

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité :

Dynamique des fluides

Présentée et soutenue par :

M. PIERRE CAYOT

le mardi 26 avril 2016

Titre :

SCHEMAS NUMERIQUES D'ORDRE ELEVE POUR LA SIMULATION DES ECOULEMENTS TURBULENTS SUR MAILLAGE STRUCTURE ET NON-STRUCTURE

Ecole doctorale :

Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :

Centre Européen de Recherche et Formation Avancées en Calcul Scientifique (CERFACS)

Directeur(s) de Thèse :

M. GUILLAUME PUIGT

Rapporteurs :

M. JENS MUELLER, QUEEN MARY UNIVERSITY OF LONDON
M. RODOLPHE TURPAULT, UNIVERSITE DE BORDEAUX

Membre(s) du jury :

M. NICOLAS GOURDAIN, ISAE TOULOUSE, Président
M. GUILLAUME PUIGT, CERFACS, Membre
M. HUGUES DENIAU, ONERA, Membre
M. VINCENT COUAILLIER, ONERA, Membre

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier R. Turpault et J. D. Mueller d'avoir accepté d'être rapporteurs de mes travaux de thèse. Je remercie également N. Gourdain, H. Deniau et V. Couaillier pour leur participation à mon Jury de thèse.

Je voudrais remercier SNECMA Villaroche et en particulier M. Dumas et E. Lippinois qui ont permis la réalisation de cette thèse. Merci également à G. Leroy de Turboméca et M. Stanciu de EDF, qui par l'intermédiaire du CIRT, ont accompagné ces travaux.

Je tiens à exprimer ma gratitude à T. Poinsot pour mon intégration dans l'équipe CFD du CERFACS et plus particulièrement à J. F. Boussuge pour son accueil au sein de l'équipe Aérodynamique.

Je remercie également G. Puigt, mon directeur de thèse, qui m'a aiguillé tout au long de mes recherches. Tous tes conseils et remarques ont permis l'aboutissement de cette thèse. Je suis vraiment fier d'être aujourd'hui le premier docteur diplômé par tes soins.

Je salue tous les membres de l'équipe CFD qui ont fait de ces quelques années au CERFACS un moment inoubliable. Merci à tous les seniors qui savent se rendre disponibles, notamment Marc et Gab. Je remercie également l'équipe CSG qui permet de nous sortir de nombreux problèmes informatiques et en particulier Gérard et Fabrice pour leur disponibilité et gentillesse permanente.

Ces remerciements n'auraient pas lieu sans l'aide précieuse de l'administration et particulièrement de Michèle, Chantal et Marie. Ce formidable trio permet de faire régner une bonne ambiance quotidienne dans les couloirs du CERFACS. Merci à Chantal pour les impressions et reliures magnifiques et pour ta bonne humeur permanente et merci aussi à Marie pour toute l'organisation de la soutenance de thèse et pour ta gentillesse.

J'aimerais maintenant remercier tous les thésards et post-docs que j'ai pu côtoyer durant ces cinq années au CERFACS. Tout d'abord merci aux anciens, Guigz, David, Gilou, Jarjar, Thomas L., Pablo, Pti Ju et compagnie avec qui j'ai passé de très bons moments au CERFACS mais également en dehors. Merci également à toute la bande des moins anciens, Majd, Romain, Dario, Pierre, Nico, Luc, Omar, Julien, César, Laura, Mélissa, Carlos, Valentin et Félix pour les pauses et soirées partagées ensemble. Finalement merci à Yannis pour les moments de galère partagés et les entraînements à la salle !

Ensuite, je tiens à remercier tous mes amis qui m'ont soutenu et encouragé. Merci à mon ancien colocataire César avec qui j'ai passé mes deux premières années de thèse. Merci aux

amis de l’INSA, Aurélien, Julien, Blaise, Lola, Valentine et Greg. Merci aux vieux de Clermont, Olivier, Antoine, Mickael, Nico et Jérém. Finalement merci à Diane pour toutes les soirées « philosophiques » passées ensemble qui m’ont permis d’arriver jusqu’ici.

Une grande partie de ces remerciements va également à toute ma famille. Merci à mes parents qui m’ont orienté dans cette voie et qui m’ont toujours soutenu au long de toutes ces années. Les moments passés avec vous durant cette thèse ont toujours été une aide pour arriver jusqu’au bout. Merci à mes petites sœurs qui ont su résister à toutes mes tortures pendant toutes ces années. Et merci à mes grands-parents pour toutes leurs attentions à chaque fois que l’on se voit.

Finalement, Merci à Laure de m’avoir supporté (dans les deux sens du terme) depuis près de 3 ans et presque 24h/24. Je te remercie de m’avoir relevé quand j’étais prêt à abandonner et de m’avoir encouragé jusqu’à la fin. Après cette expérience, je sais que malgré toutes les difficultés que l’on pourra rencontrer au cours de notre vie, nous pourrons les surmonter ensemble.

Table des matières

Chapitre 1: Contexte de l'étude et introduction

1.1 Modélisation de la turbulence 1

1.1.1 Approche DNS 2

1.1.2 Approche RANS 2

1.1.3 Approche LES 3

1.1.4 Applications aux turbomachines 3

1.2 Maillages et méthodes numériques pour la LES 6

1.2.1 Maillages autour de géométries complexes 6

1.2.2 Solveur elsA *et contraintes industrielles 9*

1.3 Objectifs et plan de l'étude 11

Chapitre 2: Bibliographie

2.1 Équations générales 14

2.2 Approche générale des schémas numériques 15

2.3 Méthodes de calcul de gradient 16

2.3.1 Méthode Green-Gauss 16

2.3.2 Méthode Green-Gauss corrigée 17

2.3.3 Méthodes "diamant" 18

2.3.4 Méthode d'Eymard et al. 20

2.3.5 Méthode par moindres carrés 20

2.3.6 Méthodes Éléments Finis (EF) 22

2.3.7 Méthode de Dubois 22

2.3.8 Conclusion sur les gradients pour la partie diffusive 24

2.4 Familles de schémas d'ordre élevé en convection 24

2.4.1 Extension des approches classiques à l'ordre élevé à reconstruction continue de la solution 25

2.4.2 Extension des approches classiques à l'ordre élevé à l'aide d'une reconstruction discontinue de la solution 26

2.4.3 Approche par stencil compact. 30

2.4.4 Conclusions sur les schémas déjà présentés. 36

2.4.5 Approche directionnelle 37

Chapitre 3: Nouvelle formulation de gradient

3.1 Choix d'une approche pour le calcul du gradient 41

3.2 Discrétisation du ux diffusif 42

3.3 Analyse théorique du gradient 44

3.3.1 Propriétés nécessaires. 44

3.3.2 Analyse théorique sur l'équation de la chaleur 44

3.4 Résultats numériques 48

3.4.1 Application à l'équation de la chaleur 48

3.4.2 Préservation linéaire 52

3.4.3 Équations de Navier-Stokes : plaque plane laminaire 54

3.4.4 Coût de calcul et efficacité CPU 57

3.5 Conclusion 58

Chapitre 4: Nouveau schéma directionnel pour *elsA* : théorie et advection 1D

4.1 Rappels sur le formalisme Volumes Finis 59

4.2 Formulation des gradients 61

4.3 Utilisation des gradients pour la construction de schémas d'ordre élevé 61

4.4 Analyse théorique du nouveau schéma 62

4.4.1 Analyse d'ordre en 1D 62

4.4.2 Analyse d'ordre sur un cas 2D de triangles équilatéraux. 65

4.4.3 Analyse fréquentielle du schéma en 1D 68

4.5 Application : Advection linéaire en 1D 72

4.6 Conclusion 74

Chapitre 5: Application numérique : Convection de vortex

5.1 Paramètres numériques 76
5.2 Vortex isentropique 77
5.3 Calcul d'erreur pour les schémas d'ordre élevé 77
5.4 Validation sur hexaèdres réguliers 78
5.5 Validation sur triangles/prismes 84
5.6 Conclusion 87

Chapitre 6: Conclusions et perspectives

6.1 Conclusions 88
6.2 Perspectives 89

ANNEXES 99

Annexe A : A new cell-centered nite volume method for the discretization of diffusive uxes on unstructured grids 99

Chapitre 1

Contexte de l'étude et introduction

Sommaire

1.1 Modélisation de la turbulence 1
1.1.1 Approche DNS 2
1.1.2 Approche RANS 2
1.1.3 Approche LES 3
1.1.4 Applications aux turbomachines 3
1.2 Maillages et méthodes numériques pour la LES 6
1.2.1 Maillages autour de géométries complexes 6
1.2.2 Solveur elsA et contraintes industrielles 9
1.3 Objectifs et plan de l'étude 11

L'objectif de ce chapitre est de placer le contexte de cette étude en présentant tout d'abord les différentes méthodes de modélisation de la turbulence et en particulier les bases de la Simulation aux Grandes Échelles des équations de Navier-Stokes. Ensuite, les différentes approches permettant de mailler des géométries seront explicitées. Puis le code de simulation numérique *elsA* sera introduit, ainsi que les contraintes associées à son usage. Finalement, la dernière partie présentera les objectifs et le plan de cette étude.

1.1 Modélisation de la turbulence

Aujourd'hui, la simulation numérique est un outil de choix pour limiter le coût des méthodes expérimentales. En effet, la mécanique des fluides fournit depuis longtemps les bases pour analyser un écoulement fluide (simple) et la mécanique des fluides numérique (CFD en Anglais pour Computational Fluid Dynamics) permet de calculer cet écoulement et des écoulements plus complexes pour lesquels seule une analyse *a posteriori* (après le calcul) est possible.

Les méthodes expérimentales nécessitent beaucoup plus de matériel et de temps que la simulation numérique qui se fait à l'aide de moyens informatiques. Les équations de Navier-Stokes qui caractérisent le comportement des écoulements de fluide peuvent être résolues de différentes manières. 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 :

- Simulation numérique directe des équations sans modèle de turbulence (approche DNS - Direct Numerical Simulation en Anglais)
- Modélisation à statistique globale où tous les mouvements tourbillonnaires sont moyennés (approche RANS - Reynolds Averaged Navier-Stokes en Anglais)
- 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 (approche LES - Large Eddy Simulation en Anglais) et de modélisation de sous maille (SGS - Sub-Grid Scale en Anglais).

1.1.1 Approche DNS

L'approche DNS consiste à résoudre toutes les échelles de la turbulence. Pour obtenir numériquement un résultat très proche de la réalité physique, la simulation doit capturer toutes les échelles de la dynamique de l'écoulement. Pour cela, les échelles de la discrétisation, la taille des mailles et le pas de temps, doivent être petits devant les échelles de l'écoulement. Notons L l'échelle intégrale et η l'échelle de Kolmogorov. La théorie de Kolmogorov décrit le concept de cascade énergétique des plus grosses structures tourbillonnaires (de vitesse U) vers les plus fines (de vitesse u). 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. Ainsi, $U^2/L = u^2/\eta$ avec $Re = u\eta/ = 1$ où est la viscosité et Re le nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Kolmogorov.

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 $N \quad (Re^{3\ 4})^3$. De plus, le pas de temps doit être pris en compte afin d'obtenir des résultats suffisamment précis, en général le nombre de pas de temps est tel que $Re^{3\ 4}$. Le coût nécessaire pour une simulation est donc de $N \quad Re^3$. Le coût d'une simulation est donc très important même pour de faibles nombres de Reynolds, il est donc impossible d'utiliser l'approche DNS pour des applications industrielles où le nombre de Reynolds est de l'ordre de 10^7.

Afin de réduire le temps de simulation, on considère deux autres approches basées sur la modélisation des effets de la turbulence : avec l'approche RANS, on s'intéresse aux effets moyens de la turbulence ; avec la Simulation aux Grandes Échelles, on ne représente que la partie du spectre de la turbulence que le maillage peut représenter et on modélise les effets des échelles turbulentes plus petite que celle de la maille.

1.1.2 Approche RANS

Le principe de la méthode RANS est de moyenner les effets instationnaires de la turbulence. Pour cela, on considère les équations de Navier-Stokes et on leur applique une moyenne d'ensemble. Cette moyenne fait apparaître de nouveaux termes à modéliser et la fermeture passe par la définition d'un modèle de turbulence. L'objectif de l'approche RANS est de capturer les effets moyens de la turbulence et le système des équations à résoudre est augmenté par celui des équations régissant les effets moyens de la turbulence. Cette technique est la plus utilisée actuellement dans l'industrie. L'approche U-RANS (pour Unsteady-RANS en Anglais) est une variante instationnaire de la méthode RANS qui permet de prendre en compte certains effets instationnaires comme par exemple les interactions entre deux étages mobiles de turbomachines.

Lorsque la compréhension d'un phénomène physique nécessite d'analyser les interactions entre les fluctuations turbulentes et l'écoulement porteur, l'approche (U-)RANS peut conduire à des résultats de faible qualité. Dans ces conditions, le recours à la LES est nécessaire.

1.1.3 Approche LES

L'approche SGE [1] ou LES [2] est une alternative aux approches RANS et DNS. 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. Cette méthode requiert moins de ressources que l'approche DNS mais beaucoup plus que la méthode RANS. 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.

En pratique, la simulation aux grandes échelles permet de réduire la taille des maillages utilisés en séparant les grandes et les petites échelles à l'aide d'une longueur de coupure. Pour effectuer explicitement cette séparation des échelles, un filtre est appliqué aux équations de Navier-Stokes. 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 $_C$ dépendant du dimensionnement du filtre (Fig.1.1).

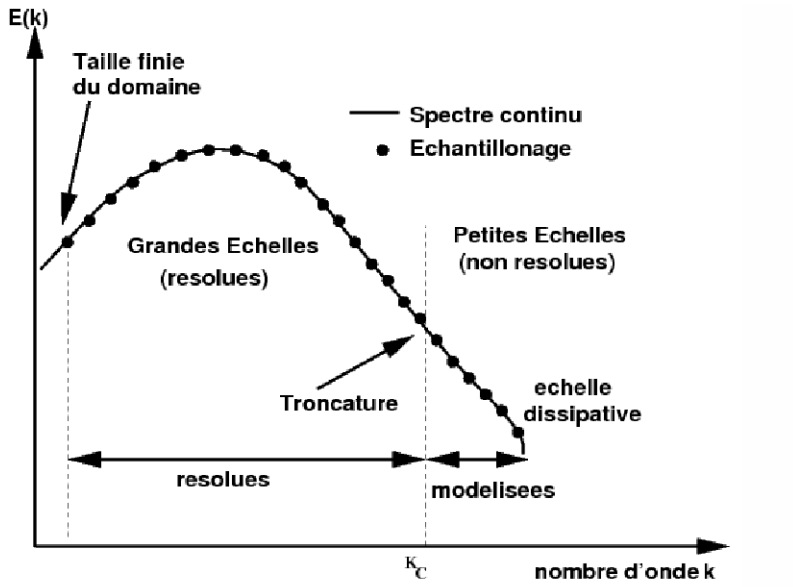


FIGURE 1.1: Filtrage du spectre de l'énergie cinétique, image issue de [3]

1.1.4 Applications aux turbomachines

Actuellement, les calculs industriels utilisent les techniques RANS et U-RANS sur des maillages structurés et non-structurés. En général, les schémas numériques utilisés ne dépassent pas l'ordre deux et l'approche implicite en temps peut être utilisée. Les simulations peuvent utiliser de 1 à 150 cœurs de calcul simultanément pour des maillages allant jusqu'à 100 millions de

cellules. Ainsi, le besoin en algorithmes efficaces sur machine massivement parallèle (HPC en Anglais pour High Performance Computing) est réduit.

Les méthodes RANS sont basées sur une moyenne des équations de Navier-Stokes, elles impliquent une moyenne des effets instationnaires de la turbulence. Elles ne permettent donc pas de capturer de nombreux phénomènes instationnaires comme par exemple des écoulements turbulents avec présence de tourbillons, de chocs et de propagation d'ondes. La LES permet de prendre en compte tous les phénomènes instationnaires mais requiert des maillages très fins, faiblement anisotropes ainsi qu'une approche temporelle explicite, d'où la nécessité de plateformes de calcul massivement parallèle.

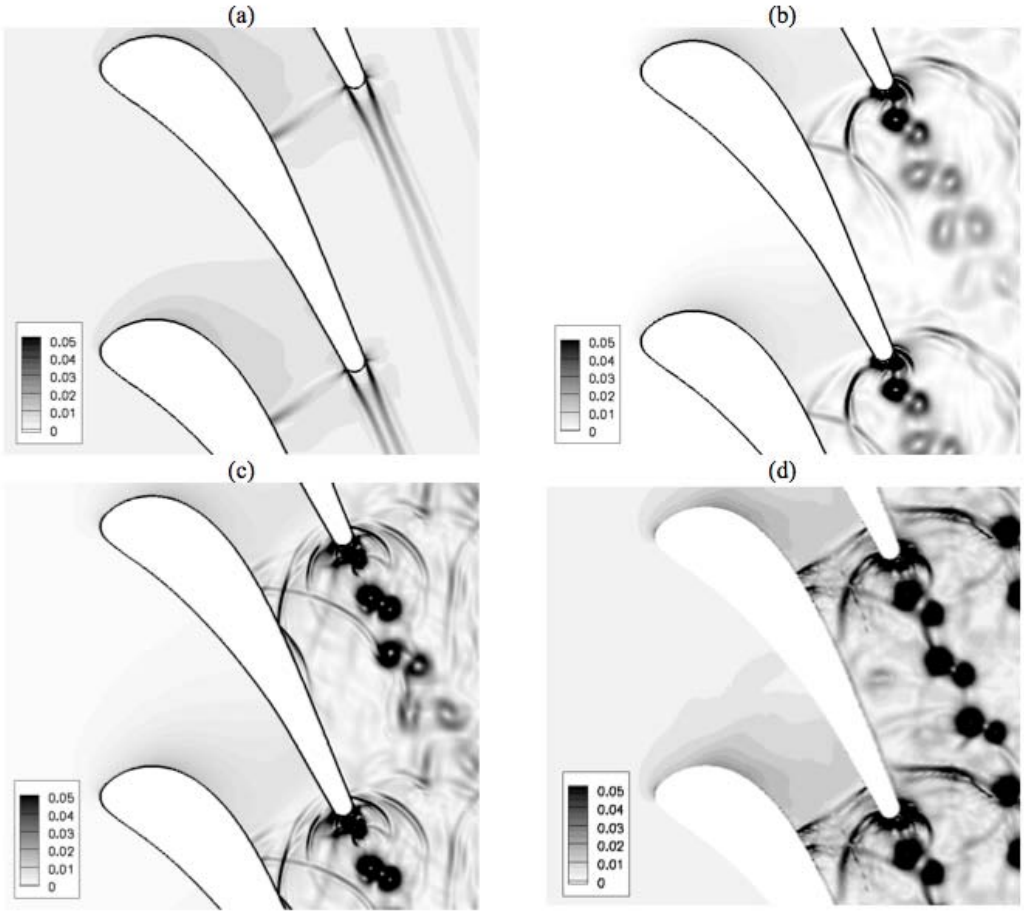


FIGURE 1.2: Champ instantané de grad dans l'IGV d'une turbine haute-pression, image issue de [4]
(a) RANS (b) U-RANS (c) LES Code 1 (d) LES Code 2

De nombreux calculs déjà réalisés permettent de mettre en évidence les différences entre les simulations RANS et LES. Un premier exemple est celui réalisé par Gourdain *et al.*[5, 4]. Une aube de turbine haute-pression a été modélisée et des simulations RANS, U-RANS et LES ont été effectuées sur cette configuration. La Fig. 1.2 présente les résultats obtenus par les différentes simulations. Les résultats mettent bien en évidence la différence de quantité d'informations obtenues par les différentes modélisations. La simulation RANS permet d'avoir un champ où tous les phénomènes sont noyés dans l'écoulement. La simulation U-RANS permet d'obtenir plus d'in-

formations sur le sillage et les ondes acoustiques mais ces phénomènes sont vite dissipés. Les simulations LES permettent d'obtenir beaucoup plus de détails sur les ondes acoustiques et sur la propagation des tourbillons dans le sillage des aubes.

Pour obtenir les résultats RANS et U-RANS, un maillage de 0.795M cellules a été utilisé tandis que pour la LES un maillage de 6.37M cellules a été nécessaire. La différence se répercute aussitôt sur les temps CPU. Pour obtenir un état convergé en RANS, il faut 21 heures CPU. Pour 10ms de simulation instationnaire, il faut respectivement 230 heures CPU pour la méthode U-RANS et 2000 heures CPU pour la méthode LES. Dans la publication [5], le temps de calcul de cette simulation LES est raisonnable car elle a été effectuée sur un maillage plutôt grossier. Il est d'ailleurs indiqué que le ratio en temps de calcul entre les méthodes RANS et U-RANS est environ 11 tandis que le ratio entre les méthodes U-RANS et LES est proche de 9. Ces facteurs sont très en dessous des vrais besoins en terme de maillage et pas de temps de la LES et, pour des simulations plus réalistes (en terme de raffinement de maillage et de pas de temps associé), **l'ordre de grandeur du coût d'un calcul LES par rapport à un calcul RANS varie entre 1000 et 10 000.**

Un besoin de plus en plus nécessaire est celui de pouvoir réaliser des simulations sur des géométries très complexes. En effet, dans le domaine des turbomachines de plus en plus d'effets technologiques veulent être compris et maîtrisés. Pour citer quelques exemples, il faudrait être capable de simuler des congés de raccordement en pied de pâle, des baignoires en tête de pâle, des ventilations de refroidissement, des aubes perforées, des recirculations sous plateforme. Tous ces effets technologiques nécessitent d'être maillés avant de pouvoir réaliser des calculs, c'est souvent la phase de maillage qui est problématique dans un premier temps. La Fig. 1.3 présente trois effets technologiques : un congé de raccordement, une baignoire en tête de pale et des évents de refroidissement au bord de fuite.

1.2 Maillages et méthodes numériques pour la LES

1.2.1 Maillages autour de géométries complexes

La décomposition du domaine de calcul est une partie importante de la CFD puisque la discrétisation du domaine d'intérêt rend possible la résolution des équations de Navier-Stokes discrétisées. 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 s'appuyant sur la géométrie (*body- tted*) et les maillages de type cartésien. Les maillages cartésiens sont construits en traçant des lignes de maillages à x, y et z constants, englobant la géométrie à mailler. Comme la géométrie est directement immergée dans le maillage, les lignes de maillage ne peuvent pas être ajustées à une géométrie non orthogonale. Lorsque les limites des corps ne coïncident pas avec le maillage, des interpolations sont nécessaires pour compenser le décalage des limites du corps par rapport au maillage.

Tous les codes de simulation numérique industriels (standards) utilisent des maillages qui s'appuient sur la géométrie. Dans cette catégorie de maillages dits *body- tted*, il existe encore deux sous classes : les maillages structurés et les maillages non-structurés. Ces deux types de maillage ont chacun des avantages et des inconvénients.

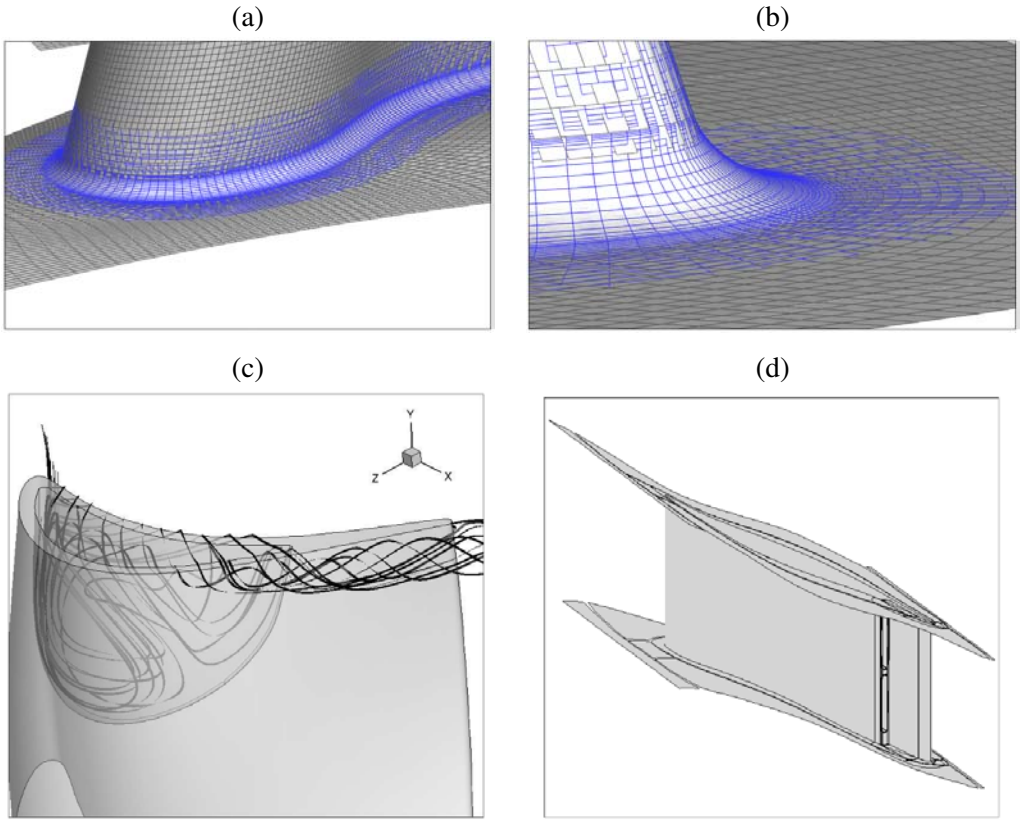


FIGURE 1.3: Différents effets technologiques, images issues de [6]
(a-b) Congés de raccordement (c) Baignoire (d) Évents de refroidissement

1.2.1.a) Maillage structuré

Les maillages structurés consistent en une décomposition du domaine de calcul en pavés hexaédriques appelés blocs. Dans un bloc structuré, il existe une ligne de maillage par direction d'espace. Ainsi, il est possible de repérer chaque nœud du maillage par un triplet (i, j, k) en dimension 3. Ainsi, un bloc de maillage est défini par :

- trois entiers $i_m + 1$, $j_m + 1$ et $k_m + 1$
- $(i_m + 1)$ $(j_m + 1)$ $(k_m + 1)$ coordonnées dans les directions d'espace x, y et z
- i_m j_m k_m volumes de contrôle qui sont alors repérés implicitement.

Il est impossible de recouvrir le domaine de calcul avec un seul bloc de maillage, même pour des configurations simples. L'approche structurée est nécessairement multi bloc et le maillage est construit en utilisant plusieurs briques topologiques élémentaires : les maillages en "H", en "O" ou en "C". Par exemple, pour mailler une aile, un maillage en "C" composé de 5 blocs est utilisé pour mailler le domaine autour de l'aile. Pour ce type de maillage, les lignes de maillage doivent se propager jusqu'aux bords du domaine. Dans le cas du profil d'aile, 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 (Fig.1.4). Pour une pale de turbomachine, il est souvent possible de choisir une topologie de maillage *a priori*, ce qui rend la procédure de construction du maillage assez simple. C'est ce que permet par exemple le logiciel Autogrid de Numeca [7].

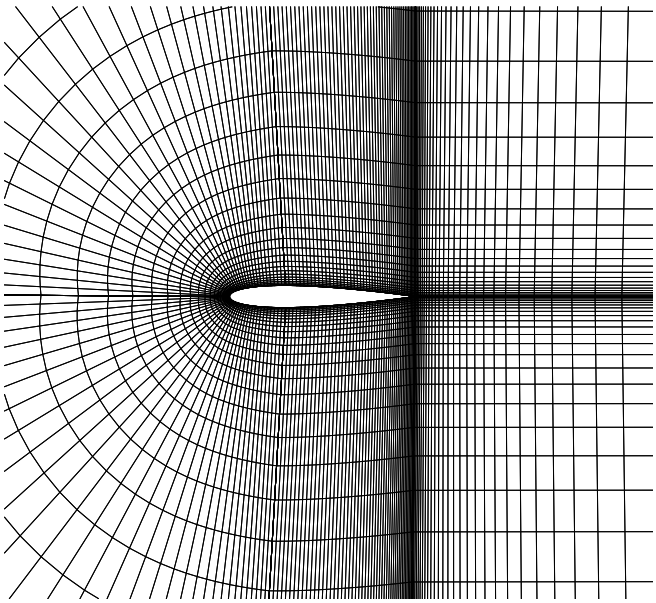


FIGURE 1.4: Aperçu du maillage d'une aile d'avion en structuré

L'intérêt majeur de cette approche est la facilité de repérage des volumes, des nœuds, des interfaces... à l'aide d'un triplet (i, j, k) pour chaque bloc, il s'agit d'un adressage direct des données. Pour une cellule donnée, l'accès aux cellules voisines, aux faces et aux nœuds nécessite de jouer avec les indices du triplet (i, j, k). De plus, l'utilisation de maillages structurés permet d'aligner les directions du maillage avec les directions privilégiées de l'écoulement, ce qui est un point crucial pour capturer avec précision les variations des champs dans une direction donnée ou pour suivre des sillages.

Plusieurs industriels utilisent actuellement le code numérique *elsA* pour des applications RANS sur des maillages structurés. En général, les maillages sont souvent anisotropes pour capturer la couche limite et permettent des calculs à coût réduit. Par contre, le temps de génération du maillage pour une géométrie complexe devient vite important, typiquement de quelques heures à plusieurs semaines.

1.2.1.b) Maillage non-structuré

Un maillage non structuré n'est pas intrinsèquement basé sur un découpage du domaine de calcul en pavés. La force d'un mailleur non structuré réside dans sa capacité à générer des maillages pour des géométries complexes dans un temps court (au plus quelques jours) et avec des motifs élémentaires variés. La plupart des mailleurs non structurés traite les tétraèdres, les prismes, les pyramides et les hexaèdres. Un maillage non-structuré est défini au minimum avec les éléments suivants :

– le nombre de nœuds du maillage et chaque nœud i est repéré par ses coordonnées (x_i, y_i, z_i)

- le nombre de volumes du maillage et chaque volume est défini par les n sommets de la cellule. C'est la table de connectivité des éléments du maillage. Pour chaque motif élémentaire, on dispose d'une norme permettant d'identifier l'ordre d'apparition des sommets dans la table de connectivité. Ce point est crucial pour la construction de la métrique du maillage.

- la liste des éléments surfaciques qui sont à la frontière du domaine, sur lesquels on applique des conditions limites physiques ou numériques.

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.

L'intérêt du maillage non-structuré est le temps de génération de ce maillage. Par exemple, pour mailler totalement un avion il faut environ un mois avec un maillage structuré, tandis qu'avec un maillage non-structuré, l'ordre de grandeur est la journée. Le maillage non-structuré est également utile lorsque il est nécessaire de mailler des détails technologiques précis. La Fig. 1.5 présente un maillage non-structuré d'une aube de turbine. Il est ensuite possible de mailler une aube de turbine perforée de nombreux trous pour le refroidissement de la pale avec un temps de maillage similaire à celui de l'aube classique.



FIGURE 1.5: Aperçu du maillage non-structuré d'une aube de turbine

Les techniques standard de génération de maillages non-structurés induisent des maillages souvent peu anitropes, ce qui est un avantage pour la LES car la modélisation des effets de sous maille est prise en compte par des termes de modélisation isotropes.

1.2.1.c) Maillage hybride

La définition de maillage hybride peut avoir plusieurs sens. Certains définissent un maillage hybride comme un maillage non-structuré multi-éléments. Dans ce document, les maillages hybrides concernent des maillages composés à la fois de blocs structurés et de blocs non-structurés.

L'intérêt de ce type de maillage est de profiter des avantages des maillages structurés et non-structurés. Par exemple, un problème des maillages structurés est la propagation des lignes de maillage jusqu'au bord du domaine. L'ajout d'un bloc non-structuré à partir d'une certaine distance permet de réduire le nombre de mailles.

Les blocs non-structurés sont en général utilisés pour mailler le contour de géométries complexes, tandis que les blocs structurés permettent de mailler la proche paroi de surfaces régulières afin de résoudre au mieux la couche limite de l'écoulement. La Fig. 1.6 présente un maillage hybride autour du fuselage d'un avion. Autour du fuselage, plusieurs blocs structurés sont accolés et à partir d'une certain distance le maillage devient non-structuré.

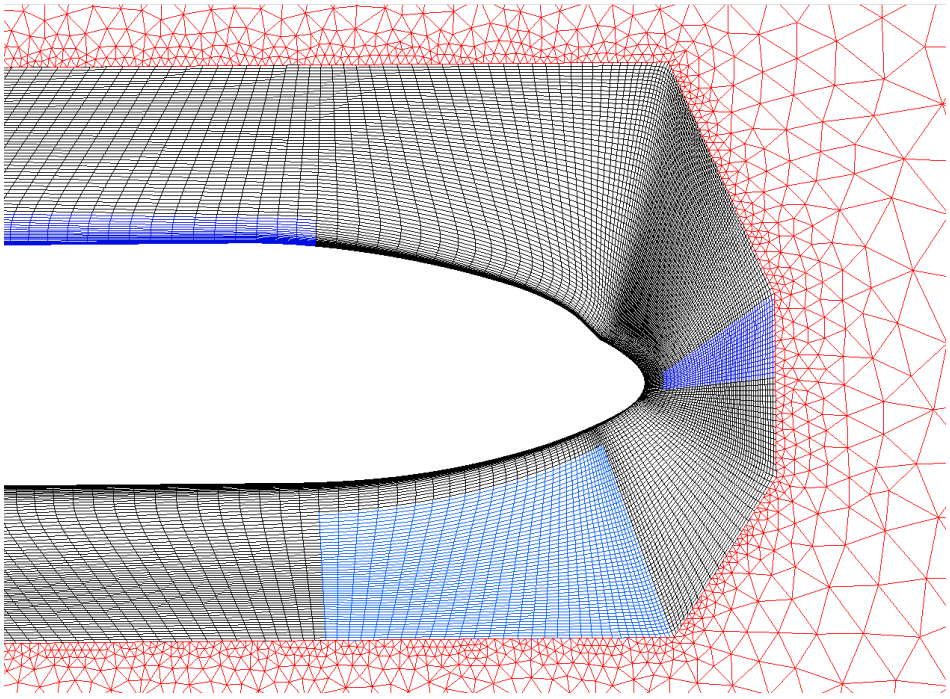


FIGURE 1.6: Aperçu du maillage hybride d'un avion

La Fig. 1.7 présente le même maillage hybride que précédemment mais autour de l'aile de l'avion. Il est plus facile de définir les blocs structurés de cette manière en s'affranchissant de la propagation des lignes de maillage.

1.2.2 *Solveur* elsA *et contraintes industrielles*

Afin de pouvoir effectuer des calculs LES, des schémas numériques adaptés doivent être utilisés. Les équations de Navier-Stokes se décomposent en deux parties distinctes : la partie convective représentée par une équation hyperbolique et la partie diffusive représentée par une équation elliptique. Les schémas numériques se classent donc en deux familles, ceux pour résoudre la partie

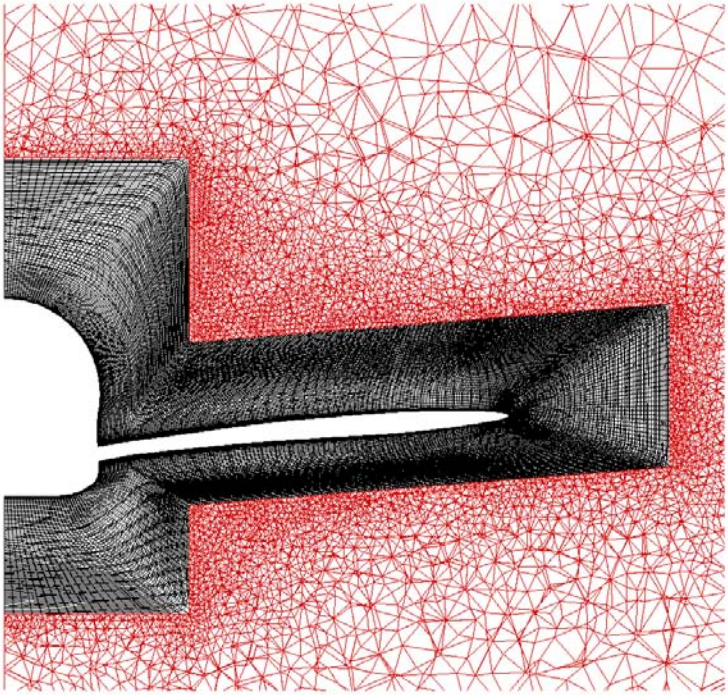


FIGURE 1.7: Aperçu du maillage hybride autour d'une aile

convective des équations et ceux pour résoudre la partie diffusive. Les schémas numériques sont choisis selon le type d'application désirée. Dans le cas de cette étude, les applications souhaitées sont les écoulements à haut nombre de Reynolds, ce qui implique que les effets de la convection seront prédominants sur la diffusion. Il est donc choisi d'utiliser un schéma numérique d'ordre élevé pour la partie convective et un schéma numérique classique pour la partie diffusive. Cette analyse sur les besoins en qualité des schémas a déjà été menée avec succès par le passé. Par exemple avec le code *elsA* en structuré, de nombreuses simulations aéroacoustiques [8, 9] ont été réalisées avec un schéma convectif compact d'ordre 6 [10] et avec un schéma diffusif d'ordre 2. On précise qu'un schéma numérique est dit d'ordre élevé dès que son ordre dépasse deux.

Le cadre de cette étude s'oriente autour du code de simulation numérique *elsA* [11] (ensemble logiciel de simulation en Aérodynamique), de l'ONERA et co-développé par le CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique). Ce code est basé sur une formulation Volumes Finis s'appuyant sur des cellules de type hexaédriques et avec un repérage structuré des cellules. Il permet de simuler des écoulements complexes dans différents domaines impliquant l'aérodynamique. Ces écoulements peuvent être résolus pour les équations de Navier-Stokes 3D compressibles par les approches suivantes : Euler, RANS, U-RANS et LES.

Depuis quelques années, des efforts sont faits pour permettre d'utiliser ce code de simulation numérique sur des éléments plus complexes (tétraèdres, prismes et pyramides). L'objectif est de

pouvoir réaliser des calculs RANS et LES soit sur des maillages structurés, soit sur des maillages non-structurés, soit sur des maillages hybrides composés de blocs structurés et non-structurés. Cette dernière approche [12, 13, 14, 15] présente l'intérêt de coupler les avantages de chacune des techniques standards : précision et vitesse du solveur pour maillage structuré, génération rapide du maillage non-structuré.

Le formalisme Volumes Finis centré cellule du solveur *elsA* implique certaines contraintes pour les schémas numériques. Tout d'abord les solutions doivent être calculées et stockées au centre des cellules. Les volumes de contrôle du schéma numérique correspondent donc aux cellules du maillage. Pour calculer le bilan de flux dans le volume de contrôle, il est nécessaire d'obtenir le flux d'interface sur chaque frontière du volume de contrôle. Pour le code *elsA*, les flux sont donc calculés aux interfaces à l'aide des gradients d'interface. De plus, ce sont les données aux faces qui sont échangées dans un contexte parallèle.

1.3 Objectifs et plan de l'étude

Le contexte de cette étude est donc l'extension du code de simulation numérique *elsA* aux calculs LES sur des maillages hybrides (blocs structurés et non-structurés). L'approche LES étant déjà validée en structuré, l'étude portera uniquement sur des maillages non-structurés. L'approche LES nécessite des ingrédients numériques adaptés (conditions limites) et des modèles dédiés (modèles de sous maille) qui sont couramment utilisés pour les maillages structurés et qui peuvent être étendus aux maillages non structurés assez simplement, sans nécessiter une étude spécifique. C'est pour cette raison que les conditions limites en LES et le modèle de sous-maille ne seront pas étudiés dans ce document.

Il est donc choisi de se focaliser sur l'analyse de schémas numériques pour la LES en maillage non-structuré avec le code de simulation numérique *elsA*. Cela permettra un retour rapide des développements dans le contexte industriel au travers de la livraison des versions successives de l'outil.

Le choix du code de calcul induit certaines contraintes. En premier lieu, il faut respecter le formalisme Volumes Finis centré cellules dans les nouveaux schémas numériques. D'autres contraintes sont posées au niveau de l'architecture de données, c'est-à-dire que le schéma doit être consistant avec les informations accessibles. Il faut en particulier prendre soin de respecter les règles imposées du parallélisme (échange des données par les faces).

Les travaux présentés ici consistent donc au développement d'un nouveau schéma numérique d'ordre élevé permettant l'utilisation de la LES sur des maillages non-structurés.

ll existe une grande variété de schémas numériques d'ordre élevé. Parmi tous les schémas numériques d'ordre élevé existants, il est nécessaire de sélectionner une famille de schémas en accord avec les contraintes imposées par le code de simulation numérique et par les applications désirées. Le schéma idéal doit respecter les conditions suivantes :

- ordre élevé : un schéma d'ordre élevé permet la propagation d'information sur de longues distances car son comportement est meilleur que sa contrepartie de bas-ordre,
- formalisme Volumes Finis : le formalisme est en accord avec celui de la partie structurée du code et c'est nécessaire pour simplifier les échanges aux interfaces hybrides entre blocs structurés et non-structurés,
- approche centrée cellule : les flux seront toujours calculés aux interfaces du maillage,
- compatibilité avec les éléments standards canoniques : utilisable sur prismes, tétraèdres, pyramides et hexaèdres,

– molécule de points compacte : c'est un point clé pour minimiser les échanges dans un environnement massivement parallèle.

Ce document est organisé comme suit. Après cette introduction, les différentes classes de schémas convectifs d'ordre élevé utilisables en LES sont introduites et les schémas présentés. Pour chaque schéma, on vérifiera si l'approche respecte toutes les contraintes énoncées précédemment. Les schémas de calcul des gradients seront aussi présentés. En effet, même si ces schémas interviennent d'habitude dans la résolution de la densité de flux diffusifs, ils peuvent également servir pour certains schémas numériques dans le traitement de la densité de flux convectifs. À la suite de cette étude bibliographique, une nouvelle méthode de calcul de gradient sera présentée. Ce schéma a été construit dans le but d'avoir une consistance dans le calcul des gradients entre la partie structurée et non-structurée du code. Cette nouvelle approche a été développée pour servir dans la partie diffusive et convective des calculs. Ce gradient sera ensuite analysé théoriquement et numériquement sur plusieurs cas tests. Puis, un nouveau schéma convectif d'ordre élevé sera présenté pour l'implémentation dans *elsA*. La formation théorique de ce schéma numérique sera tout d'abord présentée, puis il sera ensuite analysé d'un point de vue spatial (ordre du schéma), fréquentiel (stabilité, dispersion, dissipation...) et numérique. Finalement, le dernier chapitre de ce document présentera les conclusions et perspectives de ce travail de thèse.

Chapitre 2

Bibliographie

Sommaire

2.1 Équations générales 14
2.2 Approche générale des schémas numériques 15
2.3 Méthodes de calcul de gradient 16
2.3.1 Méthode Green-Gauss 16
2.3.2 Méthode Green-Gauss corrigée 17
2.3.3 Méthodes "diamant" 18
2.3.4 Méthode d'Eymard et al. 20
2.3.5 Méthode par moindres carrés 20
2.3.6 Méthodes Éléments Finis (EF) 22
2.3.7 Méthode de Dubois 22
2.3.8 Conclusion sur les gradients pour la partie diffusive 24
2.4 Familles de schémas d'ordre élevé en convection 24
2.4.1 Extension des approches classiques à l'ordre élevé à reconstruction continue de la solution 25
2.4.2 Extension des approches classiques à l'ordre élevé à l'aide d'une reconstruction discontinue de la solution 26
2.4.3 Approche par stencil compact 30
2.4.4 Conclusions sur les schémas déjà présentés 36
2.4.5 Approche directionnelle 37

Le but de ce chapitre est de faire un inventaire des méthodes numériques qui ont été étudiées durant la thèse. Cette bibliographie se déroule en deux parties, une première portant sur les différentes méthodes de calcul de gradient et une deuxième partie présentant les différentes familles de schémas numériques d'ordre élevé en convection. Avant de présenter la bibliographie, un bref rappel est fait sur les équations générales de la mécanique des fluides et sur les schémas numériques.

2.1 Équations générales

L'application principale de la méthode des volumes finis est l'approximation des équations de Navier-Stokes qui gouvernent le mouvement des fluides newtoniens. Cette modélisation suit l'approche de la mécanique des milieux continus [16, 17]. Les équations de Navier-Stokes se formulent à l'aide de bilan de flux de masse, de bilan de flux de quantité de mouvement et de bilan de flux d'énergie du fluide. Pour déterminer l'état d'un milieu fluide, il est nécessaire de connaître en chaque point du domaine : la masse volumique (en $kg.m^{-3}$), les composantes de la vitesse notées U_i (en $m.s^{-1}$), la pression P (en Pa), le tenseur des contraintes $_{ij}$ (en $N.m^{-2}$), les composantes des forces volumiques F_i (en N), la température T (en K), le vecteur densité de flux de chaleur q (en $J.m^{-2}.s^{-1}$) et l'énergie interne e (en $J.kg^{-1}$).

À l'instant t (en s), seulement 5 équations caractérisent le milieu, ce sont les équations de Navier-Stokes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial\ U_i}{\partial x_i} &= 0 \\ \frac{\partial\ U_i}{\partial t} + \frac{\partial\ U_i U_j}{\partial x_j} &= F_i - \frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial\ _{ij}}{\partial x_j} \\ \frac{\partial\ E}{\partial t} + \frac{\partial\ U_j E}{\partial x_j} &= U_j F_i + \frac{\partial\ _{ij} U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \end{aligned} \tag{2.1}$$

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.

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

$$_{ij} = -P\mathbf{I} + \ _{ij} \ . \tag{2.2}$$

I représente la matrice identité de taille (3,3). 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 :

$$_{ij} = \quad \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \quad - \quad \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \ _{ij} \ , \tag{2.3}$$

où $\dfrac{\partial U_k}{\partial x_k}$ représente la trace du tenseur de déformation et où et 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 :

$$2 \ + 3 \ = 0 \ , \tag{2.4}$$

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

$$_{ij} = \quad \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \quad - \frac{2}{3} \ \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \ _{ij} \ . \tag{2.5}$$

La viscosité n'est pas une nouvelle inconnue étant donné que c'est une propriété intrinsèque au fluide.

Dans un fluide, la conduction thermique est un transfert thermique qui se fait des régions à température élevée vers les régions à température plus basse. Ce phénomène est décrit par la loi de Fourier qui dit que la densité de flux de chaleur q est proportionnelle au gradient de température :

$$q_i = - \frac{\partial T}{\partial x_i} , \tag{2.6}$$

où (en $W.K^{-1}.m^{-1}$) est le coefficient de conductivité thermique.

Dans cette étude, le fluide est considéré comme un gaz parfait polytropique, ses propriétés suivent donc la loi thermodynamique suivante :

$$\begin{aligned} P &= \quad r\,T \\ P &= (\quad -1)\;\; e \\ P &= (\quad -1)\;\; C_v\,T \end{aligned} \tag{2.7}$$

où :

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

Dans le cas du gaz parfait polytropique, l'énergie interne e et l'enthalpie h (en $J.kg^{-1}$) s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} e &= C_v T \\ h &= C_p T \end{aligned} \tag{2.8}$$

2.2 Approche générale des schémas numériques

On considère le système aux dérivées partielles des équations de Navier-Stokes écrit sous forme compacte :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot F(W) + \nabla \cdot (G(W, \nabla W)) = 0 \quad \text{dans} \quad , \;\; t \, , \tag{2.9}$$

où W représente le vecteur des champs conservatifs évoluant au cours du temps. F représente la densité de flux convectifs et G la densité de flux diffusifs.

La résolution de ces équations par la méthode Volumes Finis (VF) consiste à découper le domaine global en petits volumes, et à calculer une approximation des valeurs moyennes des champs conservatifs W sur ces volumes élémentaires ou cellules.

Soit K un volume élémentaire, si l'on suppose ce volume fixe dans le temps, en intégrant Eq. 2.9 sur K et en utilisant le théorème de Stokes, on obtient :

$$\frac{d}{dt}\int_K W\,d \quad + \quad \int_K [F(W) + G(W, \nabla W)] \cdot n\,d \quad = 0 \quad , \quad t\,, \tag{2.10}$$

où ∂K désigne la surface fermée formant la frontière de K, et n la normale unitaire en un point de cette frontière dirigée vers l'extérieur de K. Le terme $F(W) \cdot n$ est appelé terme convectif et le terme $G(W, \nabla W) \cdot n$ est appelé terme diffusif. L'intégration de ces termes sur la surface permet d'obtenir les flux convectif et diffusif respectivement.

Ce sont ces deux termes qui sont à l'origine des deux parties de la bibliographie. On remarque la présence de gradients dans l'expression du flux diffusif, c'est ce gradient qui a été étudié d'abord. La partie de la bibliographie sur les schémas d'ordre élevé porte quand à elle sur la partie convective des équations.

2.3 Méthodes de calcul de gradient

Cette première partie est dédiée aux différentes méthodes de calcul de gradient. Le calcul des gradients est une partie importante et déterminante pour la création d'un schéma numérique. En général, ces gradients sont utilisés pour résoudre la partie diffusive des équations de Navier-Stokes mais peuvent également intervenir dans la partie convective. Les méthodes de calcul des flux diffusifs s'appuyent généralement sur la formulation de Green pour calculer un gradient à partir de l'intégrale d'un champ sur le bord d'un volume. Dans la suite, les méthodes les plus utilisées sont rapidemment présentées.

2.3.1 Méthode Green-Gauss

2.3.1.a) Description

La méthode de Green-Gauss (GG) nécessite 5 points pour évaluer le bilan de flux diffusif à l'intérieur d'un segment du maillage (en 1D). Le bilan de flux diffusif fait intervenir les flux diffusifs sur les 2 interfaces du segment 1D. Le calcul du gradient à l'interface entre deux cellules se base sur 2 étapes.

– Pendant la première étape, un gradient moyen au centre de la cellule de contrôle est évalué par utilisation de la formule de Green sur la frontière de la cellule. Les valeurs des champs au bord sont obtenus par simple demi-somme des valeurs de part et d'autre de l'interface. Supposons K un volume et $i = 1, .., n_K$ ses faces, le gradient centré W en K s'écrit :

$$\nabla W_K = \frac{1}{|K|}\sum_{i=1}^{n_K} \frac{1}{2}(W_K + W_i) \cdot n_i\,, \tag{2.11}$$

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 n_i la normale à la face i et extérieure à la face de K.

– Pendant la seconde étape, le gradient sur l'interface Σ, interface entre les volumes G et D, est obtenu comme moyenne des gradients dans les volumes adjacents. Ce gradient s'écrit alors :

$$\overline{\nabla W_\Sigma} = \frac{1}{2}(\nabla W_G + \nabla W_D) \ . \tag{2.12}$$

2.3.1.b) Propriétés

- Cette technique de calcul des gradients ne tient pas compte des tailles respectives des cellules et se justifie pleinement pour un maillage avec un pas de discrétisation uniforme.
- Les gradients d'interface sont évalués par 2 différences centrées et ne dissipent pas les hautes fréquences. Cela peut rendre les calculs instables, voire conduire à une solution physiquement inacceptable.
- Cette méthode pose un problème de découplage pair/impair. C'est-à-dire que lorsqu'un bilan de flux est calculé dans une cellule i, l'expression de ce bilan de flux prend en compte uniquement les cellules $i+2$ et $i-2$. Pour l'équation de la chaleur linéaire, cela revient à résoudre deux problèmes découplés sur les cellules paires d'une part et sur les cellules impaires d'autre part.
- La métrique peut être prise en compte pour cette méthode. Au lieu de calculer la valeur des champs aux interfaces par demi-somme, elle est calculée par moyenne pondérée par les volumes de chaque côté de l'interface :

$$W_\Sigma = \frac{|G|W_G + |D|W_D}{|G| + |D|} \ . \tag{2.13}$$

De même, cette pondération peut être utilisée pour le calcul du gradient à l'interface.

$$\overline{\nabla W_\Sigma} = \frac{|G|\nabla W_G + |D|\nabla W_D}{|G| + |D|} \ . \tag{2.14}$$

2.3.2 Méthode Green-Gauss corrigée

2.3.2.a) Description

Comme son nom l'indique, la méthode de Green-Gauss corrigée (GGC) est une amélioration de la méthode GG. L'objectif de la correction est d'éliminer le problème du découplage pair / impair du gradient GG de dissiper les hautes fréquences.

Cette correction a été introduite pour la première fois dans le cadre des solveurs volumes finis / éléments finis avec données aux nœuds du maillage. Pour cette approche, un gradient nodal peut être calculé de 2 manières différences. Pour la première approche (Galle [18]), le gradient nodal est obtenu par circulation sur un volume dual autour du nœud du maillage. Avec la second approche valide seulement sur maillage de triangles / tétraèdres, le gradient nodal est calculé par moyenne de gradients éléments finis $\mathcal{P}^1$ sur tous les triangles partageant le sommet donné. La Fig. 2.1 présente une cellule duale délimitée en pointillés et les gradients nodaux aux points rouges vont servir pour calculer le gradient à l'interface rouge entre les deux nœuds considérés. Le gradient à l'interface est défini comme la moyenne entre les deux nœuds de la face (car l'interface est située au milieu de l'arête). De plus, la stabilité de ce schéma a été améliorée par la correction

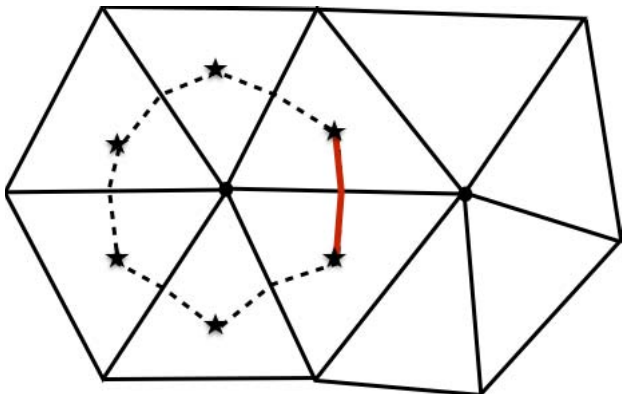


FIGURE 2.1: Gradient à l'interface du volume dual

de Crumpton [19] pour des maillages à fort aspect ratio de maille. C'est cette correction qui donne le nom d'approche GGC. Dans le cadre volumes finis / éléments finis avec données aux nœuds du maillage, la correction est appliquée dans la direction de l'arête reliant les sommets i et j et elle consiste à imposer le gradient obtenu par différences finies dans la direction de l'arête.

C'est cette approche qui est étendue aux volumes finis en remplaçant les sommets du maillage par les centres des volumes de contrôle. Ainsi, la correction dans le sens de l'arête est remplacée par une correction dans la direction des 2 centres de gravité des éléments. Le nouveau gradient GGC sur l'interface Σ s'écrit alors :

$$\nabla W_\Sigma = \overline{\nabla W_\Sigma} - \left(\overline{\nabla W_\Sigma} \cdot \overrightarrow{C_G C_D} - (W_D - W_G)\right) \frac{\overrightarrow{C_G C_D}}{||\overrightarrow{C_G C_D}||^2} , \tag{2.15}$$

où $\overline{\nabla W_\Sigma}$ représente le gradient obtenu par la méthode GG, C_G et C_D les centres respectifs des volumes G et D. Cette méthode a montré des propriétés de conservation, consistence, monotonie et d'ordre 2 sur des maillages structurés réguliers uniquement.

2.3.2.b) Propriétés

- Par rapport à la méthode GG, cette méthode dissipe correctement les hautes fréquences de l'écoulement.
- Le coût numérique de cette méthode est acceptable.
- Le principe de cette méthode est donc une correction dans le sens de l'*arête* reliant les deux centres voisins de l'interface traitée.
- De la même manière que pour le gradient GG, la métrique peut être prise en compte dans le calcul des valeurs des champs aux interfaces et dans le calcul du gradient moyen à l'interface.

2.3.3 Méthodes "diamant"

Un autre moyen de calculer un gradient d'interface repose sur la méthode de Coirier [20] ou méthode *diamant*. Pour cette méthode, le gradient d'interface est calculé par moyenne sur une

cellule duale autour de l'interface. Cette cellule duale (Fig. 2.2) est construite à l'aide des nœuds de la face et des centres des cellules adjacentes. Le gradient est ensuite calculé par circulation avec les valeurs des champs aux centres des cellules et aux nœuds de la face. Ceci implique de devoir reconstruire les valeurs aux nœuds à partir des valeurs centrées cellules.

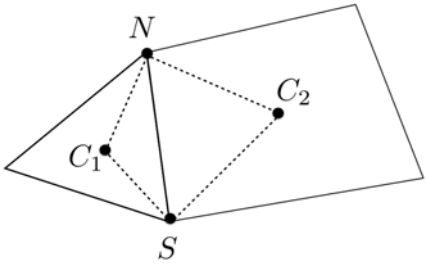


FIGURE 2.2: Gradient à l'interface calculé sur le volume en pointillés

Pour Coudière *et al.* [21], les reconstructions aux nœuds sont faites par une méthode des moindres carrés à l'aide des champs aux centres des cellules autour de ce nœud. Ensuite, le gradient d'interface est déterminé par circulation sur le contour de la cellule diamant. L'usage des moindres carrés rend le pré-traitement de cette méthode relativement cher. De plus, le fait d'avoir des données aux centres des cellules mais également aux nœuds devient coûteux, en particulier dans un environnement parallèle. En effet, pour reconstruire le champ à l'un des nœuds du maillage, il faut connaître tous les volumes s'appuyant sur ce nœud. Cette connectivité est basée sur les nœuds du maillage et pas sur les faces. En conséquence, des échanges supplémentaires sont rajoutés dans un contexte volumes finis centrés cellules. La Fig. 2.3 représente les échanges nécessaires dans le cas d'un point triple partagé entre différents processeurs.

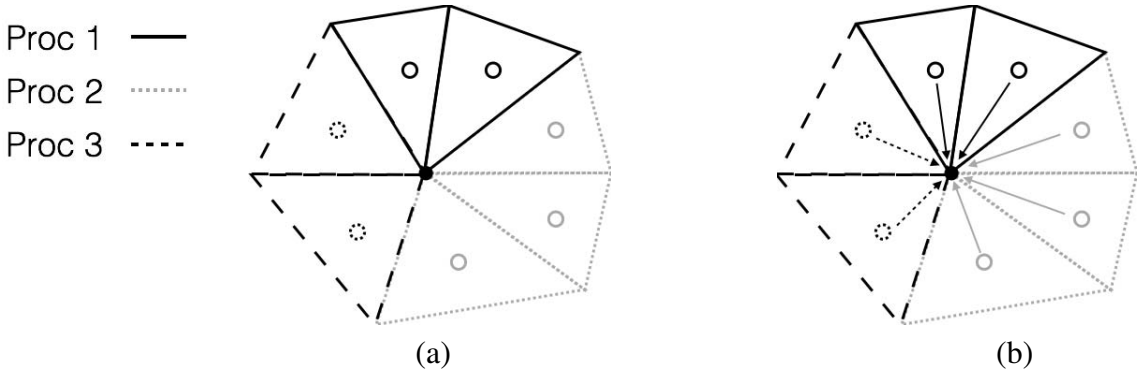


FIGURE 2.3: (a) Répartition des cellules sur 3 blocs différents (b) Reconstruction du champ au nœud • dans un contexte parallèle

En 2D, Le Potier *et al.* [22] ont choisi de prendre les 3 points les plus proches du nœud parmi les centres des cellules voisines. Ensuite, les coordonnées barycentriques sont utilisées

pour reconstruire la valeur au nœud. Il faut également noter que Le Potier propose un schéma pour maillages en triangles, où le centre de la cellule est l'intersection des bissectrices du triangle. Le centre du cercle inscrit est défini comme centre de la cellule car améliorant la stabilité sur des maillages fortement anisotropes. La Fig. 2.4 présente le calcul du cercle inscrit et la recherche des trois points utilisés pour la reconstruction aux nœuds. Ce traitement peut induire un pré-traitement assez coûteux. De plus, cette approche ne s'étend pas aux maillages multi-éléments généraux.

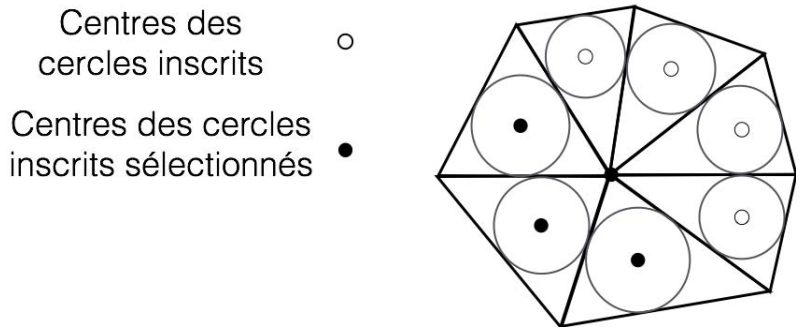


FIGURE 2.4: Centres des cercles inscrits et sélection des trois points les plus proches du nœud

2.3.4 Méthode d'Eymard et al.

Eymard *et al.* [23] ont proposé un solveur volumes finis pour les équations de diffusion avec des opérateurs anisotropes. L'idée de la méthode est d'écrire l'opérateur comme la somme d'un opérateur isotrope et d'un opérateur anisotrope. Le flux diffusif de l'opérateur isotrope est calculé par différence finie et l'opérateur anisotrope est résolu par un solveur dédié. Cette méthode requiert que le segment reliant les centres de deux cellules voisines soit perpendiculaire à l'interface entre les deux cellules. Ce cas est uniquement possible si le centre des cercles circonscrits est utilisé comme centre des cellules pour les triangles. Cette propriété ne peut pas être atteinte par des maillages non-structurés généraux.

2.3.5 Méthode par moindres carrés

Les méthodes par moindres carrés sont appropriées pour les solveurs volumes finis non-structurés. Cette méthode est décrite par Mavriplis [24] et plus récemment par Shima *et al.* [25]. Elle consiste à reconstruire le gradient dans chaque volume du maillage en utilisant les champs de toutes les cellules voisines. La première étape consiste à définir une reconstruction polynômiale autour d'une cellule C_i :

$$\begin{aligned} W_i^R(x-x_i, y-y_i, z-z_i) &= W_i + \left.\frac{\partial W}{\partial x}\right|_i (x-x_i) + \left.\frac{\partial W}{\partial y}\right|_i (y-y_i) + \left.\frac{\partial W}{\partial z}\right|_i (z-z_i) + \\ &\quad \left.\frac{\partial^2 W}{\partial x^2}\right|_i \frac{(x-x_i)^2}{2} + \left.\frac{\partial^2 W}{\partial x \partial y}\right|_i (x-x_i)(y-y_i) + \cdots \end{aligned} \tag{2.16}$$

avec (x_i, y_i, z_i) coordonnées du centre de la cellule C_i, W_i est la valeur du champ W au centre de la cellule C_i et l'indice R signifie "reconstruit".

La conservation du champ moyen implique que l'intégration de la reconstruction polynômiale sur la cellule C_i doit conduire à retrouver le champ moyen $\overline{W}_i$:

$$\frac{1}{|C_i|}\int_{C_i} W_i^R dv = \overline{W}_i\,, \tag{2.17}$$

avec $|C_i|$ volume de la cellule C_i. On retrouve ainsi que $\overline{W}_i = W_i$ pour un schéma du second ordre si le centre de la cellule est choisi comme point de référence.

En développant le terme de gauche de Eq. 2.17, il vient facilement que :

$$\begin{aligned}\frac{1}{|C_i|}\int_{C_i} W_i^R dv \;=\; & W_i + \left.\frac{\partial W}{\partial x}\right|_i \overline{x_i} + \\ & \left.\frac{\partial W}{\partial y}\right|_i \overline{y_i} + \left.\frac{\partial W}{\partial z}\right|_i \overline{z_i} + \\ & \left.\frac{\partial^2 W}{\partial x^2}\right|_i \overline{x_i^2} + \left.\frac{\partial^2 W}{\partial x \partial y}\right|_i \overline{xy_i} + \cdots\end{aligned} \tag{2.18}$$

avec

$$\overline{x^n y_i^m} = \frac{1}{|C_i|}\int_{C_i} (x-x_i)^n (y-y_i)^m dv\,. \tag{2.19}$$

La valeur moyenne pour un volume C_j pour la solution reconstruite W_i^R s'écrit alors :

$$\begin{aligned}\frac{1}{|C_j|}\int_{C_j} W_i^R dv \;=\; & W_i + \left.\frac{\partial W}{\partial x}\right|_i (\overline{x_j} + (x_j - x_i)) + \\ & \left.\frac{\partial W}{\partial y}\right|_i (\overline{y_j} + (y_j - y_i)) + \left.\frac{\partial W}{\partial z}\right|_i (\overline{z_j} + (z_j - z_i)) + \\ & \left.\frac{\partial^2 W}{\partial x^2}\right|_i \frac{\overline{x_j^2} + 2\overline{x_j}(x_j - x_i) + (x_j - x_i)^2}{2} + \\ & \left.\frac{\partial^2 W}{\partial x \partial y}\right|_i (\overline{xy_j} + \overline{x_j}(y_j - y_i) + (x_j - x_i)\overline{y_j} + (x_j - x_i)(y_j - y_i)) + \cdots\end{aligned} \tag{2.20}$$

Cette équation est ensuite écrite sur tous les volumes C_j appartenant au stencil de la cellule C_i. Si on considère une approximation du second ordre (les termes de dérivée seconde sont négligés), Eq. 2.20 peut se réécrire sous la forme d'un système linéaire d'équations où les inconnues sont les valeurs du gradient.

Par exemple, si la cellule C_i est un triangle et que le stencil utilisé est uniquement les voisins par les faces de ce triangle, alors le système à résoudre est le suivant :

$$\begin{matrix} {}_{i1}(x_1 - x_i) & {}_{i1}(y_1 - y_i) \\ {}_{i2}(x_2 - x_i) & {}_{i2}(y_2 - y_i) \\ {}_{i3}(x_3 - x_i) & {}_{i3}(y_3 - y_i) \end{matrix} \left.\begin{matrix} \frac{\partial W}{\partial x} \\ \frac{\partial W}{\partial y} \end{matrix}\right|_i = \begin{matrix} {}_{i1}(W_1 - W_i) \\ {}_{i2}(W_2 - W_i) \\ {}_{i3}(W_3 - W_i) \end{matrix}\,, \tag{2.21}$$

avec w_{ij} poids permettant de prendre en compte la métrique et s'écrivant :

$$w_{ij} = \frac{1}{\overline{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}} . \tag{2.22}$$

Ainsi, dans notre cas, il y a plus d'équations que d'inconnues et le système est résolu par moindre carrés. Le problème de cette méthode est qu'elle nécessite le calcul d'intégrales dans une phase de pré-traitement. Ces intégrales sont constantes tant que le maillage est fixé. Cette méthode est connue pour avoir un coût de calcul important. De plus, cette méthode génère des problèmes de conditionnement pour résoudre le système linéaire de la forme $Ax = b$. Ce problème de conditionnement est généralement corrigé par la méthode pseudo-inverse de Moore-Penrose [26].

Une fois le gradient dans chaque cellule obtenu, le gradient d'interface est calculé soit par demi-somme des gradients dans les cellules voisines, soit par un traitement permettant de prendre en compte la métrique [27].

2.3.6 Méthodes Éléments Finis (EF)

D'autres méthodes de calcul de gradient existent dans le domaine des éléments finis [28]. En Éléments Finis, les champs sont souvent stockés aux nœuds du maillage. Les gradients sont calculés par des éléments finis $\mathcal{P}^1$ pour les éléments tétraèdriques la plupart du temps. Pour des éléments comme les hexaèdres, les prismes ou les pyramides, il est plus complexe de reconstruire le gradient mais plusieurs méthodes sont disponibles [29, 30].

Des méthodes hybrides ont aussi été proposées par le passé. Elles sont hybrides dans le sens où elles utilisent des champs volumes finis centrés cellules, mais elles nécessitent de reconstruire une solution aux nœuds du maillage. Une formulation éléments finis est alors utilisée pour déterminer un gradient sur chaque volume dual. Enfin, ce gradient sert à déterminer le flux diffusif sur chaque interface. Cette approche a été analysée en détail pour le traitement des flux diffusifs par Flandrin *et al.* [31, 32]. Pour calculer les gradients, le domaine doit être découpé en une nouvelle triangulation. Il existe deux moyens de construire cette triangulation.

Avec la première approche, les triangles sont construits par les nœuds du maillage et les centres des cellules. Dans ce cas, le flux diffusif sur une face est divisé en deux contributions provenant de deux gradients différents (Fig. 2.5). Cette approche peut être vue comme une extension de la méthode *diamant* de Coirier mais diffère par la manière de calculer les gradients. Cette approche nécessite une interpolation aux nœuds du maillage, ce qui est difficile à réaliser dans un contexte parallèle avec un solveur Volumes Finis centré cellules et des flux calculés aux faces.

Avec la deuxième approche, la triangulation prend uniquement en compte les centres des cellules. Le nouveau maillage dual intersecte les faces du maillage initial et produit de nouvelles facettes (Fig. 2.5). Un gradient est ensuite calculé puis utilisé pour construire le flux sur chaque facette. En 2D, la définition de ces facettes est assez triviale. En 3D, cela n'est plus du tout évident et en général, l'intersection d'un élément du maillage avec un tétraèdre peut produire un polyèdre complexe. Cette approche est plutôt complexe à mettre en œuvre et a un coût de calcul important (un gradient à calculer par facette). Ces approches ne seront pas considérées par la suite.

2.3.7 Méthode de Dubois

Cette dernière méthode est celle qui se rapproche le plus du cadre Volumes Finis avec données stockées aux centres des cellules du code *elsA*. En effet, Dubois [33] présente une méthode adaptée aux Volumes Finis pour des éléments non-structurés. Le problème à résoudre est comment

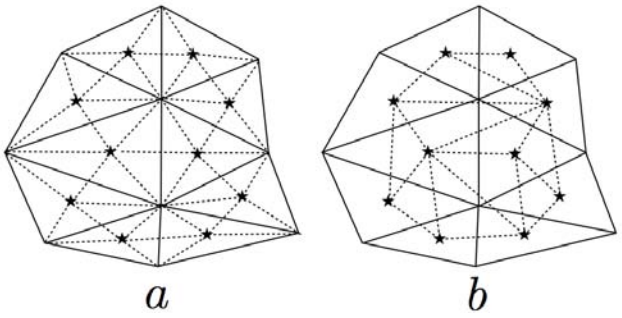


FIGURE 2.5: Définition de la triangulation pour la première (a) et la seconde (b) approche. Le maillage est représenté par des lignes continues, les centres des cellules par des étoiles et la triangulation par des lignes pointillées.

calculer le gradient du champ W sur toutes les faces Σ du maillage. Pour cela, un voisinage V_Σ est défini pour chaque face du maillage. Ensuite, un jeu de coefficients α_Σ associé à la face Σ est choisi de façon à représenter le gradient sous la forme :

$$\nabla W_\Sigma = \sum_{i \in V_\Sigma} \alpha_{\Sigma,i} W_i \,, \tag{2.23}$$

avec W_i solution dans les cellules appartenant au voisinage V_Σ.

Eq. 2.23 peut s'interpréter comme un système linéaire d'inconnues $\alpha_{\Sigma,i}$. Pour obtenir les coefficients, on commence par définir un repère local centré au centre de la face. On introduit alors une reconstruction polynômiale de Lagrange sur le stencil V_Σ. Enfin, l'accès au gradient nécessite la dérivation du polynôme interpolateur.

Deux types de voisinage peuvent être définis pour une face quelconque et ceci de manière simple en 2D. La première est tout d'abord de définir les deux volumes de chaque côté de la face puis ensuite de choisir seulement les cellules voisines de ces deux volumes qui ont un sommet commun avec la face d'intérêt. La Fig. 2.6 présente ce premier type de voisinage par les faces.

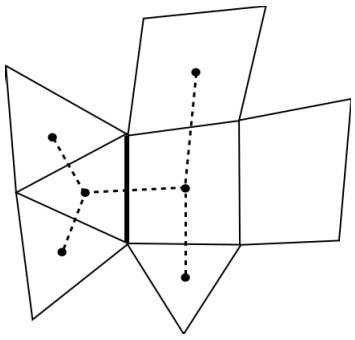


FIGURE 2.6: Définition du voisinage par les faces

Le deuxième type de voisinage est défini par toutes les cellules qui ont un sommet commun avec la face d'intérêt. Ce type de voisinage conduit toujours à une molécule de points plus importante. La Fig. 2.7 présente le type de voisinage par les sommets.

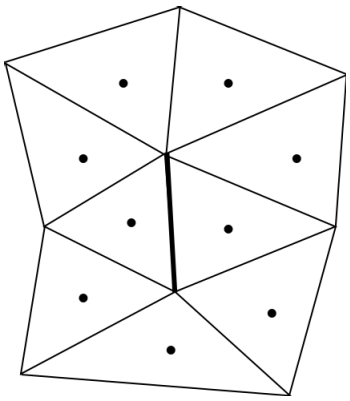


FIGURE 2.7: Définition du voisinage par les sommets

Le seul inconvénient de cette méthode provient du stockage des informations. En effet, pour chaque face du maillage un certain nombre de coefficients α_Σ (dépendant du voisinage) sont définis et stockés pour toute la durée de la simulation. Le point intéressant de cette méthode est la définition du voisinage par les faces (Fig. 2.6) qui serait compatible avec l'approche Volumes Finis centré cellule.

2.3.8 Conclusion sur les gradients pour la partie diffusive

La partie diffusive des équations de Navier-Stokes peut donc être résolue par les différentes méthodes introduites précédemment. Les avantages et inconvénients de chaque méthode ont été mis en avant. Certaines de ces méthodes possédent des aspects discriminants pour une utilisation à la fois sur maillages structurés et non-structurés multi-éléments. D'autres méthodes ne conviennent pas pour des utilisations massivement parallèle. En conclusion, il est difficile de trouver, parmi ces méthodes, une méthode qui remplirait toutes les contraintes imposées.

De la même manière, il est nécessaire d'étudier et de comparer les différents schémas permettant la résolution de la partie convective des équations de Navier-Stokes. Cette étude permettra d'identifier s'il existe un schéma adapté aux contraintes fixées.

2.4 Familles de schémas d'ordre élevé en convection

Après l'inventaire des méthodes de calcul de gradient pour la partie diffusive des équations de Navier-Stokes, une analyse des différentes méthodes de résolution de la partie convective des équations peut être faite. Cette analyse portera uniquement sur des schémas pouvant atteindre un ordre élevé (supérieur à 2).

Dans cette partie les différentes méthodes seront analysées sous plusieurs angles :

- Le formalisme mathématique sous-jacent. Nous rappelons que les schémas doivent être mis en œuvre dans le code *elsA* qui est basé sur un formalisme Volumes Finis.
- L'ordre du schéma. La SGE nécessite des schémas peu dissipatif et peu dispersif afin de capturer précisément les phénomènes turbulents. Les schémas d'ordre élevé remplissent en général ces deux conditions.

– La molécule de points ou stencil. Un schéma numérique nécessite un certain nombre de points pour être défini. Les approches d'ordre élevé peuvent avoir une molécule de points étendue non compatible avec le besoin en calcul parallèle performant.

Cette partie est organisée en trois sections. Pour commencer, les approches avec reconstruction continue de la solution sont introduites. Ensuite, les approches avec reconstruction discontinue sont présentées. Aucune de ces deux classes de méthodes ne respecte toutes les contraintes évoquées ci-dessus et le dernier type d'approche se base sur une reconstruction directionnelle.

De nombreux auteurs ont déjà fait des bibliographies sur les méthodes d'ordre élevé, par exemple, Wang [34]. De plus, de nombreux ouvrages sont disponibles comme ceux de Barth et Deconinck [35] et Deville, Fischer et Mund [36] qui présentent en général plusieurs méthodes d'ordre élevé. Karniadakis et Sherwin [37] se focalisent sur les méthodes éléments finis d'ordre élevé, et Cockburn, Karniadakis et Shu [38], et Hesthaven et Warburton [39] présentent les méthodes de Galerkin discontinu. Dans un souci de concision, les détails de chaque méthode ne seront pas présentés.

2.4.1 Extension des approches classiques à l'ordre élevé à reconstruction continue de la solution

La méthode de Galerkin continue, basée sur un formalisme de type éléments finis, sera rapidement présentée. Cette technique utilise un stencil compact et permet une utilisation plus facile en parallèle.

2.4.1.a) Galerkin continue

La méthode de Galerkin continue se base sur le formalisme mathématique des éléments finis. Les éléments finis classiques $\mathcal{P}^1$ supposent une description linéaire des champs dans les tétraèdres et sont appliqués dans les codes RANS. L'approche d'ordre élevé consiste à utiliser des polynômes d'ordre plus élevé dans chaque cellule. La résolution des équations est faite sous leur forme variationnelle et la solution approchée est choisie de telle manière que la solution soit continue entre chaque élément. Sherwin *et al.* [40] et Sherwin et Ainsworth [41] présentent en détail la méthode Galerkin continue d'ordre élevé. De plus, Sherwin [42] présente les méthodes de Galerkin continue et discontinue et montre que le schéma discontinu est plus diffusif. L'approche Galerkin continue est utilisée également dans le code AVBP du CERFACS pour les LES (schéma de Colin et Rudgyard [43]). Ces schémas utilisent la méthode des Éléments Finis de Galerkin avec les fonctions de forme situées aux nœuds du maillage.

Deux schémas principaux sont disponibles dans AVBP, le schéma TTG4A (ordre 3 en espace et ordre 4 en temps) et le schéma TTGC (ordre 3 en espace et en temps). Pour ces schémas, l'ordre en temps est augmenté à l'aide d'une procédure à deux pas (basée sur les séries de Taylor) :

$$\begin{aligned} W &= W^n + \alpha \quad t\frac{\partial W^n}{\partial t} + \quad t^2\frac{\partial^2 W^n}{\partial t^2} \\ W^{n+1} &= W^n + \quad t \quad {}_1\frac{\partial W^n}{\partial t} + {}_2\frac{\partial W}{\partial t} \quad + \quad t^2 \quad {}_1\frac{\partial^2 W^n}{\partial t^2} + {}_2\frac{\partial^2 W}{\partial t^2} \quad , \end{aligned} \tag{2.24}$$

avec α, , ${}_1$, ${}_2$, ${}_1$, et ${}_2$ paramètres permettant d'utiliser différents schémas. Le Tab. 2.1 répertorie les différents schémas possibles en fonction des coefficients.

Ensuite, les dérivées temporelles dans Eq. 2.24 sont remplacées par des dérivées spatiales.

$$\frac{\partial W^n}{\partial t} = -\Big(\nabla \cdot F(W)\Big)^n \, . \tag{2.25}$$

Schémas			$_1$	$_2$	$_1$	$_2$
LW (1 étape)	0	0	1	0	1/2	0
TTG3	1/3	1/9	1	0	0	1/2
TTG4A	1/3	1/12	1	0	0	1/2
TTG4B	0.1409714	0.1160538	0	1	0	0.3590284
TTGC ( )	1/2 -	1/6	0	1		0

TABLE 2.1: Famille des schémas TTG et les différents coefficients pour les obtenir

Finalement, la méthode de Galerkin est appliquée à ces deux équations modifiées, c'est-à-dire que les équations sont multipliées par les fonctions de forme et intégrées sur tout le domaine. Tous les détails de la formation de ces schémas sont présentés par Lamarque [44].

2.4.1.b) Schémas à résidus distribués

Les schémas RDS (Residual Distribution Scheme) englobent les méthodes volumes finis de type *centré sommets* et tous les schémas pouvant être formulé comme une méthode des éléments finis de Petrov-Galerkin ou de Taylor-Galerkin. Les schémas numériques implantés dans le code AVBP du CERFACS appartiennent également à cette famille de schémas. En effet, AVBP est un code éléments finis centrés sommets où les bilans des lois de conservation sont appliqués au centre des cellules alors que les solutions sont définies aux nœuds. C'est-à-dire que le calcul du résidu est fait au centre de chaque volume, puis il est ensuite redistribué aux nœuds appartenant à ce volume. Cette méthode a été introduite par Roe [45] et a donné naissance a de nombreux schémas dérivés. La formulation mathématique de cette famille de schémas ainsi que les schémas implantés dans AVBP sont explicités dans [44]. Les schémas RDS sont également décrits par Abgrall [46], Villedieu [47, 48] et Ricchiuto [49, 50].

2.4.2 Extension des approches classiques à l'ordre élevé à l'aide d'une reconstruction discontinue de la solution

Les schémas d'ordre élevé les plus courants en volume fini non structuré sont les schémas ENO (Essentialy Non-Oscillatory), WENO (Weighted Essentialy Non-Oscillatory) et CENO (Central Essentially Non-Oscillatory). Ce sont des extensions directes de la méthode de Godunov en volumes finis : les équations sont résolues sous forme intégrale dans chaque cellule du domaine. Le fait que ces méthodes soient d'ordre élevé provient du fait que dans chaque cellule la solution est représentée par un polynôme reconstruit à partir des valeurs moyennes des cellules voisines. Les discontinuités obtenues entre deux cellules sont ensuite utilisées pour calculer le flux aux interfaces à l'aide d'un solveur de Riemann [51]. Ces méthodes ne sont pas spatialement compactes car l'extension à l'ordre élevé nécessite un stencil étendu (utilisation des cellules voisines). Deux problèmes se posent pour les schémas à stencil étendu :

- la difficulté d'adaptation pour des calculs massivement parallèles, il est très difficile de faire tous les échanges quand une molécule de points étendue est partagée entre plusieurs processeurs,
- la construction du stencil sur maillages multi-éléments n'est pas unique, le nombre de voisins peut varier.

2.4.2.a) Schéma ENO

La méthode ENO a tout d'abord été introduite par Harten *et al.* [52] et a ensuite été adaptée aux maillages non-structurés par Durlofsky *et al.* [53], Abgrall [54] et Ollivier-Gooch [55]. Le principe de cette méthode est de calculer plusieurs polynômes par cellule. Ensuite, la reconstruction des flux à l'interface s'effectue par interpolation polynômiale avec une approche hiérarchique, les polynômes sont classés du plus au moins régulier et le polynôme le plus régulier est choisi. La reconstruction du flux à l'interface est donc dépendante des polynômes utilisés et c'est l'ordre des polynômes qui va permettre d'augmenter le degré de précision du calcul.

En considérant l'équation d'Euler sous forme intégrale :

$$\frac{d}{dt}\int W\, d \quad + \int_S F(W)\cdot n\, dS = 0\,, \tag{2.26}$$

les frontières de chaque volume de contrôle peuvent être décomposées en un certain de nombre de facettes $\ _j$, le terme intégral sur la frontière d'un élément S_i peut alors se réécrire :

$$\int_{S_i} (F(W)\cdot n)\, dS = \sum_j \int_{\ _j} (F(W)\cdot n)\, dS\,. \tag{2.27}$$

Le terme de droite d'Eq. 2.27 est alors discrétisé en utilisant une quadrature de Gauss à N points. L'approximation suivante du flux numérique est alors obtenue :

$$\int_{S_i} (F(W)\cdot n)\, dS = \sum_j |\ _j| \sum_{l=1}^{N} w_l F(W(G_l))\cdot n\,, \tag{2.28}$$

où G_l et w_l sont respectivement les points de Gauss et les poids de la quadrature sur la facette $\ _j$. Finalement, il est possible de reconstruire les valeurs de W_i à chaque instant t. Les valeurs reconstruites sur une interface à partir des champs à gauche et à droite ne sont en général pas identiques et un solveur de Riemann (approché) permet de prendre en compte cette discontinuité.

Pour les schémas ENO, les valeurs moyennes dans chaque cellule sont approximées par un polynôme. L'ordre du schéma ENO dépend de l'ordre du polynôme utilisé, si un schéma d'ordre n est désiré, le polynôme devra être d'ordre $n-1$. Pour la construction d'un polynôme d'ordre η, il faut utiliser $N(\eta)$ cellules, où $N(\eta) = (\eta+1)(\eta+2)/2$ en deux dimensions [56] et $N(\eta) = (\eta+1)(\eta+2)(\eta+3)/2 - 1$ en trois dimensions [57]. La mise en place du schéma numérique nécessite alors trois étapes.

– La première étape consiste à choisir un stencil adapté. Il existe plusieurs manières de construire la molécule de points : en utilisant les voisins par les faces ou par les noeuds de la cellule concernée (Fig. 2.8), ou pour des ordres plus élevés prendre également en considération les seconds voisins.

– Les polynômes $p(x,y)$ sont alors définis sur la molécule de points et calculés de la manière suivante :

$$p(x,y) = \sum r_{\ _1\ _2} (x-x_c)^{\ _1} (y-y_c)^{\ _2} \quad , \tag{2.29}$$

avec $|\ | = \ _1 + \ _2$, $\ \in 0,1,2,...$, x_c et y_c coordonnées du barycentre du volume de contrôle et $r_{\ _1\ _2}$ coefficients inconnus. En imposant que l'intégration de $p(x,y)$ sur toutes les cellules du

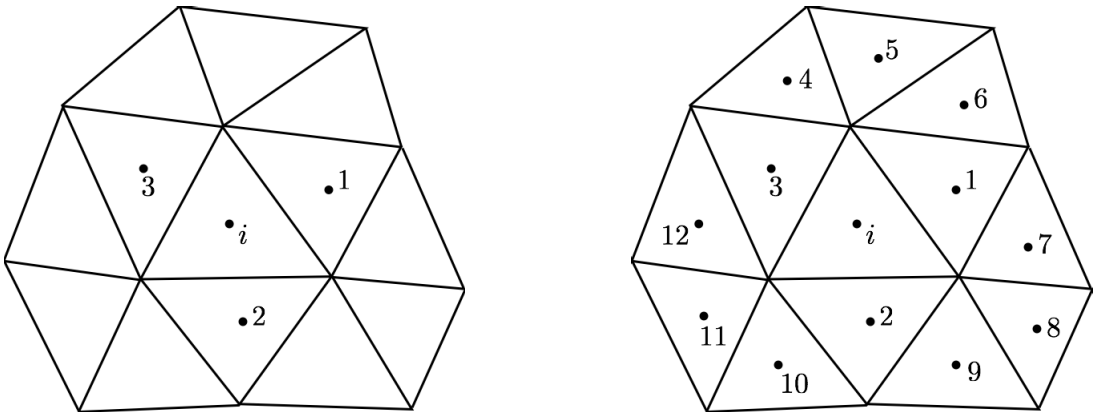


FIGURE 2.8: Stencils classiques pour la reconstruction ENO : (a) reconstruction par les faces et (b) reconstruction par les sommets

stencil soit égale à la valeur moyenne d'une variable $\bar{W}$ dans chaque cellule, un système linéaire de $N(\eta)$ équations à $N(\eta)$ inconnues doit être résolu :

$$[R]\{r\} = \{\bar{W}\} \quad . \tag{2.30}$$

Ici, R est la matrice des moments du volume de contrôle, ces moments $\overline{x^\phi y^\zeta}$ qui forment la matrice sont définis de la manière suivante :

$$\overline{x^\phi y^\zeta} = \frac{1}{V_i}\int_{V_i}(x-x_c)^\phi (y-y_c)^\zeta dV \quad . \tag{2.31}$$

Ces termes sont ensuite évalués à l'aide d'une quadrature de Gauss d'ordre suffisant.

– Après que les reconstructions polynômiales soient effectuées sur chaque cellule, l'étape suivante est alors de vérifier quel polynôme est le moins oscillant pour utiliser le schéma ENO. Jiang et Shu [58] présentent différents indicateurs permettant de mesurer l'oscillation des polynômes.

2.4.2.b) Schéma WENO

La méthode WENO a tout d'abord été introduite par Liu *et al.* [59] puis a ensuite été adaptée aux maillages non-structurés par Hu et Shu [60]. Les schémas WENO utilisent les mêmes fondements mathématiques que les schémas ENO : plusieurs polynômes sont reconstruits à partir des champs moyens sur chaque volume de contrôle. Toutefois, contrairement à l'approche ENO, tous les polynômes interviennent dans le calcul grâce à des poids. En résumé, le nouveau polynôme est $p(x,y) = \sum_{k=1}^{m} w_k p_k(x,y)$. Les poids sont alors définis de la manière suivante :

$$w_k = \frac{\varepsilon + OI(p_k(x,y))}{\sum_{k'=1}^{m}[\varepsilon + OI(p_{k'}(x,y))]} \quad , \tag{2.32}$$

où ε est un nombre réel petit évitant la division par zéro et OI est l'indicateur d'oscillations choisi.

De nombreuses publications expliquent en détails la formation des schémas WENO, comme par exemple Wolf et Avezedo [56], Tsoutsanis *et al.* [57] et plus récemment Liu et Zhang [61].

2.4.2.c) Schéma CENO

De nombreux scientifiques utilisent également d'autres schémas d'ordre élevé et nécessitant un stencil important. Par exemple la méthode CENO (Central Essentially Non-Oscillatory) décrite par Ivan et Groth [62], mélange entre les schémas ENO et WENO, permet d'adapter la reconstruction du polynôme en fonction de la résolution et des discontinuités de la solution. Cette méthode de résolution hybride est activée par un indicateur de continuité de la solution (basé sur les résidus).

2.4.2.d) Autres schémas à molécule de points étendue

Toutes les méthodes présentées précédemment appartiennent à la catégorie des schémas *k-exacts*. Dans ce groupe de schémas se retrouvent également toutes les méthodes de reconstruction par moindres carrés, celles-ci sont présentées par exemple par Mandal et Rao [63] et également par Gerolymos et Vallet [64]. Le principe de cette méthode est de retrouver les valeurs de la solution aux interfaces à l'aide de développement de Taylor à partir du centre de la cellule voisine. La solution à l'interface s'exprime alors en fonction de la valeur dans la cellule, du gradient dans la cellule, de la Hessienne dans la cellule...

$$\begin{aligned} W_L &= W_i + |d_L| \cdot \nabla W_L + \frac{1}{2}|d_L^2| \cdot H_L + \ ... \\ W_R &= W_j + |d_R| \cdot \nabla W_R + \frac{1}{2}|d_R^2| \cdot H_R + \ ... \end{aligned} \tag{2.33}$$

avec W_L solution à l'interface à gauche, W_R solution à l'interface à droite, W_i et W_j valeurs dans les cellules i et j, d_L distance entre l'interface et le centre de la cellule à gauche, d_R distance entre l'interface et le centre de la cellule à droite, ∇W gradient dans la cellule et H Hessienne dans la cellule.

L'ordre de la solution est donc dépendant de l'expression de la solution à l'interface. Si celle-ci dépend uniquement des valeurs voisines, l'ordre sera égal à 1. Si le gradient intervient, l'ordre passera à 2 et avec la Hessienne à 3.

Toutes les dérivées intervenant dans les gradients et les Hessiennes sont calculées par la méthode des moindre carrés. Ces schémas nécessitent donc également une molécule de points étendue pour la reconstruction par moindre carrés.

Enfin, il est nécessaire de calculer plusieurs flux par interface afin d'avoir un flux d'interface en accord avec la reconstruction. Ce sont les quadratures des intégrales de bord et elles se retrouvent dans d'autres méthodes d'ordre élevé.

2.4.2.e) Méthode MOOD

L'approche MOOD (pour Multi-dimensional Optimal Order Detection en Anglais) a été développée dans un contexte Volumes Finis par Loubère, Diot, Dumbser et Clain [65, 66, 67, 68].

Le principe de la méthode est le suivant. On commence par calculer le nouvel état après intégration en temps en calculant les flux à un ordre donné. Si cette solution n'est pas physiquement correcte (oscillations par exemple), on calcule un nouvel état après intégration en temps en calculant les flux à un ordre inférieur. Ce procédé est répété jusqu'à ce qu'une solution acceptable soit trouvée, l'ordre le plus bas étant un schéma du premier ordre basé sur une extrapolation d'ordre 0. Bien entendu, la force de la méthode MOOD réside dans la définition de la solution acceptable.

La méthode MOOD nécessite la définition de détecteur de régularité de la solution. Deux types de détecteurs sont introduits :

– Le premier détecteur est le Principe du Maximum Discret (PMD), la solution W_i^{n+1} vérifie le PMD si :
$$\min_{j=1,\ ,N}(W_i^n, W_j^n) \qquad W_i^{n+1} \qquad \max_{j=1,\ ,N}(W_i^n, W_j^n)\,, \tag{2.34}$$
avec N nombre de cellules appartenant au voisinage de la cellule i. Ce premier détecteur nécessite un stencil composé de la cellule courante et de ses voisins.
Le PMD est un critère strict et implique une erreur du second ordre sur des extremas réguliers. Il est donc nécessaire de pouvoir outrepasser ce critère pour des extremas réguliers et obtenir des ordres élevés, c'est le but du second détecteur.

– Le deuxième détecteur différencie un extremum régulier d'une discontinuité : une solution peut outrepasser le PMD si :
$$\mathcal{W}_i^{min}\mathcal{W}_i^{max} > 0\,, \tag{2.35}$$
et
$$\left|\frac{\mathcal{W}_i^{min}}{\mathcal{W}_i^{max}}\right| > 1 - \quad = \frac{1}{2}\,, \tag{2.36}$$
avec
$$\begin{aligned}\mathcal{W}_i^{min} &= \min_{j=1,\ ,N}(\mathcal{W}_i^n, \mathcal{W}_j^n)\\ \mathcal{W}_i^{max} &= \max_{j=1,\ ,N}(\mathcal{W}_i^n, \mathcal{W}_j^n)\,,\end{aligned} \tag{2.37}$$
avec o.

L'intérêt principal de cette méthode est qu'elle permet de passer correctement les chocs en diminuant l'ordre de la solution proche des discontinuités.

2.4.2.f) Récapitulatif des schémas

Le Tab. 2.2 résume les différents aspects des schémas vus précédemment. Les principaux avantages et inconvénients sont mis en avant, ainsi que le formalisme associé à ces méthodes. Ce tableau récapitule aussi les codes et/ou les auteurs utilisant ces schémas. Le schéma CENO n'est pas présenté car c'est un schéma hybride utilisant les schémas ENO et WENO, il a donc presque les mêmes caractéristiques que ceux-ci.

2.4.3 Approche par stencil compact

Les schémas suivants d'ordre élevé sont à stencil minimum, c'est-à-dire que la représentation d'ordre élevé ne fait intervenir que le volume courant et ses voisins directs. Pour cela, il faut représenter la solution d'ordre élevé dans chaque volume et les degrés de liberté sont ainsi situés à

Schéma	Avantages	Inconvénients	Formalisme	Publications
GC	Stencil compact, efficace en parallèle	Traitement spécial pour les chocs	EF	[40], [42], [41], [43], [37], [69], ...
RDS	Stencil compact	Flux calculés aux nœuds	VF centré sommets / EF	[45], [44], [46], [47], ...
ENO	Adapté pour les chocs	Stencil étendu, difficilement parallélisable	VF	[53], [55], [54], ...
WENO	Précis dans les régions sans discontinuités, adapté pour les chocs	Stencil étendu, difficilement parallélisable	VF	[57], [56], [60], [59], [58] ...
k-exact	Précis	Stencil étendu, moindre carrés coûteux	VF	[63], [64], [62], ...
MOOD	Précis, adapté pour les chocs	Stencil étendu	VF	[65], [66] , [67], [68], ...

TABLE 2.2: Récapitulatif des différents schémas d'ordre élevé à reconstruction continue de la solution

l'intérieur d'un volume. Seuls les voisins aux interfaces sont nécessaires pour le calcul des flux car ils permettent de faire transiter les informations de volume en volume. Toutes les méthodes suivantes sont dites méthodes *spectrales* car elles utilisent toutes une projection sur une base polynômiale. La méthode la plus couramment utilisée avec un formalisme éléments finis est celle de Galerkin Discontinue (GD). De nouvelles méthodes reprenant certaines particularités des approches volumes finis et différences finies se classent également dans cette catégorie, ce sont les volumes spectraux et les différences spectrales.

2.4.3.a) Approche Galerkin Discontinue (GD)

Cette méthode a été introduite pour la première fois par Reed et Hill en 1973 [70] pour résoudre l'équation de transport de neutrons. Le principe de la méthode GD est l'introduction d'une formulation variationnelle directement dans chaque cellule du maillage, sans hypothèse de continuité à l'interface entre 2 volumes adjacents. Sur cette interface, les états reconstruits sont différents et le flux advectif est alors calculé par un solveur du problème de Riemann. Ainsi, l'approche GD implique de résoudre la forme variationnelle des équations de Navier-Stokes et cette approche peut assez facilement être mise en œuvre dans un code éléments finis pour la mécanique des fluides.

Il existe ensuite de nombreuses variantes à la méthode GD, la plus populaire étant initiée par Cockburn et Shu [71, 72]. D'autres comme Bassi et Rebay présentent la méthode pour traiter les termes visqueux d'une manière *centrée* [73, 74].

Pour clarifier cette méthode DG, on choisit de l'appliquer au problème modèle des équations d'Euler compressibles 2D :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot F(W) = 0\,. \tag{2.38}$$

On introduit la formulation faible de Eq. 2.38 en multipliant par une fonction test v et en intégrant sur le domaine de calcul :

$$\int v\frac{\partial W}{\partial t}d \quad + \int \quad v(F(W)\cdot n)d \quad - \int \nabla v \cdot F(W)d \quad = 0\,. \tag{2.39}$$

Maintenant, on suppose que la solution est engendrée par une base de fonctions de forme, c'est-à-dire que la solution W_e dans un élément est déterminée par un ensemble de coefficients w_i ne dépendant pas des cellules voisines :

$$W_e = \sum_{i\in I_e} w_i \quad _i\,, \tag{2.40}$$

où $\quad _i$ sont les fonctions de base en éléments finis. Les fonctions tests de la forme variationnelle prennent alors les valeurs des fonctions de forme sur chaque élément :

$$\sum_e \quad \int_{\ e} \quad \frac{\partial W}{\partial t}d \quad + \int_{\ e} \quad (F(W)\cdot n)d \quad - \int_{\ e} \nabla \quad \cdot F(W)d \qquad = 0\,. \tag{2.41}$$

L'Eq. 2.41 est résolue sur chaque élément du maillage. Il existe donc des discontinuités entre les solutions aux frontières entre chaque élément. Le second terme de Eq. 2.41 permet d'assurer le couplage entre chaque élément. Les discontinuités sont gérées par un solveur de Riemann à chaque interface. L'intégrale de bord est alors remplacée par une somme sur toutes les faces de la cellule :

$$\sum_e \quad \int_{\ e} \quad \frac{\partial W}{\partial t}d \quad + \sum_{f\in\Sigma_e} \sum_{i\in f} \quad _i \quad F_{Riem}(W^-, W^+, n)d \quad - \int_{\ e} \nabla \quad \cdot F(W)d \qquad = 0\,. \tag{2.42}$$

Comme à la manière des schémas *k-exacts*, le solveur de Riemann est appliqué à plusieurs points flux de l'interface selon les règles de quadrature des intégrales de bord.

2.4.3.b) Volumes spectraux

Le principe des volumes spectraux est de représenter les champs de manière polynomiale dans chaque élément du maillage, mais les coefficients du polynôme doivent être reliés aux champs moyens des inconnues sur des sous-cellules. Il s'agit donc d'une reconstruction polynomiale basée sur des champs moyens typiquement rencontrés en volume fini. Ces schémas ressemblent fortement aux méthodes de type ENO. La différence provient du fait que le polynôme n'est pas créé à l'aide des cellules voisines, il est calculé directement dans la cellule subdivisée. De la même manière que les méthodes GD, la solution est discontinue entre chaque cellule et le flux à l'interface est alors calculé par un solveur de Riemann. Wang *et al.* [75, 76, 77, 78] étudient les volumes spectraux depuis 2002 et présentent dans les publications la formulation basique de cette méthode jusqu'à l'extension en 3D. Chikhaoui *et al.* [79, 80] analysent également la précision de la méthode des volumes spectraux sur des cas de transport et avec choc. Une analyse plus complète de cette approche se trouve dans la thèse de Van den Abeele [81]. Cette approche est plutôt analysée pour des maillages contenant des tétraèdres ou des triangles. L'extension à tous les types d'éléments classiques est un problème ouvert.

Afin d'expliquer la méthode des volumes spectraux, considérons l'équation d'Euler 2D suivante :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot F(W) = 0\,. \tag{2.43}$$

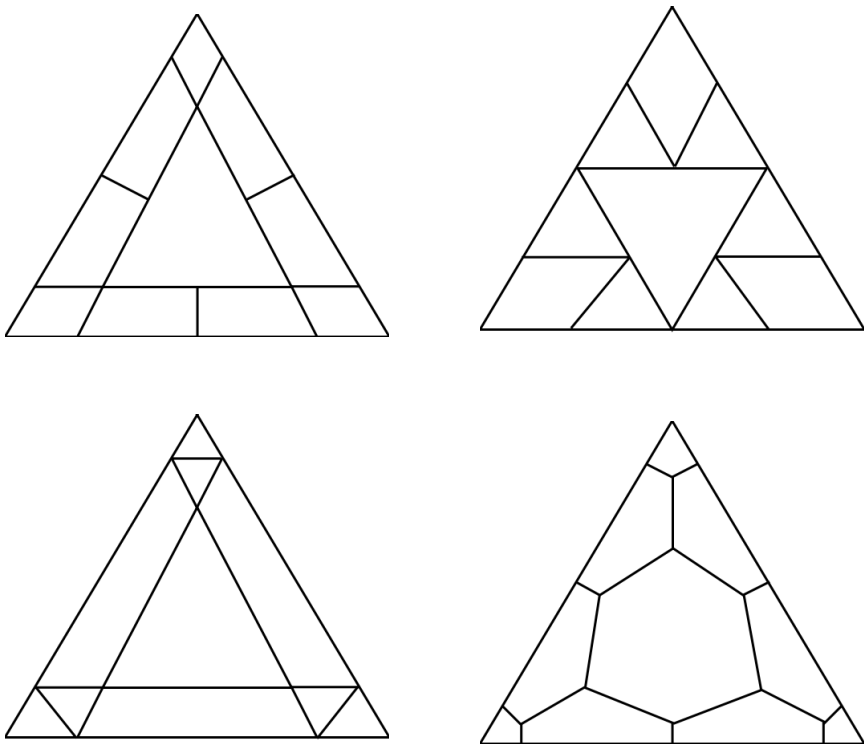


FIGURE 2.9: Différentes partitions possibles dans un triangle pour un schéma d'ordre 4

Pour un certain ordre k, chaque cellule (triangle) C_i est partitionnée en $m = k(k+1)/2$ sous cellules en 2D notées $C_{i,j}$ (Fig. 2.9). Soient W les variables conservatives dans chaque sous cellule. On souhaite représenter W dans la cellule C_i par un polynôme $p_i(x, y)$ au moins d'ordre $k-1$. Cette représentation de W s'effectue sous contrainte : on impose que l'intégale de la reconstruction polynomiale coïncide avec le champ moyen sur chacun des sous volumes. Ainsi, dans le sous volume $C_{i,j}$, la moyenne $\bar{W}_{i,j}$ de chaque variable conservative est telle que :

$$\bar{W}_{i,j} = \frac{1}{V_{i,j}} \int_{C_{i,j}} W(x,y)\, dxdy = \frac{1}{V_{i,j}} \int_{C_{i,j}} p_i(x,y)\, dxdy\,, \tag{2.44}$$

où $V_{i,j}$ représente le volume de la sous cellule $C_{i,j}$. Eq. 2.44 est la relation permettant de définir les coefficients du polynôme en fonction des champs moyens sur chaque sous volume.

En introduisant la base adéquate des fonctions polynomiales $L_j(x, y) \in P^{k-1}$, la reconstruction s'exprime simplement :

$$p_i(x,y) = \sum_{j=1}^{m} L_j(x,y)\bar{W}_{i,j}\,., \tag{2.45}$$

En intégrant Eq. 2.43, l'équation devient :

$$\frac{d\bar{W}_{i,j}}{dt} + \frac{1}{V_{i,j}} \sum_{r=1}^{K} \int_{A_r} (f \cdot n) dA = 0\,, \tag{2.46}$$

avec $\bar{W}_{i,j}$ vecteur des variables conservatives de la sous cellule $C_{i,j}$, $f = (F, G)$, K nombre de faces dans $C_{i,j}$ et A_r la r-ième face de $C_{i,j}$. Pour conserver l'ordre de la méthode, l'intégration sur chaque face se fait à l'aide d'une quadrature de Gauss d'ordre k :

$$\int_{A_r} (f \cdot n) dA = \sum_{q=1}^{J} w_{rq} f(W(x_{rq}, y_{rq})) \cdot n_r A_r \,, \tag{2.47}$$

où $J = int(k+1)/2$ nombre de points de quadrature sur la face r, w_{rq} poids des points de Gauss et (x_{rq}, y_{rq}) points de la quadrature de Gauss. Les sous faces A_r sont de 2 types, soit faces internes, soit faces frontières.

Il reste finalement à déterminer les flux d'interface. Pour les sous faces internes, le flux est calculé aux points de quadrature par combinaison non linéaire de l'état W interpolé au point de quadrature à l'aide de Eq. 2.45. Par contre, les champs reconstruits à l'interface entre deux volumes spectraux sont discontinus la plupart du temps, le flux est donc évalué par un solveur de Riemann approché (Rusanov [82] ou Roe [45]). La forme finale de l'équation à résoudre est alors :

$$\frac{d\bar{W}_{i,j}}{dt} + \frac{1}{V_{i,j}} \sum_{r=1}^{K} \sum_{q=1}^{J} w_{rq} f_{Riem}(W_L(x_{rq}, y_{rq}), W_R(x_{rq}, y_{rq}), n_r) A_r = 0 \,. \tag{2.48}$$

De nombreux travaux plus récents adaptent cette méthode pour une utilisation sans quadrature de Gauss [83] ou pour du multigrille [84].

2.4.3.c) Différences spectrales

La première apparition des schémas aux différences spectrales a été faite en 1996 par Kopriva et Kolias [85, 86] sous le nom de méthode *staggered-grid Chebyshev multidomain* pour les maillages structurés. Mais c'est en 2006 que Liu, Vinokur et Wang [87] proposent une formulation plus générale utilisable pour des tétraèdres et la méthode est renommée en *différences spectrales*. Finalement, la stabilité de l'approche sur triangles n'est pas garantie et dans la très grande majorité des articles sur cette approche, les calculs sont effectués sur maillage non structuré composé d'hexaèdres. Ce schéma est inspiré de la méthode GD mais est basé sur la forme différentielle *forte* des équations. Il s'agit alors de s'affranchir des règles de quadrature complexes rencontrées en GD et VS.

Les explications sur la méthode sont données ici en 1D car l'extension en 2D et 3D sur quadrilatère et hexaèdre suit un traitement 1D par direction (approche tensorielle). On commence par définir un polynôme de degré p par interpolation de la solution définie en $p+1$ points qualifiés de points *solution*. On peut pour cela utiliser par exemple une interpolation de Lagrange. En reprenant les équations d'Euler, on constate qu'en 1D, il faut définir un polynôme de flux d'ordre $p+1$ afin que sa dérivée soit consistante avec le polynôme solution. On peut pour cela à nouveau s'appuyer sur le polynôme de Lagrange. Le polynôme de flux étant d'ordre $p+1$, il s'appuie sur $p+2$ points qualifiés de points *ux*. Ces points flux sont placés en 1D suivant un formalisme de saute mouton par rapport aux points solution : on place un point flux sur chaque frontière et un point flux entre 2 points solutions. Le processus de calcul de la dérivée du polynôme du flux est alors le suivant :

- Extrapolation de la solution des points solution vers les points flux par interpolation polynômiale (polynôme de Lagrange).
- Calcul des flux aux points internes à partir de la solution.

– Calcul des flux aux frontières par résolution d'un problème de Riemann.
– Construction du polynôme de flux par interpolation (polynôme de Lagrange).
– Dérivation du polynôme de flux aux points solution et incrément temporel de la solution.

De plus en plus de scientifiques s'intéressent à cette méthode et l'utilisent pour leur efficacité, comme par exemple May et Jameson [88], Sun *et al.* [89], Van den Abeele [81], Liang *et al.* [90], Hu *et al.* [91] et plus récemment Lodato et Jameson [92].

Le point clé concerne le positionnement judicieux des points solution et des points flux. Pour permettre un positionnement unique dans tout hexaèdre (quadrangle en 2D), une transformation isoparamétrique permet de ramener chaque volume de calcul dans son équivalent isoparamétrique ; ainsi il suffit de travailler sur un élément $[0,1]^d$ en dimension d.

Afin de choisir les points flux et les points solution, l'approche la plus courante consiste à utiliser les points de Chebyshev-Gauss comme points solution et les points de Chebyshev-Gauss-Lobato ou de Legendre comme points flux. Par exemple, la répartition des points solution et des points flux se fait comme sur la Fig. 2.10 en 2D et il s'agit d'une approche directionnelle dans le volume.

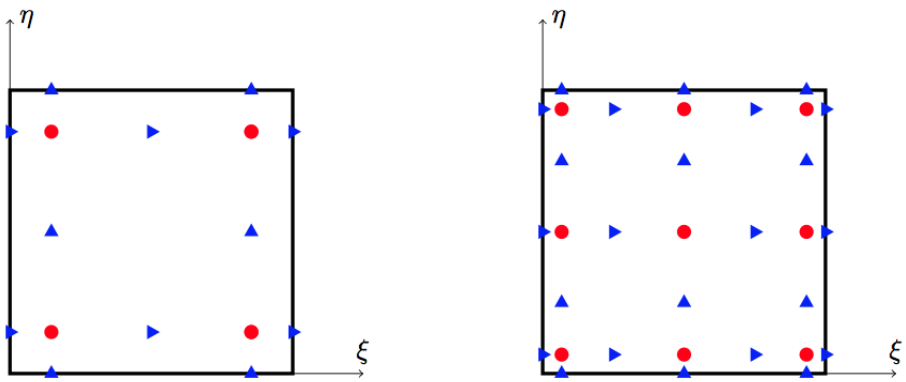


FIGURE 2.10: Partitions possibles pour un quadrilatère (ordres 1 et 2 des polynômes), avec points solutions (cercle rouge) et points de flux (triangle bleu)

2.4.3.d) Méthodes à reconstruction de ux

Les méthodes à reconstruction de flux sont, comme les différences spectrales, basées sur une résolution forte des équations initiales. Ce type de méthode est construit pour contourner les difficultés de la méthode des différences spectrales. En premier lieu, il s'agit de définir une approche co-localisée pour laquelle les points solutions et les points flux dans l'élément sont identiques. On s'affranchit ainsi du coût de l'interpolation polynômiale aux points flux. Toutefois, le polynôme de flux ainsi créé est du même degré que le polynôme solution, ce qui est incompatible avec la formulation des équations aux dérivées partielles : le polynôme de flux doit (exactement) avoir pour ordre celui du polynôme solution plus un.

La méthode Flux Reconstruction a été introduite pour la première fois par Huynh en 2007 [93]. L'idée est de définir une correction au polynôme de flux avec 2 objectifs :

– Atteindre le degré du polynôme attendu : le polynôme de flux de degré $p+1$ est alors la somme du polynôme initial de degré p et de polynômes corrections de degré $p+1$.
– Rendre le polynôme de flux continu au bord. Ce point est un prérequis afin de rendre l'approche conservative.

On parle alors de méthode de reconstruction de flux ou de relèvement car la forme du polynôme correcteur de degré $p+1$ est une donnée de la méthode. Ce polynôme est souvent choisi sur base de polynôme de Radau pour lequel on impose une valeur de 1 sur un bord, de 0 sur l'autre bord. La correction par polynôme de Radau est appliquée par symétrie pour corriger l'autre extrémité d'un volume de contrôle 1D. Ce type d'approche s'étend en 2D et 3D par produit tensoriel. En 2009, Wang et Gao [94] proposent une formulation du relèvement utilisable sur des triangles et changent le nom de la méthode pour approche CPR (Correction Procedure via Reconstrution). En 2011, Vincent, Castonguay et Jameson [95] étudient cette formulation et retrouvent sous condition l'approche Galerkin discontinue et démontrent la stabilité de la méthode à tout ordre. En 2012, Castonguay, Vincent et Jameson [96] proposent un relèvement qui garantit que le schéma obtenu préserve l'énergie cinétique, ce qui est un point positif pour les calculs LES.

Depuis 2014, la littérature sur cette approche est très prolifique et de nombreux auteurs utilisent l'approche FR/CPR pour des calculs LES. Son principal avantage est sa compatibilité avec tous les éléments canoniques des maillages non structurés (hexaèdres, prismes, pyramides et tétraèdres) et son coût de calcul par itération et par degré de liberté inférieur aux autres approches [97].

2.4.3.e) Récapitulatif des schémas à stencil compact

Le Tab. 2.3 récapitule les avantages et inconvénients des techniques introduites précédemment.

Schéma	Avantages	Inconvénients	Formalisme	Publications
GD	Efficace en parallèle	Moins robuste pour les chocs	VF/EF	[71], [72], [74], [98], ...
DS	Efficace en parallèle	En développement en non-structuré	DF/VF	[87], [81], [88], [92], [86], [90], ...
VS	Efficace en parallèle	Décomposition non-unique	VF	[81], [78], [84], [75], [79], [80], ...
FR	Efficace en parallèle	Choix du polynôme correcteur	DF/VF	[93], [94], [95], [96], [97], ...

TABLE 2.3: Récapitulatif des différents schémas d'ordre élevé à stencil compact

2.4.4 Conclusions sur les schémas déjà présentés

Les méthodes d'ordre élevé présentées précédement ne sont pas facilement utilisables pour *elsA* non-structuré. En effet, l'approche Galerkin continue n'est pas compatible avec le formalisme volumes finis centrés cellules. D'autre part, les schémas ENO, WENO et CENO sont des méthodes pouvant être adaptées pour *elsA* non-structuré mais uniquement pour des ordres 2 ou 3. Si l'on souhaite un ordre plus élevé, le stencil devient rapidemment trop étendu et donc peu

compatible avec le besoin en performance parallèle. Les schémas GD, SV et SD qui sont des méthodes compactes ne sont pas compatibles avec l'architecture de données d'*elsA*. La section suivante présente un autre type de schéma permettant également d'atteindre l'ordre élevé, les schémas à approche directionnelle.

2.4.5 Approche directionnelle

Dans cette section, nous analysons un nouveau type d'approche basé sur une molécule de points directionnelle. Deux grandes classes de schémas sont basées sur ce formalisme. La première catégorie de schémas (schéma NLV6) est présentée dans plusieurs articles par Koobus *et al.* [99], Alabakin *et al.* [100], Camarri *et al.* [101] et également Cournède *et al.* [102]. La deuxième partie présente un autre code utilisant une approche directionnelle, il s'agit du code CharLES de Cascade Technologies. Peu d'informations sont disponibles à son propos, Khalighi *et al.* présentent dans [103] l'idée principale du schéma.

2.4.5.a) Schéma NLV6

Cette famille de schémas est basée sur une approximation utilisant à la fois des éléments finis et des volumes finis de type centré sommet. Ce schéma est centré aux sommets, dissipatif, précis au second ordre sur certaines tétraédrisations et pouvant aller jusqu'à l'ordre 6. Dans les différentes études de Dervieux *et al.*, les volumes duaux suivants sont utilisés (Fig. 2.11) : ceux-ci sont construits à l'aide des centres des cellules et des milieux des arêtes.

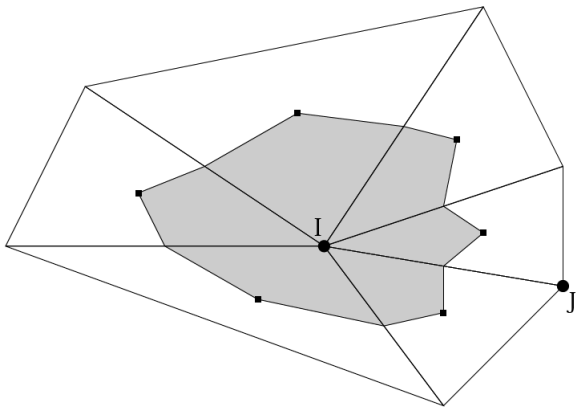


FIGURE 2.11: Construction par centre de la cellule et milieu des arêtes

Considérons les équations d'Euler :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot F(W) = 0\,. \tag{2.49}$$

Après une discrétisation spatiale et temporelle, la densité de flux à chaque noeud i est calculée par circulation sur le volume dual de la manière suivante :

$$aire(C_i)\, W_{i,t} + \sum_j \; {}^{upwind}_{ij} = 0\,, \tag{2.50}$$

avec $aire(C_i)$ surface de la cellule en 2D ou volume en 3D et $\overset{upwind}{ij}$ flux numérique décentré à l'interface entre les nœuds i et j.

Le flux numérique $\overset{upwind}{ij}$ est la clé de ce schéma numérique. Il est choisi de la manière suivante :

$$\overset{upwind}{ij} = \quad_{ij} - \mathcal{D}_{ij}\,, \tag{2.51}$$

avec $\mathcal{D}_{ij}$ terme de stabilisation tel que :

$$\mathcal{D}_{ij} = 0.5 \quad sign(\mathcal{A}_{ij})(F_{ji}\cdot n_{ij} - F_{ij}\cdot n_{ij})\,, \tag{2.52}$$

avec paramètre de décentrement et $\mathcal{A}_{ij}$ défini de la manière suivante :

$$\mathcal{A}_{ij} = (F\,, G\,)((W_L + W_R)/2)\cdot n_{ij}\,. \tag{2.53}$$

Le flux centré à l'interface s'écrit :

$$_{ij} = 0.5(F_{ij} + F_{ji})\cdot n_{ij}\,. \tag{2.54}$$

Afin d'obtenir une précision plus élevée, une extension a été mise en place. Elle se base sur l'approche MUSCL de Van Leer [104] puis augmente l'ordre à l'aide de valeurs extrapolées F_{ij} et F_{ji} à l'interface des cellules.

$$\begin{aligned} F_{ij} = &\quad F_i + 0.5(\nabla F)_{ij}\cdot ij \\ F_{ji} = &\quad F_j - 0.5(\nabla F)_{ji}\cdot ij\,, \end{aligned} \tag{2.55}$$

où les pentes $(\nabla F)_{ij}$ et $(\nabla F)_{ji}$ sont obtenues en utilisant des gradients centrés et décentrés.

L'idée est donc de faire intervenir des corrections permettant de supprimer les termes successifs de l'analyse de Taylor, ce qui revient à piloter l'ordre du schéma.

Le gradient centré $(\nabla F)^c_{ij}$ est défini tel que $(\nabla F)^c_{ij}\cdot ij = F_j - F_i$.
Le gradient au noeud i est calculé sur le volume dual C_i comme la moyenne des gradients des triangles qui contiennent le noeud consideré, soit :

$$(\nabla F)_i = \frac{1}{aire(C_i)}\sum_{T\in C_i}\frac{aire(T)}{3}\sum_{k\in T} F_k \nabla \overset{T}{k}\,, \tag{2.56}$$

avec $\nabla \overset{T}{k}$ gradient des fonctions de base des éléments P^1-Galerkin. Pour définir les autres approximations de gradients, il faut considérer deux triangles supplémentaires notés T_{ij} et T_{ji}. L'élément T_{ij} est en amont du noeud i et T_{ji} en aval du noeud j (Fig. 2.12). Le gradient amont $(\nabla F)^u_{ij}$ est alors calculé comme un gradient classique en éléments finis sur T_{ij} et le gradient aval $(\nabla F)^d_{ij}$ sur T_{ji}.
C'est-à-dire $(\nabla F)^{u(d)}_{ij(ji)} = \nabla F_{T_{ij(ji)}}$ où $\nabla F_T = \quad_{k\in T} F_k \nabla \overset{T}{k}$ est le gradient sur le triangle T.

Il est maintenant possible de rassembler ces gradients afin d'obtenir les pentes $(\nabla F)_{ij,ji}$:

$$\begin{aligned} (\nabla F)_{ij}\cdot ij = &(1 - \quad)(\nabla F)^c_{ij}\cdot ij + \quad(\nabla F)^u_{ij}\cdot ij \\ &+ \quad_c[(\nabla F)^u_{ij}\cdot ij - 2(\nabla F)^c_{ij}\cdot ij + (\nabla F)^d_{ij}\cdot ij] \\ &+ \quad_d[(\nabla F)_{D_{ij}}\cdot ij - 2(\nabla F)_i\cdot ij + (\nabla F)_j\cdot ij]\,. \end{aligned} \tag{2.57}$$

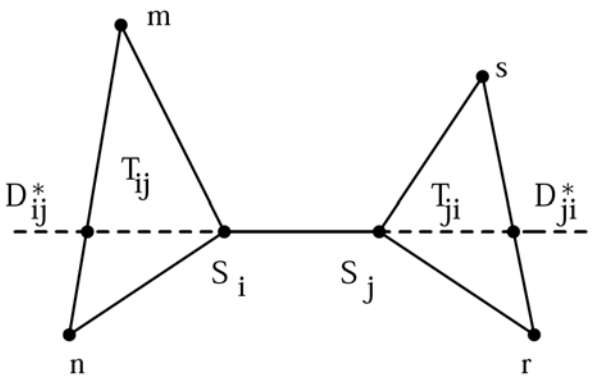


FIGURE 2.12: Location des triangles amont et aval

De la même manière pour F_{ji}, on obtient :

$$\begin{aligned}(\nabla F)_{ji}\cdot ji = (1- \quad)(\nabla F)^c_{ij}\cdot ji + \quad (\nabla F)^d_{ij}\cdot ji \\ + \ {}_c[(\nabla F)^u\cdot ji - 2(\nabla F)^c_{ij}\cdot ji + (\nabla F)^d_{ij}\cdot ji] \\ + \ {}_d[(\nabla F)_{D_{ji}}\cdot ji - 2(\nabla F)_j\cdot ji + (\nabla F)_i\cdot ji]\,.\end{aligned} \tag{2.58}$$

Le terme $(\nabla F)_{D_{ij}}$ est le gradient au point D_{ij}. Ce dernier est interpolé à partir des valeurs des gradients aux noeuds de la face opposée à i dans le triangle T_{ij}.
Les coefficients , $_c$ et $_d$ sont des constantes permettant de contrôler le caractère centré ou décentré des pentes.

Avec tous ces termes, il est ensuite possible de reconstruire le flux numérique final sur l'interface considérée. Ce flux numérique est ensuite ajouté (soustrait) au flux du nœud i (j).

2.4.5.b) CharLES

Le code CharLES de Cascade Technologies permet de résoudre les équations de Navier-Stokes compressibles et est adapté à la SGE. D'après Khalighi *et al.* [103], le calcul du flux d'Euler se fait en deux étapes. Tout d'abord les valeurs à droite et à gauche de l'interface sont reconstruites à l'aide d'une reconstruction polynômiale (troisième ordre maximum), puis le flux est calculé en utilisant un mélange de flux centrés et décentrés. Par exemple, pour une configuration cartésienne 2D (Fig. 2.13), les états à gauche et à droite de l'interface sont :

$$\begin{aligned} {}_l &= {}_L + a_l(\ {}_R - \ {}_L) + b_l\cdot\nabla\ {}_L \\ {}_r &= {}_R + a_r(\ {}_L - \ {}_R) + b_r\cdot\nabla\ {}_R\,, \end{aligned} \tag{2.59}$$

avec $\nabla\ {}_L$ et $\nabla\ {}_R$ gradients du second ordre, ${}_L$ et ${}_R$ variables primitives dans les cellules voisines et a_l, a_r, b_l et b_r coefficients pour la reconstruction calculés à l'avance.

Le flux d'Euler est ensuite calculé à l'aide d'un flux centré non-dissipatif et d'un flux décentré dissipatif.

$$F^e = (1-\alpha)F^{central} + \alpha F^{upwind}\,. \tag{2.60}$$

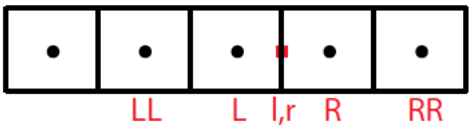


FIGURE 2.13: Stencil directionnel pour un cas cartésien

Le paramètre α permet de choisir le calcul de flux selon les régions. Si le maillage est de bonne qualité dans une région α prend pour valeur zéro et le schéma devient purement centré et non-dissipatif, et pour des régions où le maillage est de moins bonne qualité α est augmenté afin d'éviter des instabilités dues au schéma centré. Le code CharLES permet également de prendre un compte les chocs. En effet, un capteur permet de changer de schéma dès qu'un choc apparaît et de passer à un schéma ENO du deuxième ordre.

2.4.5.c) Récapitulatif des schémas à approche directionnelle

Le Tab. 2.4 récapitule les avantages et inconvénients des techniques introduites précédemment.

Schéma	Avantages	Inconvénients	Formalisme	Publications
NLV6	Stencil réduit et ordre élevé	Centré Nœuds	VF/EF	[99], [102], [101], [100]
CharLES	Stencil réduit et ordre élevé	Peu d'informations	VF	[103]

TABLE 2.4: Récapitulatif des schémas d'ordre élevé à approche directionnelle

Les approches directionnelles présentées ne conviennent pas parfaitement pour une adaptation directe pour *elsA*. Le schéma NLV6 est centré aux nœuds et possède un formalisme Éléments Finis, ces deux contraintes ne sont pas compatibles avec l'architecture de données imposée. Pour le code CharLES, il existe très peu d'informations au sujet du schéma numérique et cela ne suffit pas pour le mettre en place dans un code.

Chapitre 3

Nouvelle formulation de gradient

Sommaire

3.1 Choix d'une approche pour le calcul du gradient 41
3.2 Discrétisation du ux diffusif 42
3.3 Analyse théorique du gradient 44
3.3.1 Propriétés nécessaires 44
3.3.2 Analyse théorique sur l'équation de la chaleur 44
3.4 Résultats numériques 48
3.4.1 Application à l'équation de la chaleur 48
3.4.2 Préservation linéaire 52
3.4.3 Équations de Navier-Stokes : plaque plane laminaire 54
3.4.4 Coût de calcul et efficacité CPU 57
3.5 Conclusion 58

Comme il a été indiqué dans la bibliographie, il existe une grande variété de méthodes de calcul de gradient. En règle générale, les gradients sont utilisés pour la résolution de la partie diffusive des équations de Navier-Stokes. Dans cette partie, nous traitons spécifiquement un nouveau type de gradient à molécule de point réduite à vocation LES.

3.1 Choix d'une approche pour le calcul du gradient

Les travaux exposés dans ce document concernent un code de CFD de type volumes finis non structuré puis hybride. La mise en place d'une nouvelle méthode de calcul de gradient nécessite de faire attention à toutes les contraintes imposées, et en particulier à l'existant (approche structurée). Dans le cas de cette étude, les différentes contraintes à respecter sont les suivantes :

– Le gradient doit être utilisable par le code *elsA* avec le formalisme Volumes Finis centré cellule.
Dans un cadre Volumes Finis centré cellule, on effectue la transformation de l'intégrale volumique de densité de flux diffusif en intégrale surfacique de flux diffusif sur la frontière d'un élément. Le code de simulation a donc besoin des gradients sur le contour de chaque cellule et la toute première contrainte est donc d'avoir un gradient sur l'interface.

– Le gradient doit pouvoir être utilisé autant dans la partie structurée que non structurée du code.

  Cette condition implique que le gradient puisse être calculé sur tous les types d'élément. La formulation du schéma doit être valide sur des héxaèdres et des tétraèdres suffisament réguliers, mais aussi adaptable aux maillages structurés.

– Le gradient ne doit pas être nécessairement d'ordre élevé, une approche au second ordre suffit.

  Dans le contexte de cette étude, l'objectif principal concerne des simulations à grand nombre de Reynolds. Ainsi, les effets convectifs sont prépondérants par rapport aux effets diffusifs. On est ainsi prêt à payer le prix d'un schéma convectif d'ordre élevé alors que l'on se contentera d'un schéma d'ordre plus faible sur la diffusion (typiquement ordre 2). Cette analyse sur les besoins en qualité des schémas a déjà été menée avec succès par le passé. Par exemple avec le code *elsA* en structuré, de nombreuses simulations aéroacoustiques [8, 9] ont été réalisées avec un schéma convectif compact d'ordre 6 [10] et avec un schéma diffusif d'ordre 2.

– Le gradient doit être calculé efficacement en parallèle.

  La SGE nécessite le recours aux techniques de HPC et on souhaite que le nouveau gradient ne pénalise pas trop les échanges parallèles existants. Dans *elsA*, les échanges se font par les faces des cellules, c'est-à-dire que les faces partagées entre deux processeurs communiquent les champs dans les cellules de chaque côté. Pour ne pas augmenter ces échanges, nous souhaitons proposer un schéma diffusif utilisant le même type de communication. Par exemple, la méthode de calcul de gradient avec cellule de Coirier (méthode diamant) nécessite de reconstruire des champs aux nœuds du maillage et nous essayerons d'éviter ce type d'approche.

C'est donc en essayant de répondre à toutes ces contraintes que le gradient suivant a été développé.

3.2 Discrétisation du ux diffusif

Les flux diffusifs qui sont évalués sur chaque face du maillage sont contruits à partir de diffusivités dynamique et thermique couplées à un calcul de gradient à l'interface. Ici, nous reprenons en partie la méthode proposée par Coirier : on souhaite construire un volume dual autour de chaque interface du maillage et les gradients sont calculés sur cette cellule duale autour de chaque face. Contrairement à l'approche de Coirier, le volume autour de la face est délimité par les centres des cellules voisines, les centres des faces adjacentes et les nœuds de l'interface en 2D, comme décrit sur la Fig. 3.1. On s'affranchit ainsi de l'utilisation de champs nodaux. En trois dimensions, le volume dual est délimité par les barycentres des cellules voisines, les barycentres des faces adjacentes et les milieux des arêtes adjacentes. Notons C le volume dual, nous allons construire le gradient par circulation sur le volume dual et nous allons appliquer ce gradient sur l'interface :

$$\nabla W_{C_i} \quad \nabla W_{C_i} = \frac{1}{V} \int_{C_i} \nabla W \, dv \,, \tag{3.1}$$

avec V volume de la cellule duale. Ensuite, le gradient est calculé par circulation autour de la cellule duale :

$$\frac{1}{V} \int_{C_i} \nabla W \, dv = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{m} \int_{C_{ij}} W \cdot n \, ds \,, \tag{3.2}$$

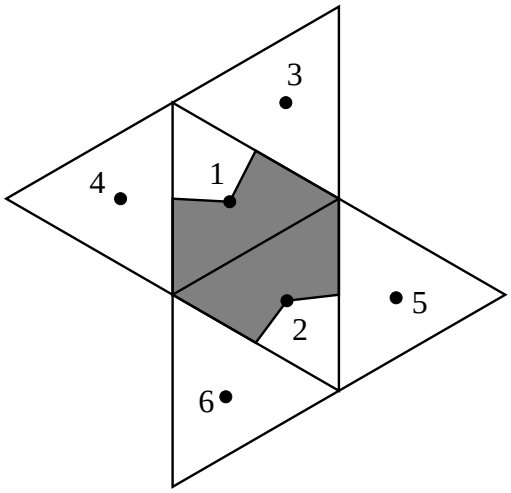


FIGURE 3.1: Definition du volume dual autour d'une interface en 2D.

où n représente la normale sortante à la face j de la cellule duale C_i . Il reste à ce niveau à définir les états d'interface et 2 cas se présentent :

– Si la normale se situe sur une face réelle du maillage, on construit un état d'interface par moyenne des états à droite et gauche et les valeurs du flux sont obtenues à partir de cet état d'interface. Cette moyenne peut également être pondérée par les valeurs des cellules adjacentes à la manière de la méthode GG.

– Si c'est une face à l'intérieur d'une cellule, les flux sont calculés à partir de l'état dans la cellule.

Ainsi, en reprenant l'exemple en deux dimensions de la Fig. 3.1, le gradient à l'interface est exprimé par :

$$\begin{aligned} V \cdot \nabla W_{C_i} = & W_1 S_L \cdot n_L + W_2 S_R \cdot n_R + \\ & \frac{(W_1+W_3)}{2}\frac{S_{13}}{2}\cdot n_{13} + \frac{(W_1+W_4)}{2}\frac{S_{14}}{2}\cdot n_{14} + \\ & \frac{(W_2+W_5)}{2}\frac{S_{25}}{2}\cdot n_{25} + \frac{(W_2+W_6)}{2}\frac{S_{26}}{2}\cdot n_{26}\,, \end{aligned} \tag{3.3}$$

avec n_L somme des normales des deux facettes comprises dans la cellule 1, n_R somme des normales des deux facettes dans la cellule 2 et n_{ij} normale à la face entre les cellules i et j. S_L correspond à la surface des deux facettes dans la cellule 1, S_R à la surface des deux facettes dans la cellule 2 et S_{ij} à la surface entre les cellules i et j.

Dans la suite du document, le nouveau gradient sera nommé gradient UIG (pour Unstructured Interface Gradient en Anglais).

3.3 Analyse théorique du gradient

3.3.1 Propriétés nécessaires

Une méthode numérique efficace doit satisfaire les propriétés suivantes :

- consistance,
- conservation,
- monotonicité,
- précision à l'ordre 2,
- support compact.

La dernière propriété est facilement démontrable, la méthode de calcul du gradient se fait sur un support compact. Pour un maillage de quadrilatères, le nouveau gradient fait intervenir 6 cellules pour construire la valeur à l'interface. Pour rappel, les méthodes de Green-Gauss et des moindres carrés nécessitent 8 cellules quadrangulaires. En trois dimensions sur maillage hexaédrique, la nouvelle méthode ne requiert 10 cellules par face, tandis que les autres demandent 12 cellules. Enfin, si l'on reprend la terminologie de l'approche GG, on peut dire qu'en 1D, cette nouvelle approche ne nécessite qu'une molécule de 3 points.

3.3.2 Analyse théorique sur l'équation de la chaleur

Pour effectuer l'analyse théorique du gradient, on considère l'équation de la chaleur linéaire :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \quad T \,, \tag{3.4}$$

avec T la température, α constante de diffusion et le Laplacien. La discrétisation de l'équation de la chaleur en volumes finis centrés cellules et en deux dimensions donne :

$$V_i \quad \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{t} \quad - \alpha \sum_{j=1}^{N_f} \nabla T_j \cdot S_j n_j = 0 \,, \tag{3.5}$$

où ∇T_j est le nouveau gradient sur chaque face j de la cellule C_i. Ce gradient est exprimé par circulation dans la cellule duale construite autour de l'interface. L'équation de la chaleur peut ainsi être réécrite :

$$V_i \quad \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{t} \quad - \alpha \sum_{j=1}^{N_f} \quad \sum_{k=1}^{N_f} \frac{1}{V} T_k^n \cdot S_k n_k \quad S_j \cdot n_j = 0 \,, \tag{3.6}$$

avec N_f faces de la cellule duale. Et la forme finale s'exprime :

$$V_i \quad \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{t} \quad - \alpha \sum_{j=1}^{N_f} a_j T_j^n = 0 \,. \tag{3.7}$$

3.3.2.a) Consistance et ordre

Un schéma numérique est consistant quand les équations discrétisées tendent vers les équations continues quand le pas de temps et d'espace tendent vers 0. Donc la limite suivante doit être satisfaite :

$$V_i \quad \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{t} \quad - \alpha \sum_{j=1}^{N_f} \nabla T_j \cdot S_j n_j \quad - \quad V_i \quad \frac{\partial T}{\partial t} \quad {}_i^n - \alpha V_i \quad T_i^n \quad \to 0\,. \tag{3.8}$$

Si la fonction $T(x,t)$ est suffisament régulière, un développement de Taylor donne :

$$V_i \quad \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{t} \quad = V_i \quad \frac{\partial T}{\partial t} \quad {}_i^n + O(\quad t)\,. \tag{3.9}$$

Il faut juste vérifier que :

$$\alpha \sum_{j=1}^{N_f} \nabla T_j \cdot S_j n_j - \alpha V_i \quad T_i^n \to 0\,.: \tag{3.10}$$

En une dimension, le bilan de flux total BF_i dans une cellule C_i est (terme de gauche de Eq. 3.10) :

$$BF_i = \alpha \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{x}\,, \tag{3.11}$$

et avec le développement de Taylor, on retrouve bien que le terme de droite de Eq. 3.10 donne :

$$BF_i = \alpha \quad x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + O(\quad x^3)\,, \tag{3.12}$$

ce qui est consistant avec l'expression de l'opérateur du Laplacien en une dimension et prouve donc que le schéma est du second ordre.

3.3.2.b) Ordre en deux dimensions sur maillage de carrés

Pour prouver l'ordre du gradient en deux dimensions, il faut également montrer que le bilan de flux total dans un carré est consistant avec l'expression du Laplacien. Pour simplifier la lecture des expressions, on remplace la notation indicée T_i utilisée précédemment par une définition dépendant de la paramétrisation de l'espace $T(i,j)$. L'expression du gradient UIG en deux dimensions dépend de l'orientation de l'interface, soit on est dans la direction x, soit dans la direction y. Ceci donne deux expressions du gradient, la première si l'interface est en x et la deuxième si l'interface est en y :

$$\begin{array}{ll} \nabla T_{i+1\ 2,j} = \dfrac{1}{x \quad y} & \dfrac{(T(i+1,j) - T(i,j)) \quad y}{\dfrac{T(i,j+1) + T(i+1,j+1)}{2} \cdot \dfrac{x}{2} - \dfrac{T(i,j-1) + T(i+1,j-1)}{2} \cdot \dfrac{x}{2}} \\ \nabla T_{i,j+1\ 2} = \dfrac{1}{x \quad y} & \dfrac{\dfrac{T(i+1,j) + T(i+1,j+1)}{2} \cdot \dfrac{y}{2} - \dfrac{T(i-1,j) + T(i-1,j+1)}{2} \cdot \dfrac{y}{2}}{(T(i,j+1) - T(i,j)) \quad x} \end{array}\,, \tag{3.13}$$

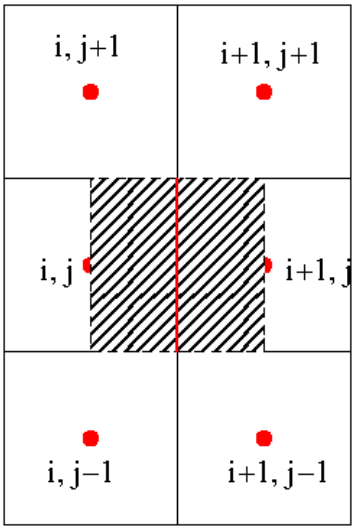


FIGURE 3.2: Cellule duale et maillage

avec chaque $T(i,j)$ qui représente la valeur dans chaque cellule, $\quad x$ distance d'un centre de cellule au centre voisin dans la direction x et $\quad y$ distance d'un centre de cellule au centre voisin dans la direction y. La Fig. 3.2 représente la cellule duale pour le calcul d'un gradient d'interface en x.

On peut maintenant sommer chaque contribution des interfaces pour obtenir le bilan de flux total $BF(i,j)$ dans la cellule C_i :

$$BF(i,j) = \alpha \quad y \left(\nabla T_{i+1\ 2,j} \cdot n_x - \nabla T_{i-1\ 2,j} \cdot n_x \right) + \alpha \quad x \left(\nabla T_{i,j+1\ 2} \cdot n_y - \nabla T_{i,j-1\ 2} \cdot n_y \right) . \tag{3.14}$$

Ensuite, en rassemblant tous les termes et en faisant des développements de Taylor de chaque $T(i,j)$, le bilan de flux total devient :

$$BF(i,j) = \alpha \quad x \quad y \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \alpha \quad x \quad y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + O(\quad x^3) + O(\quad y^3) . \tag{3.15}$$

Le fait de ne pas avoir de termes croisés et d'avoir des dérivées secondes montre bien que cette expression correspond à celle du Laplacien en deux dimensions.

3.3.2.c) Ordre en deux dimensions sur maillage de triangles équilatéraux

L'analyse d'ordre est également possible sur des maillages de triangles équilatéraux. L'avantage des triangles équilatéraux est que deux directions privilégiées peuvent être définies. Une rangée de triangles équilatéraux peut être considerée d'indice j et chaque triangle de cette rangée possède un indice i. La Fig. 3.3 montre l'organisation de ces directions. La régularité d'un triangle équilatéral permet de déterminer les relations des gradients sur chaque arête de ce triangle. Notons a la longueur du côté du triangle équilatéral. Supposons un triangle équilatéral, orienté la pointe vers le bas, dans ce cas les normales aux arêtes peuvent être définies de la manière

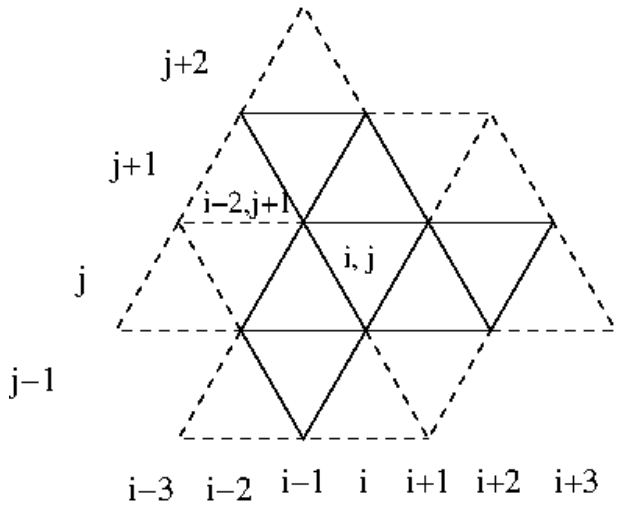


FIGURE 3.3: Organisation des triangles équilatéraux

suivante :

$$n_1 = \begin{pmatrix} \frac{\overline{3}}{2} \\ \frac{-1}{2} \end{pmatrix} \quad ; \quad n_2 = \begin{pmatrix} \frac{-\overline{3}}{2} \\ \frac{-1}{2} \end{pmatrix} \quad ; \quad n_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad . \tag{3.16}$$

Ensuite, il faut appliquer le gradient UIG sur chacune des arêtes du triangles. Par exemple, pour le gradient de l'arête de normale n_3, on a :

$$\begin{aligned} \nabla T_{i,j+1\ 2} = \frac{\overline{3}}{a^2} \quad & y\,(T(i,j+1) - T(i,j)) \cdot n_3 - \frac{x}{2}(T(i+1,j+1) + T(i,j+1)) \cdot n_2 \\ & + \frac{x}{2}(T(i+1,j) + T(i,j)) \cdot n_1 - \frac{x}{2}(T(i-1,j+1) + T(i,j+1)) \cdot n_1 \\ & + \frac{x}{2}(T(i-1,j) + T(i,j)) \cdot n_2 \quad , \end{aligned} \tag{3.17}$$

avec chaque $T(i,j)$ qui représente la valeur dans chaque cellule, $\quad x = \frac{a}{2}$ et $\quad y = \frac{a\ \overline{3}}{6}$.

De la même manière, le gradient UIG peut être exprimé sur les deux autres arêtes. Finalement, le bilan de flux total $BF(u,j)$ est reconstruit en prenant en compte les gradients sur chaque arête, soit :

$$BF(i,j) = a\,\alpha\left(\nabla T_{i,j+1\ 2} \cdot n_3 + \nabla T_{i+1\ 2,j} \cdot n_1 + \nabla T_{i-1\ 2,j} \cdot n_2\right) . \tag{3.18}$$

Après développement de chaque gradient, puis par développement de Taylor de tous les flux provenant des cellules voisines, le bilan de flux total devient :

$$BF(i,j) = \frac{5\ \overline{3}}{16} a^2\,\alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{5\ \overline{3}}{16} a^2\,\alpha \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + O(\ \ x^3) + O(\ \ y^3)\,. \tag{3.19}$$

Dans cette expression, aucun terme d'ordre 1 n'intervient et aucun terme croisé d'ordre 2 non plus. Par contre, à l'opposé des analyses précédentes, l'aire du triangle équilatéral n'est pas retrouvé dans le bilan de flux total. Le coefficient devant les dérivées devrait être de $\frac{\overline{3}}{4}a^2$. Ceci montre que le schéma n'est pas consistant sur les triangles équilatéraux. Ceci montre que le gradient UIG n'est pas forcément d'ordre 2 sur des maillages composés de triangles équilatéraux, ceci se vérifiera sur des cas tests numériques.

Remarque : Il faut noter qu'une correction peut être apportée en multipliant les gradients par $4/5$. Cette correction est uniquement valable pour des triangles équilatéraux mais on peut imaginer trouver des coefficients variables en fonction de la métrique de n'importe quel élément.

3.3.2.d) Stabilité et monotonie

Le gradient sera stable si l'erreur de troncature n'est pas amplifiée au cours du temps. Cela peut être vérifié avec une analyse de Von Neumann. Cette analyse a été faite en 1D et en 2D. Avec T une solution harmonique de la forme :

$$T_i^n = A^n exp(j(hx_i + h\, y_i)) \quad \text{avec} \quad j^2 = -1\,, \tag{3.20}$$

l'équation de la chaleur devient :

$$(A - (1 + \frac{\alpha \quad t}{V_i}a_i))e^{j(hx_i + h'y_i)} = \alpha\frac{t}{V_i}\sum_{k=i} a_k e^{j(hx_k + h'y_k)} \quad \text{avec} \quad A = \frac{A^{n+1}}{A^n} \tag{3.21}$$

Sachant que le schéma pour le gradient est stable si et seulement si $|A| \quad 1$ et que le principe du maximum discret doit être respecté, le système suivant est construit :

$$\begin{aligned} &-a_i + \sum_{k=i} |a_k| \quad \frac{2V_i}{\alpha \quad t}, \\ &\sum_{k=i} |a_k| \quad -a_i, \\ &-a_i \quad \frac{V_i}{\alpha \quad t}, \\ &\sum_k a_k = 0. \end{aligned} \tag{3.22}$$

Le nouveau schéma respecte les inégalités de Eq. 3.22 en 1D et en 2D.

3.4 Résultats numériques

3.4.1 Application à l'équation de la chaleur

La solution numérique stationnaire a été comparée à la solution analytique pour un problème de diffusion de la chaleur avec un coefficient de diffusion constant $\alpha = 0.75$. Les conditions de

Dirichlet sont utilisées aux frontières du domaine :

$$T(x,y) = \begin{array}{ll} 0 & x \in [0,L] \quad \text{and} \quad y = 0\,, \\ \sin(\ \frac{x}{L}) & x \in [0,L] \quad \text{and} \quad y = L\,, \\ 0 & y \in [0,L] \quad \text{and} \quad x = 0\,, \\ \sin(\ \frac{y}{L}) & y \in [0,L] \quad \text{and} \quad x = L\,. \end{array} \tag{3.23}$$

La solution exacte du problème est connue et s'écrit :

$$T^{ex}(x,y) = \frac{1}{\sinh(\ )}\ \sinh(\ \frac{x}{L})\sin(\ \frac{y}{L}) + \sinh(\ \frac{y}{L})\sin(\ \frac{x}{L})\ \ , \tag{3.24}$$

et cette solution est représentée sur la Fig. 3.4.

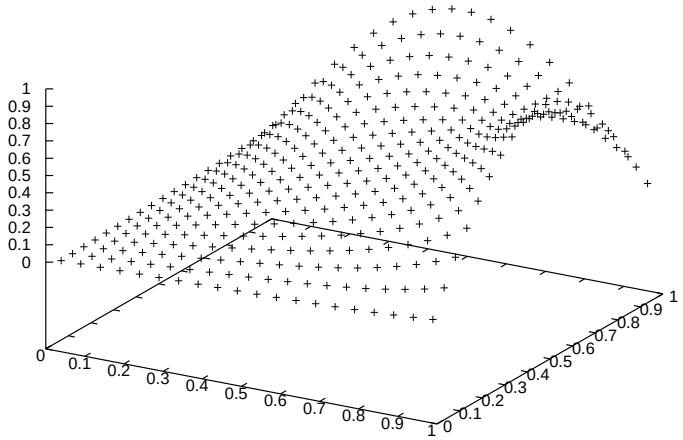


FIGURE 3.4: Solution exacte du problème de diffusion pure

L'erreur entre les solutions exacte et numérique est évaluée par la norme $\mathcal{L}_2$ de l'écart entre les 2 solutions :

$$= \frac{1}{V}\ \sum_{i=1}^{N_c} V_i (T_i^{ex} - T_i)^2 \qquad , \tag{3.25}$$

avec V le volume total, V_i le volume de la cellule C_i, T_i^{ex} est la valeur moyenne de la solution exacte dans la cellule C_i et T_i la solution approchée dans la cellule C_i. Il est possible de déterminer une approximation d'ordre 2 de la solution exacte moyenne en imposant que la valeur moyenne de la solution exacte dans une cellule soit la solution au centre de cette dernière. La répartition d'erreur est telle que $= O(h^p)$, où h est la taille caractéristique d'un élément et p est l'ordre de précision de la méthode numérique. L'ordre de précision a été calculé théoriquement sur un maillage régulier en une et deux dimensions et sur des triangles équilatéraux également, mais cet

ordre doit être vérifié numériquement. En pratique, l'ordre p est déduit de l'analyse des résultats numériques d'une convergence en maillage avec :

$$log(\ ) = p\, log(h) + C\,, \tag{3.26}$$

avec C constante. Pour ce cas test, quatre types de maillages sont choisis : des carrés réguliers, des quadrilatères déformés, des triangles équilatéraux et des triangles irréguliers. Ces maillages sont présentés sur la Fig. 3.5.

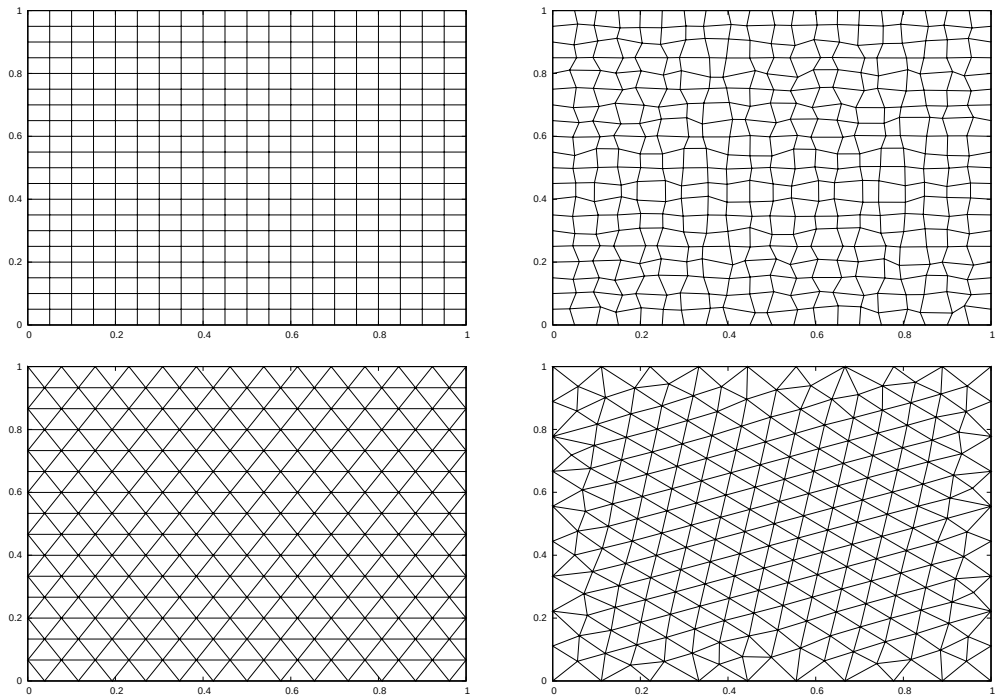


FIGURE 3.5: Maillages utilisés pour le calcul de l'ordre de précision

Pour chaque maillage, trois raffinements différents ont été utilisés pour modifier la taille caractéristique du maillage. Ensuite, le problème de diffusion est résolu avec la nouvelle de méthode de calcul de gradient UIG (Unstructured Interface Gradient) sur tous les maillages. Les résultats de cette méthode sont ensuite comparés au gradient calculé par moindre carrés (LS pour Least Square en Anglais) et au gradient calculé par circulation (GG).

La Fig. 3.6 montre l'évolution du logarithme de l'erreur en fonction du logarithme de taille caractéristique de cellules pour les différents maillages. Les ordres exacts sont donnés dans le Tab. 3.1.

Sur le maillage de carrés réguliers, tous les gradients sont similaires et sont d'ordre 2. Par contre pour les gradients GG et LS, deux types de courbes sont introduites pour les carrés réguliers sur la Fig. 3.6. En effet, les résultats obtenus avec BR (pour Boundary Recopy en Anglais) sont seulement d'ordre 1. Pour ces calculs, le gradient au bord est obtenu par une extrapolation d'ordre 0 du gradient au centre de la cellule. Le second ordre des gradients GG et LS est obtenu si le gradient au bord est calculé avec le schéma UIG. Le schéma UIG a donc été appliqué à toutes les faces frontières et les gradients GG et LS ont été conservés pour toutes les faces internes.

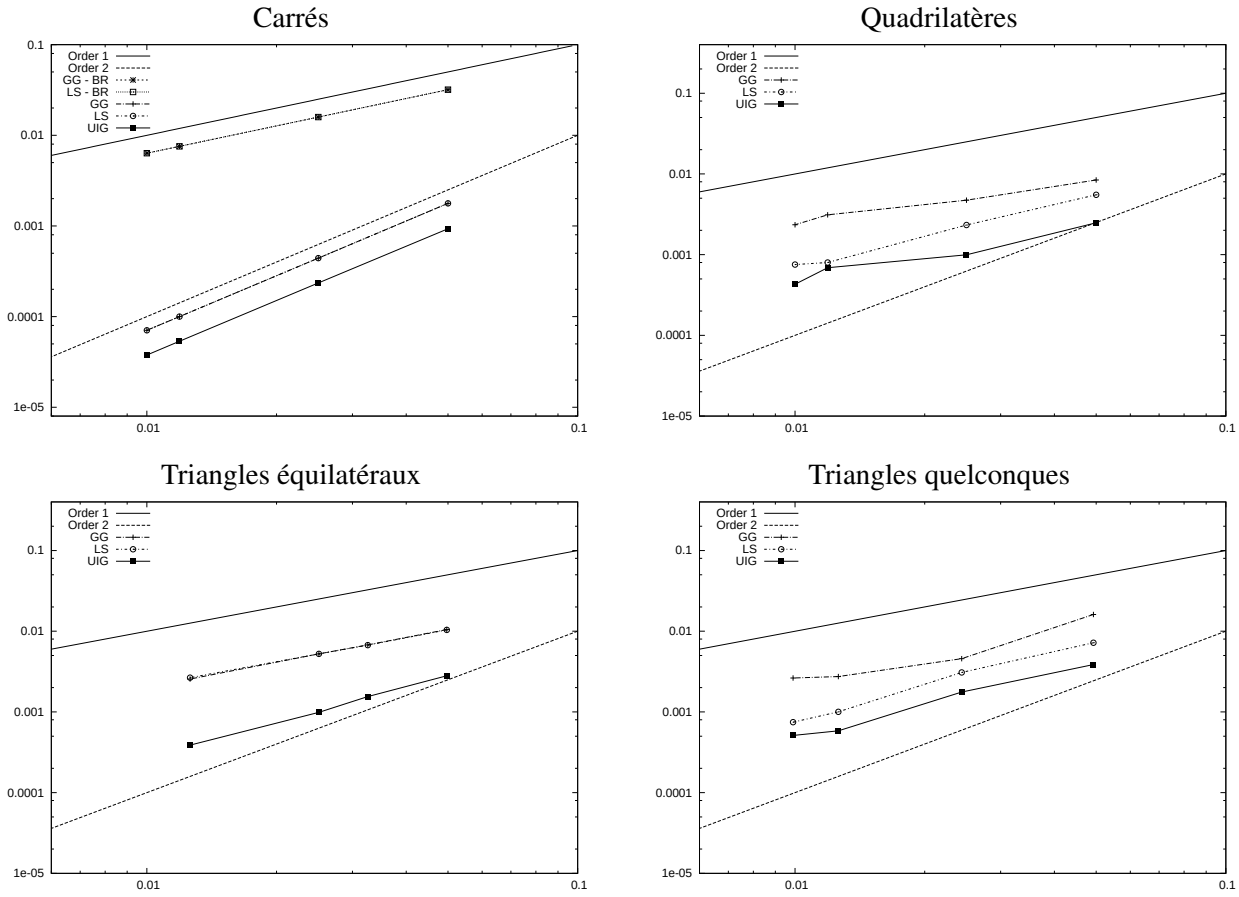


FIGURE 3.6: Erreur $\mathcal{L}_2$ sur chaque maillage

La Fig. 3.6 montre que sur les quadrilatères irréguliers, le gradient GG perd toute sa précision tandis que le gradient LS conserve toute de même un ordre supérieur à 1. Cela est dû au fait que le gradient LS prend en compte la métrique locale dans la définition du gradient. Le schéma UIG est seulement d'ordre 1, ce qui n'est pas étonnant car la seule métrique incorporée est celle du volume local pour définir les solutions aux interfaces. Sur les maillages équilatéraux, la méthode UIG donne les meilleurs résultats que les gradients GG et LS qui sont seulement d'ordre 1. Sur les triangles quelconques, les trois méthodes ont des ordres comparables.

Il est nécessaire de noter que pour tous les maillages, indépendamment de l'ordre, l'erreur $\mathcal{L}_2$ obtenue avec le gradient UIG est toujours inférieure à celle obtenue avec les gradients GG et LS.

Les résultats donnés dans le Tab. 3.1 confirment l'ordre théorique du gradient UIG sur des carrés réguliers. Pour chaque type de maillage, cette méthode conserve tout de même un ordre de précision supérieur à 1.

	Carré	Quadrilatère	Équilatéral	Triangle
Gradient GG	2.00	0.76	1.02	1.46
Gradient LS	2.00	1.27	1.00	1.33
Gradient UIG	1.99	1.08	1.47	1.23

TABLE 3.1: Ordre de précision sur chaque maillage

3.4.2 Préservation linéaire

Dans cette partie, les trois méthodes précédentes vont être testées pour vérifier qu'elles sont capables de préserver une solution linéaire exacte comme suggéré par Breil et Maire [105]. Comme précédemment, l'équation de la chaleur est résolue sur un domaine carré $[0,1] \quad [0,1]$ avec les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{aligned} T(x,y) &= \begin{cases} 0 & y \in [0,1] \quad \text{et} \quad x = 0\,, \\ 1 & y \in [0,1] \quad \text{et} \quad x = 1\,, \end{cases} \\ \frac{\partial T}{\partial y} &= \begin{cases} 0 & x \in [0,1] \quad \text{et} \quad y = 0\,, \\ 0 & x \in [0,1] \quad \text{et} \quad y = 1\,, \end{cases} \end{aligned} \tag{3.27}$$

Pour ce cas test, les conditions de Dirichlet sont utilisés sur deux frontières et des conditions de Neumann sont utilisés sur les deux autres. Avec un coefficient de diffusion $\alpha = 1$, la solution analytique de l'équation de la chaleur avec ces conditions aux limites est $T_{ex}(x,y) = x$.

De la même manière que le cas précédent, ce problème est résolu sur quatre différents types de maillage : des carrés réguliers, des quadrilatères déformés, des triangles équilatéraux et des triangles irréguliers. Pour chaque maillage, quatre raffinements différents sont encore utilisés pour modifier la taille caractéristique du maillage. Ensuite, l'erreur $\mathcal{L}_2$ de $T - T_{ex}$ est étudiée pour les trois différentes méthodes, UIG, GG et LS.

Dans un premier temps, les solutions obtenues peuvent être comparées à la solution exacte. Pour cela, une coupe est réalisée autour de $x = 0.625m$, pour les maillages non-réguliers, les cellules voisines de ce plan de coupe sont représentées. On essaye ainsi de s'affranchir de toute technique d'extrapolation sur la coupe. La Fig. 3.7 présente les résultats obtenus sur les différents types de maillage.

Pour le maillage composé de carrés, les solutions sur la droite $x = 0.6175$ sont représentées. Pour le maillage de quadrilatères, les solutions dans les cellules voisines à la droite $x = 0.625$ sont tracées. Pour le maillage de triangles équilatéraux, toutes les solutions dans les cellules autour de la droite $x = 0.6155$ ont été représentées. Et pour le maillage de triangles quelconques, les solutions dans les cellules proche de la droite $x = 0.615$ ont été retenues.

Ces résultats permettent d'avoir un aperçu de l'ordre des méthodes sur les différents maillages. Par exemple pour les carrés, tous les gradients reproduisent parfaitement la solution exacte. Sur les quadrilatères, la méthode LS se rapproche le plus de la solution exacte, le gradient UIG possède une erreur un peu plus importante et le gradient GG ne reproduit pas correctement la solution. Sur les triangles équilatéraux, les méthodes UIG et GG sont très proches de la solution exacte (très faible écart par rapport à la solution exacte) et le gradient LS surestime la solution analytique. Finalement, pour les triangles quelconques, les résultats obtenus sont comparés point par point avec la solution exacte. Les gradients UIG et LS donnent les meilleurs résultats, ils se rapprochent

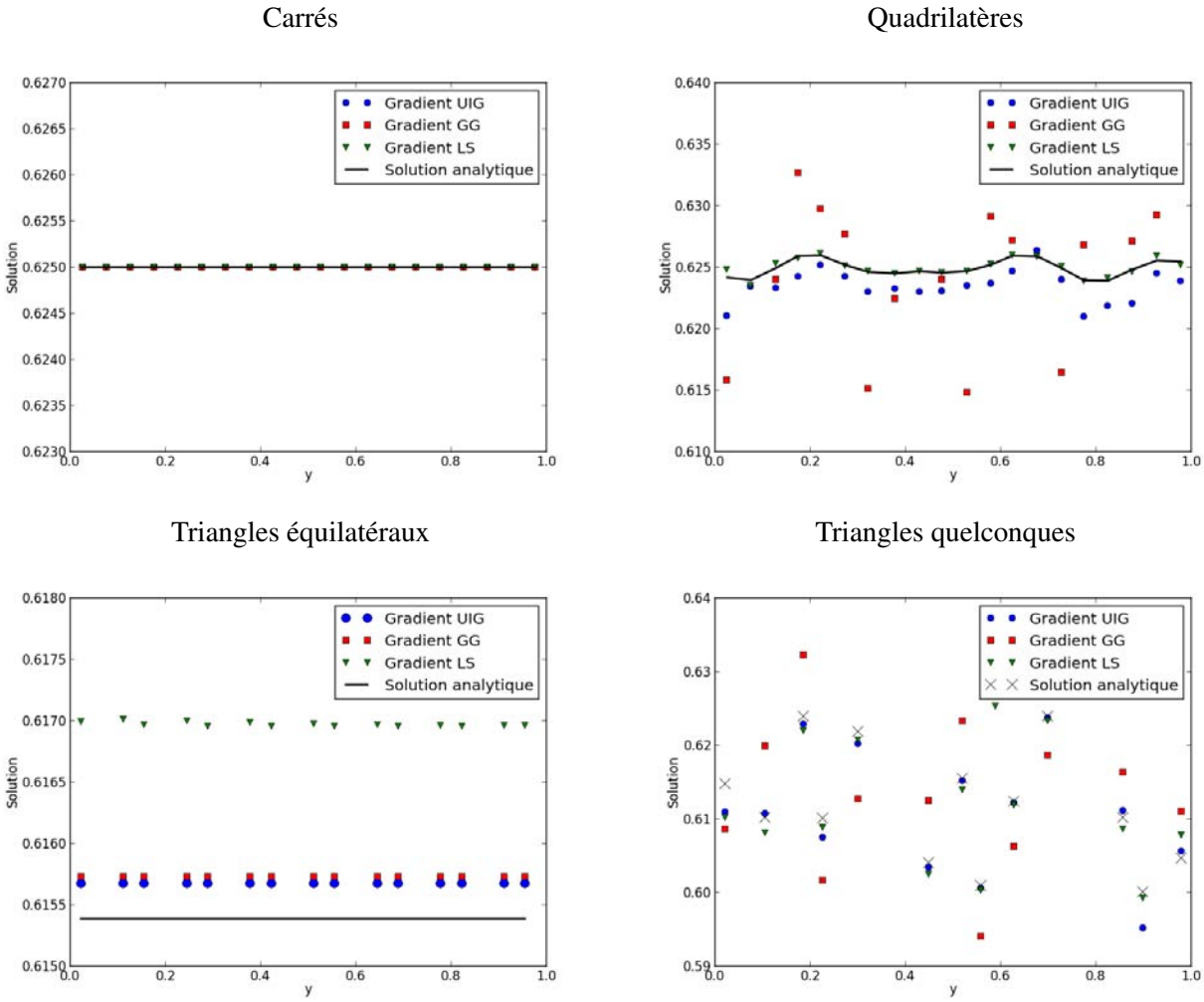


FIGURE 3.7: Solutions obtenues comparées à la solution exacte : cas linéaire

à chaque fois de la solution exacte et finalement le gradient GG est le plus éloigné de la solution exacte. Ces résultats peuvent également être comparés aux ordres de convergence obtenus.

La Fig. 3.8 montre que sur les carrés réguliers, les méthodes LS et GG sont similaires et d'ordre 1 uniquement si le gradient aux frontières est obtenu par recopie de celui dans la cellule proche de la frontière. La légende contient les indices BR (pour Boundary Recopy en Anglais) si le gradient est recopié aux frontières du domaine pour une condition aux limites de Dirichlet. Quand la méthode UIG est utilisée aux frontières, toutes les méthodes retrouvent la solution linéaire "exacte" : les niveaux d'errreur sont inférieurs à 10^{-9} et aucune erreur ne peut être calculée. Ceci prouve que les méthodes sont toutes d'ordre 2 sur les carrés. Sur les quadrilatères déformés, les méthodes GG et LS sont autour de l'ordre 1 et la méthode UIG permet d'obtenir un ordre supérieur. Sur les maillages équilatéraux et les triangles, la nouvelle méthode UIG donne une erreur $\mathcal{L}_2$ plus faible que les gradients GG et LS, tout en ayant des ordres similaires. Les ordres de précision des différentes méthodes sont présentés dans le Tab. 3.2.

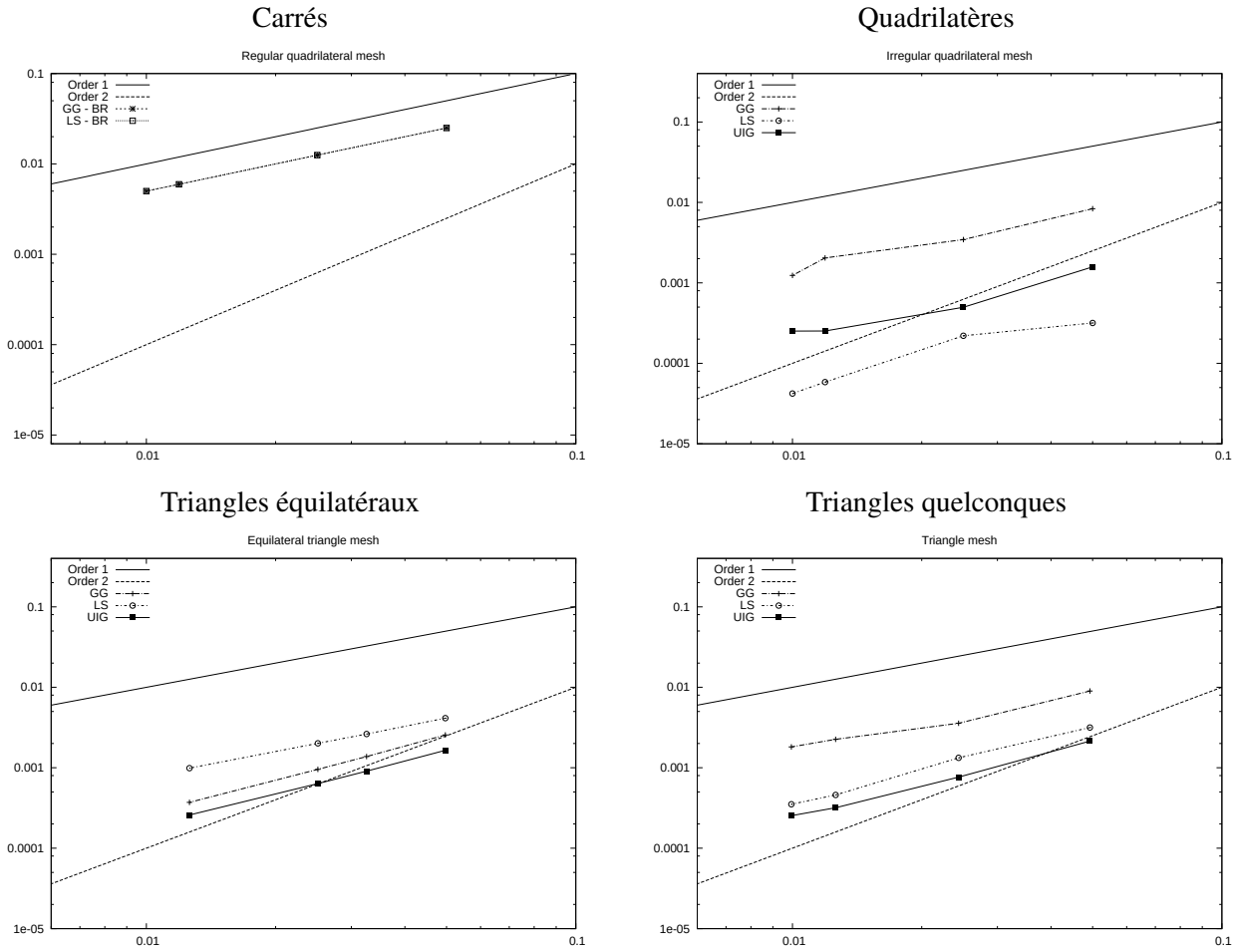


FIGURE 3.8: Erreur $\mathcal{L}_2$ sur chaque type de maillage : cas linéaire

Gradient	Quadrilatère	Équilateral	Triangle
GG	1.14	1.43	1.10
LS	0.97	1.05	1.41
UIG	1.41	1.38	1.32

TABLE 3.2: Ordre de précision sur chaque type de maillage

3.4.3 Équations de Navier-Stokes : plaque plane laminaire

Dans cette partie, les résultats d'un écoulement sur une plaque plane adiabatique sont présentés. Les paramètres choisis pour la simulation sont les suivants :

- un schéma temporel explicite Runge-Kutta d'ordre 4,
- un schéma de Roe, étendu à l'ordre 2 par une formulation MUSCL [104] couplée au limi-

teur de pente minmod,

– des conditions aux limites d'entrée et de sorties similaires à celles utilisées dans *elsA* [11] (conditions *far eld*).

La simulation est réalisée sur le maillage structuré régulier présenté sur la Fig. 3.9. Ce maillage régulier comporte 3640 nœuds et 3520 hexaèdres, une discrétisation uniforme de $x = 0.02m$ le long de la plaque et une discrétisation géométrique de 65 cellules dans la direction normale à la plaque. Dans la direction normale, la première maille est de taille 2 $10^{-4}m$ et un ratio de 1.1 est appliqué ensuite.

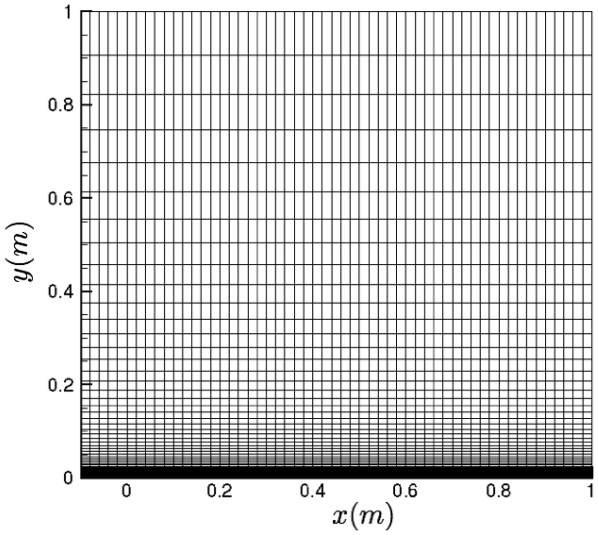


FIGURE 3.9: Plaque plane adiabatique et laminaire : maillage non-structuré régulier

La plaque plane mesure 1 mètre de long, le nombre de Mach est fixé à $M = 0.8$, le nombre de Reynolds est $Re = 3.10^4$ et l'angle d'incidence est fixé à 0. Une couche limite laminaire se développe sur la plaque et s'épaissit le long de celle-ci. Le bord d'attaque de la plaque est fixé au point $(0, 0)$ et le domaine est étendu avant la plaque jusqu'à $x = -0.1m$ dans le but d'éviter toute interaction entre la condition d'entrée et la condition du mur adiabatique visqueux sur la plaque. Pour le calcul, quatre conditions aux limites sont utilisées. Une condition de non-glissement est associé au mur adiabatique ($y = 0$ and $x > 0$) et une condition de glissement est choisie dans la région avant la plaque plane ($y = 0$ and $x < 0$). La condition d'entrée ($x = -0.1$) est décrite par une formulation caractéristique de la condition aux limites. Toutes les autres faces extérieures sont associées à une condition de sortie subsonique définie par la pression.

Les simulations numériques sont réalisées avec les trois méthodes de calcul de gradient vues précédemment, GG, LS et UIG. Le cas test de l'équation de la chaleur a montré l'importance de la définition des gradients aux bords, les gradients aux faces frontières sont donc calculés avec le schéma UIG, tandis que les schémas GG et LS sont utilisés sur toutes les faces internes. Le nombre de pas de temps du calcul est ensuite assez important pour garantir que la solution est convergée.

L'étude se porte ensuite sur le coefficient de friction C_f le long de la paroi adiabatique. Les résultats sont ensuite comparés à la loi de Blasius sur une plaque plane laminaire. Cette loi est

rapportée par Cousteix [106] :

$$C_f = \frac{0.664}{\sqrt{Re_x}}, \tag{3.28}$$

où Re_x représente le nombre de Reynolds le long de la paroi. Les résultats sont donnés sur la Fig. 3.10. Tout d'abord toutes les méthodes sont très similaires. La seule différence provient du

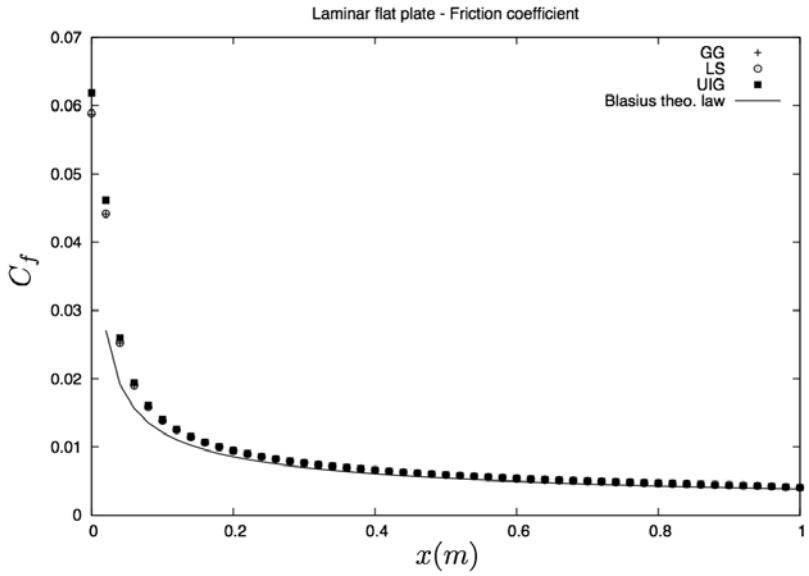


FIGURE 3.10: Coefficient de frottement le long de la paroi adiabatique

maximum du coefficient de friction, un peu plus élevé pour la méthode UIG. Ces trois méthodes sont très proches de la loi théorique de Blasius, à part proche du bord d'attaque où la loi théorique tend vers l'infini.

La solution Blasius donne également le comportement de la vitesse à un x fixé. Les solutions sont extraites à $x = 0.93m$ (ligne de centre des cellules) pour les schémas UIG, GG et LS puis les solutions sont exprimées en fonction de la loi théorique de Blasius. La vitesse est adimensionnée par $U = u/u$ où u est la composante de la vitesse locale et u la vitesse en entrée. La distance à la paroi est exprimée par η tel que :

$$\eta = y \cdot \sqrt{Re_x},$$

où Re_x est le nombre de Reynolds le long de la paroi. Les résultats numériques et théoriques sont présentés sur la Fig. 3.11. Les résultats obtenus par les différents schémas sont en accord avec la loi théorique.

Ces résultats sont en accord avec l'étude théorique et les résultats obtenus sur l'équation de la chaleur. Sur le cas régulier, la méthode UIG prouve qu'elle est bien précise et comparable aux autres méthodes. Le fait qu'elle fonctionne sur des maillages réguliers permet de penser que son comportement sera adéquat pour la SGE sur des maillages isotropes.

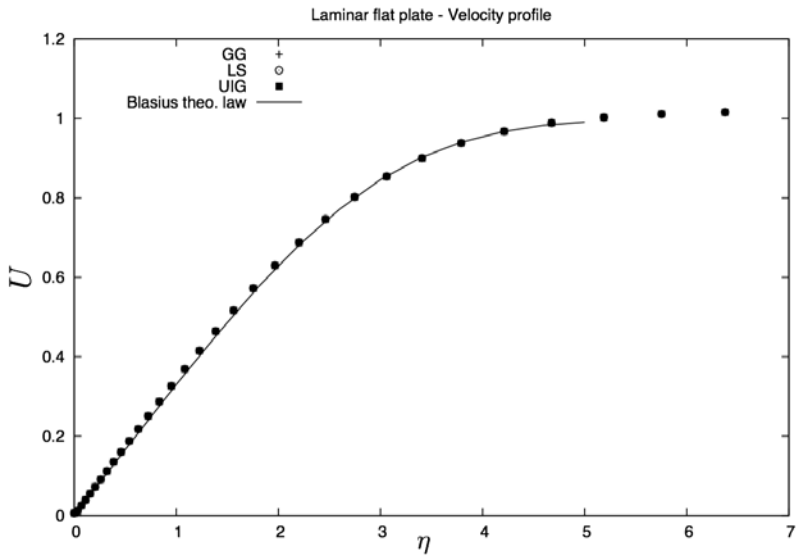


FIGURE 3.11: Plaque plane adiabatique : profil de vitesse exprimé en fonction de la loi théorique de Blasius

3.4.4 Coût de calcul et ef cacité CPU

Un point important est le coût en mémoire et l'efficacité CPU des différentes méthodes de calcul de gradient.

La méthode GG nécessite deux boucles sur toutes les faces, une pour calculer le gradient centré cellule et une pour définir le gradient d'interface comme moyenne des gradients centrés dans les deux cellules adjacentes. Le coût de cette méthode évolue en $2N_f$, avec N_f le nombre de faces du maillage. Le stockage en mémoire est limité à tous les gradients centrés cellules : dN_c champs à stocker où d est la dimension du problème et N_c le nombre de cellules du maillage.

Avec la méthode LS, le gradient centré cellule est calculé directement à partir des voisins de la cellule courante et deux algorithmes peuvent être choisis. Pour le premier algorithme, le calcul du gradient suit un calcul basé sur les cellules : une boucle sur les cellules est faite et le gradient est calculé sur chaque cellule. Le coût de cette méthode évolue alors en fN_c où f est le nombre maximal de faces de l'élément (4 pour un quadrilatère, 3 pour un triangle, ...). Le stockage suit une loi en dN_c pour le gradient et en dfN_c pour la matrice pseudo-inverse. Avec le second algorithme, le gradient est calculé suivant une approche basée sur les faces, où les gradients des cellules à gauche et à droite de l'interface sont actualisés pendant la boucle sur les faces. Le coût est donc de N_f et le stockage suit une loi en dN_c pour le gradient et en dfN_c pour la matrice pseudo-inverse. Finalement, le gradient d'interface est obtenu par une nouvelle boucle sur les faces, de coût N_f.

Avec la méthode UIG, l'algorithme est directement une boucle sur les faces et suit donc une loi en N_f. Le stockage est limité à quelques variables de métrique comme le volume dual et les deux vecteurs normaux des facettes qui ferment le volume dual dans les cellules de gauche et de droite. En 3D, pour une interface triangulaire, il est nécessaire de stocker 4 vecteurs normaux pour la formulation Green-Gauss de chaque côté de l'interface et le stockage suit une loi en $8 \quad d \quad N_f = 24N_f$. Pour une interface quadrangulaire, la même analyse mène à un stockage

suivant la loi $10 \quad d \quad N_f = 30N_f$. Par conséquent, le stockage nécessaire ne dépasse jamais $30N_f$ pour un maillage non-structuré multi-éléments. Mais il est facile de réduire le stockage local sachant que les facettes du volume dual sont les mêmes que les vraies faces du maillage. Donc le stockage des composantes des vecteurs normaux de la cellule duale peuvent être remplacées par le ratio des surfaces entre les facettes de la cellule duale et les vraies faces du maillage. Dans ce cas, la mémoire nécessaire est bornée par $(2d + 8) \quad N_f$, soit $14N_f$ en 3D.

Le coût de chaque méthode est résumé dans le Tab. 3.3. Il est évident que la nouvelle technique UIG est l'approche la plus efficace en terme de coût CPU mais le besoin en mémoire est plus important que les autres méthodes, même si les gradients ne doivent pas être stockés.

Méthode	Coût CPU	Stockage mémoire
GG	$2N_f$	dN_c par gradient
LS	$fN_c + N_f$ or $2N_f$	dN_c par gradient
UIG	N_f	$(2d + 8)N_f$

TABLE 3.3: Résumé des coûts CPU et mémoire pour les méthodes étudiées.

3.5 Conclusion

En conclusion pour cette partie, un nouveau gradient pour la partie diffusive des équations de Navier-Stokes a été développé. Ce gradient UIG possède des propriétés comparables aux autres méthodes. De plus, le gradient UIG peut être utilisé pour la partie structurée et la partie non-structurée d'un code Volumes Finis centré cellule. L'avantage de cette méthode est qu'elle permet de réduire le coût CPU en ne faisant qu'une boucle sur les faces tout en donnant des résultats similaires aux autres méthodes.

La chapitre suivant va maintenant permettre de s'intéresser à la partie convective des équations de Navier-Stokes et au développement d'un nouveau schéma numérique d'ordre élevé.

Chapitre 4

Nouveau schéma directionnel pour *elsA* : théorie et advection 1D

Sommaire

4.1 Rappels sur le formalisme Volumes Finis 59
4.2 Formulation des gradients 61
4.3 Utilisation des gradients pour la construction de schémas d'ordre élevé 61
4.4 Analyse théorique du nouveau schéma 62
4.4.1 Analyse d'ordre en 1D 62
4.4.2 Analyse d'ordre sur un cas 2D de triangles équilatéraux 65
4.4.3 Analyse fréquentielle du schéma en 1D 68
4.5 Application : Advection linéaire en 1D 72
4.6 Conclusion 74

Le chapitre bibliographique a permis de montrer qu'aucun des schémas présentés ne respectait complétement les contraintes, c'est-à-dire un schéma numérique volumes finis centrés cellules, avec un stencil assez compact pour permettre une bonne efficacité parallèle et avec une architecture proche du code *elsA*. Sous l'angle efficacité parallèle des calculs, deux approches sont prometteuses : les approches spectrales discontinues et l'approche directionnelle. Toutefois, ces deux approches sont construites sur un formalisme différent qui sera incompatible avec les schémas d'ordre élevé déjà disponibles dans *elsA* pour les maillages structurés. Dans ce chapitre, on va proposer un nouveau type de schéma basé sur un formalisme Volumes Finis et une reconstruction directionnelle des états à l'interface.

4.1 Rappels sur le formalisme Volumes Finis

Considérons les équations d'Euler bidimensionnelles ou tridimensionnelles écrites sous forme compacte :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot F(W) = 0 \quad , \tag{4.1}$$

avec W variables conservatives et F fonction flux. La formulation Volumes Finis permet d'intégrer Eq. 4.1 sur un volume de contrôle de la manière suivante :

$$\frac{d}{dt}\int W(t,x)dx = -\int F(W(t,x))\cdot n\, dS \quad , \tag{4.2}$$

où n est le vecteur unitaire normal sortant au volume de contrôle. En passant du problème continu au problème discret et en prenant pour volumes de contrôle les cellules C du maillage, Eq. 4.2 se réécrit :

$$|C|\frac{dW_C}{dt} = -\sum_{S\in C} {}_S\,|S| \quad , \tag{4.3}$$

avec W_C moyenne des variables conservatives sur la cellule C et ${}_S$ flux numérique associé à la face S du maillage. Il faut donc estimer le flux numérique sur l'interface.

Notons ${}_{ij}$ le flux numérique entre deux cellules i et j. En théorie, le flux est alors calculé par moyenne arithmétique entre les flux à gauche et à droite de l'interface notés F_{ij} et F_{ji}, soit :

$${}_{ij} = 0.5\,(F_{ij} + F_{ji}) \quad . \tag{4.4}$$

En pratique, cette moyenne arithmétique conduit à un schéma purement centré et non-dissipatif. **Nous avons passé plusieurs mois à tenter de stabiliser cette approche centrée en suivant plusieurs voies possibles mais nous n'avons pas réussi à mettre en place un terme stabilisateur générique.** C'est la raison pour laquelle l'approche que nous proposons s'éloigne de celle de l'approche directionnelle présentée dans le chapitre bibliographique. Il a ainsi été choisi de calculer le flux à l'aide des états reconstruits à droite et à gauche de l'interface par l'intermédiaire d'un solveur de Riemann. Les états à gauche et à droite vont être des états reconstruits à l'aide des cellules voisines et des gradients voisins. Il vient donc :

$${}_{ij} = F_{Riem}(W_{ij}, W_{ji})\,, \tag{4.5}$$

avec W_{ij} et W_{ji} états reconstruits respectivement à gauche et à droite de l'interface. Ces états reconstruits sont calculés à l'aide d'une interpolation des états des cellules voisines, ils s'expriment :

$$\begin{aligned} W_{ij} &= W_i + \nabla W_{ij}\cdot C_{iF} \\ W_{ji} &= W_j + \nabla W_{ji}\cdot C_{jF} \quad , \end{aligned} \tag{4.6}$$

avec W_i et W_j états dans les cellules i et j, ∇W_{ij} et ∇W_{ji} pentes extrapolées faisant intervenir un certain nombre de gradients selon le stencil choisi. Les vecteurs C_{iF} et C_{jF} sont les vecteurs non normalisés, respectivement entre le centre de la cellule C_i et le centre de l'interface puis entre le centre de la cellule C_j et le centre de l'interface.

La construction du schéma repose sur :

- la construction et l'utilisation de nouveaux gradients
- une formule d'extrapolation des états basés sur ces gradients

Ces deux points sont abordés dans les sections suivantes.

4.2 Formulation des gradients

Les schémas directionnels introduits dans le cadre de l'approche directionnelle en éléments finis font intervenir plusieurs gradients à évaluer. Sans le formalisme éléments finis, deux schémas numériques peuvent être envisagés :

– Le gradient centré cellule. Ce gradient centré est calculé par circulation autour d'un élément C_i du maillage :

$$(\nabla_C W)_i = \frac{1}{C_i} \sum_{k=1}^{nfaces} 0.5(W_L + W_R) \cdot n_k \, S \tag{4.7}$$

– Gradient centré interface. Le gradient centré à l'interface ne peut pas être obtenu simplement par différence entre les deux états voisins de l'interface dans un formalisme Volumes Finis. Nous utiliserons donc le nouveau schéma pour les gradients : le schéma UIG. La construction de ce gradient se base sur la construction d'une cellule duale autour de l'interface considérée et a été présentée au chapitre précédent.

Le gradient à l'interface $i + \frac{1}{2}$ s'écrit dans le cas d'un maillage de carrés :

$$\begin{aligned}(\nabla_I W)_{i+1\ 2} = \frac{1}{x\quad y} \quad & (W_{i+1,j} - W_{i,j}) \quad y \cdot n_x + \\ & \frac{W_{i,j+1} - W_{i,j-1} + W_{i+1,j+1} - W_{i+1,j-1}}{2} \quad x \cdot n_y\end{aligned} \tag{4.8}$$

4.3 Utilisation des gradients pour la construction de schémas d'ordre élevé

Notre objectif est de proposer un schéma convectif d'ordre élevé dans *elsA*, en se basant sur un stencil à quatre points et en incluant des informations supplémentaires afin d'atteindre l'ordre le plus élevé possible. Ici, en suivant le formalisme de reconstruction avec pente, il est intéressant d'obtenir une pente à l'aide de deux types de gradients différents, les gradients calculés par circulation et les gradients UIG.

Notons $\nabla_C W_i$ le gradient par circulation dans la cellule i, $\nabla_I W^+$ le gradient UIG en amont de l'interface considerée, $\nabla_I W^-$ en aval de celle-ci et $\nabla_I W$ sur l'interface considerée. Le calcul des pentes s'exprime alors de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\nabla W_{ij} = & (1 - \quad)\nabla_I W + \quad \nabla_I W^+ + \\ & \nabla_I W^+ - 2\nabla_I W + \nabla_I W^- \quad + \\ & \nabla_C W_{i+2} - 2\nabla_I W^+ + \nabla_C W_{i+1}\end{aligned} \tag{4.9}$$

et :

$$\begin{aligned}\nabla W_{ji} = & (1 - \quad)\nabla_I W + \quad \nabla_I W^- + \\ & \nabla_I W^+ - 2\nabla_I W + \nabla_I W^- \quad + \\ & \nabla_C W_{i-1} - 2\nabla_I W^- + \nabla_C W_i\end{aligned} \tag{4.10}$$

avec , et paramètres de décentrement du schéma. Ces pentes font donc intervenir toutes les cellules présentes sur la Fig. 4.1 et l'aire grisée correspond à la cellule duale permettant de calculer le gradient UIG sur l'interface entre les cellules i et $i+1$.

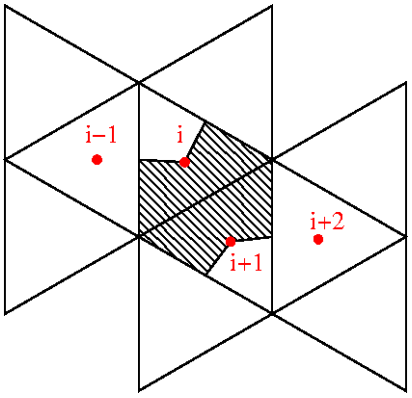


FIGURE 4.1: Cellules utilisées et cellule duale

Cette adaptatation nécessite maintenant d'être analysée pour vérifier l'ordre de ce ce schéma (dans un premier temps en une dimension, puis pour un maillage 2D cartésien) et également la résolution fréquentielle de celui-ci.

4.4 Analyse théorique du nouveau schéma

L'analyse des schémas numériques ne peut être mené dans un cadre général non linéaire. Ici, on choisit de résoudre l'équation d'advection à vitesse constante c à l'aide des nouveaus schémas.

4.4.1 Analyse d'ordre en 1D

En 1D, les gradients peuvent s'exprimer de manière simple en fonction des expressions des états dans les cellules voisines. Le calcul du gradient par circulation sur une cellule i, dans un maillage régulier de pas x, s'exprime simplement :

$$\nabla_C W_i = \frac{W_{i+1} - W_{i-1}}{2 \quad x}\,, \tag{4.11}$$

et le calcul du gradient UIG sur l'interface $i + \frac{1}{2}$ donne :

$$\nabla_I W = \frac{W_{i+1} - W_i}{x}\,. \tag{4.12}$$

À partir de ces définitions, il est possible de reconstruire la valeur des pentes à droite et à gauche de l'interface $i + \frac{1}{2}$ (Fig. 4.2). En une dimension, le pas d'espace x n'intervient pas dans les expressions des pentes. Le pas d'espace qui apparaît dans les gradients est simplifié quand on

multiplie les pentes par les vecteurs non normalisés $C_{i+1,i+1\ 2}$ et $C_{i,i+1\ 2}$. En 1D, les vecteurs normalisés correspondent respectivement à $-\ x/2$ et $\ x/2$. Les pentes à droite $\nabla W^{+}_{i+\frac{1}{2}}$ et à gauche $\nabla W^{-}_{i+\frac{1}{2}}$ de l'interface s'expriment alors :

$$\begin{aligned} -2\nabla W^{+}_{i+\frac{1}{2}} \cdot C_{i+1,i+1\ 2} =&(1-\ \ )(W_{i+1}-W_i)+\ \ (W_{i+2}-W_{i+1}) \\ &+\ \ (W_{i+2}-3W_{i+1}+3W_i-W_{i-1}) \\ &+\frac{}{2}(W_{i+3}-3W_{i+2}+3W_{i+1}-W_i)\,, \end{aligned} \tag{4.13}$$

et :

$$\begin{aligned} 2\nabla W^{-}_{i+\frac{1}{2}} \cdot C_{i,i+1\ 2} =&(1-\ \ )(W_{i+1}-W_i)+\ \ (W_i-W_{i-1}) \\ &+\ \ (W_{i+2}-3W_{i+1}+3W_i-W_{i-1}) \\ &+\frac{}{2}(W_{i+1}-3W_i+3W_{i-1}-W_{i-2})\,. \end{aligned} \tag{4.14}$$

Dans le cas 1D, le bilan de flux numérique BF_i sur la cellule i s'exprime en fonction des flux aux interfaces à droite et à gauche, soit :

$$BF_i = \frac{1}{x}(\ \ _{i+\frac{1}{2}} -\ \ _{i-\frac{1}{2}})\quad , \tag{4.15}$$

Chaque flux d'interface dépend ensuite des états à gauche et à droite et est résolu par un solveur de Riemann, c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} _{i+\frac{1}{2}} &= F_{Riem}(W^{-}_{i+\frac{1}{2}}, W^{+}_{i+\frac{1}{2}}) \\ _{i-\frac{1}{2}} &= F_{Riem}(W^{-}_{i-\frac{1}{2}}, W^{+}_{i-\frac{1}{2}}) \quad . \end{aligned} \tag{4.16}$$

Afin de pouvoir effectuer une analyse plus générale qu'avec un simple solveur décentré de Riemann, on calcule ici le flux avec le schéma suivant :

$$_{i+\frac{1}{2}} = c\ \ \frac{W^{-}_{i+\frac{1}{2}}+W^{+}_{i+\frac{1}{2}}}{2}+\ \ sign(c)\frac{W^{-}_{i+\frac{1}{2}}-W^{+}_{i+\frac{1}{2}}}{2}\quad , \tag{4.17}$$

avec paramètre de dissipation spatiale. L'Eq. 4.17 est une ré-écriture du solveur de Riemann utilisé. Le paramètre permet de passer d'un schéma purement centré quand il est égal à 0, à un schéma purement décentré si il est égal à 1. Cette simplification n'influe pas sur l'étude du schéma numérique en lui-même. L'expression de $_{i-\frac{1}{2}}$ est semblable à l'Eq. 4.17, il reste à exprimer les termes $W_{i\ \frac{1}{2}}$ à l'aide de la formulation MUSCL. Il vient alors :

$$\begin{aligned} W^{-}_{i+\frac{1}{2}} = W_i + \nabla W^{-}_{i+\frac{1}{2}} \cdot C_{i,i+1\ 2} \quad ; \quad W^{+}_{i+\frac{1}{2}} =& W_{i+1} + \nabla W^{+}_{i+\frac{1}{2}} \cdot C_{i+1,i+1\ 2} \\ W^{-}_{i-\frac{1}{2}} = W_{i-1} + \nabla W^{-}_{i-\frac{1}{2}} \cdot C_{i-1,i-1\ 2} \quad ; \quad W^{+}_{i-\frac{1}{2}} =& W_i + \nabla W^{+}_{i-\frac{1}{2}} \cdot C_{i,i-1\ 2} \end{aligned} \tag{4.18}$$

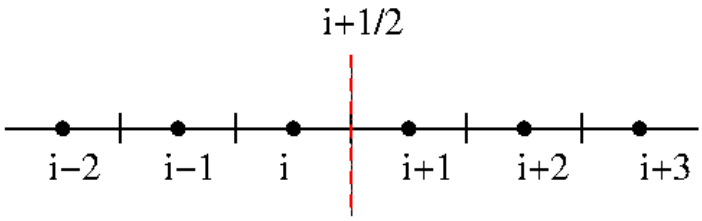


FIGURE 4.2: Stencil en 1D

En assemblant tous les termes précédents, il est possible de reconstruire le bilan de flux total BF_i dans la cellule i :

$$
\begin{aligned}
BF_i = \frac{c}{4\ \ x}\quad & \frac{(1+\ \ )}{2} && W_{i-3}\ \ + \\
& [\ \ (1+\ \ )+2\ \ \ -2\ \ -2\ \ ] && W_{i-2}\ \ + \\
& -2(1+\ \ \ +2\ \ \ )-8\ \ \ +\frac{5}{2}\ \ +\frac{7}{2} && W_{i-1}\ \ + \\
& [6\ \ \ \ +12\ \ \ -4\ \ ] && W_i\ \ \ + \\
& 2(1+\ \ \ -2\ \ \ )-8\ \ \ -\frac{5}{2}\ \ +\frac{7}{2} && W_{i+1}\ \ + \\
& [-\ \ (1-\ \ )+2\ \ \ +2\ \ -2\ \ ] && W_{i+2}\ \ + \\
& -\frac{(1-\ \ )}{2} && W_{i+3}
\end{aligned}
\tag{4.19}
$$

Cette formule peut se réécrire en fonction des dérivées spatiales pour déterminer l'ordre du schéma construit. À partir de Eq. 4.19, les termes W_{i-3}, W_{i-2}, W_{i-1}, W_{i+1}, W_{i+2} et W_{i+3} sont réécrits par des développements de Taylor jusqu'à l'ordre 6. L'expression du bilan de flux total devient :

$$
BF_i = c\ \ \frac{\partial W}{\partial x} + C_3\frac{x^2}{6}\frac{\partial^3 W}{\partial x^3} + C_4\frac{x^3}{4}\frac{\partial^4 W}{\partial x^4} + C_5\frac{x^4}{120}\frac{\partial^5 W}{\partial x^5} + C_6\frac{x^5}{24}\frac{\partial^6 W}{\partial x^6} + O(\ \ x^6)
\tag{4.20}
$$

avec :

$$
\begin{aligned}
C_3 &= \ \ (1-3\ \ ) \\
C_4 &= \ \ (\ \ +2\ \ +\ \ ) \\
C_5 &= \ \ 1-15\ \ \ -30 \\
C_6 &= \ \ (\ \ +2\ \ +4\ \ )
\end{aligned}
\tag{4.21}
$$

En prenant certaines valeurs pour les paramètres , , et , l'ordre du schéma peut être augmenté jusqu'à l'ordre 6 (Tab. 4.1). Le schéma à l'ordre 6 est un schéma purement centré et donc non-dissipatif. La dissipation est un paramètre essentiel pour la stabilité d'un schéma numérique. Le

Schéma					Ordre
1	1	1/3	0	0	3
2	1	1/3	-1/6	0	4
3	1	1/3	0	-1/3	4
4	1	1/3	-1/10	-2/15	5
5	0	1/3	-	-2/15	6

TABLE 4.1: Précision des différents schémas dans les cas 1D et 2D

schéma d'ordre 5, décentré et donc naturellement dissipatif, semble *a priori* le plus approprié en terme d'ordre et de stabilité.

Ces ordres et valeurs des constantes restent toujours valables pour un cas 2D structuré étant donné l'approche directionnelle du schéma. Pour le cas 2D, la résolution des équations est similaire sauf que l'on traite le flux numérique sur les quatre interfaces de la cellule. Le bilan total de flux ne fait ensuite intervenir aucun terme croisé. Il est maintenant nécessaire d'analyser l'ordre de ce schéma sur un cas 2D non-structurée. Bien qu'il soit quasiment impossible de faire une analyse d'ordre sur un maillage non-structuré général, il est possible de le faire en considérant le cas particulier d'un maillage à triangles équilatéraux. Cette analyse est intéressante car les maillages de triangles équilatéraux se rapprochent des maillages isotropes utilisées pour la SGE.

4.4.2 Analyse d'ordre sur un cas 2D de triangles équilatéraux

Pour l'analyse du schéma en 2D, le modèle d'advection suivant sera étudié :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + a\frac{\partial W}{\partial x} + b\frac{\partial W}{\partial y} = 0 \quad . \tag{4.22}$$

L'avantage des triangles équilatéraux est que deux directions privilégiées peuvent être définies. Une rangée de triangles équilatéraux peut être considerée d'indice j et chaque triangle de cette rangée possède un indice i. La Fig. 4.3 montre l'organisation de ces directions et présente également le stencil utilisé pour un cas 2D non-structuré. Deux types de triangles sont présents sur la Fig. 4.3, ceux avec la pointe vers le haut et ceux avec la pointe vers le bas. Notons h la longueur d'une arête d'un triangle et supposons que l'addition des indices i et j soit paire, alors considérons qu'il s'agit d'un triangle avec la pointe en bas. Si l'addition des indices i et j est impaire, le triangle traité aura la pointe en haut. Le gradient par circulation dans le triangle T_{ij} s'écrit dans les deux cas possibles :

$$\begin{aligned}
\frac{\overline{3}h^2}{4}\nabla_C W_{ij} &= \frac{h}{2}\left[W_{i,j+1}.\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} + W_{i+1,j}.\begin{pmatrix}\overline{3}/2\\-1/2\end{pmatrix} + W_{i-1,j}.\begin{pmatrix}-\overline{3}/2\\-1/2\end{pmatrix}\right] && \text{si } (i+j) \text{ pair,}\\
\frac{\overline{3}h^2}{4}\nabla_C W_{ij} &= \frac{h}{2}\left[W_{i,j-1}.\begin{pmatrix}0\\-1\end{pmatrix} + W_{i+1,j}.\begin{pmatrix}\overline{3}/2\\1/2\end{pmatrix} + W_{i-1,j}.\begin{pmatrix}-\overline{3}/2\\1/2\end{pmatrix}\right] && \text{si } (i+j) \text{ impair.}
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Pour le cas du gradient UIG, il aura trois formulations différentes dans le cas où la somme $i+j$ est paire et trois autres sinon. Notons $n_1 = \begin{pmatrix}\overline{3}/2\\-1/2\end{pmatrix}$, $n_2 = \begin{pmatrix}-\overline{3}/2\\-1/2\end{pmatrix}$ et $n_3 = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$. Le gradient

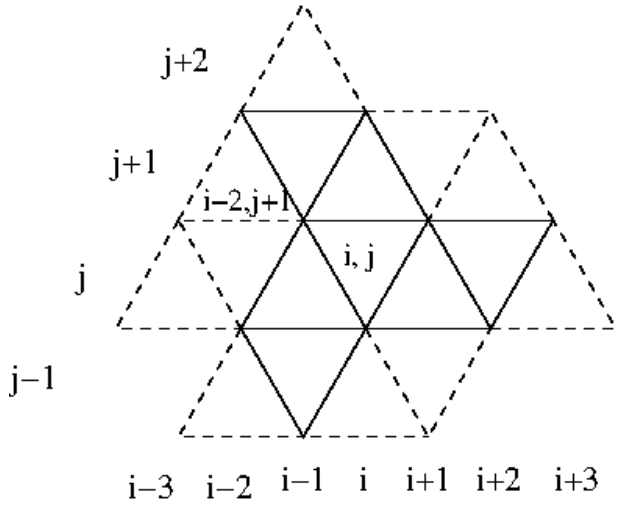


FIGURE 4.3: Stencil en 2D avec triangles équilatéraux

UIG s'écrit alors pour chaque face du triangle, c'est-à-dire pour l'interface $j+1/2$:

$$\begin{aligned}\frac{h^2}{\overline{\overline{3}}}\nabla_I W_{i,j+1\ 2} = \quad & y(W_{i,j+1} - W_{i,j}) \cdot n_3 \\ & + \frac{x}{2}(W_{i+1,j+1} + W_{i,j+1}) \cdot (-n_2) + \frac{x}{2}(W_{i+1,j} + W_{i,j}) \cdot n_1 \\ & + \frac{x}{2}(W_{i-1,j+1} + W_{i,j+1}) \cdot (-n_1) + \frac{x}{2}(W_{i-1,j} + W_{i,j}) \cdot n_2 \quad ,\end{aligned} \tag{4.24}$$

puis pour l'interface $i+1/2$:

$$\begin{aligned}\frac{h^2}{\overline{\overline{3}}}\nabla_I W_{i+1\ 2,j} = \quad & y(W_{i+1,j} - W_{i,j}) \cdot n_1 \\ & + \frac{x}{2}(W_{i+2,j} + W_{i+1,j}) \cdot (-n_2) + \frac{x}{2}(W_{i+1,j-1} + W_{i+1,j}) \cdot (-n_3) \\ & + \frac{x}{2}(W_{i,j+1} + W_{i,j}) \cdot n_3 + \frac{x}{2}(W_{i-1,j} + W_{i,j}) \cdot n_2 \quad ,\end{aligned} \tag{4.25}$$

et finalement pour l'interface $i-1/2$:

$$\begin{aligned}\frac{h^2}{\overline{\overline{3}}}\nabla_I W_{i-1\ 2,j} = \quad & y(W_{i-1,j} - W_{i,j}) \cdot n_2 \\ & + \frac{x}{2}(W_{i,j+1} + W_{i,j}) \cdot n_3 + \frac{x}{2}(W_{i+1,j} + W_{i,j}) \cdot n_1 \\ & + \frac{x}{2}(W_{i-2,j} + W_{i-1,j}) \cdot (-n_1) + \frac{x}{2}(W_{i-1,j-1} + W_{i-1,j}) \cdot (-n_3) \quad .\end{aligned} \tag{4.26}$$

Dans le cas où la somme $i+j$ est impaire, les gradients UIG deviennent :

$$\begin{aligned}\frac{h^2}{\overline{\overline{3}}}\nabla_I W_{i,j-1\ 2} = \quad & y(W_{i,j-1}-W_{i,j})\cdot(-n_3)\\ &+\frac{x}{2}(W_{i+1,j}+W_{i,j})\cdot(-n_2)+\frac{x}{2}(W_{i+1,j-1}+W_{i,j-1})\cdot n_1\\ &+\frac{x}{2}(W_{i-1,j}+W_{i,j})\cdot(-n_1)+\frac{x}{2}(W_{i-1,j-1}+W_{i,j-1})\cdot n_2 \quad ,\end{aligned} \tag{4.27}$$

puis pour l'interface $i+1/2$:

$$\begin{aligned}\frac{h^2}{\overline{\overline{3}}}\nabla_I W_{i+1\ 2,j} = \quad & y(W_{i+1,j}-W_{i,j})\cdot(-n_2)\\ &+\frac{x}{2}(W_{i+2,j}+W_{i+1,j})\cdot n_1+\frac{x}{2}(W_{i+1,j+1}+W_{i+1,j})\cdot n_3\\ &+\frac{x}{2}(W_{i,j-1}+W_{i,j})\cdot(-n_3)+\frac{x}{2}(W_{i-1,j}+W_{i,j})\cdot(-n_1) \quad ,\end{aligned} \tag{4.28}$$

et finalement pour l'interface $i-1/2$:

$$\begin{aligned}\frac{h^2}{\overline{\overline{3}}}\nabla_I W_{i-1\ 2,j} = \quad & y(W_{i-1,j}-W_{i,j})\cdot(-n_1)\\ &+\frac{x}{2}(W_{i,j-1}+W_{i,j})\cdot(-n_3)+\frac{x}{2}(W_{i+1,j}+W_{i,j})\cdot(-n_2)\\ &+\frac{x}{2}(W_{i-2,j}+W_{i-1,j})\cdot n_2+\frac{x}{2}(W_{i-1,j+1}+W_{i-1,j})\cdot n_3 \quad .\end{aligned} \tag{4.29}$$

Il faut ensuite définir les six calculs de pentes différents, deux pour chaque arête du triangle, soit :

$$\begin{aligned}\nabla^-_{i+1\ 2} =& (1-\ \ )\nabla_I W_{i+1\ 2,j}+\ \ \nabla_I W_{i-1\ 2,j}\\ &+\ \ \left(\nabla_I W_{i+3\ 2,j}-2\nabla_I W_{i+1\ 2,j}+\nabla_I W_{i-1\ 2,j}\right)\\ &+\ \ \left(\nabla_C W_{i-1,j}-2\nabla_I W_{i-1\ 2,j}+\nabla_C W_{i,j}\right)\\ \nabla^+_{i+1\ 2} =& (1-\ \ )\nabla_I W_{i+1\ 2,j}+\ \ \nabla_I W_{i+3\ 2,j}\\ &+\ \ \left(\nabla_I W_{i+3\ 2,j}-2\nabla_I W_{i+1\ 2,j}+\nabla_I W_{i-1\ 2,j}\right)\\ &+\ \ \left(\nabla_C W_{i+2,j}-2\nabla_I W_{i+3\ 2,j}+\nabla_C W_{i+1,j}\right)\end{aligned} \tag{4.30}$$

En utilisant des formules similaires pour les interfaces $i-1/2$ et $j+1/2$, le bilan de flux total $BF(i,j)$ sur la cellule C_{ij} est alors calculable par :

$$\begin{aligned}BF(i,j) =& (a,b)\cdot n_3\ \ (1+\ \ )(W_{i,j}+\nabla^-_{j+1\ 2}\cdot C_{i,j+1\ 2})+(1-\ \ )(W_{i,j+1}-\nabla^+_{j+1\ 2}\cdot C_{j+1,j+1\ 2})\\ &+(a,b)\cdot n_1\ \ (1+\ \ )(W_{i,j}+\nabla^-_{i+1\ 2}\cdot C_{i,i+1\ 2})+(1-\ \ )(W_{i+1,j}-\nabla^+_{i+1\ 2}\cdot C_{i+1,i+1\ 2})\\ &+(a,b)\cdot n_2\ \ (1+\ \ )(W_{i,j}+\nabla^-_{i-1\ 2}\cdot C_{i,i-1\ 2})+(1-\ \ )(W_{i-1,j}-\nabla^+_{i-1\ 2}\cdot C_{i-1,i-1\ 2})\end{aligned} \tag{4.31}$$

Afin d'étudier l'ordre de cette formulation en fonction des différents paramètres, toutes les cellules intervenant dans le calcul du flux sont prises en compte par des développements de Taylor. Par exemple, le développement de Taylor de la cellule $C_{i+1,j}$ donne :

$$\begin{aligned} W(i+1,j) = W(i,j) + \quad & xW_x + \quad yW_y + \frac{1}{2}(\quad x^2W_{xx} + \quad y^2W_{yy} + 2 \quad x \quad yW_{xy}) \\ & + \frac{1}{6}(\quad x^3W_{xxx} + \quad y^3W_{yyy} + 3 \quad x^2 \quad yW_{xxy} + 3 \quad x \quad y^2W_{xyy}) \\ & + \frac{1}{24}(\quad x^4W_{xxxx} + \quad y^4W_{yyyy} + 4 \quad x^3 \quad yW_{xxxy} + 4 \quad x \quad y^3W_{xyyy} + 6 \quad x^2 \quad y^2W_{xxyy}) \\ & + \frac{1}{120}(\quad x^5W_{xxxxx} + \quad y^5W_{yyyyy} + 5 \quad x^4 \quad yW_{xxxxy} + 5 \quad x \quad y^4W_{xyyyy} \\ & \qquad + 10 \quad x^3 \quad y^2W_{xxxyy} + 10 \quad x^2 \quad y^3W_{xxyyy}) \quad , \end{aligned} \tag{4.32}$$

avec $x = h/2$ et $y = \overline{3}h/6$. Au final, après simplification et réunification des termes d'ordre similaire, le schéma peut atteindre l'ordre 3 sur les triangles équilatéraux. Le Tab. 4.2 présente les deux ordres retenus pour le cas de triangles équilatéraux.

Schéma					Ordre
Tri1	0	24/(33+9 $\overline{3}$)	0	0	3
Tri2	0	$\overline{3}$/9	5/3- 9 $\overline{3}$/27	0	2

TABLE 4.2: Précision des différents schémas dans le cas 2D sur triangles équilatéraux

L'ordre final du schéma sera validé dans la suite de la thèse sur des cas tests et maillages variés. L'ordre spatial n'est pas la seule analyse à réaliser, il faut également s'intéresser à la résolution fréquentielle du schéma.

4.4.3 Analyse fréquentielle du schéma en 1D

L'analyse d'ordre présente uniquement les erreurs de précision dans l'espace des polynômes. Le passage dans l'espace des fonctions trigonométriques permet alors d'étudier la précision du schéma sur une large bande de fréquences. Cette étude est nécessaire pour s'assurer que le schéma numérique sera capable de capturer certains tourbillons de fréquence connue. Cette étude est donc cruciale en SGE. Le schéma numérique sera classifié selon deux aspects principaux :

- la dispersion : capacité du schéma à conserver un phénomène de fréquence donnée,
- la dissipation : la tendance du schéma à amplifier ou amortir une certaine fréquence.

Pour observer l'erreur faite par le schéma dans l'espace de Fourier, il faut considérer une onde spatiale de nombre d'onde k, $u_k(x) = exp(-Ikx)$ avec $I^2 = -1$. Le nombre d'onde adimensionné est défini par $= kh$. La plus petite longueur d'onde $= 2 \ /k$ pouvant être discrétisée sur un maillage de pas h étant $_{min} = 2h$, d'après le critère de Shannon, il est possible de déduire que le nombre d'onde adimensionné varie entre 0 et . On sait que la dérivée exacte de $u_k(x)$ est :

$$\frac{\partial u_k(x_i)}{\partial x} = -I \quad u_k(x_i)/h \quad . \tag{4.33}$$

Le schéma numérique implique l'approximation suivante :

$$\frac{\partial u_k(x_i)}{\partial x} \qquad u_k = \frac{1}{h}\sum_{j=-m}^{j=n} a_{i+j} exp(-I \;\; x_{i+j}/h) \quad , \tag{4.34}$$

avec $n = m$ dans le cas d'un schéma centré. Un nombre d'onde modifié est ensuite défini tel que :

$$u_k = -I \;\; u_k(x_i)/h \quad . \tag{4.35}$$

Ce nombre d'onde modifié permet de représenter l'erreur faite par le schéma numérique sur le nombre d'onde, soit :

$$(\;\;) = I \sum_{j=-m}^{j=n} a_{i+j} exp(-Ij \;\;) \quad . \tag{4.36}$$

La partie réelle de $(\;\;)$ traduit l'effet de dispersion du schéma numérique tandis que sa partie imaginaire représente l'effet de dissipation ou d'antidiffusion. Pour tous les schémas centrés la partie imaginaire est nulle et ces schémas sont non-dissipatifs.

Dans un premier temps, l'étude du schéma numérique se fera sans prendre en compte la dissipation spatiale, c'est-à-dire en fixant $= 0$. L'analyse en 1D présente les nombres d'onde modifiés suivant pour deux jeux de paramètres différents :

– Pour $= 1/3$ et $= 0$ (ordre 4, stencil à deux points) :

$$u_k = \frac{1}{12}u_{i-2} - \frac{2}{3}u_{i-1} + \frac{2}{3}u_{i+1} - \frac{1}{12}u_{i+2} \quad , \tag{4.37}$$

et qui donne le nombre d'onde modifié suivant :

$$(\;\;) = \frac{4}{3}sin(\;\;) - \frac{1}{6}sin(2\;\;) \quad . \tag{4.38}$$

– Pour $= 1/3$ et $= -2/15$ (ordre 6, stencil à quatre points) :

$$u_k = -\frac{1}{60}u_{i-3} + \frac{3}{20}u_{i-2} - \frac{3}{4}u_{i-1} + \frac{3}{4}u_{i+1} - \frac{3}{20}u_{i+2} + \frac{1}{60}u_{i+3} \quad , \tag{4.39}$$

et le nombre d'onde modifié associé :

$$(\;\;) = \frac{3}{2}sin(\;\;) - \frac{3}{10}sin(2\;\;) + \frac{1}{30}sin(3\;\;) \quad . \tag{4.40}$$

En prenant compte de la dissipation spatiale ($= 1$) et avec les paramètres suivants ($= 1/3$, $= -1/10$, $= -2/15$), le schéma numérique devient d'ordre 5 et l'onde spatiale modifiée s'écrit :

$$u_k = -\frac{1}{30}u_{i-3} + \frac{1}{4}u_{i-2} - u_{i-1} + \frac{1}{3}u_i + \frac{1}{2}u_{i+1} - \frac{1}{20}u_{i+2} \quad . \tag{4.41}$$

Cette fois-ci, l'aspect décentré implique que le nombre d'onde modifié aura une partie imaginaire, c'est-à-dire :

$$(\;\;) = \frac{7}{4}sin(\;\;) - \frac{1}{2}sin(2\;\;) + \frac{1}{12}sin(3\;\;) + I\,(-\frac{5}{6} + \frac{5}{4}cos(\;\;) - \frac{1}{2}cos(2\;\;) + \frac{1}{12}cos(3\;\;)) \quad . \tag{4.42}$$

L'expression précédente est celle d'un schéma décentré d'ordre 4, tout d'abord seule la partie réelle sera présentée.

La Fig. 4.4 présente la dispersion introduite par le schéma numérique. La première courbe correspond à un schéma numérique qui serait idéal, et la deuxième représente un schéma classique centré de différences finies ou de volumes finis d'ordre 2. Les 2 courbes suivantes correspondent aux schémas centrés d'ordre 4 et d'ordre 6 présentés précédemment. Enfin, la dernière courbe est relative au schéma décentré d'ordre 4. On constate que plus l'ordre en espace augmente, plus la dispersion diminue. La résolution spectrale de ces schémas évolue de plus en plus lentement lorsqu'on augmente l'ordre d'approximation de la dérivée. En général, la région d'intérêt est située entre 0 et $/2$, car la SGE filtre les hautes fréquences.

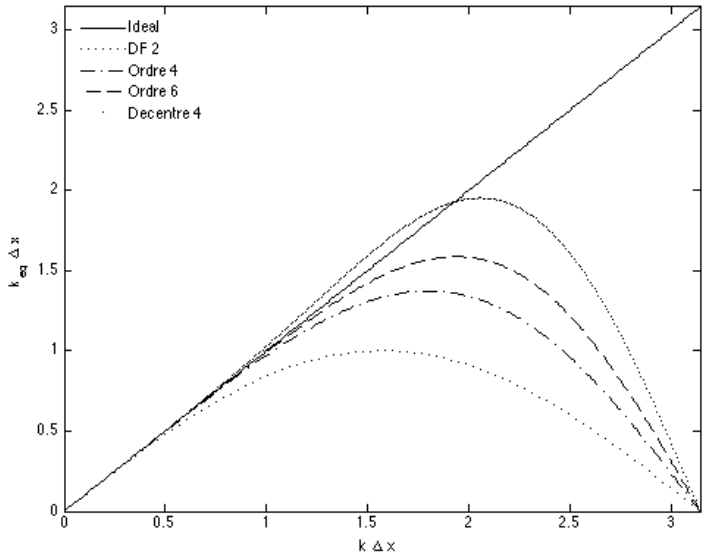


FIGURE 4.4: Dispersion des schémas d'ordre 4 et 6

La Fig. 4.5 montre qu'il faut respectivement 22, 12 et 7 points aux schémas d'ordre 2, 4 et 6 pour résoudre une longueur d'onde avec une erreur de phase inférieure à 10^{-3}. L'erreur de phase mesure l'écart entre le signal initial et celui reçu par le schéma numérique.

Sur les précédentes figures, la partie réelle du schéma décentré à l'ordre 4 a également été tracée. Figs. 4.4, 4.6 et 4.7 montrent que la partie réelle du schéma décentré d'ordre 4 dépasse les asymptotes des deux figures.

La Fig. 4.8 présente la diffusion numérique pour les schémas décentrés aux ordres 3, 4 et 5. Ceux d'ordre 3 et 5 sont respectivement des dégradations des schémas centrés d'ordre 4 et 6, ils ont donc la même partie réelle que ceux-ci. Leur partie imaginaire, représentée ci-dessous, montre que la diffusion rajoutée est faible (inférieure à 0.1). Au contraire, le schéma décentré d'ordre 4 possède une diffusion plus importante de manière à limiter les effets d'instabilité de ce schéma.

Ces figures présentent donc que les différentes possibilités avec ce schéma sont bien supérieures à un schéma classique d'ordre 2. Cette analyse théorique sera ensuite validée par différents cas tests.

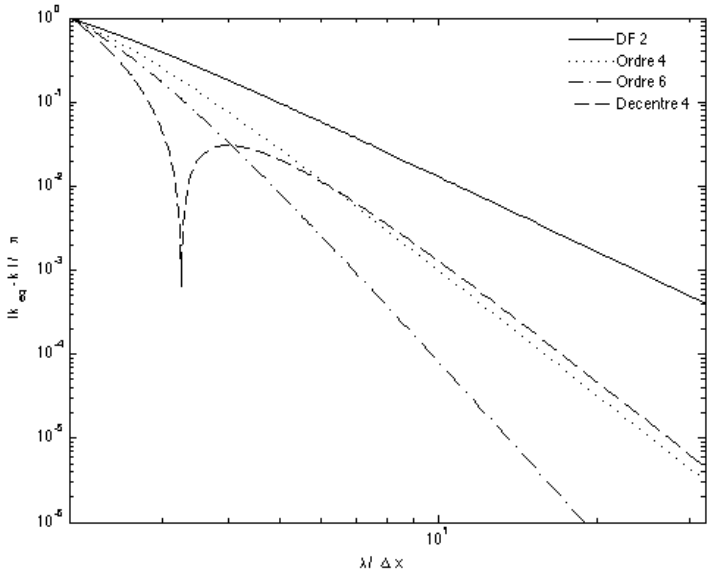


FIGURE 4.5: Erreur de phase

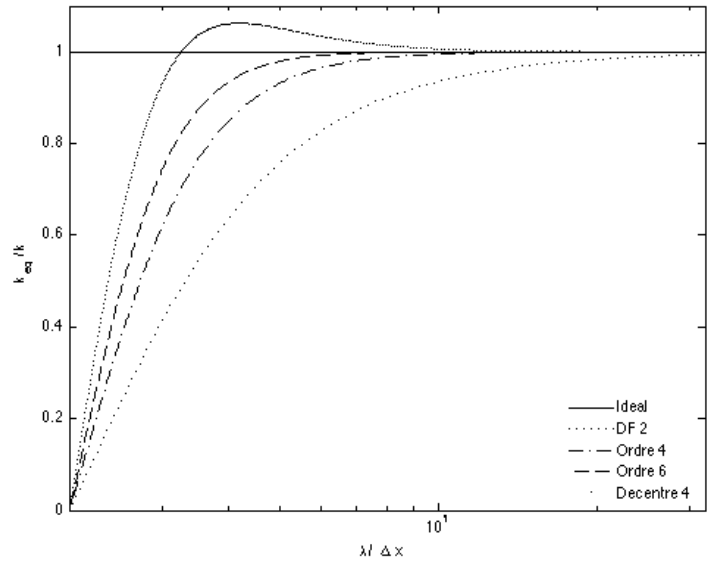


FIGURE 4.6: Vitesse de phase

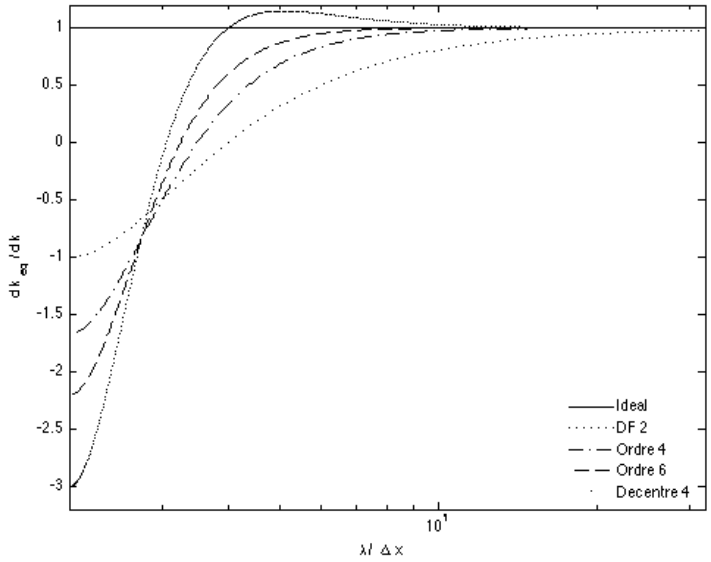


FIGURE 4.7: Vitesse de groupe

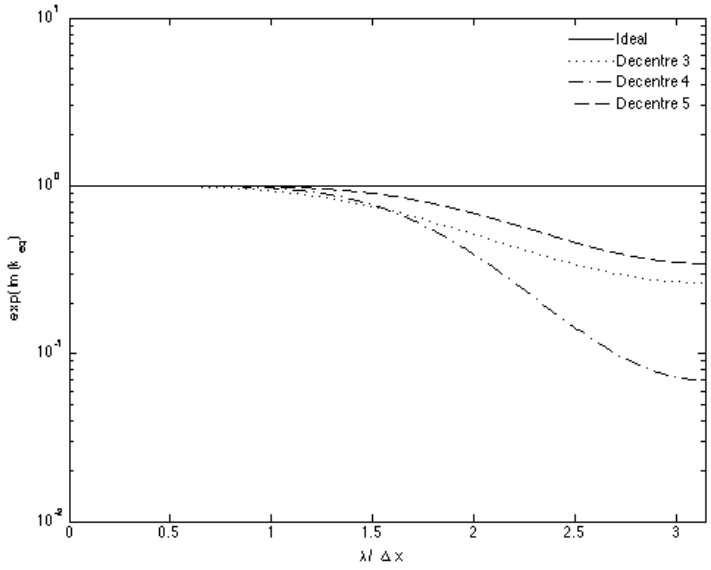


FIGURE 4.8: Diffusion pour les schémas décentrés

4.5 Application : Advection linéaire en 1D

La première application consiste à étudier les comportements de différents schémas créés sur un cas d'advection. Ce cas test consiste à étudier le déplacement d'une gaussienne au cours du

temps. Le but de ce test est de vérifier que le schéma ne dissipe pas trop l'amplitude maximale et qu'il ne créé pas d'oscillations. La gaussienne s'exprime de la manière suivante :

$$f(x) = A \exp \quad -\frac{(x - x_0)^2}{K} \tag{4.43}$$

avec dans notre cas, A amplitude de la gaussienne égale à 1, x_0 point de départ de la gaussienne et $K = 10^{-4}$ largeur de la gaussienne. Le cas est testé sur un maillage d'une longueur de 0.3 m et composé de 300 cellules, soit un pas $x = 0.001$. Le domaine est fixé entre $[-0.15, 0.15]$ et on initiale la gaussienne à $x_0 = -0.1$m.

Afin de n'avoir aucun impact du schéma temporel, on utilise un pas de temps très faible. La simulation est réalisée sur 20 ms en 20000 itérations soit un pas de temps de $10^{-5}ms$. Cinq schémas vont donc être testés, le schéma d'ordre 3, les deux schémas d'ordre 4, le schéma d'ordre 5 et le schéma d'ordre 6. Les résultats donnés par ces schémas sont tracés au moment initial, à 10 ms et à 20 ms (Fig. 4.9).

Pour tous les schémas, aucune oscillation n'apparaît au cours du temps et le maximum de la gaussienne semble conservé pour tous les ordres. En zoomant sur l'ordre 3, on remarque tout de même une légère dissipation (Fig. 4.10).

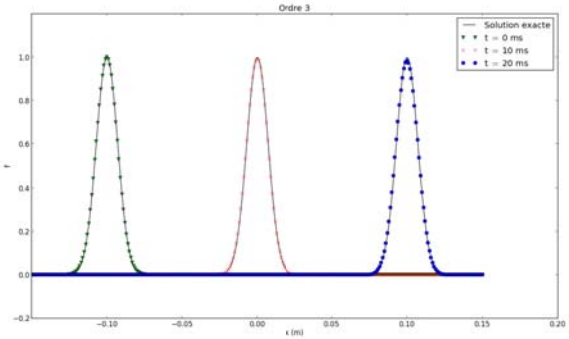
Afin de mieux quantifier la dissipation de chaque schéma, on étudie ensuite l'erreur en norme infinie à 10 ms et à 20 ms pour chaque schéma.

Le Tab. 4.3 donne l'évolution de l'erreur pour chaque schéma en fonction du temps. La première remarque est que le schéma d'ordre 4 - a possède une erreur inférieure au schéma d'ordre 5. Ceci peut s'expliquer par le fait que ce schéma d'ordre 4 est centré et donc non dissipatif, tandis que l'ordre 5 est par nature décentré et donc dissipatif. Mise à part cette remarque, la réduction de l'erreur se fait en même temps que la montée en ordre. Pour le schéma d'ordre 6, la gaussienne est très bien reproduite et l'erreur est la plus faible. Le fait que ce schéma soit purement centré permet d'obtenir ces résultats.

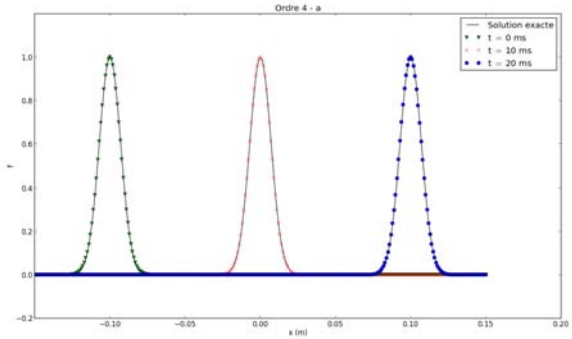
Ordre du schéma	Erreur à 10 ms	Erreur à 20 ms	Pente
3	9.34e-3	1.79e-2	8.56e-2
4-a (= 0)	1.3e-5	6.33e-5	5.03e-4
4-b (= 0)	5.13e-4	1.06e-3	5.47e-3
5	1.93e-4	3.83e-4	1.89e-3
6	9.23e-7	1.57e-7	-7.66e-6

TABLE 4.3: Erreur en norme infinie des différents schémas pour le cas d'advection 1D

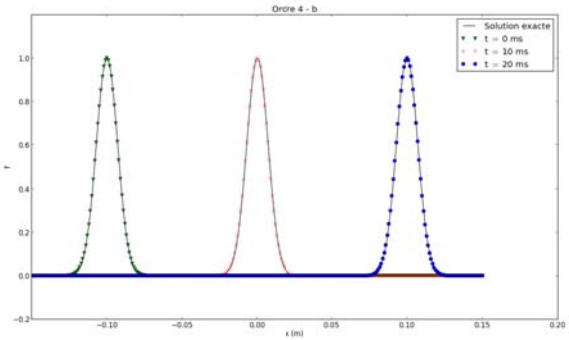
Ordre 3



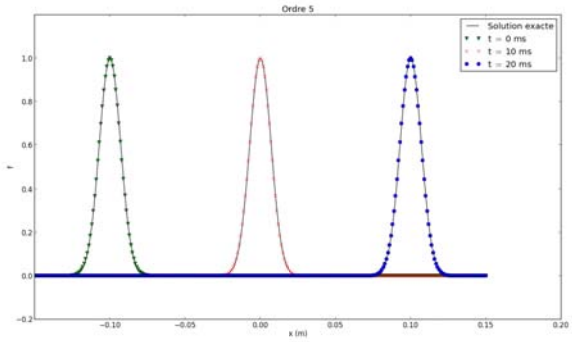
Ordre 4 - a



Ordre 4 - b



Ordre 5



Ordre 6

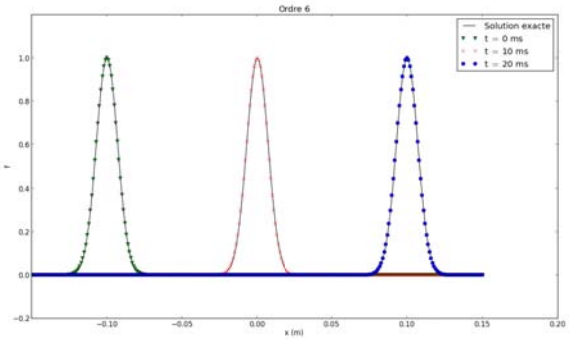


FIGURE 4.9: Advection 1D des différents schémas

4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré comment nous avons construit une nouvelle famille de schémas numériques pour traiter à l'ordre élevé les termes de convection. Les points clés sont l'utilisation d'un solveur de Riemann d'une part, et une extrapolation optimisée des états à droite

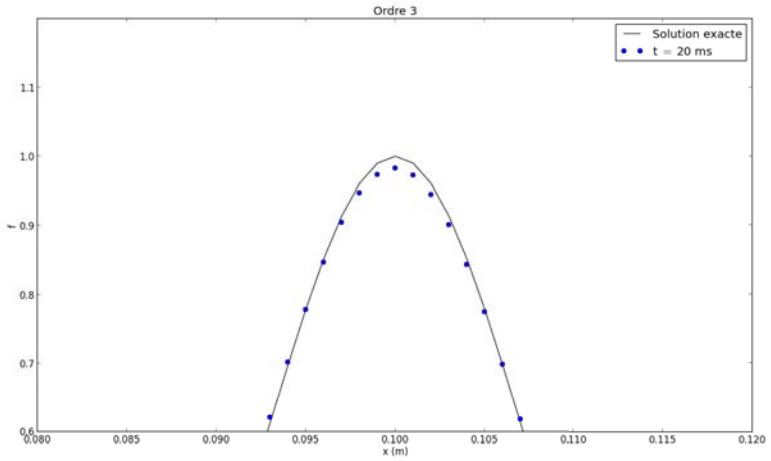


FIGURE 4.10: Zoom sur le pic de la Gaussienne à $t = 20ms$ et pour le schéma d'ordre 3

et à gauche de l'interface d'autre part. Pour compacter l'information, l'extrapolation proposée utilise des gradients qui doivent être précalculés. Ces gradients sont des gradients utilisant une formulation par face, et donc parfaitement adaptés à un contexte de calcul parallèle pour un code de type volumes finis centré cellule. Dans le chapitre suivant, nous analyserons la famille de schéma sur un cas bidimensionnel en résolvant les équations d'Euler.

Chapitre 5

Application numérique : Convection de vortex

Sommaire

5.1 Paramètres numériques 76
5.2 Vortex isentropique 77
5.3 Calcul d'erreur pour les schémas d'ordre élevé 77
5.4 Validation sur hexaèdres réguliers 78
5.5 Validation sur triangles/prismes 84
5.6 Conclusion 87

Le but de ce chapitre est de valider les différents schémas numériques présentés précédemment. Leurs comportements vont être étudiés sur un cas de convection pur dans un premier temps.

5.1 Paramètres numériques

Les schémas développés et présentés au chapitre précédent ont été implantés dans un code parallèle de résolution des équations d'Euler. Les simulations numériques nécessitent la définition du solveur de Riemann d'une part et des explications sur l'intégration en temps d'autre part.

Le solveur de Riemann retenu est le classique schéma de Roe. En suivant notre analyse sur les approche spectrales discontinues, on s'est rendu compte que les schémas de Roe et de Rusanov étaient généralement considérés et notre choix s'est porté sur le schéma de Roe pour contrôler au mieux la dissipation du schéma. Bien entendu, tout solveur de Riemann peut être considéré pour le schéma.

Afin de mesurer des erreurs liées au schéma spatial plutôt que des erreurs liées à l'intégration en temps des équations, la résolution temporelle des équations d'Euler se base sur un schéma dit DRP (Dispersion Relation Preserving) proposé par Bogey et Bailly [107] pour des calculs d'aéroacoustique. Ce même schéma numérique est disponible dans *elsA* pour les calculs d'aéroacoustique. C'est un schéma de Runge-Kutta à 6 étapes et d'ordre 2, faiblement dissipatif et faiblement dispersif.

5.2 Vortex isentropique

Le cas le plus académique pour tester l'ordre d'un schéma convectif reste le cas de la convection d'un vortex compressible et isentropique dans un écoulement uniforme. Le cas de convection de vortex utilisé provient du *"3rd International Workshop on High-Order CFD Methods"* [108]. Les équations qui régissent le problème sont les équations d'Euler instationnaires avec le coefficient polytropique $= 1.4$ et la constante des gaz parfaits $R_{gas} = 287.15\, J.kg^{-1}.K^{-1}$. Le vortex isentropique est un cas intéressant car il est solution des équations d'Euleur, la solution théorique exacte est connue.

Le domaine est tout d'abord initialisé par un écoulement constant à une pression P , une température T et un nombre de Mach $M = 0.5$. On ajoute à cet écoulement un vortex de rayon caractéristique R et de force qui est centré aux coordonnées (x_C,y_C). Le vortex est initialisé avec les perturbations du champ porteur suivantes sur la vitesse et la pression :

$$\begin{aligned} u &= - \ U \ (y - y_C)/R \quad \exp(-r^2/2) \\ v &= \ U \ (x - x_C)/R \quad \exp(-r^2/2) \\ T &= 0.5(\ U \ )^2 \quad \exp(-r^2)/C_p \quad , \end{aligned} \tag{5.1}$$

avec :

$$C_p = \frac{}{-1} R_{gas} \qquad \text{et} \qquad r = \ \overline{(x - x_C)^2 + (y - y_C)^2}/R \quad , \tag{5.2}$$

et $U = M \ \overline{R_{gas}T}$ vitesse de l'écoulement non perturbé. Les vitesses sont donc $u_0 = U + u$ et $v_0 = v$. La pression, la température et la masse volumique sont imposées pour que le vortex soit dans un état stationnaire :

$$\begin{aligned} T_0 &= T \ - \ T \\ {}_0 &= \ (T_0/T \ )^{\frac{1}{-1}} \\ P_0 &= \ {}_0 R_{gas} T_0 \quad , \end{aligned} \tag{5.3}$$

Le but de ce cas test est de vérifier que le vortex est transporté sans perturbations par l'écoulement uniforme. La solution initiale est donc utilisée comme solution de référence pour calculer la précision des schémas numériques.

Le domaine est un carré de côté $L_x = L_y = 0.1\, m$, avec des conditions aux limites périodiques imposées sur chaque bord. Le vortex est centré aux coordonnées ($x_C = 0.05\, m$, $y_C = 0.05\, m$), la pression fixée est à $P = 10000\, N.m^{-2}$ et la température à $T = 300\, K$. L'intensité du vortex est choisie telle que $= 1/5$ et le rayon est $R = 0.005$.

5.3 Calcul d'erreur pour les schémas d'ordre élevé

Le calcul de l'erreur $\mathcal{L}_2$ pour des schémas d'ordre élevé et en particulier dans le cadre du formalisme Volumes Finis peut souvent être problématique. L'erreur $\mathcal{L}_2$ sur un domaine est

exprimée de la manière suivante :

$$Err_{L2}(\ ) = \frac{\int (S - S_{exact})^2 dV}{\int dV}^{1\ 2} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \int_{V_i} (S - S_{exact})^2 dV}{\sum_{i=1}^{N} |V_i|}^{1\ 2} . \tag{5.4}$$

Dans le cas d'une solution provenant d'une méthode Volumes Finis, la solution obtenue est une solution moyenne sur l'élément considéré. L'erreur $\mathcal{L}_2$ devient :

$$Err_{L2}(\ ) = \frac{\sum_{i=1}^{N} (\bar{S} - \bar{S}_{exact})^2 |V_i|}{\sum_{i=1}^{N} |V_i|}^{1\ 2} . \tag{5.5}$$

En général, la solution exacte est calculée à partir des équations théoriques avec les coordonnées des centres des cellules. Le problème est qu'il faut être consistant entre l'expression de la solution obtenue et celle de la solution exacte. Il est donc nécessaire que la solution exacte soit également une moyenne sur tout l'élément.

Pour des schémas d'ordre élevé, la solution moyenne $\bar{S}$ correspond à une représentation d'ordre élevé. Il faut donc obtenir une représentation d'ordre élevé de la solution exacte moyenne $\bar{S}_{exact}$. Dans le cas général, il est nécessaire d'utiliser une formule de quadrature de précision suffisante pour approximer l'intégrale sur l'élément.

Une approche plus rapide pour approximer la solution exacte moyenne sur l'élément, est de subdiviser cet élément en un nombre suffisant de sous-élément pour obtenir la précision souhaitée. Il est facile de subdiviser n'importe quel élément en divisant les arêtes par un nombre donné. L'expression de la solution exacte moyenne devient alors :

$$\bar{S}_{exact} = \frac{\sum_{i=1}^{n} s_i |v_i|}{|V|} \tag{5.6}$$

avec s_i solution exacte au centre du sous-élément et $|v_i|$ volume du sous-élément. Dans cet exemple, le nombre de subdivisions a été choisi arbitrairement très grand (de l'ordre de 40 par direction) afin de contrôler que l'écart entre 2 raffinements sucessifs soit faible, et toujours d'ordre plus faible que l'erreur numérique mesurée ensuite par les calculs instationnaires.

De la même manière, l'initialisation du calcul nécessite la définition de champs moyens par cellule et on doit utiliser la même technque que pour le calcul de l'erreur. Le fait d'initialiser le calcul avec les solutions exactes au centre des cellules est consistant avec le formalisme Volumes Finis mais seulement à l'ordre 2. Pour obtenir un ordre de précision supérieur, le calcul est donc initialisé par $\bar{S}_{exact}$ dans chaque cellule du maillage.

5.4 Validation sur hexaèdres réguliers

Le premier objectif de ce cas test est de valider les coefficients de la famille de schémas obtenus théoriquement. Il est nécessaire de retrouver les mêmes ordres que la théorie dans cas là. Pour

cela, des simulations sont réalisés sur quatre maillages différents, successivement raffinés $L_x/32$ (maillage M1), $L_x/64$ (maillage M2), $L_x/128$ (maillage M3), $L_x/256$ (maillage M4) dans les directions x et y. Ces maillages sont composés d'hexaèdres réguliers et uniquement 5 cellules seront représentées dans la direction z.

Une distance caractéristique h est déterminée de la manière suivante pour chaque maillage :

$$h = \frac{1}{(N_{cell})^{1\ 3}} \tag{5.7}$$

Le Tab. 5.1 présente les données de chaque maillage.

Maillage	Nombre de cellules	Distance h
M1	5120	0.05802
M2	20480	0.03655
M3	81920	0.02302
M4	327680	0.01450

TABLE 5.1: Nombre de cellules et distance caractérique des différents maillages

Les différents schémas sont donc testés sur les quatre maillages précédents. Ensuite, la valeur de l'erreur $\mathcal{L}_2$ est tracée en fonction de la distance caractéristique h.

La Fig. 5.1 présente les courbes de convergence pour les différents schémas. Il est à noter que le schéma théoriquement d'ordre 6 n'est pas affiché sur cette figure. En effet, ce schéma est un schéma purement centré et ne permet pas d'obtenir un calcul stable. La Fig. 5.1 présente également des points supplémentaires pour le schéma d'ordre 5, lorsque celui-ci est initialisé avec les valeurs exactes au centre des cellules et non par la valeur moyenne dans la cellule.

Le Tab. 5.2 récapitule les ordres des différents schémas sur cette convergence en maillage. Les ordres sont calculés comme la moyenne des pentes entre chaque point de la Fig. 5.1. La première remarque est que tous les schémas respectent au moins les ordres trouvés théoriquement. Les ordres des schémas sont similaires à ceux de la théorie entre les maillages M1 et M2 et des ordres supérieurs apparaissent entre les maillages M2 et M3 puis M3 et M4. Ce phénomène n'apparaît pas pour le schéma dont la solution initiale est fixée par les valeurs au centre des cellules.

Schéma	Ordre
Schéma 3	3.25808
Schéma 4A	4.88759
Schéma 4B	4.68742
Schéma 5	5.12794
Schéma 5 Cell-Center	4.07428

TABLE 5.2: Ordre réel des schémas sur hexaèdres réguliers

L'analyse de la convergence en maillage a permis de valider les ordres des différents schémas sur des hexaèdres réguliers. Pour confirmer le bon comportement des schémas, il faut comparer les solutions obtenues au bout d'un tour de vortex sur les différents maillages. Deux variables

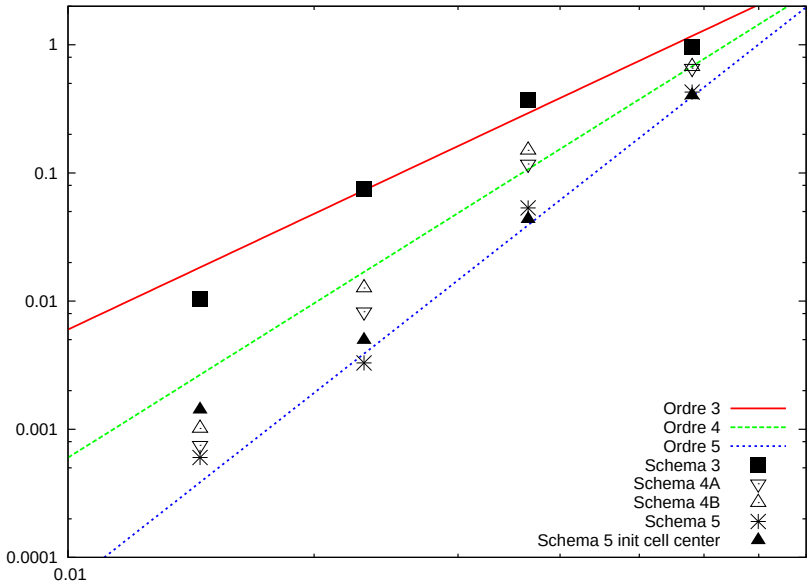


FIGURE 5.1: Courbe de convergence des différents schémas

vont être analysées, la composante de vitesse suivant la direction y et la pression. Ces variables vont être tracées sur une isoligne au milieu du domaine à $y = 0.05$ constant.

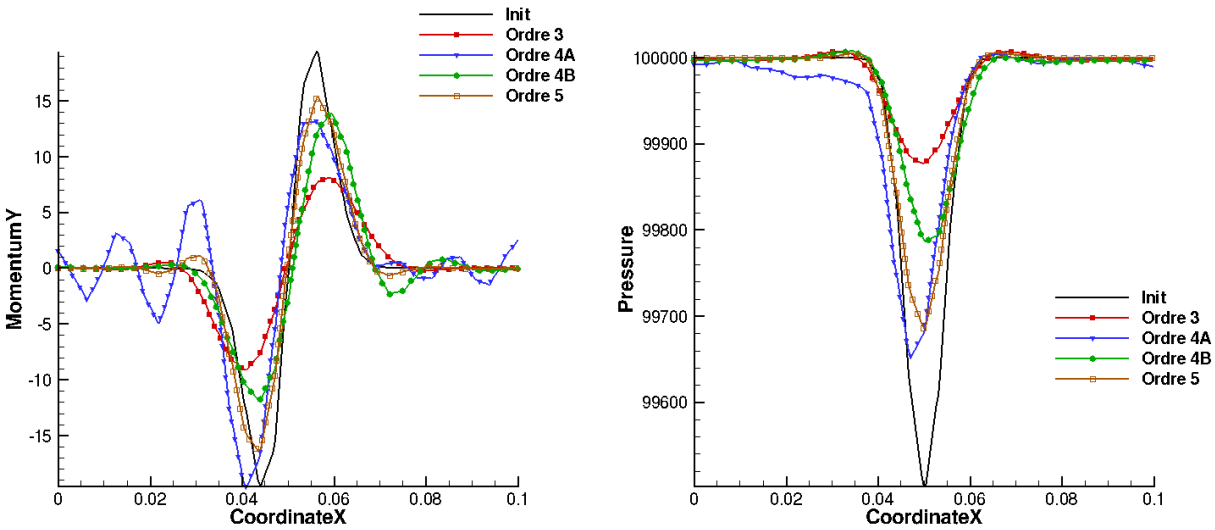


FIGURE 5.2: Vitesse en y et pression après un tour sur le maillage M1

La Fig. 5.2 présente les résultats des différents schémas sur le maillage M1 au bout d'un tour. Aucun des schémas n'arrive à conserver la solution initiale correctement, bien que plus on augmente l'ordre plus on se rapproche de la solution attendue. Le fait qu'on ne reproduise

pas la solution initiale sur ce maillage paraît normal. En effet, il y a seulement 32 cellules dans chaque direction et donc moins de 5 points pour discrétiser le vortex. Cette discrétisation n'est pas suffisante quelque soit le schéma numérique choisi.

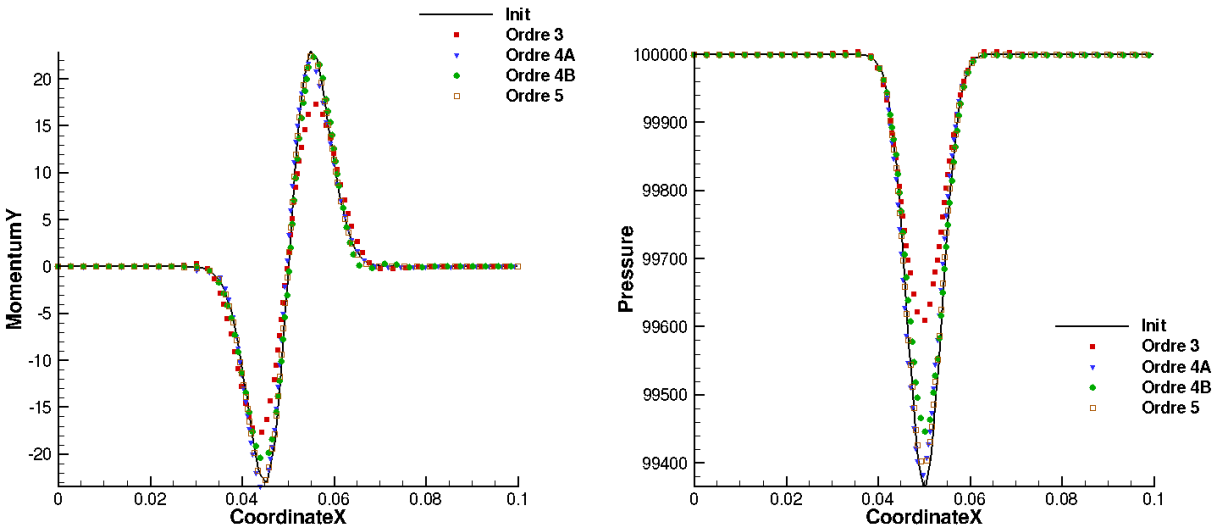


FIGURE 5.3: Vitesse en y et pression après un tour sur le maillage M2

La Fig. 5.3 présente des résultats plus convenables sur le maillage M2. Seuls les schémas d'ordre 3 et d'ordre 4B montrent un peu de dissipation.

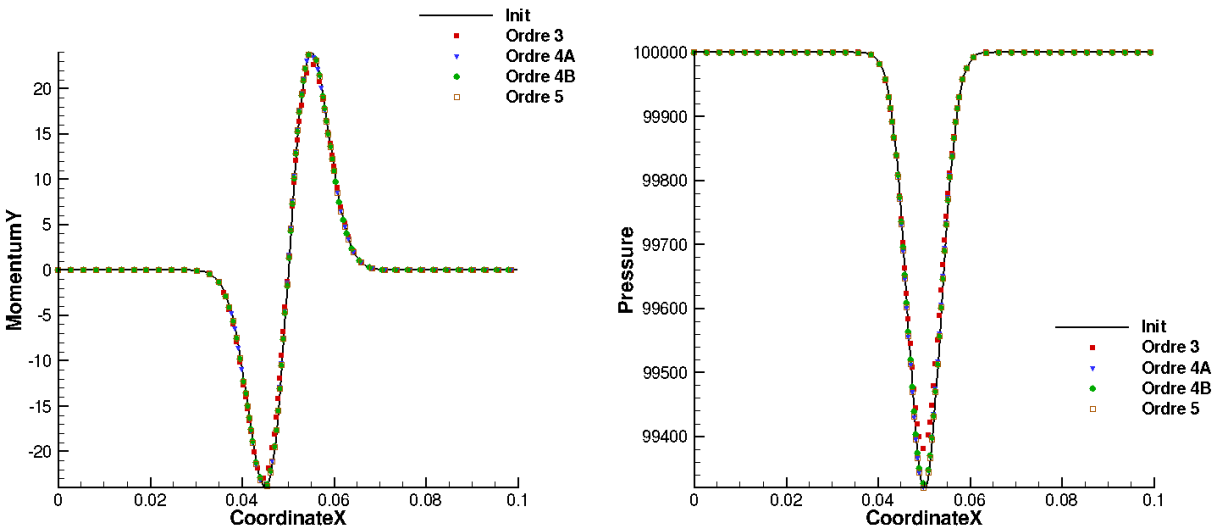


FIGURE 5.4: Vitesse en y et pression après un tour sur le maillage M3

La Fig. 5.4 montre les résultats sur le maillage M3, ceux-ci sont très similaires à la solution initiale. Seule la solution du schéma d'ordre 3 dissipe légèrement la pression dans le domaine.

Les résultats obtenus sur le maillage M4 au bout d'un tour de convection ne sont pas présentés ici car tous les schémas reproduisent correctement la solution.

Il faut maintenant étudier les solutions obtenues après 30 tours du vortex pour tous les schémas. Étant donné la solution au bout d'un tour sur le maillage M1, les résultats après 30 tours ne seront pas présentés sur ce maillage.

La Fig. 5.5 représente les courbes en vitesse en y et en pression obtenues par les différents schémas au bout de 30 tours de convection sur le maillage M2. Il est clair que tous les schémas n'arrivent pas à conserver correctement le vortex pendant si longtemps. Les courbes de la vitesse en y montrent l'apparition de dispersion et de dissipation des différents schémas. Il est tout de même possible de tirer quelques conclusions. Tout d'abord, il est normal de voir que le pic de pression n'est pas correctement reproduit par les 4 schémas. Et de plus, le schéma d'ordre 3 est celui qui dissipe le plus et le schéma d'ordre 5 est celui qui disperse le moins des 4 schémas. Finalement, le maillage n'est clairement pas suffisament raffiné pour conserver le vortex correctement.

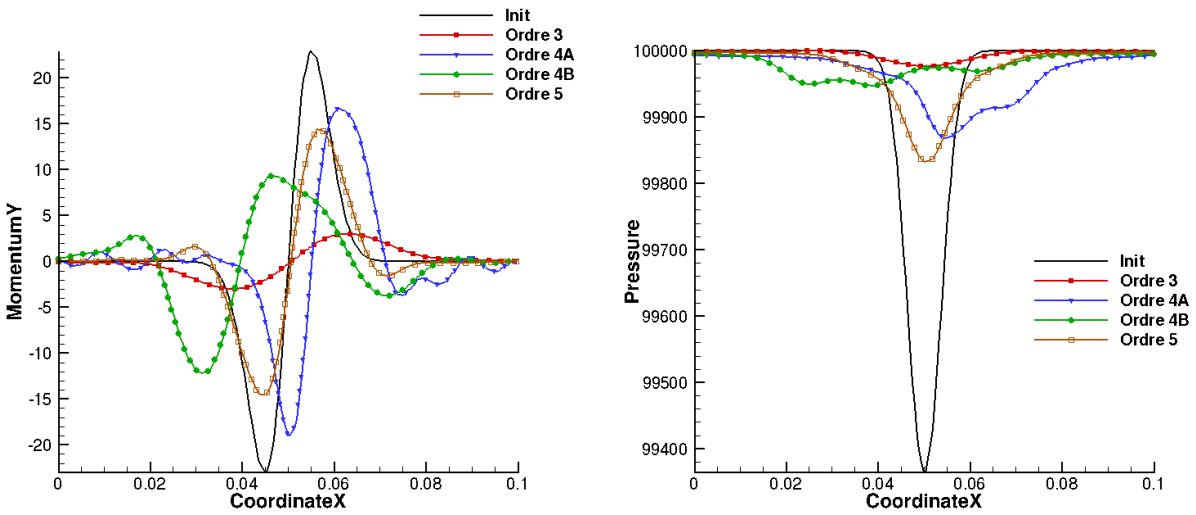


FIGURE 5.5: Vitesse en y et pression après 30 tours sur le maillage M2

La Fig. 5.6 représente les courbes en vitesse en y et en pression obtenues par les différents schémas au bout de 30 tours de convection sur le maillage M3. Sur ce type de maillage, les solutions sont nettement meilleures que précédemment. Seul le schéma d'ordre 3 présente une forte dissipation sur la vitesse et donc sur la pression. Le schéma d'ordre 4A est le schéma qui reproduit le mieux les courbes de vitesse et de pression. Tandis que le schéma d'ordre 4B semble être légérement dissipé et dispersé par rapport à la solution initiale. Finalement, le schéma d'ordre 5 présente une très légère dissipation en vitesse et en pression.

La Fig. 5.7 représente les courbes en vitesse en y et en pression obtenues par les différents schémas au bout de 30 tours de convection sur le maillage M4. Ce maillage est le plus raffiné et cela se voit sur les résultats obtenus. Les schémas 4A, 4B et 5 reproduisent exactement le vortex au bout de 30 tours de convection. Seul le schéma d'ordre 3 fait apparaître de la dissipation mais

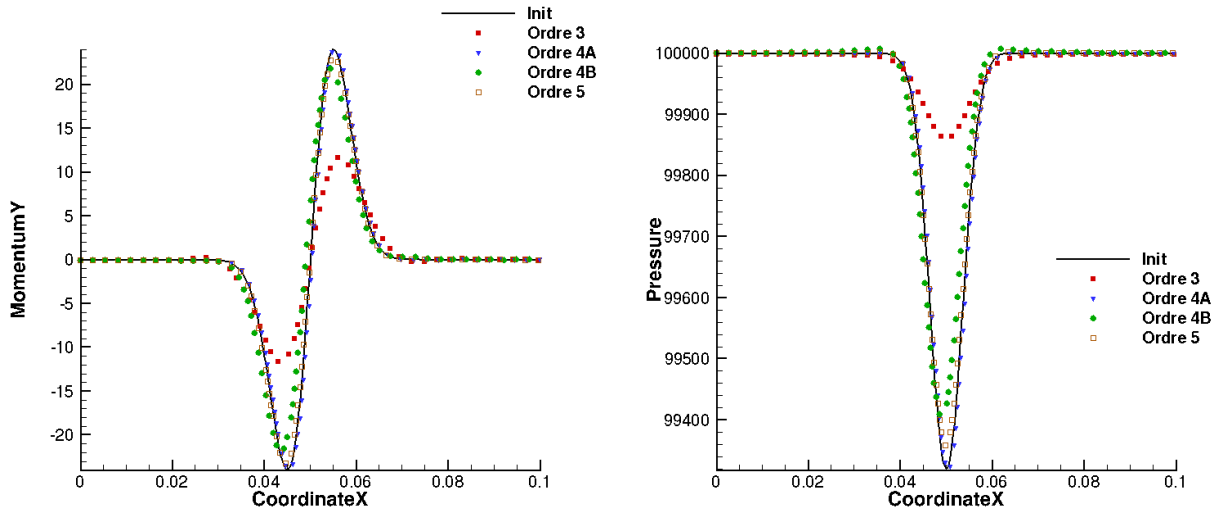


FIGURE 5.6: Vitesse en y et pression après 30 tours sur le maillage M3

tout de même bien moindre que sur le maillage M3.

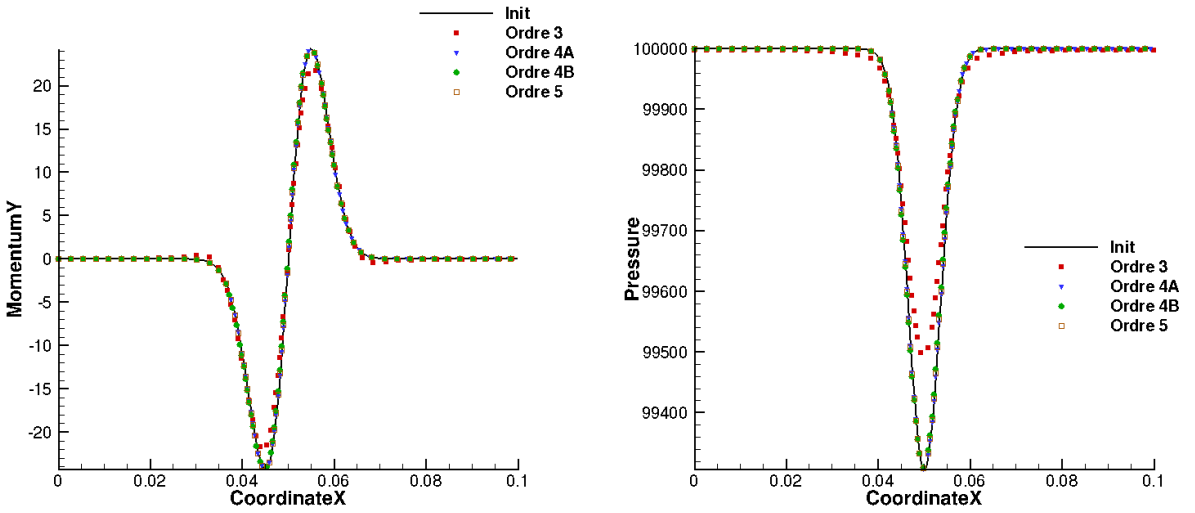


FIGURE 5.7: Vitesse en y et pression après 30 tours sur le maillage M4

En conclusion sur les maillages hexaédriques, les ordres obtenus théoriquement ont été retrouvés en pratique. Les solutions obtenues sont en accord avec les ordres des différents schémas, les schémas d'ordre plus élevé seront toujours plus précis que ceux d'un ordre inférieur. Si un schéma devait être retenu, le schéma d'ordre 5 serait celui sélectionné pour des calculs sur des hexaèdres. Ce schéma présente peu d'effets de dispersion et de dissipation tout en ayant une précision importante.

Maillage	Nombre de cellules	Distance h
M1	13060	0.04246
M2	31200	0.03176
M3	53870	0.02648
M4	215990	0.01667

TABLE 5.3: Nombre de cellules et distance caractérique des différents maillages triangulaires

5.5 Validation sur triangles/prismes

De la même manière que sur les hexaèdres, une étude de convergence en maillage peut-être réalisée sur les triangles/prismes. Des simulations sont réalisées sur quatre maillages différents, successivement raffinés. Le domaine est composé de 5 rangées de prismes dans la direction z. La Fig. 5.8 présente le maillage M1 composé de 13060 cellules.

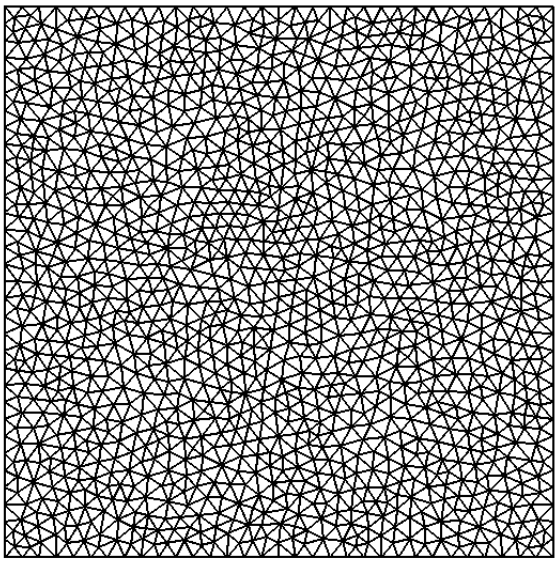


FIGURE 5.8: Maillage M1 composé de triangles

Le Tab. 5.3 présente les données de chaque maillage.

Les calculs sont initialisés de la même façon que pour les maillages hexaédriques, le champ imposé au centre de la cellule correspond à la moyenne sur tout l'élément. Les deux schémas trouvés théoriquement sur triangles équilatéraux sont testés. La Fig. 5.9 présente les courbes obtenues pour les deux schémas sur les 4 maillages de triangles. Le Tab. 5.4 donne les valeurs numériques des pentes obtenues des deux schémas obtenus théoriquement dans Tab. 4.2. Il apparaît donc que les schémas numériques créés respectent les ordres obtenus théoriquement.

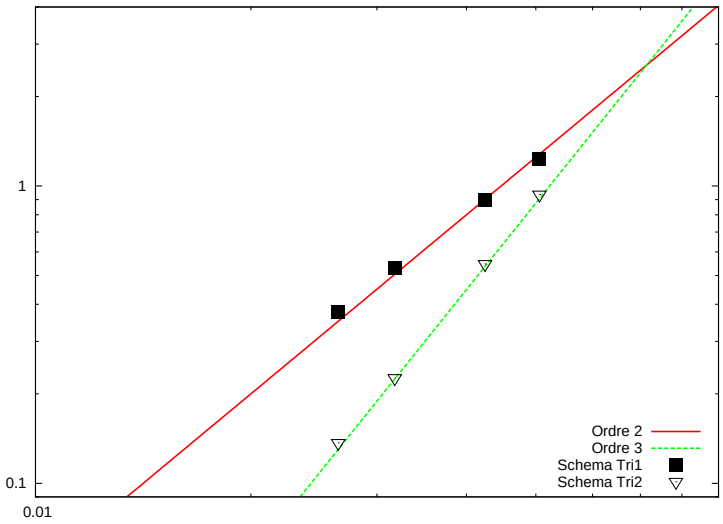


FIGURE 5.9: Courbes de convergence sur les maillages de triangles/prismes

Schéma	Ordre
Tri1	1.827
Tri2	2.957

TABLE 5.4: Ordre réel des schémas sur triangles

Il est maintenant important de comparer les solutions obtenues au bout d'un tour de vortex par rapport à la solution initiale pour étudier leur comportement sur les maillages de triangles. La Fig. 5.10 représente la vitesse dans la direction y et la pression sur les différents maillages avec le schéma d'ordre 2. Que ce soit sur la vitesse ou la pression, les champs sont largement dissipés par rapport à la solution initiale. Plus le maillage est fin et moins la dissipation est importante. De plus, le schéma ne disperse pas car les extrema des solutions obtenues se situent toujours aux extrema de la solution initiale.

La Fig. 5.11 représente la vitesse dans la direction y et la pression sur les différents maillages avec le schéma d'ordre 3. Pour ce schéma, le raffinement du maillage conduit le schéma à surestimer la vitesse et la pression par rapport à la solution initiale. Le dépassement de la solution initiale se fait dès le maillage M3. Le dépassement est très faible sur la vitesse et de l'ordre de 90 Pa sur la pression pour le maillage M4. De plus, des légères oscillations inférieures à 40 Pa apparaîssent sur les maillages M1, M2 et M3.

En conclusion sur les deux schémas pour les triangles, malgré leur ordre qui concorde avec la théorie, ils n'arrivent pas à reproduire la solution initiale de manière identique. La raison la plus évidente pour expliquer ces résultats est le fait d'utiliser des coefficients constants pour l'expression des pentes extrapolées du schéma. Ces coefficients ont été calculés manuellement pour des triangles équilatéraux et ne sont donc pas exacts pour des triangles quelconques.

L'utilisation des coefficients constants apporte nécessairement une erreur sur chaque calcul de flux, étant donné que les maillages ne sont pas composés uniquement de triangles équilatéraux. Les erreurs induites ont donc deux comportements sur les deux schémas proposés. Sur le schéma

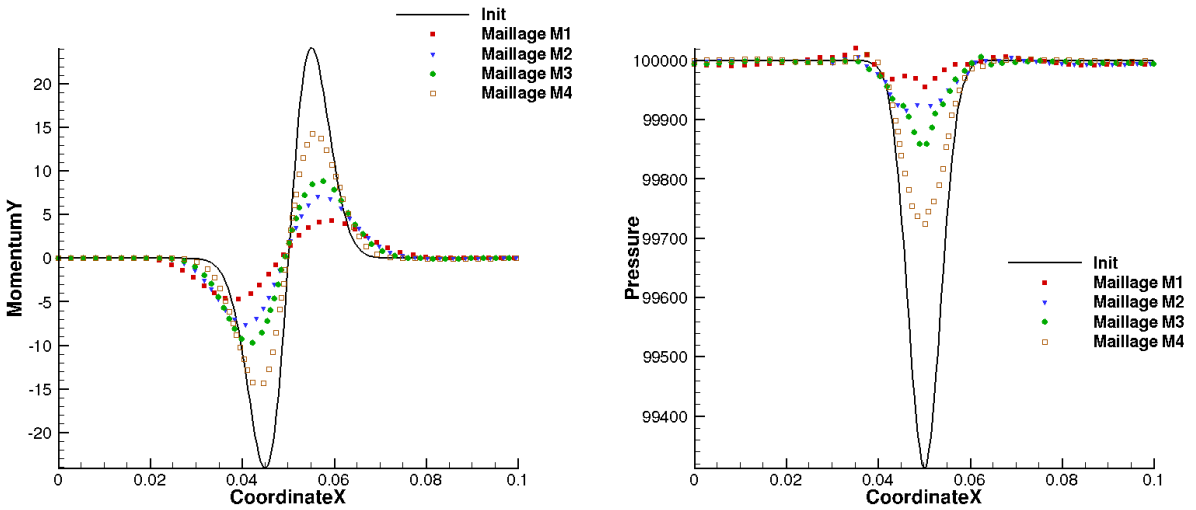


FIGURE 5.10: Vitesse en y et pression après 1 tour sur les différents maillages avec le schéma d'ordre 2

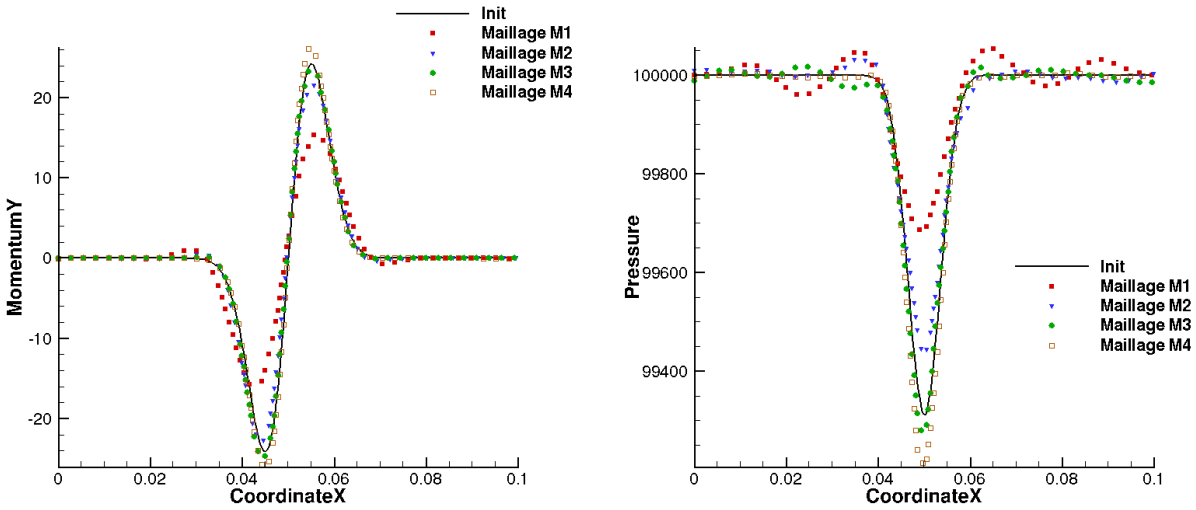


FIGURE 5.11: Vitesse en y et pression après 1 tour sur les différents maillages avec le schéma d'ordre 3

d'ordre 2, les erreurs vont provoquer une dissipation très importante des phénomènes physiques. Au contraire pour le schéma d'ordre 3, les erreurs semblent s'accumuler (ceci est probablement dû à la meilleure précision du schéma) et ont tendance à surestimer la solution initiale.

À ce stade, plusieurs pistes sont à suivre pour améliorer le comportement de ces schémas. La première piste serait d'observer leurs comportements sur des maillages beaucoup plus réguliers pour constater que l'erreur provient bien des coefficients constants. La solution envisagée pour la suite est tout de même de modifier ces coefficients en fonction de la forme du stencil et des

éléments qui le compose.

La solution des coefficients variables permettrait de résoudre les problèmes de régularité de maillages et également de permettre de traiter des maillages non-structurés multi-éléments. Cette solution se fait en pré-traitement du calcul et nécessite juste le stockage de 3 rééls par face pour la totalité du calcul.

5.6 Conclusion

En conclusion sur la partie applicative, les résultats obtenus ont permis de valider la théorie sur ces schémas. Les ordres des schémas ont bien été retrouvés pour des maillages hexaédriques et des maillages de triangles/prismes. Les valeurs des poids des schémas sont donc validées par ce cas test. Les solutions obtenues sur les maillages hexaédriques réguliers confirment un bon comportement des différents schémas sur des maillages réguliers. Pour les solutions obtenues sur les maillages triangles/prismes, le comportement des schémas est différent et dû à la non-régularité du maillage.

Chapitre 6

Conclusions et perspectives

6.1 Conclusions

Ces travaux de thèse avaient pour but de mettre en place tous les ingrédients numériques pour réaliser des Simulations aux Grandes Échellles sur des maillages non-structurés avec le code numérique *elsA*. Les impératifs d'applications industrielles ont fixé le choix de développer un schéma numérique d'ordre élevé pour propager les informations sur de longues distances. Une étude approfondie a donc été réalisée sur les différentes manières d'obtenir un schéma d'ordre élevé.

La bibliographie sur les schémas numérique d'ordre élevé s'est accompagnée d'une bibliographie sur les méthodes numériques permettant de calculer un gradient. En effet, les parties convective et diffusive des équations de Navier-Stokes étant fortement liées, la bibliographie devait regrouper ces deux thèmes. La bibliographie sur les méthodes de calcul de gradient a permis de déterminer les approches les plus intéressantes et utilisables dans un contexte non-structuré pour le code *elsA*. L'étude des différents schémas numériques a été réalisée pour recenser toutes les méthodes numériques, quelque soit leur formalisme, qui permettent d'atteindre un ordre élevé.

Parmi tous les schémas numériques d'ordre élevé, il a été nécessaire de sélectionner une famille de schémas en accord avec les contraintes imposées par le code *elsA* et par les applications désirées. Le schéma idéal devait respecter les conditions suivantes :

- ordre élevé : un schéma d'ordre élevé permet la propagation d'information sur de longues distances car son comportement est meilleur que sa contrepartie de bas-ordre,
- formalisme Volumes Finis : le formalisme est en accord avec celui de la partie structurée du code et c'est nécessaire pour simplifier les échanges aux interfaces hybrides entre blocs structurés et non-structurés,
- approche centrée cellule : les flux seront toujours calculés aux interfaces du maillage,
- compatibilité avec les éléments standards canoniques : utilisable sur prismes, tétraèdres, pyramides et hexaèdres,
- molécule de points compacte : c'est un point clé pour minimiser les échanges dans un environnement massivement parallèle.

Toutes ces conditions ont entraîné le choix d'une approche directionnelle pour le développement d'un nouveau schéma numérique.

La base de l'approche directionnelle est d'utiliser des gradients pour compacter l'information. Il a donc été important de se baser sur la bibliographie des méthodes de calcul des gradients pour développer un nouveau gradient utilisable à la fois dans la partie diffusive et convective des équations de Navier-Stokes sur des maillages non-structurés multi-éléments. C'est dans ce but que le gradient UIG a été développé et testé. Les résultats obtenus pour ce gradient ont permis de mettre en évidence son bon comportement et une précision correcte sur des maillages multi-éléments réguliers. Ces conclusions permettent de valider son utilisation pour des calculs LES étant donné que les maillages doivent être isotropes.

Le développement d'une nouvelle famille de schémas numériques a donc été mis en place avec l'utilisation de deux gradients différents, le gradient Green-Gauss au centre des cellules et le gradient UIG aux interfaces. Cette famille de schémas se base sur un stencil à 4 cellules, deux cellules de chaque côté de l'interface. Il est possible de faire intervenir 7 gradients différents sur cette molécule de points, 4 gradients GG et 3 gradients UIG. L'étude théorique a montré que plusieurs schémas pouvaient être créés, allant de l'ordre 3 à 6 sur des hexaèdres réguliers et de l'ordre 2 à 3 sur des triangles équilatéraux. L'analyse fréquentielle permet de valider le comportement spectral des ces schémas. Un premier cas d'advection 1D a permis de valider rapidemment le bon fonctionnement et la stabilité de ces schémas numériques.

L'application de ces schémas a ensuite été étendue à un cas de convection pure multidimensionnel. L'implémentation du gradient UIG et de la famille de schémas numériques en 3D a nécessité un travail important de codage. Le cas test du vortex isentropique permet de tester de manière sure les différents schémas numériques. Les conclusions sont en accord avec la théorie, les ordres des différents schémas sont bien retrouvés sur les hexaèdres réguliers et sur les triangles. La solution est correctement conservée sur les maillages les plus fins pendant plusieurs temps convectif. Cela permet de déduire que ces schémas numériques seront valides pour des calculs LES où les maillages seront nécessairement fins et isotropes.

Ces travaux sont donc une première étape de la mise en place de nouveaux schémas numériques pour un code industriel. La création et les premiers tests ont permis de déterminer la faisabilité et le bon fonctionnement de ces nouvelles méthodes.

6.2 Perspectives

La mise en place des schémas numériques étant achévée, de nombreux points restent à traiter pour s'assurer du comportement des schémas pour des utilisations plus complexes.

Tout d'abord, il n'a pas été possible de traiter un maillage totalement non-structuré multi-éléments dans le temps imparti. Ceci devrait être la première tâche à effectuer pour assurer la validité de ces schémas. Actuellement, les schémas numériques développés utilisent des coefficients constants sur tout le domaine de calcul. Le traitement des maillages non-structurés multi-éléments nécessitera une phase de pré-traitement afin de déterminer et fixer les poids du schéma numérique pour chaque interface en fonction de la molécule de points. Trois réels devront donc être stockés pour chaque interface. Ce pré-traitement permettra de s'affranchir du type d'élément et également de la régularité du maillage.

Une autre perspective est le couplage entre les conditions aux limites et le schéma numérique. En pratique, le couplage entre les conditions aux limites caractéristiques de Poinsot et Lele [109] ne devrait pas poser de problème particulier pour une utilisation en LES. En effet, ces conditions aux limites servent à définir un flux par interface qui vient remplacer celui issu du schéma numérique. Ces conditions sont déjà implantées dans la partie structurée du code *elsA* et leur extension au non structuré ne devrait pas demander beaucoup de développements. Ce point reste toutefois

à vérifier.

Une fois ces deux premiers points traités, il sera possible d'effectuer des cas tests plus complexes comme les cas de Turbulence Homogène Isotrope et de canal turbulent sur maillage non structuré. Ces cas permettront de valider l'accord entre les schémas numériques et la Simulation aux Grandes Échelles.

Une dernière perspective liée au schéma numérique porte sur la capture de choc. Les écoulements en turbomachines présentent généralement des chocs qu'il faut pouvoir capturer. Là, il semble que notre approche, basée sur une adaptation de la méthode MUSCL de van Leer, présente un avantage indéniable. En effet, notre formalisme ressemble beaucoup à l'extension MUSCL dans laquelle une reconstruction linéaire permet de retrouver de nouveaux états à l'interface. En incluant un senseur de choc, comme celui de Ducros [110] ou celui de Bogey-de Cacqueray-Bailly [111], il est possible de déterminer pour quelle cellules / faces il sera nécessaire de remplacer le schéma que nous avons proposé par une approche MUSCL classique. Bien que ce travail ne soit pas effectué, il ne semble pas y avoir, au premier abord, d'incompatibilité notable pour implanter la capture de choc.

Enfin, nous rappelons que le contexte de cette étude concerne la LES sur maillage hybride contenant des blocs structurés et non structurés. Les schémas numériques utilisés en LES / aéroacoustique et développés au CERFACS sont basés sur une adaptation aux volumes finis des schémas compacts de Lele écrits en différences finies. Le schéma obtenu est d'ordre 6. Il faut arriver à faire communiquer 2 schémas numériques différents au travers d'une interface hybride de couplage. Deux cas peuvent être envisagés.

Dans le premier cas, les blocs structurés et non structurés sont raccordés par une interface à points coïncidents. On peut envisager de traiter l'interface en utilisant une approche décentrée de part et d'autre de l'interface. Il faut tout de même s'assurer que le couplage des schémas numériques ne produira pas de réflexion d'ondes au niveau de l'interface hybride.

Dans le second cas, les blocs structurés et non structurés sont raccordés par une interface à points non-coïncidents. Lorsque les raccords sont à points non-coïncidents, le formalisme volumes finis induit une technique naturelle de calcul des flux : un flux numérique est calculé sur chaque facette obtenue par intersection des discrétisations surfaciques différentes issues de chaque côté de l'interface. Un assemblage différent de ces flux numériques permet enfin de garantir la conservativité du traitement. Il y a donc ici plus de degrés de liberté dans le calcul des échanges à travers une interface hybride non coïncidente.
1. Comme dans le cas à point coïncident, on peut commencer par déterminer une extrapolation des quantités sur les faces du maillage, puis utiliser les champs extrapolés à l'interface pour construire les champs aux centres des facettes pour enfin calculer des flux.
2. On peut utiliser une extrapolation décentrée multidimensionnelle pour déterminer des champs aux centres des facettes définissant le raccord non-coïncident, puis calculer le flux sur chaque facette.
3. ...
L'avantage indéniable de cette approche par interface non-coïncidente concerne bien entendu le moindre niveau de contraintes à appliquer lors de la génération des maillages.

Ces travaux d'extension aux maillages hybrides font également partie des activités menées au CERFACS dans le cadre du traitement par couplage, que ce soit pour des codes de calcul, des méthodes numériques différentes ou des physiques différentes.

Références

[1] P. SAGAUT : *Large Eddy Simulation for incompressible ows*. Springer, 2002. cited p. 3

[2] Stephen B. POPE : *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000. cited p. 3

[3] Bastien CARUELLE : *Simulations d'écoulements instationnaires turbulents en aérodynamique : Application à la simulation du phénomène de tremblement*. Thèse de doctorat, ENSICA, Toulouse, 2000. cited p. 3

[4] N. GOURDAIN, L. GICQUEL, G. STAFFELBACH, O. VERMOREL, F. DUCHAINE, J.-F. BOUSSUGE et T. POINSOT : High performance parallel computing of flows in complex geometries - Part 2 : Applications. *Computational Science and Discovery 2*, 015004:28, 2009. cited p. 4

[5] N. GOURDAIN, L. GICQUEL, M. MONTAGNAC, O. VERMOREL, M. GAZAIX, G. STAFFELBACH, M. GARCIA, J.-F. BOUSSUGE et T. POINSOT : High performance parallel computing of flows in complex geometries - Part 1 : Methods. *Computational Science and Discovery 2*, 015003:26, 2009. cited p. 4

[6] F. WLASSOW : *Analyse instationnaire aérothermique d'un étage de turbine avec transport de points chauds*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Lyon, 2012. cited p. 5

[7] Numeca's Flow Integrated Environment. User Manual – Fine Version 6. Rapport technique, Numeca, September 2006. cited p. 6

[8] A. FOSSO-POUANGUÉ, H. DENIAU, N. LAMARQUE et T. J. POINSOT : Comparison of outflow boundary conditions for subsonic aeroacoustic simulations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 68(10):1207–1233, 2012. cited p. 9, 42

[9] A. FOSSO-POUANGUÉ, M. SANJOSÉ, S. MOREAU, G. DAVILLER et H. DENIAU : Subsonic jet noise simulations using both structured and unstructured grids. *AIAA Journal*, 53:55–69, 2015. cited p. 9, 42

[10] A. FOSSO-POUANGUÉ, H. DENIAU, F. SICOT et P. SAGAUT : Curvilinear finite volume schemes using high order compact interpolation. *Journal of Computational Physics*, 229: 5090–5122, 2010. cited p. 9, 42

[11] Theoretical manual elsa. Onera, /ELSA/ xxxxxxx, Onera, 1998. cited p. 9, 55

[12] G. PUIGT, M. GAZAIX, M. MONTAGNAC, M.-C. LE PAPE, M. DE LA LLAVE PLATA, C. MARMIGNON, J.-F. BOUSSUGE et V. COUAILLIER : Development of a new hybrid compressible solver inside the CFD *elsA* software. *In 20th Computational Fluid Dynamics Conference, AIAA Paper, 2011-3379*, 2011. cited p. 10

[13] M. DE LA LLAVE PLATA, V. COUAILLIER, C. MARMIGNON, M.-C. LE PAPE, M. GAZAIX et B. CANTALOUBE : Further developments in the multiblock hybrid CFD solver *elsA*-H. *In 50TH AIAA Aerospace Sciences meeting including the new horizons forum and aerospace exposition, AIAA Paper, 2012-1112*, 2012. cited p. 10

[14] C. MARMIGNON, B. CANTALOUBE, M-C. LE PAPE, M. DE LA LLAVE PLATA, V. COUAILLIER et M. GAZAIX : Development of an agglomeration multigrid technique int he hybrid solver *elsA*-h. *In Seventh International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD7), Paper ICCFD7-1603*, 2012. cited p. 10

[15] M. DE LA LLAVE PLATA, V. COUAILLIER, M.-C. LE PAPE, C. MARMIGNON et M. GAZAIX : *elsA*-Hybrid : An all-in-one structured/unstructured solver for the simulation of internal and external flows. application to turbomachinery. *In 4th European Conference for Aerospace Sciences*, 2011. cited p. 10

[16] S. CANDEL : *Mécanique des uides*. Dunod, 2005. cited p. 14

[17] G. K. BATCHELOR : *An introduction in uid dynamics*. Cambridge Universtiy Press, 2000. cited p. 14

[18] M. GALLE : Unstructured viscous flow solution using adaptive hybrid grids. *In Proc. NASA Conference Publication 3316, ICASE/LaRC Workshop on Adaptive Grid Methods*, 1995. cited p. 17

[19] P.I. CRUMPTON, P. MOINIER et M.B. GILES : An unstructured algorithm for high Reynolds number flows on highly stretched grids. *In in Proceedings of the 10th International Conference on Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flows*, pages 561–572, 1997. cited p. 18

[20] WJ. COIRIER : *An adaptively-re ned, cartesian, cell-based scheme for the Euler and Navier-Stokes equations*. Thèse de doctorat, University of Michigan, Juin 1994. cited p. 18

[21] Y. COUDIÈRE, J.-P. VILA et P. VILLEDIEU : Convergence of a finite volume scheme for a diffusion convection problem. *In Finite Volumes for Complex Applications*. In F. Benkhaldoum and R. Vilsmeier, 1996. cited p. 19

[22] C. LE POTIER : A finite volume method for the approximation of highly anisotropic diffusion operators on unstructured meshes. *In Finite Volumes for Complex Applications IV*, 2005. cited p. 19

[23] R. EYMARD, T. GALLOUET et R. HERBIN : A cell centered finite volume approximation for second order spatial derivative operators with full matrix on unstructured meshes in any space dimension. *Journal of Numerical Analysis*, 26:326–353, 2006. cited p. 20

[24] D.J. MAVRIPLIS : Revisiting the least-squares procedure for gradient reconstruction on unstructured meshes. *AIAA Paper*, 2003-3986, 2003. cited p. 20

[25] E. SHIMA, K. KITAMURA et T. HAGA : Green-Gauss/weighted-least-squares hybrid gradient reconstruction for arbitrary polyhedra unstructured grids. *AIAA Journal*, 51(11): 2740–2747, 2013. cited p. 20

[26] F. TOUTOUNIAN et A. ATAEI : A new method for computing Moore–Penrose inverse matrices. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 228(1):412–417, 2009. cited p. 22

[27] A. JALALI, M. SHARBATDAR et C. OLLIVIER-GOOCH : Accuracy analysis of unstructured finite volume discretization schemes for diffusive fluxes. *Computers & Fluids*, 101:220–232, 2014. cited p. 22

[28] C. FARHAT, L. FEZOUI et S. LANTERI : Two-dimensional viscous flow computations on the connecti on machine : Unstructured meshes, upwind schemes and massively parallel computations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 102:61–88, 1993. cited p. 22

[29] G. PUIGT, V. AUFFRAY et J.D. MÜLLER : Discretisation of diffusive fluxes on hybrid grids. *Journal of Computational Physics*, 229(5):1425–1447, 2010. cited p. 22

[30] B. DISKIN, J.L. THOMAS, E.J. NIELSEN, H. NISHIKAWA et J. A. WHITE : Comparison of node-centered and cell-centered unstructured finite-volumes discretizations : Viscous fluxes. *AIAA Journal*, 48:1326–1338, 2010. cited p. 22

[31] L. FLANDRIN, P. CHARRIER et B. DUBROCA : A robust finite-volume method for computations of two-dimensional unstructured hybrid meshes. *Computational Fluid Dynamics*, S. Wagner, E.H. Hirschel, J. Priaux, R. Riva (Eds.):301–308, 1994. cited p. 22

[32] L. FLANDRIN : *Cell-centered methods for Euler and Navier-Stokes computations on unstructured meshes*. Thèse de doctorat, Université de Bordeaux I, 1995. cited p. 22

[33] François DUBOIS : *Lemmes Finis pour la Dynamique des gaz*. hal-00733937, 2012. cited p. 22

[34] Z. J. WANG : High-order methods for the Euler and Navier-Stokes equations on unstructured grids. *Progress in Aerospace Sciences*, 43:1–41, 2007. cited p. 25

[35] T. J. BARTH et H. DECONINCK : *High-order methods for computational physics*. Springer, 1999. cited p. 25

[36] M. O. DEVILLE, P. F. FISCHER et E. H. MUND : *High-order methods for incompressible ows*. Cambridge University Press, 2002. cited p. 25

[37] G.E. KARNIADAKIS et S. J. SHERWIN : *Spectral/hp element methods for computational uid dynamics*. Oxford Scientific Publications, 2005. cited p. 25, 31

[38] B. COCKBURN, G. E. KARNIADAKIS et C. W. SHU : *Discontinuous Galerkin methods : Theory, computation and applications*. Springer, 2000. cited p. 25

[39] J. S. HESTHAVEN et T. WARBURTON : *Nodal Discontinuous Galerkin Methods - Algorithms, Analysis and Applications*. Springer, 2008. cited p. 25

[40] S. J. SHERWIN, T. C.E. WARBURTON et G. E. KARNIADAKIS : Spectral/hp methods for elliptic problems on hybrid grids. *Contempory Mathematics*, 218:191–216, 1998. cited p. 25, 31

[41] S.J. SHERWIN et M. AINSWOTH : Unsteady Navier-Stokes solvers using hybrid spectral/hp element methods. *Applied Numerical Mathematics*, 33:357–364, 2000. cited p. 25, 31

[42] S. J. SHERWIN : Dispersion analysis of the continuous and discontinous Galerkin formulations. *In International Symposium on Discontinuous Galerkin Methods*, 1999. cited p. 25, 31

[43] O. COLIN et M. RUDGYARD : Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for LES. *Journal of Computational Physics*, 162:338–371, 2000. cited p. 25, 31

[44] N. LAMARQUE : *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007. cited p. 26, 31

[45] P. ROE : Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 43:357–372, 1981. cited p. 26, 31, 34

[46] R. ABGRALL et T. BARTH : Residual distribution schemes for conservation laws via adaptive quadrature. *SIAM Journal on Scienti c Computing*, 24:732–769, 2003. cited p. 26, 31

[47] N. VILLEDIEU : *High order discretization by residual distribution schemes*. Thèse de doctorat, Von Karman Institute, 2009. cited p. 26, 31

[48] N. VILLEDIEU, T. QUINTINO, M. RICCHIUTO et H. DECONINCK : Third order residual distribution schemes for the Navier–Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 230:4301–4315, 2011. cited p. 26

[49] M. RICCHIUTO et R. ABGRALL : Explicit Runge-Kutta Residual-Distribution schemes for time dependent problems. *Journal of Computational Physics*, 229(16):5653–5691, 2010. cited p. 26

[50] M. RICCHIUTO : An explicit residual based approach for shallow water flows. *Journal of Computational Physics*, 280:306–344, 2015. cited p. 26

[51] E. F. TORO : *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 2009. cited p. 26

[52] A. HARTEN, B. ENGQUIST, S. OSHER et S.R. CHAKRAVARTHY : Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes III. *Journal of Computational Physics*, 72: 231–303, 1987. cited p. 27

[53] L.J. DURLOFSKY, B. ENGQUIST et S. OSHER : Triangle based adaptive stencils for the solution of hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 98:64–73, 1992. cited p. 27, 31

[54] R. ABGRALL : On essentially non-oscillatory schemes on unstructured meshes : analysis and implementation. *ICASE Report*, 92-74, 1992. cited p. 27, 31

[55] C.F. OLLIVIER-GOOCH : Quasi-ENO schemes for unstructured meshes based on unlimited data-dependent least-squares reconstruction. *Journal of Computational Physics*, 133:6–17, 1997. cited p. 27, 31

[56] W.R. WOLF et J.L.F. AZEVEDO : High-order ENO and WENO schemes for unstructured grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 55:917–943, 2007. cited p. 27, 29, 31

[57] P. TSOUTSANIS, V.A. TITAREV et D. DRIKAKIS : WENO schemes on arbitrary mixed-element unstructured meshes in three space dimensions. *Journal of Computational Physics*, 230:1585–1601, 2011. cited p. 27, 29, 31

[58] G.-S. JIANG et C.-W. SHU : Efficient implementation of weighted ENO schemes. *Journal of Computational Physics*, 126:202–228, 1996. cited p. 28, 31

[59] X.D. LIU, S. OSHER et T. CHAN : Weighted essentially non-oscillatory schemes. *Journal of Computational Physics*, 115:200–212, 1994. cited p. 28, 31

[60] C. HU et C.W. SHU : Weighted essentially non-oscillatory schemes on triangular meshes. *Journal of Computational Physics*, 150:97–127, 1999. cited p. 28, 31

[61] Y. LIU et Y.-T. ZHANG : A robust reconstruction for unstructured WENO schemes. *Journal of Scienti c Computing*, 2012. cited p. 29

[62] L. IVAN et C.P.T. GROTH : High-order solution-adaptive central essentially non-oscillatory (CENO) method for viscous flows. *AIAA*, 367, 2011. cited p. 29, 31

[63] J. C. MANDAL et S. P. RAO : High resolution finite volume computations on unstructured grids using solution dependent weighted least squares gradients. *Computers & Fluids*, 44:23–31, 2011. cited p. 29, 31

[64] G.A. GEROLYMOS et I. VALLET : High-order finite-volume reconstruction on arbitrary unstructured grids. *In 7th International Conference of Computational Fluid Dynamics (ICCFD7)*, 2012. cited p. 29, 31

[65] S. CLAIN, S. DIOT et R. LOUBÈRE : A high-order volume method for systems of conservation laws - Multi-dimensional Optimal Order Detection (MOOD). *Journal of Computational Physics*, 230:4028–4050, 2011. cited p. 29, 31

[66] S. DIOT : *La méthode MOOD - Multi-dimensional Optimal Order Detection - la première approche a posteriori aux méthodes Volumes Finis d'ordre très élevé*. Thèse de doctorat, Univertsité de Toulouse 3 Paul Sabatier, 2012. cited p. 29, 31

[67] S. DIOT, S. CLAIN et R. LOUBÈRE : Improved detection criteria for the Multi-dimensional Optimal Order Detection (MOOD) on unstructured meshes with very high-order polynomials. *Computers and Fluids*, 64:43–63, 2012. cited p. 29, 31

[68] S. DIOT, R. LOUBÈRE et S. CLAIN : The Multi-dimensional Optimal Order Detection method in the three-dimensional case : very high-order finite volume method for hyperbolic systems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 73:3762–392, 2013. cited p. 29, 31

[69] A. N. BROOKS et T. J. R. HUGHES : Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32:199–259, 1982. cited p. 31

[70] W.H. REED et T.R. HILL : Triangular mesh methods for the neutron transport equation. Rapport technique, Los Alamos National Laboratory, New Mexico, USA, 1973. cited p. 31

[71] B. COCKBURN et C.-W. SHU : The Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for conservation laws V : Multidimensional systems. *Journal of Computational Physics*, 141:199–224, 1998. cited p. 31, 36

[72] B. COCKBURN et C.-W. SHU : Runge-Kutta discontinuous Galerkin methods for convection-dominated problems. *Journal of Scienti c Computing*, 16:173–261, 2001. cited p. 31, 36

[73] F. BASSI et S. REBAY : A high-order accurate discontinuous finite element method for the numerical solution of the compressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 131:267–279, 1997. cited p. 31

[74] F. BASSI, A. CRIVELLINI, D.A. Di PIETRO et S. REBAY : A high-order discontinuous Galerkin solver for 3D aerodynamic turbulent flows. *In European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECCOMAS CFD*, 2006. cited p. 31, 36

[75] Z.J. WANG : Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids : Basic formulation. *Journal of Computational Physics*, 178:210–251, 2002. cited p. 32, 36

[76] Z.J. WANG et Y.LIU : Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids II : Extension to two-dimensional scalar equation. *Journal of Computational Physics*, 179:665–697, 2002. cited p. 32

[77] Z.J. WANG, L. ZANG et Y. LIU : Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids IV : Extension to two-dimensional systems. *Journal of Computational Physics*, 194:716–741, 2004. cited p. 32

[78] Y. LIU, M. VINOKUR et Z.J WANG : Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids V : Extension to three-dimensional systems. *Journal of Computational Physics*, 212:454–472, 2006. cited p. 32, 36

[79] O. CHIKHAOUI, J. GRESSIER et G. GRONDIN : Assessment of the Spectral Volume method on inviscid and viscous flow. *In The Sixth International Conference on Computational Fluid Dynamics*, 2010. cited p. 32, 36

[80] O. CHIKHAOUI, J. GRESSIER et G. GRONDIN : Spectral Volume Method : application to Euler equations and performance appraisal. *In Fifth European Conference on Computational Fluid Dynamics*, 2010. cited p. 32, 36

[81] K. VAN DEN ABEELE : *Development of high-order accurate schemes for unstructured grids*. Thèse de doctorat, Vrije Universiteit Brussel, Bruxelles, mai 2009. cited p. 32, 35, 36

[82] V. V. RUSANOV : Calculation of interaction of non-stationary shock waves with obstacles. *Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics USSR*, 1:267–279, 1961. cited p. 34

[83] R. HARRIS, Z.J. WANG et Y. LIU : Efficient quadrature-free high-order spectral volume method on unstructured grids : Theory and 2D implementation. *Journal of Computational Physics*, 227:1620–1642, 2008. cited p. 34

[84] M. PARSANI, K. VAN DEN ABEELE, C. LACOR et E. TURKEL : Implicit LU-SGS time integration algorithm for high-order spectral volume method with p-multigrid strategy. *Journal of Computational Physics*, 229:828–850, 2010. cited p. 34, 36

[85] D.A. KOPRIVA et J.H. KOLIAS : A conservative staggered-grid Chebyshev multidomain method for compressible flows. Rapport technique, ICASE, Report 95-18 and NASA Contracttor Report 195060, 1995. cited p. 34

[86] D.A. KOPRIVA et J.H. KOLIAS : A conservative staggered-grid Chebyshev multidomain method for compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 125:244–261, 1996. cited p. 34, 36

[87] Y. LIU, M. VINOKUR et Z.J. WANG : Spectral difference method for unstructured grids I : Basic formulation. *Journal of Computational Physics*, 216:780–801, 2006. cited p. 34, 36

[88] G. MAY et A. JAMESON : A spectral difference method for the Euler and Navier-Stokes equations on unstructured meshes. *In 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting Exhibit, January 9-12*, 2006. cited p. 35, 36

[89] Y. SUN, Z.J. WANG et Y. LIU : High-order multidomain spectral difference method for the Navier-Stokes equations on unstructured hexaedral grids. *Communications in Computational Physics*, 2:310–333, 2007. cited p. 35

[90] C. LIANG, A. JAMESON et Z.J. WANG : Spectral difference method for compressible flow on unstructured grids with mixed elements. *Journal of Computational Physics*, 228:2847–2858, 2009. cited p. 35, 36

[91] M.L. HU, Z.J. WANG et H. HU : A high-order spectral difference method for unstructured dynamic grids. *Computers & Fluids*, 48:84–97, 2011. cited p. 35

[92] G. LODATO et A. JAMESON : LES modeling with high-order flux reconstruction and spectral difference schemes. *In ICCFD7*, 2012. cited p. 35, 36

[93] H.T. HUYNH : A flux reconstruction approach to high-order schemes including discontinuousGalerkin methods. *In 18th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, 25 - 28 June, Miami, FL, AIAA Paper 2007-4079*, 2007. cited p. 35, 36

[94] Z.J. WANG et H. GAO : A unifying lifting collocation penalty formulation including the discontinuous Galerkin, spectral volume / difference methods for conservation laws on mixed grids. *Journal of Computational Physics*, 228(21):8161–8186, 2009. cited p. 36

[95] P.E. VINCENT, P. CASTONGUAY et A. JAMESON : A new class of high-order energy stable flux reconstruction schemes. *Journal of Scienti c Computing*, 47(1):50–72, 2011. cited p. 36

[96] P. CASTONGUAY, P.E. VINCENT et A. JAMESON : A new class of high-order energy stable flux reconstruction schemes for triangular elements. *Journal of Scienti c Computations*, 51:224–256, 2012. cited p. 36

[97] LM. YU, Z.J. WANG et Y. LIU : On the accuracy and efficiency of discontinuous Galerkin, spectral difference and correction procedure via reconstruction methods. *Journal of Computational Physics*, 259:70–95, 2014. cited p. 36

[98] K. HILLEWAERT : *Development of the discontinuous Galerkin method for high-resolution, large scale CFD and acoustics in industrial geometries*. Thèse de doctorat, Université Catholique de Louvain, 2013. cited p. 36

[99] B. KOOBUS, S. WORNOM, S. CAMARRI, M.V. SALVETTI et A. DERVIEUX : Nonlinear v6 schemes for compressible flow. RR 6433, INRIA, 2008. cited p. 37, 40

[100] I. ABALAKIN, A. DERVIEUX et T. KOZUBSKAYA : A vertex centered high-order MUSCL scheme applying to linearised Euler acoustics. RR 4459, INRIA, 2002. cited p. 37, 40

[101] S. CAMARRI, M.V. SALVETTI, B. KOOBUS et A. DERVIEUX : A low diffusion MUSCL scheme for LES on unstructured grids. RR 4412, INRIA, 2002. cited p. 37, 40

[102] P.-H. COURNÈDE, B. KOOBUS et A. DERVIEUX : Positivity statements for a mixed-element-volume scheme on fixed and moving grids. *Revue Européenne de Mécanique Numérique*, 15 :7-8:767–798, 2006. cited p. 37, 40

[103] Y. KHALIGHI, J. W. NICHOLS, S. K. LELE, F. HAM et P. MOIN : Unstructured large eddy simulation for prediction of noise issued from turbulent jets in various configurations. *In AIAA Aeroacoustics Conference*, 2011. cited p. 37, 39, 40

[104] B.VAN LEER : Towards the ultimate conservative difference scheme.V.A second-order sequel to Godunov's method. *Journal of Computational Physics*, 32:101–136, 1979. cited p. 38, 54

[105] J. BREIL et P.-H. MAIRE : A cell-centered diffusion scheme on two-dimensional unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 224:785–823, 2007. cited p. 52

[106] J. COUSTEIX : *Turbulence et couche limite*. CEPADUES Editions, 1989. cited p. 56

[107] C. BOGEY et C. BAILLY : A family of low dispersive and low dissipative explicit schemes for flow and noise computations. *Journal of Computational Physics*, 194:194–214, 2004. cited p. 76

[108] Z.J. WANG, K. FIDKOSKI, R. ABGRALL, F. BASSI, D. CARAENI, A. CARY, H. DECONINCK, R. HARTMANN, K. HILLEWAERT, H.T. HUYNH, N. KROLL, G. MAY, P.-O. PERSSON, B. van LEER et M. VISBAL : High-Order CFD Methods : Current Status and Perspective. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 72(8):811–845, 2012. cited p. 77

[109] T.J. POINSOT et S. K. LELE : Boudary conditions for direct suimulations of compressible viscous flow. *Journal of Computational Physics*, 101:104–139, 1992. cited p. 89

[110] F. DUCROS, V. FERRAND, F. NICOUD, C. WEBER, D. DARRACQ, C. GACHERIEU et T. POINSOT : Large Eddy Simulation of shock-turbulence interaction. *Journal of Computational Physics*, 152(2):517–549, 1999. cited p. 90

[111] C. BOGEY, N. DE CACQUERAY et C. BAILLY : A shock capturing methodology based on adaptative spatial filtering of high-order non-linear computations. *Journal of Computational Physics*, 228(5):1447–1465, 2009. cited p. 90

ANNEXES

Annexe A

A new cell-centered finite volume method for the discretization of diffusive fluxes on unstructured grids

A new cell-centred finite volume method for the discretisation of diffusive fluxes on unstructured grids

Pierre Cayot[a,b,1], Guillaume Puigt[b,2,*], Jean-François Boussuge[b,2], Pierre Sagaut[c,3]

[a] *Safran Snecma Villaroche, Rond-point René-Ravaud, 77550 Moissy-Cramayel, France*
[b] *CERFACS, CFD Team, 42 avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 1, France*
[c] *Université Aix Marseille, Laboratoire M2P2 UMR7340, Centrale Marseille, 38 rue Joliot-Curie, 13451 Marseille, France*

Abstract

This paper addresses specifically the computation of diffusion terms in a cell-centred finite volume solver. After a review of the main techniques available, a new way to compute gradients directly on the interface is introduced and its numerical properties analysed. In the last part of the paper, computations are performed to compare the accuracy and efficiency of all methods. For Dirichlet boundary conditions, it is proved that a zeroth-order extrapolation of the gradient on the boundary can lead to inaccurate results and second order of accuracy is lost. In contrary, the use of the proposed gradient technique enables to recover a second-order accurate solution. Finally, the new interface gradient scheme is applied to the Navier-Stokes equations.

1. Introduction

During the last decades, many research activities in CFD were devoted to enabling industrial simulations of compressible flows in a cell-centred finite volume framework with structured grids using body-fitted meshes. Structured grids enable to capture the anisotropy of boundary layer regions, where high-aspect ratio cells are required and structured numerical techniques help

*Corresponding author
Email addresses: pierre.cayot@cerfacs.fr (Pierre Cayot), guillaume.puigt@cerfacs.fr (Guillaume Puigt), boussuge@cerfacs.fr (Jean-François Boussuge), pierre.sagaut@univ-amu.fr (Pierre Sagaut)
[1] Ph.D. Student
[2] Senior Researcher
[3] Professor

to improve performance and robustness (for example implicit smoothing operator, or the structured way of coarsening meshes for the multigrid procedure). One time-consuming step for structured grids remains the generation of the multiblock mesh topology. Even if some tools are dedicated to certain kind of applications such as Autogrid for turbomachinery[1], the definition of a general topology over a complex geometry is still the work of experts. Moreover, the time to spend on mesh generation being quite limited, industries were looking for techniques to simplify the process. Among them, one can consider the overlapping grid technique, also called Chimera grid (see [2, 3, 4, 5] for instance) and the mismatched abutting interface (also called patched grid) [6, 7, 8]. Both approaches propose to split the initial computational domain in subparts and to mesh them independently. The coupling of the subgrids is performed either by an interpolation between overlapping grids, or by a specific treatment following the cell-centred finite volume flux balance. The chimera technique is by nature not conservative since an interpolation is performed to exchange information between grids. The second approach is conservative on plane interfaces but not conservative on general curved interfaces. This is a consequence of the need to recover exactly the same surface measure using straight edges and different refinements.

Despite Chimera and non-abutting node techniques, the CFD community commonly assumes that unstructured mesh technology is more suitable than structured approaches for highly complex CAD models. In fact, very complex geometries can be accounted for easily since the only constraint is to have closed surfaces, with gaps between geometry panels lower than the required accuracy. The mesh generation is more or less automatic but the solution accuracy may be reduced locally due to the presence of skewed elements in sensitive regions. A way to alleviate this limitation consists in accounting for different element shapes, with hexahedron and prism in the boundary layer, tetrahedron far from the wall. Pyramids are generally considered to manage the transition between elements with 3-node faces to elements with 4-node faces. An unstructured solver is by nature more CPU- and memory- consuming than a structured solver since the introduction of connectivity tables induces an extra memory cost for storage and indirect memory addressing which increases the CPU cost.

A good way to take the benefits of both structured and unstructured paradigms is to enable a coupling between both kinds of zones inside a grid. The goal is to consider a structured multi-block grid near a simple geometry and an unstructured grid near a complex CAD. Such an approach was ever considered in the past. For instance, Soetrisno *et al.* [9, 10, 11] performed steady turbulent RANS computations using hybrid grids on 2D high lift con-

figurations using an implicit time integration procedure. Tsung *et al.* [12] introduced a similar approach for the computation of steady flows around turbomachinery blades. More recently, DLR introduced the same hybrid extension for the unstructured solver TAU [13, 14, 15] dedicated to external aerodynamics and also for the structured solver TRACE [16, 17] dedicated to turbomachinery applications. Finally, such an extension was also considered for the *elsA* software of ONERA and co-developed by CERFACS since 2001. Focus was essentially put on the convection scheme for unstructured grid, on multigrid smoothing and on implicit time integration [18, 19, 20, 21]. In this paper, we propose a new diffusion scheme for the Navier-Stokes equations with theoretical properties in agreement with the unstructured mesh capability presented above. The key point is to introduce an approach also valid for structured grids, enabling an easy coupling between the zones. Our objective is to propose a scheme usable for both Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) and Large Eddy Simulations (LES), even if the theoretical needs of both approaches may differ. Actually, our development includes some constraints. First, the scheme is dedicated to unstructured cell-centred finite volume solver but the scheme can be easily and efficiently implemented in a multi-block structured solver, which makes the scheme suitable for hybrid grid computations. Moreover, the stencil is chosen as compact as possible in order to tackle a high performance for parallel simulations using limited length for sending / receiving messages and this is one key point for LES. It is also required that the scheme is second order accurate for regular grid and this is a key point to capture the boundary layer. Finally, we look for a scheme that does not involve any global treatment on the whole mesh. Focusing specifically on this last point, one can consider the example of an interpolation to mesh nodes. For a cell-centred unstructured solver, the standard data structure follows a face-based approach: flux is computed on any mesh interface. An interpolation to mesh nodes needs extra communications between blocks in order to treat correctly nodes shared by more than two partitions.

Before the analysis of the bibliography, let introduce the general form of standard Partial Differential Equations (PDE) with a diffusion term:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{D}(W, \nabla W) = 0, \tag{1}$$

where W stands for the vector of unknowns and $\mathcal{D}$ is the general form of any operator involving both states variables W and their gradients ∇W. Since we are interested in solving Eq. 1 with a Finite Volume approach, the computational domain is first split in several non overlapping volumes

denoted Ω_i such that the intersection between two volumes Ω_i and Ω_j is either one of the mesh interfaces denoted $F_{(i,j)}$ or empty. For a volume Ω_i, the list of its direct neighbour indexes is denoted $\mathcal{F}_i$: for any index $j \quad \mathcal{F}_i$, the face $F_{(i,j)}$ is a true mesh face that separates cells Ω_i and Ω_j. Then, integrating over Ω_i and using Gauss formula, it comes:

$$\frac{d}{dt}(V_i\overline{W}_i) + \sum_{j\in\mathcal{F}_i} \int_{F_{(i,j)}} \mathcal{D}(W,\nabla W)n_{(i,j)}ds = 0, \tag{2}$$

where V_i is the volume of cell Ω_i and $\overline{W}_i$ is the mean value of W over cell Ω_i. Eq. 2 shows that starting from the averaged quantity over any mesh cell, time advance of the equation is possible once integrals on mesh interfaces are known, taking care that the unit normal vector $n_{(i,j)}$ is directed outward (from Ω_i to Ω_j). It is therefore mandatory to define an interface gradient to compute any diffusion term of a PDE.

This paper addresses the definition of a new interface gradient for the computation of the diffusion terms in PDE using a cell-centred finite volume approximation. Applications concern standard academic test cases: the linear heat equation or the Navier-Stokes equations (perfect gas assumption). The present paper is organized as follows. After the introduction, the first part is dedicated to a the review of standard diffusion schemes, focusing specifically on the diffusion term of the Navier-Stokes equations. Then, our new scheme is introduced, presented and its properties summarized. Finally, numerical experiments are performed to confirm the theoretical results before concluding.

2. Review of interface gradient computation

In this section, several methods to define an interface gradient are introduced and explained.

2.1. Techniques based on Green-Gauss formulation on mesh elements

The standard Green-Gauss method (identified by GG in the following) uses the Green-Gauss formulation to compute the cell-centred averaged gradient using data at interface. Data at interface are generally defined as an arithmetic average of quantities of both sides, using either a pure centred approximation or a weighted formulation taking into account element volume. Following notations introduced in Eq. 2, it comes:

$$\int_{\Omega_i} \nabla W dv = \sum_{j\in\mathcal{F}_i} \int_{F_{(i,j)}} W n_{(i,j)} ds, \tag{3}$$

and Eq. 3 can be discretized as:

$$V_i \overline{\nabla W}_i = \sum_{j \in \mathcal{F}_i} \frac{V_i \overline{W}_i + V_j \overline{W}_j}{V_i + V_j} S_{(i,j)} n_{(i,j)}, \tag{4}$$

where $S_{(i,j)}$ represents the area of the face $F_{(i,j)}$.

2.1.1. Standard Green-Gauss formulation

The interface gradient is then defined as an arithmetic average of quantities of both sides, using either a pure centred approximation or a weighted formulation taking into account element volume:

$$(\nabla W)_{F_{(i,j)}} = \frac{V_i \overline{\nabla W}_i + V_j \overline{\nabla W}_j}{V_i + V_j} \tag{5}$$

The implementation is straightforward in a standard CFD code using a face-based data structure: the computation of the interface gradient only needs two loops on all mesh faces. For the pure centred approach, the interface gradient involves two centred averages and such a scheme does not damp high frequency modes. Moreover, such a scheme leads to an odd / even decoupling. Actually, it is possible to prove that whatever the mesh is, the flux balance inside a cell depends only on data in the current cell and in the second row of neighbours build with a face-based approach. In particular, the flux balance does not depend on the direct cell neighbours.

This scheme is shown to be conservative and consistent on regular elements (equilateral triangles, squares or rectangles of a given size). The scheme is stable and monotonic for equilateral triangles, squares, parallelograms and regular rectangles. The scheme is found to be second order for squares and equilateral triangles.

2.1.2. Enhanced Green-Gauss formulation

In the context of vertex-centred finite volume approximation on dual grids, Galle [22] proposed to compute the gradients (at mesh nodes) by a GG formulation on dual cells (Fig. 1) built around mesh nodes using cell centres and face centres in 2D (and mid-edges in 3D). The gradient on the interface located between nodes i and j is then the average of the gradients in nodes i and j.

In 1997, Crumpton [23] introduced a correction to improve the stability for meshes with a large cell aspect ratio. The correction consists in replacing the GG interface gradient by a centred finite difference gradient in the direction of the mesh edge ij. Such a correction can be easily introduced in

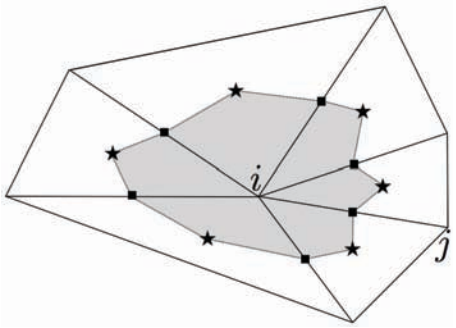


Figure 1: Definition of the dual volume around node i including face centres (squares) and cell centres (stars). In 2D, face centre and mid-edges are located at the same place.

the context of cell-centred finite volume approximation. It consists in a correction of the interface gradient in the direction of the cell centres for both control volumes that share the considered face ; the new interface gradient $\overline{(\nabla W)}_{F_{(i,j)}}$ is now:

$$\overline{(\nabla W)}_{F_{(i,j)}} = (\nabla W)_{F_{(i,j)}} - \left((\nabla W)_{F_{(i,j)}} \cdot \overrightarrow{C_i C_j} - (\overline{W_j} - \overline{W_i}) \right) \frac{\overrightarrow{C_i C_j}}{\|\overrightarrow{C_i C_j}\|^2}, \quad (6)$$

where C_i and C_j are the cell centres of Ω_i and Ω_j respectively and the other notations are the same as in Eq. 3.

The CGG method damps correctly high frequencies and the CPU overhead is negligible compared with the standard GG technique. Moreover, the technique introduces a new coupling which prevents the chequerboard type of instability found in the GG formulation. This scheme is shown to be conservative, consistent, monotonic and second-order accurate on rectangular meshes only.

2.2. Diamond cell approaches

The second class of techniques to compute interface gradients follows the diamond path approach introduced by Coirier [24] for Cartesian grids and the cell-centred finite volume approximation. The principle of the proposed approach is to define a dual cell around any mesh interface and to compute an averaged gradient on it using a Green-Gauss rule (Fig. 2). The dual cell is based on both face mesh nodes and adjacent cell centres. The dual cell gradient is then chosen as interface gradient for the diffusion flux on the face.

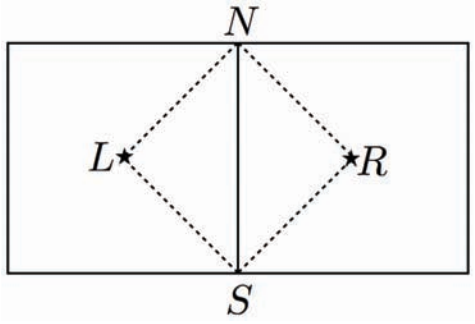


Figure 2: Definition of the dual volume around the face SN. Cell centres are represented by the black star.

Following the definition of the 4 nodes in Fig. 2 and introducing the normal vector $\overrightarrow{n_{XY}}$ normal to the face XY and directed outward the diamond cell, the final expression of the gradient over the diamond cell is simply:

$$V_d \, \nabla W = \frac{W_N + W_L}{2} \overrightarrow{n_{NL}} + \frac{W_L + W_S}{2} \overrightarrow{n_{LS}} + \frac{W_S + W_R}{2} \overrightarrow{n_{SR}} + \frac{W_R + W_N}{2} \overrightarrow{n_{RN}}, \tag{7}$$

with V_d the volume of the diamond cell.

The diamond cell approaches require the definition of the solution at mesh nodes S and N and there are several ways to compute them.

2.2.1. Averaging procedure

For the original approach proposed by Coirier [24] for Cartesian grids, the unknown at mesh nodes are defined as an arithmetic average (with constant weights) of contributions from all cells built with the given node. For a Cartesian grid, the reconstruction stencil is compact and the number of elements sharing a node is known *a priori*. However, such a reconstruction presents two drawbacks for unstructured grids. First, all cells are assumed to have the same size, something false on general unstructured grids. Moreover, the number of cells sharing a given node is assumed constant, due to the general form of the Cartesian grid. Extensions were proposed to correct the Cartesian grid limitations.

2.2.2. Least-square reconstruction

For Coudière *et al.* [25, 26], the reconstruction at a node is made by a least-square method and any cell based on the node is taken into account.

For the sake of clarity, the least-square formulation is described below in 2D.

Let f_j be an affine function defined on $\mathcal{V}_j$, the set of mesh elements that share node j. Due to its definition, f_j takes the following form:

$$f_j(x, y) = a + bx + cy, \tag{8}$$

where a, b and c are 3 unknowns. The least-square interpolation consists in choosing the coefficients a, b and c such that the distance d_j between the reconstructed value using f_j and the averaged cell-centred values in the cells of $\mathcal{V}_j$ is minimized:

$$d_j = \sum_{\Omega_i \in \mathcal{V}_j} \left(\overline{W_i} - f_j(x_i, y_i) \right)^2, \tag{9}$$

where (x_i, y_i) represents the coordinates of the centre of cell Ω_i. The coefficients a, b and c are finally computed using the fact that when a function is minimum, its gradient (with respect to a, b and c) is zero. The derivative can be computed analytically and it gives a 3×3 linear system of equations that can be inverted once the vectors X and Y defined from the list of cell centres coordinates for the cells in $\mathcal{V}_j$ are not linearly connected.

2.2.3. Choice of the local stencil for reconstruction

Le Potier [27] proposed a new approach to simplify the interpolation process. Instead of solving the whole least-square system involving all cells surrounding the node, Le Potier proposed to take into account the minimum number of cells, closest to the mesh node on which interpolation must be performed. This enables the definition of the nodal quantity from a simple barycentric averaging procedure using weights chosen as the inverse of the distance between the mesh node and the cell centre.

Since the formulations of Coudière and Le Potier require extra communications in a parallel framework, they won't be considered in the following.

2.3. Diffusion scheme dedicated to anisotropic operator

Eymard, Gallouet and Herbin [28] proposed a solver for diffusion equation with anisotropic operators. Diffusive flux of the isotropic operator is solved by finite difference and the anisotropic operator is solved by a dedicated solver proposed by the authors. This method requires that the fictitious edge between two neighbour cell centres and the interface are orthogonal. It is possible if the cell centre is assumed to be the centre of the circonscript circle. However, the technique cannot be extended to any element shape.

2.4. Method based on the finite element approximation

For a cell-vertex finite volume approximation, dual cells are built around mesh nodes using cell centre, face centre and edge mid-points (Fig. 1). The $\mathcal{P}^1$ finite element framework gives a simple framework for the computation of gradients on triangles: gradients are computed from the gradient of the shape functions. Moreover, an extension was proposed to handle general unstructured elements using new gradient still based on the $\mathcal{P}^1$ finite element approximation [29]. Flandrin *et al.* [30, 31] proposed to blend the cell-centred finite volume approximation for convection and the vertex-based finite element approximation for diffusion in an unstructured cell-centred finite volume solver. The idea is to use the high flexibility of the finite element technique to define the gradient by means of shape function gradient. To do so, the initial computational domain is covered by a new triangulation and there are two ways to build the triangulation.

With the first approach, triangles involve both mesh nodes and cell centres. In this case, the diffusion flux on a 2D face is always divided into two contributions with two different gradients (Fig. 3). This approach can be seen as an extension of the diamond cell approach of Coirier and the main difference occurs in the way gradients are computed. Such an approach keeps the need for an interpolation to mesh nodes, something difficult to perform in a parallel framework using a cell-centred finite volume solver with a face-based data structure. The first approach won't be considered in the following.

With the second approach, the triangulation only considers cell centres. The new triangle grid intersects the initial mesh faces and produces facets (Fig. 3). One gradient is then computed and applied for the flux integral computation on each facet. The definition of local facets is quite obvious in a 2D framework. In 3D, the situation is not straightforward and in general, the intersection of a mesh element with a tetrahedron can produce complex polyhedron. This approach won't be considered in the following due to its inherent complexity and high CPU cost (one gradient to compute per facet).

2.5. Least-square method for cell-centred gradient

The last technique for the gradient is based on the least-square method to compute cell-centred gradient. Such a gradient [32] was first introduced to tackle the second order of accuracy for convection terms by mean of linear extrapolation and slope limiter procedure [33] to keep a Totally Variation-Diminishing scheme. The least-square method was revisited in 2003 by Mavriplis [34] and a recent exhaustive analysis for the diffusion scheme was

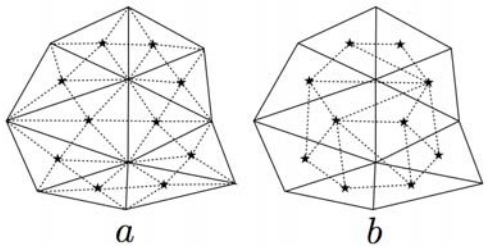


Figure 3: Definition of the triangulation for the first (a) and second (b) approaches. Mesh edges are represented with solid line, cell centres with a stars and the triangulation by dashed lines.

performed by Jalali, Sharbatdar and Ollivier-Gooch in 2014 [35]. The least square reconstruction was also analysed by Sozer, Brehm and Kiris [36] for the definition of the second-order hyperbolic flux.

The procedure to define the gradient is simple. First, a Taylor expansion of the solution is performed locally around a cell Ω_i. It is of course required that the integral of the Taylor expansion over Ω_i recovers the average value $\overline{W}_i$, while the integral of the Taylor expansion over the adjacent cell Ω_j of Ω_i will recover $\overline{W}_j$. For the sake of clarity, the steps to define the local cell-centred gradient are given below.

The first step consists in assuming that a polynomial reconstruction of the unknowns can be performed locally, around cell Ω_i, and the polynomial degree is let as a free parameter. In the following, explanations are given for a two-dimension flow but the procedure is easily extended to 3D flows. First, a link between the reconstructed field W_i^R in position (x, y) and W_i is introduced:

$$\begin{aligned} W_i^R(x,y) &= W_i + \left.\frac{\partial W}{\partial x}\right|_i (x - x_i) + \left.\frac{\partial W}{\partial y}\right|_i (y - y_i) + \\ &\quad \left.\frac{\partial^2 W}{\partial x^2}\right|_i \frac{(x - x_i)^2}{2} + \left.\frac{\partial^2 W}{\partial y^2}\right|_i \frac{(y - y_i)^2}{2} + \\ &\quad \left.\frac{\partial^2 W}{\partial x \partial y}\right|_i (x - x_i)(y - y_i) + \cdots \end{aligned} \tag{10}$$

In Eq. 10, the index i refers to the cell Ω_i and (x_i, y_i) refers to any point inside Ω_i.

The integral of the reconstructed quantity over the cell Ω_i must recover the mean quantity $\overline{W_i}$ over the volume. At the same time, it is also required

that the integral of the reconstructed quantity over the cell Ω_j close to Ω_i is $\overline{W_j}$. Doing so and assuming that 1. a second order scheme is considered and 2. the reference point is the cell centroid, it comes:

$$V_j\overline{W}_j \quad V_j\overline{W}_i + \left.\frac{\partial W}{\partial x}\right|_i \int_{\Omega_j}(x-x_i)\,dv + \left.\frac{\partial W}{\partial y}\right|_i \int_{\Omega_j}(y-y_i)\,dv \tag{11}$$

In Eq. 11, the moments can be split into two contributions: one local to the volume Ω_j and one linking the cell centres of Ω_i and Ω_j:

$$\int_{\Omega_j}(x-x_i)\,dv = \int_{\Omega_j}\Big((x-x_j)+(x_j-x_i)\Big)\,dv = \int_{\Omega_j}(x-x_j)\,dv + V_j(x_j-x_i)$$

and

$$\int_{\Omega_j}(y-y_i)\,dv = \int_{\Omega_j}\Big((y-y_j)+(y_j-y_i)\Big)\,dv = \int_{\Omega_j}(y-y_j)\,dv + V_j(y_j-y_i)$$

Incorporating all direct neighbours in the formulation, a rectangular system of equations, with more equations than unknown, is generally attained. In our solver, it is solved by Moore-Penrose pseudo-inverse algorithm [37, 38].

Finally, the interface gradient is estimated using a simple averaging procedure or using an advanced treatment depending on local metrics [35]. An enhanced approach proposed by Shima *et al.* consists in blending the Green-Gauss approach and the least-square reconstruction [39] for second-order convection scheme on polyhedral unstructured grids. At the present time, the least-square reconstruction approach is considered as the standard way to compute gradients. It requires the pre-computation of the coefficients of the pseudo-inverse matrix and these coefficients only depend on local metrics.

2.6. Least-square method for interface gradient

The previous least-square approach consists in computing first a cell-centred gradient and then this cell-centred gradient serves to define the interface gradient for the evaluation of the viscous flux. In 1991, Dubois [40, 41] proposed to use a least-square approach to define directly the interface gradient. The idea is the following. Any gradient is a local and linear function of the solutions W_i in a predefined neighbourhood V_Σ around a face Σ of the mesh. As a consequence, the gradient is evaluated using:

$$\nabla W_\Sigma = \sum_{i\in V_\Sigma} \alpha_{\Sigma,i} W_i, \tag{12}$$

where W_i is the averaged solution in cell i of the neighbourhood V_Σ and $\alpha_{\Sigma,i}$ is a weighted coefficient. Eq. 12 can be seen as a linear system of unknowns $\alpha_{\Sigma,i}$. Defining the origin of the local reference frame as the centre of the face, an interpolation (Lagrange) polynomial is first defined on the stencil V_Σ and it is then differentiated to obtain the weights. Fig. 4 gives two examples of neighbourhood reconstruction using mesh faces or mesh nodes. Of course, the quality of this approach depends on the stencil for the polynomial reconstruction and this technique needs to store the interpolation coefficients and the cell indices for the face neighbourhood.

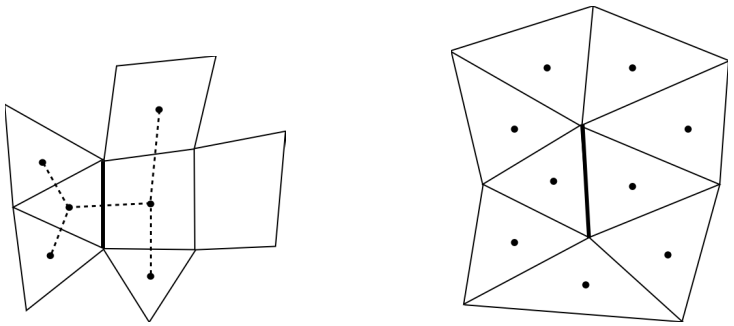


Figure 4: Dubois' approach: neighbourhood based on faces (a) or on nodes (b)

This approach won't be considered in the following, even if it is by nature well-suited for cell-centred finite volume solvers.

3. The new interface gradient scheme

The standard finite volume approach for diffusion involves an integral of the gradient over a mesh interface (Eq. 2). A new technique to compute an interface gradient is presented below. This method needs the definition of a new computational cell (called dual cell in the following) around the interface and the averaged gradient on the dual cell serves as interface gradient. In some aspects, the new diffusion scheme tends to take benefit from the simplicity of the Diamond cell formulation, but avoids the interpolation to mesh nodes.

3.1. Building a new dual cell including the interface

Let consider the interface $F_{(i,j)}$ between cells Ω_i and Ω_j. Let $(\mathcal{L}_i)_{(i,j)}$ (resp. $(\mathcal{L}_j)_{(i,j)}$) denote the list of faces of Ω_i (resp. Ω_j) that share a node

(resp. an edge) with $F_{(i,j)}$ in 2D (resp. in 3D). For a tetrahedron, $(\mathcal{L}_i)_{(i,j)}$ contains all the faces except $F_{(i,j)}$. For a prism and if $F_{(i,j)}$ is a triangle, $(\mathcal{L}_i)_{(i,j)}$ contains the three faces based on four nodes.

3.1.1. Two-dimensional dual cell

The dual cell is first limited by the face nodes and the midpoints for all edges in $(\mathcal{L}_i)_{(i,j)}$ and $(\mathcal{L}_j)_{(i,j)}$. These facets define a local region around $F_{(i,j)}$ which is partially closed. In Ω_i, the closure involves the new midpoints and the cell centre ; the same approach is applied on Ω_j. A general view of the dual volume for a mesh composed of triangles is shown in Fig. 5.

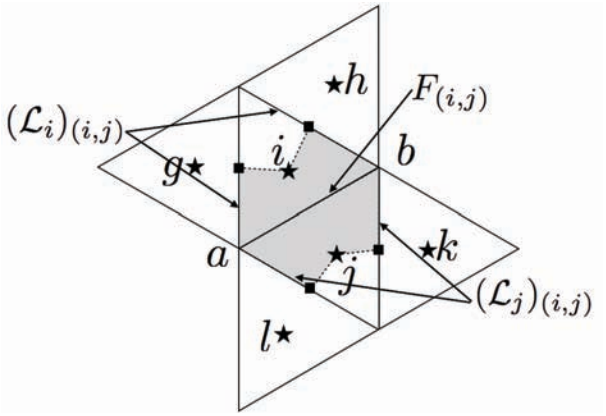


Figure 5: Definition of the dual volume around the face $F_{(i,j)}$ for a 2D mesh composed of triangles. Squares (resp. stars) represent the face centres (resp. cell centres). The indexes g, h, l and k refer to the direct neighbours of the volumes i and j in a face-based framework.

3.1.2. Three-dimensional dual cell

The three-dimensional dual cell definition is an extension of the 2D approach. Now, the dual cell is limited by two kinds of facet.

The first kind of facets is build using the faces in $(\mathcal{L}_i)_{(i,j)}$ (resp. $(\mathcal{L}_j)_{(i,j)}$) for Ω_i (resp. Ω_j): the facets are limited by the face nodes, the face centre and the midpoints for edges that share one node with the face. This first kind of facets is introduced in Fig. 6.

The second kind of facets is composed of triangles only. Any new triangle is based on 1. the centre of faces of $(\mathcal{L}_i)_{(i,j)}$ and $(\mathcal{L}_j)_{(i,j)}$, 2. edge mid-points of the faces belonging to $(\mathcal{L}_i)_{(i,j)}$ and $(\mathcal{L}_j)_{(i,j)}$ and 3. centres of the volume Ω_i or Ω_j (Fig. 7).

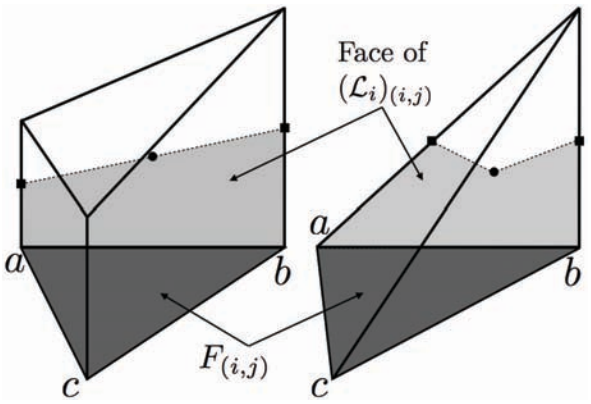


Figure 6: Part of the dual cell for the face (a, b, c) of a prism and a tetrahedron. The (background) face of interest is dark grey and the facet of the dual cell is in light grey. The square symbol represent edge midpoint while the circle represent the face centre.

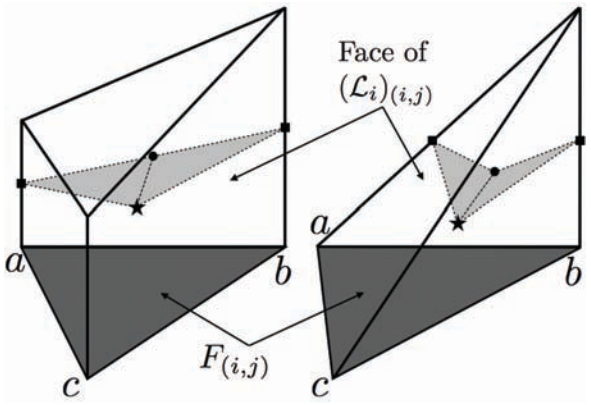


Figure 7: Part of the dual cell for the face (a, b, c) of a prism and a tetrahedron. The (background) face of interest is dark grey and the facets of the dual cell are in light grey. The square symbol represent edge midpoint while the circle represent the face centre and the star is the cell centre.

3.2. Computation of the new gradient for the diffusion flux

The procedure follows the one introduced for the diamond cell approach. A constant gradient is obtained over the dual cell and this gradient is chosen as interface gradient to introduce in the diffusion term of the boundary integral. The gradient is computed using a standard Green-Gauss approach. Such an approach involves the definition of the quantities on the different facets of the dual cell introduced previously.

For the facets defined with the use of the cell centres, the interface unknown is the mean quantity over the cell. Other facets are defined from the mesh faces that separate two cells. The interface value is then defined as an average of the mean quantities on both side of the interface. In 2D and following notations introduced in Fig. 5, it comes:

$$\begin{aligned} V_d^* \nabla W_{F_{(i,j)}} = \; & \overline{W_i}\overrightarrow{n^i_{(i,j)}} + \frac{\overline{W_i}+\overline{W_g}}{2}\frac{S_{(i,g)}}{2}n_{(i,g)} + \frac{\overline{W_i}+\overline{W_h}}{2}\frac{S_{(i,h)}}{2}n_{(i,h)} + \\ & \frac{\overline{W_j}+\overline{W_k}}{2}\frac{S_{(j,k)}}{2}n_{(j,k)} + \frac{\overline{W_j}+\overline{W_l}}{2}\frac{S_{(j,l)}}{2}n_{(j,l)} + \overline{W_j}\overrightarrow{n^j_{(i,j)}}, \end{aligned} \tag{13}$$

where V_d^* is the volume of the dual cell. $\overrightarrow{n^i_{(i,j)}}$ is the outward vector defined as the sum of the normal vectors of the facets represented in dashed lines in Fig. 5. More precisely, following notations introduced in Fig. 5, we have $\overrightarrow{n^i_{(i,j)}} = -0\,5\,n_{(i,j)}$ and $\overrightarrow{n^j_{(i,j)}} = 0\,5\,n_{(i,j)}$.

4. Theoretical properties of the new interface gradient

An efficient numerical method should satisfy basic properties: consistency, conservation, monotonicity, second-order accuracy, compact support.

The conservation property is straightforward due to the definition of an unique gradient on any face. Moreover, the compact support is easily proved when the gradient is calculated at the interface. For a quadrilateral mesh, the new gradient method needs 6 cells to construct the value at the interface. Green-Gauss and least-square methods have a larger stencil composed of 8 cells. In three dimensions, the new gradient method needs 10 cells whereas other methods which needs 12 cells.

The analysis of consistency, monotonicity and accuracy is conducted on the linear heat equation in the next section.

4.1. Unsteady linear heat equation

The unsteady linear heat equation is one of the simplest elliptic Partial Differential Equation:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \, \Delta T = 0, \tag{14}$$

where T is the temperature, α the constant diffusive coefficient and Δ represents the Laplacian operator. Eq. 14 is solved in the finite volume approach and introducing notations from Eq. 1 and Eq. 2, it comes:

$$\frac{d}{dt}(V_i \overline{T}_i) - \alpha \sum_{j \in \mathcal{F}_i} \int_{F_{(i,j)}} \nabla T \cdot n_{(i,j)} ds = 0 \tag{15}$$

For the analysis, the time derivative is discretised by an explicit Euler integration rule:

$$V_i \frac{\overline{T}_i^{(n+1)\delta t} - \overline{T}_i^{n\delta t}}{\delta t} - \alpha \sum_{j \in \mathcal{F}_i} \int_{F_{(i,j)}} \nabla T \cdot n_{(i,j)} ds = 0, \tag{16}$$

where δt is the time step kept constant. The introduction of the new interface gradient in Eq. 16 leads to an equation of the following form:

$$V_i \frac{\overline{T}_i^{(n+1)\delta t} - \overline{T}_i^{n\delta t}}{\delta t} - \alpha \sum a_j \overline{T}_j^n = 0 \tag{17}$$

The sum in Eq. 17 is defined over the whole computational domain, but $a_j = 0$ for any cell j not present in the stencil for the diffusion term of cell Ω_i.

4.2. Consistency and order of accuracy

A numerical scheme is consistent when discretised equations tend to the continuous equations with time and spatial tend to 0. In 1D, the gradient formulation is consistent and second-order accurate.

The same kind of results were obtained in 2D for a mesh composed of rectangles. On regular equilateral triangles (with an edge of length l), the scheme is not consistent. In fact, introducing the total flux balance $\mathcal{B}_i$ in a cell Ω_i, it comes:

$$\mathcal{B}_i = \alpha \frac{5 \quad \overline{3} l^2}{16} \Delta T + \mathcal{O}\Big((\delta x)^3\Big) + \mathcal{O}\Big((\delta y)^3\Big) \tag{18}$$

and the coefficient 5 $\overline{3}l^2$ 16 and the triangle area $\overline{3}l^2$ 4 differ.

4.3. Stability and monotonicity

This gradient will be stable if the error is not amplified during the time. This can be verified with a Von Neumann analysis. The analysis was performed in 1D and 2D. Let T be a harmonic solution:

$$T_i^n = A^n exp(j(hx_i + h'y_i)) \quad \text{with} \quad j^2 = -1 \tag{19}$$

Assuming that T (Eq. 19) is the solution of the linear heat equation, using the fact that $A = A^{n+1}\ A^n$ must be lower than 1 and requiring that the discrete maximum principle is verified, the following system is built:

$$\begin{aligned} -a_i + \sum_{k\neq i} a_k \ &\leq \frac{2V_i}{\alpha\Delta t}, \\ \sum_{k\neq i} a_k \ &\leq -a_i, \\ -a_i &\leq \frac{V_i}{\alpha\Delta t}, \\ \sum_k a_k &= 0 \end{aligned} \tag{20}$$

The new scheme respects inequalities of Eq. 20 in 1D and 2D.

5. Numerical results

Numerical solutions obtained with our new diffusion scheme are compared with Green-Gauss and least-square formulations on standard test cases. From now on, acronyms UIG , GG and LS will refer to the new Unstructured Interface Gradient, the Green-Gauss approach and the Least-Square technique respectively.

5.1. Application to the linear heat equation with Dirichlet boundary conditions

The linear heat equation with a constant diffusion coefficient $\alpha = 0\ 75$ is solved over a square domain of length L using various unstructured grids. Using the set of boundary conditions (Eq. 21):

$$T(x,y) = \begin{array}{lll} 0 & x & [0,L] \text{ and } y = 0, \\ \sin(\pi\frac{x}{L}) & x & [0,L] \text{ and } y = L, \\ 0 & y & [0,L] \text{ and } x = 0, \\ \sin(\pi\frac{y}{L}) & y & [0,L] \text{ and } x = L, \end{array} \tag{21}$$

the linear heat equation admits a steady exact solution T^{ex}:

$$T^{ex}(x,y) = \frac{1}{\sinh(\pi)} \sinh(\pi\frac{x}{L})\sin(\pi\frac{y}{L}) + \sinh(\pi\frac{y}{L})\sin(\pi\frac{x}{L}) \tag{22}$$

The solution, shown on Fig. 8, presents two directions of variations that intersect on the domain diagonal based on points $[0,0]$ and $[L,L]$. As a consequence, this test case presents two directions of anisotropy to capture. It should be noted that the temperature gradient is not constant along the boundary and capturing accurately this gradient will play an important role in the following.

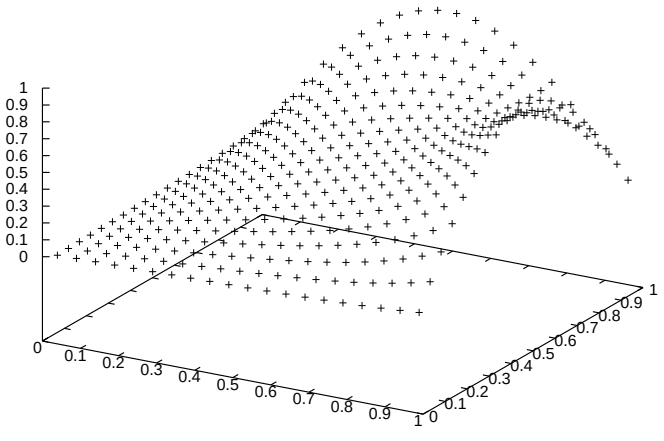


Figure 8: Exact solution of the steady linear heat equation problem with Dirichlet boundary conditions

The numerical error between exact and approximated solutions is evaluated by the $\mathcal{L}_2$ norm:

$$= \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N_c} V_i (T_i^{ex} - T_i^{num})^2 \Bigg)^{1\ 2}, \tag{23}$$

where V is the mesh total volume, N_c is the number of mesh cells and T_i^{num} the numerical solution in the centre of the cell Ω_i. Introducing the characteristic size of mesh elements h, the error changes with mesh refinement

following $= O(h^p)$ or $\log(\ ) = p\ \log(h) + C$, where p is the order of accuracy of the diffusion scheme.

Even if the order of accuracy was computed theoretically on regular case in one and two dimensions and on equilateral triangles, it is mandatory to confirm the results by numerical experiments. Four kinds of mesh are considered: regular squares, irregular quadrilaterals, equilateral triangles and irregular triangles. These meshes are shown on Fig. 9. For any kind of mesh, the mesh convergence analysis is performed with four different refinements.

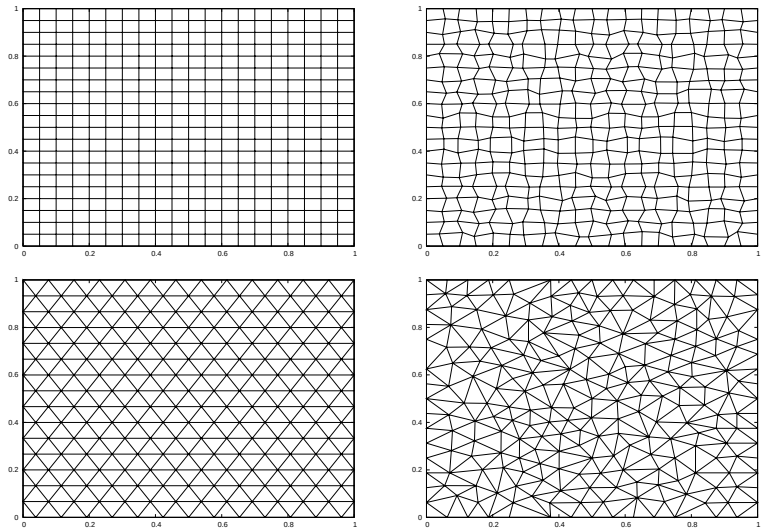


Figure 9: Linear heat equation with Dirichlet boundary conditions: kind of meshes considered for the study

Fig. 10 shows the evolution of $\log(\ )$ against $\log(h)$ for the different meshes and orders of accuracy are given in Tab. 1.

On the regular quadrilateral mesh, all schemes give the same second order of accuracy. Moreover, for the GG and LS schemes, two curves are introduced for the regular squares in Fig. 10. In fact, numerical results obtained with Boundary Recopy (denoted BR) are only first order accurate. For these computations, the interface gradient is obtained as a zeroth-order extrapolation of the cell-centred gradient computed in the intern adjacent cell. Second order of accuracy is obtained if the boundary gradient is computed with the UIG scheme. In the latest case, the UIG scheme is only applied to the boundary faces and the standard scheme is chosen for all

intern faces. From now on, the UIG scheme will always be considered to define the interface gradient on boundary faces: it is a prerequisite to compute boundary gradients when playing with Dirichlet boundary condition. On quadrilateral (irregular) elements, the GG scheme looses all its accuracy, while the LS scheme has still an accuracy larger than 1. This is due to the fact that the LS scheme incorporates by nature local metrics in the gradient definition. The UIG scheme is now only first order accurate, which is not a surprising result since the only geometric quantity accounted for is the local volume measure to define interface quantities. On equilateral triangular elements, the UIG scheme shows its superior behaviour compared to LS and GG schemes that are only first order accurate. Finally, on general triangular meshes, all schemes have comparable accuracies.

It should be noted that for all cases, the error is lower with the UIG scheme than with the two other schemes and this results does not depend on the considered mesh.

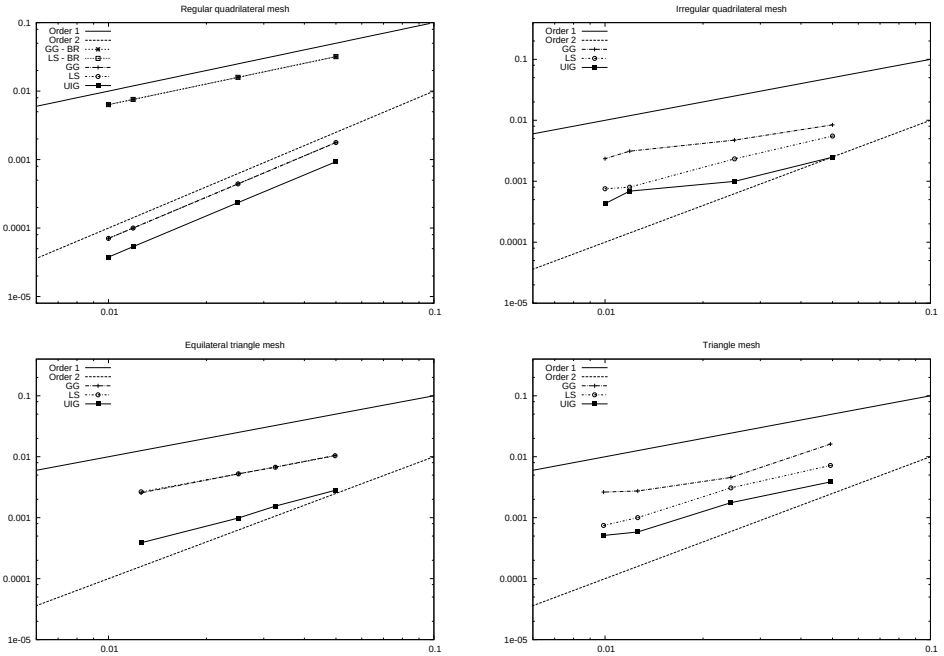


Figure 10: Linear heat equation with Dirichlet boundary conditions: $\mathcal{L}_2$ error on the four configurations

Results give in Tab. 1 confirm the analytical order of accuracy of the

UIG gradient on regular squares. In any case, the UIG accuracy is larger or equal to 1.

Gradient	Square	Quadrilateral	Equilateral	Triangular
GG	2.00	0.76	1.02	1.46
LS	2.00	1.27	1.00	1.33
UIG	1.99	1.08	1.47	1.23

Table 1: Linear heat equation with Dirichlet boundary conditions: orders of accuracy on the considered meshes.

5.2. Linear heat equation with Dirichlet and Neumann boundary conditions for linear preservation

In this part, focus is put on the capability of the three methods to capture accurately a linear solution for the linear heat equation. This test case was suggested by Breil and Maire [42]. On the unit square $[0,1]\times[0,1]$, the linear heat equation with $\alpha = 1$ is solved using two Dirichlet conditions $T = 0$ on $x = 0$, $T = 1$ on $x = 1$ and two Neumann conditions $\nabla T \cdot n = 0$ on $y = 0$ and $y = 1$. The exact solution is therefore $T_{ex}(x, y) = x$.

This problem is solved as before on the four kinds of meshes: regular squares, irregular quadrilaterals, equilateral triangles and irregular triangles. The $\mathcal{L}_2$ norm of $T - T_{ex}$ measures the accuracy of the schemes.

For regular squares, the same conclusion as before is recovered: LS and GG methods are first order accurate if the boundary gradient is obtained as a simple copy of the one inside the cell near the boundary (Fig. 11). This is the reason why the labels of the curves contain the BR (Boundary Recopy) information. Using the UIG scheme to define the boundary gradient, all schemes recover exactly the linear solution: the levels of error are lower than 10^{-9} and any error cannot be measured. On quadrilateral elements, GG and LS methods are found to be first order accurate while the accuracy of UIG is larger. Finally, on equilateral and general triangles, the new UIG scheme behaves as the best scheme for the case (either GG or LS).

The orders of accuracy of the schemes are summarized in Tab. 2.

5.3. Navier-Stokes equations: adiabatic laminar flat plate

The three diffusion schemes are now applied to the numerical resolution of the 2D Navier-Stokes equations in an unstructured (in-house) cell-centred finite volume solver. The convection terms are discretised by means of the

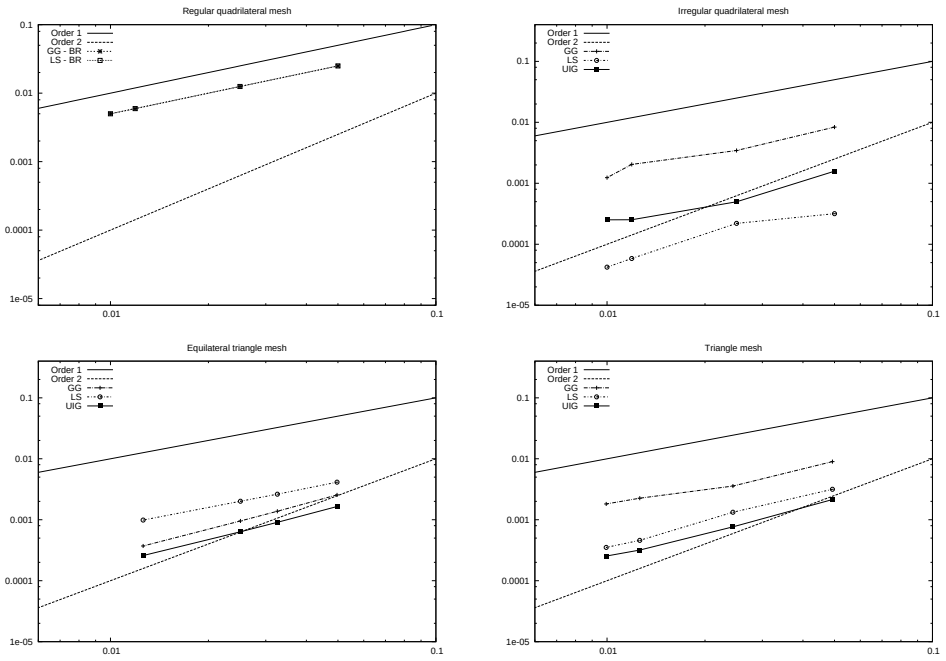


Figure 11: Linear preservation: $\mathcal{L}_2$ error on the four configurations

Gradient	Quadrilateral	Equilateral	Triangular
GG	1.14	1.43	1.10
LS	0.97	1.05	1.41
UIG	1.41	1.38	1.32

Table 2: Linear preservation: Orders of accuracy on the considered meshes

Roe's approximated Riemann solver [43] coupled with a standard second-order MUSCL technique [44] associated with the minmod limiter. Time integration is performed using a four-step Runge-Kutta explicit procedure and since we are interested in stationary solutions only, the choice of the time integration scheme does not play a major role.

The computation is set up in order to reproduce the flow over a one-meter long flat plate at $M_\infty = 0\ 8$ and $Re\ \ m = 30000$. The angle of incidence is set to 0. A laminar boundary layer develops on the plate and thickens along the plate. The leading edge of the plate is set at position $(0, 0)$ and the

computational domain is extended before the flat plate up to $x = -0\ 1m$ in order to avoid any interaction between the inflow boundary condition and the adiabatic wall viscous condition on the flat plate. The mesh is regular and composed of 3,640 nodes and 3,520 hexahedrons (Fig. 12). It is discretised using a constant grid spacing of $0\ 02m$ along the plate. In the direction normal to the wall, the discretisation is based on 65 points following a geometric law with the first point above the wall at $0\ 0002m$ from the wall and the ratio is about 1 10.

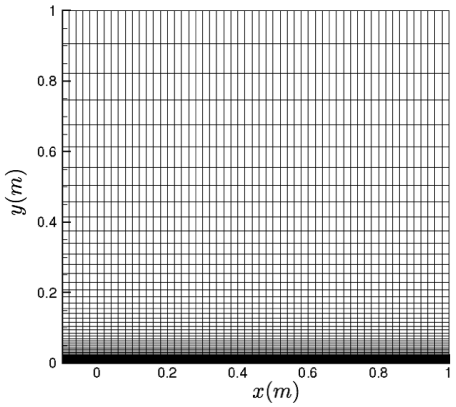


Figure 12: Adiabatic flat plate: regular unstructured mesh

For the computation, four boundary conditions are employed. The no-slip boundary condition is assigned to the adiabatic wall ($y = 0$ and $x > 0$) and a wall-slip wall is chosen for the region before the flat plate ($y = 0$ and $x < 0$). The inflow boundary condition ($x = -0\ 1$) is prescribed using a characteristic formulation of the boundary condition. All other exterior faces are assigned to a standard subsonic outflow condition defined by the pressure.

Computations are performed with the three previous gradient-computation methods, GG, LS and UIG. The heat equation test case showed the great importance of the definition of wall gradients and wall-boundary face gradients are computed with the UIG scheme, while GG and LS schemes are applied on all interior faces and a zeroth order extrapolation of intern cell-centred gradient is applied for all other boundary faces. The number of time steps is sufficiently large to guarantee that the solution is converged (more than 6 orders of magnitude lost).

The friction coefficient C_f is shown in Fig. 13 for all methods and it

is compared with the theoretical law of Blasius. The agreement between the computations and the theoretical law is good ; the largest discrepancy appears near the leading edge where the theoretical law tends to infinity.

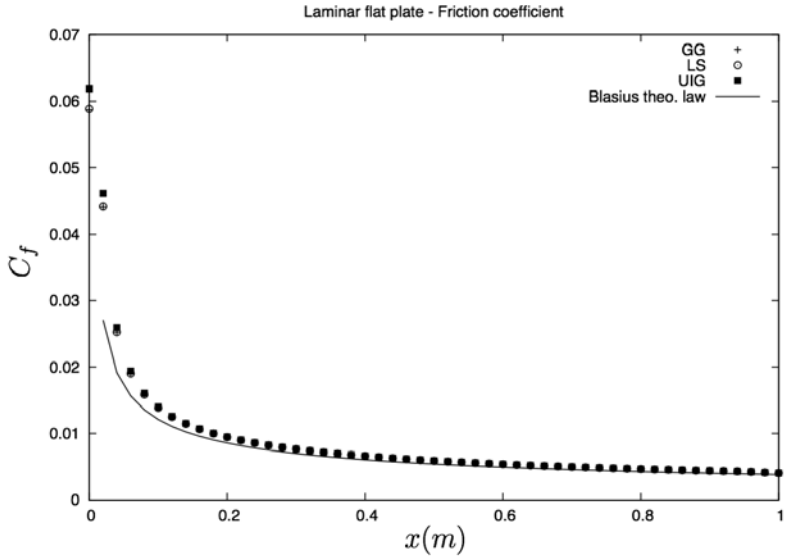


Figure 13: Adiabatic flat plate: friction coefficient along the wall

Blasius solution gives also the behaviour of the velocity component along x in a non-dimension framework. The solutions for GG, UIG and LS schemes are first extracted at $x = 0\ 93$ (cell-centred mesh line). Then, the solution is expressed in term of Blasius theoretical law. The velocity is made non-dimensional by $U = u\ \ u_\infty$ where u is the local velocity component and u_∞ is the inflow velocity norm. The distance to the wall is expressed by η such that:

$$\eta = y \cdot \quad \overline{Re_x}$$

where Re_x is the Reynolds number based on the x position of the cross section. Numerical results and theoretical profiles are shown in Fig. 14. The agreement between the schemes and the law is very good.

5.4. CPU and memory cost

A point of importance concerns the CPU efficiency and the memory cost of the methods.

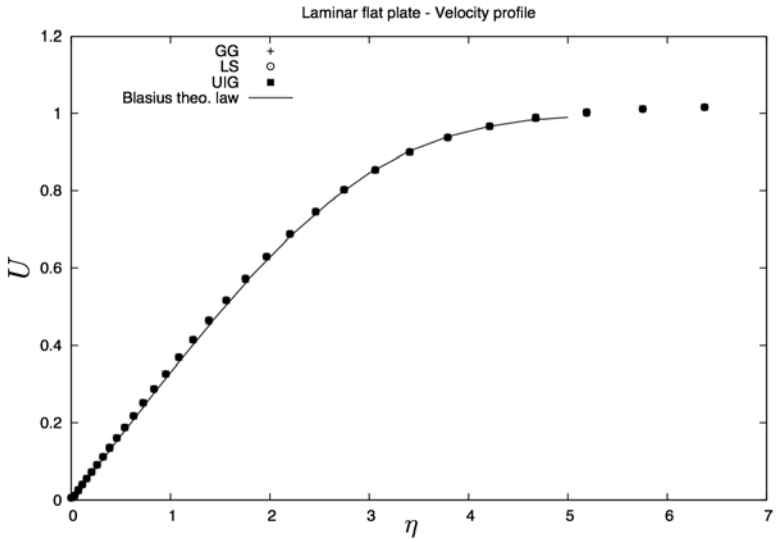


Figure 14: Adiabatic flat plate: velocity profile expressed in the dimensions of Blasius theoretical law

The GG method needs two loops on the number of faces, one to compute the cell-centred gradient and one to average the cell-centred gradients to define the interface gradient. Roughly speaking, the cost evolves as $2N_f$, where N_f is the number of mesh faces. The memory storage is limited to all cell-centred gradients: $d \times N_c$ quantities where d is the problem dimension and N_c is the number of mesh cells.

With the LS method, the cell-centred gradient is computed directly from the neighbours of the current cell and two algorithms can be chosen. With the first one, the gradient computation follows a cell-based computation: a loop on the cells is performed and the gradient computed for any cell. The cost evolves therefore as $f \times N_c$ where f is the maximum number of faces of the elements (4 for quadrangles, 3 for triangles...). The storage follows a law in $d \times N_c$ for the gradient and in $d \times f \times N_c$ for the pseudo-inverse matrix. With the second method, the gradient is computed in a face-based approach, where the gradients on left and right cells of an interface are updated in a face loop process. The cost is therefore in N_f and the storage follows a law in $d \times N_c$ for the gradient and in $d \times f \times N_c$ for the pseudo-inverse matrix. Finally, the interface gradient is computed by a loop on the faces, with a

cost in N_f.

With the UIG method, the algorithm is a direct loop on the faces and it follows a law in N_f. The storage is quite limited since extra fields are only associated with the dual volume and two normal vectors for the facets that close the dual volume in the left and right cells. In 3D, for a triangle interface, it is required to store 4 normal vectors for the Green-Gauss formulation on each side of the interface and the global storage follows a law in $8 \times d \times N_f = 24N_f$. For a quadrangle interface, the same analysis leads to a global storage that follows a law in $10 \times d \times N_f = 30N_f$. As a consequence, the necessary storage does not exceed $30N_f$ for a general unstructured multi-element shape mesh. But it is easy to minimize the local storage using the fact that the direction of the normal vector for the facets in $(\mathcal{L}_i)_{(i,j)}$ is the same as the one for the mesh faces (Fig. 6). As a consequence, the storage of the normal vector components on the dual cell can be replaced by the ratio of areas between the dual cell facet and the true mesh face. In this case, the necessary memory is bounded by $(2d + 8) \times N_f$, so $14N_f$ in 3D.

The cost of all methods is summarized in Tab. 3. It is clear that the new UIG technique is the most CPU efficient approach but the overall amount of memory is larger than with the other methods, even if the gradients must not be stored.

Method	CPU cost	Memory storage
GG	$2N_f$	dN_c per gradient
LS	$fN_c + N_f$ or $2N_f$	dN_c per gradient
UIG	N_f	$(2d + 8)N_f$

Table 3: Summary of the CPU and memory costs for the analysed approaches.

6. Conclusion

This paper addresses the definition of a new diffusion scheme for a cell-centred finite volume solver. After a review of available techniques, the Green-Gauss and Least-Square schemes are chosen as standard (reference) approaches. Both techniques give a cell-centred gradient and any interface gradient is defined as an average of contributions from both sides. Then, the new scheme is introduced. In contrary with standard schemes, our new formulation consists in defining directly an interface gradient. To do so, a dual cell is defined around the interface. It uses the adjacent cells and

the faces of the adjacent cells that share two nodes with the interface of interest. The interface gradient is defined as the mean gradient on the dual volume, computed using a Green-Gauss formula on the dual cell. As a consequence, the new scheme follows a face-based construction, in agreement with convection scheme for cell-centred finite volume solvers.

The accuracy of the new scheme is first demonstrated on the resolution of the linear heat equation. Second-order accurate solution is only recovered by the proposed scheme since the standard second-order schemes using cell-based Green-Gauss and Least-Squares techniques revert to first order accurate solutions on regular grids when a Dirichlet condition is applied on the boundary. This is due to the fact that the cell-centred gradient in the first cell above the boundary is used to define the gradient on the boundary. Second order is recovered when our UIG scheme serves to define the boundary gradient. For the Navier-Stokes equations, the new UIG scheme and the standard schemes (GG, LS) coupled with the UIG scheme for Dirichlet boundary condition lead to solutions in agreement with the theoretical profiles.

Another advantage of the proposed scheme is the associated CPU efficiency. It is shown that, even if the need for storage is larger than with standard schemes, the cost of the proposed scheme is about half of the cost of standard schemes.

In the near future, we plan to analyse the proposed scheme for its use in hybrid grids, composed of structured and unstructured zones, coupled by a conforming or non-conforming grid interface.

Acknowledgements

This research was partially supported by Snecma from the Safran group and by a grant of the CIRT (Consortium Industrie-Recherche en Turbomachine). The authors would also like to thank Snecma from the Safran group for their kind permission to publish this study.

[1] Numeca, Autogrid 5, http://www.numeca.com/en/products/automeshtm/autogrid5tm, 2012.

[2] W. Chan, R. Gomez, S. Rogers, P. Buning, Best practices in overset grid generation, in: 32nd AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit, St. Louis, Missouri, 24-26 June, AIAA Paper 2002-3191.

[3] R. Nichols, R. Tramel, P. Buning, Solver and turbulence model upgrades to overflow 2 for unsteady and high-speed applications, in: 24th Applied Aerodynamics Conference, San Francisco, California, 5-8 June, AIAA Paper 2006-2824.

[4] T. Pulliam, High order accurate finite-difference methods: as seen in overflow, in: 20th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, Honolulu, Hawaii, 27-30 June, AIAA Paper 2011-3851.

[5] B. Landmann, M. Montagnac, A highly automated parallel Chimera method for overset grids based on the implicit hole cutting technique, International Journal for Numerical Methods in Fluids 66 (2011) 778 804.

[6] A. Benkenida, J. Bohbot, J. Jouhaud, Patched grid and adaptive mesh refinement strategies for the calculation of the transport of vortices, International Journal for Numerical Methods in Fluids 40 (2002) 855 873.

[7] W. J. Costin, C. B. Allen, Numerical study of radial basis function interpolation for data transfer across discontinuous mesh interfaces, International Journal for Numerical Methods in Fluids 72 (2013) 1076 1095.

[8] J. Vanharen, G. Puigt, M. Montagnac, Theoretical and numerical analysis of nonconforming grid interface for unsteady flows, Journal of Computational Physics 285 (2015) 111 132.

[9] M. Soetrisno, S. T. Imlay, D. W. Roberts, A zonal implicit procedure for hybrid structured-unstructured grids, in: 32nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, January 10-13, AIAA Paper 94-0617.

[10] M. Soetrisno, S. Imlay, D. Roberts, D. Taflin, Development of a 3-D zonal implicit procedure for hybrid structured-unstructured grids, in: 34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, January 15-18, AIAA Paper 96-0167.

[11] M. Soetrisno, S. T.Imlay, D. Roberts, D. Taflin, Computations of viscous flows for multi-element wings using hybrid structured-unstructured grids, in: 35th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, January 6-9, AIAA Paper 97-0623.

[12] F. Tsung, J. Loellbach, O. Kwon, C. Hah, A three-dimensional structured/unstructured hybrid Navier-Stokes method for turbine blade rows, in: 30th Joint Propulsion Conference and Exhibit, Indianapolis, Indiana, June 27-29, AIAA Paper 94-3369.

[13] R. Heinrich, Implementation and usage of structured algorithms within an unstructured cfd code, in: H.-J. Rath, C. Holze, H.-J. Heinemann, R. Henke, H. Honlinger (Eds.), New Results in Numerical and Experimental Fluid Mechanics V, number 92 in Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design, Springer, 2006, pp. 430 437.

[14] L. Cambier, N. Kroll, Miracle: a joint dlr/onera effort on harmonization and development of industrial and research aerodynamic computational environment, Aerospace Science and Technology 12 (2008) 555 566.

[15] D. Schwamborn, T. Gerhold, R. Heinrich, The DLR TAU-CODE: Recent applications in research and industry, in: P. Wesseling, E. Onate, P. Périaux (Eds.), European Conference on Computational Fluid Dynamics, TU Delft, TU Delft, The Netherlands, 2006.

[16] H. Yang, D. Nuernberger, H.-P. Kersken, Towards excellence in turbomachinery Computational Fluid Dynamics: a hybrid structured-unstructured Reynolds-Averaged Navier-Stokes solver, Journal of Turbomachinery 128 (2006) 390 402.

[17] K. Becker, K. Heitkamp, E. Kugeler, Recent progress in a hybrid-grid cfd solver for turbomachinery flows, in: J. C. F. Pereira, A. Sequeira (Eds.), Proceedings of ECCOMAS CFD, Lisbon, Portugal.

[18] G. Puigt, M. Gazaix, M. Montagnac, M. Le Pape, M. de La Llave Plata, C. Marmignon, J. Boussuge, V. Couaillier, Development of a new hybrid compressible solver inside the CFD elsA software, in: 20th Computational Fluid Dynamics Conference, Honolulu, Hawaii, 27-30 June 2011, AIAA Paper 2011-3379.

[19] M. de la Llave Plata, V. Couaillier, C. Marmignon, M. Le Pape, M. Gazaix, B. Cantaloube, Further developments in the multiblock hybrid CFD solver elsA-H, in: 50th AIAA Aerospace Sciences Meeting in-

cluding the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Nashville, Tenessee, January 09-12, AIAA Paper 2012-1112.

[20] C. Marmignon, B. Cantaloube, M. Le Pape, V. Couaillier, M. Gazaix, Development of an agglomeration multigrid technique in the hybrid solver elsa-h, in: Seventh International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD7), Big Island, Hawaii, July 9-13, Paper ICCFD7-1603.

[21] M. de la Llave Plata, V. Couaillier, M. Le Pape, C. Marmignon, M. Gazaix, elsA-hybrid: an all-in-one structured/unstructured solver for the simulation of internal and external flows. application to turbomachinery, Progress in Propulsion Physics 4 (2013) 417 444.

[22] M. Galle, Unstructured viscous flow solution using adaptive hybrid grids, ICASE/LaRC Workshop on Adaptive Grid Methods, NASA Langley Research Center, 1995.

[23] P. Crumpton, P. Moinier, M. Giles, An unstructured algorithm for high reynolds number flows on highly stretched grids, in: C. Taylor, J. T. Cross (Eds.), Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, Pineridge Press, 1997, pp. 561 572.

[24] O. Cabrit, An Adaptively-Refined, Cartesian, Cell-Based Scheme for the Euler and Navier-Stokes Equations, Ph.D. thesis, The University of Michigan, 1994.

[25] Y. Coudière, J. Vila, P. Villedieu, Convergence of a finite volume scheme for a diffusion convection problem, in: F. Benkhaldoum, R. Vilsmeier (Eds.), Finite Volumes for Complex Applications, 1996.

[26] Y. Coudière, J. Vila, P. Villedieu, Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimension convection-diffusion problem, Mathematical Modelling and Numerical Analysis 33 (1999) 493 516.

[27] C. Le Potier, A finite volume method for the approximation of highly anisotropic diffusion operators on unstructured meshes, in: Finite Volumes for Complex Applications IV.

[28] R. Eymard, T. Gallouet, R. Herbin, A cell centered finite volume approximation for second order spatial derivative operators with full matrix on unstructured meshes in any space dimension, Journal of Numerical Analysis 26 (2006) 326 353.

[29] G. Puigt, J. Mueller, V. Auffray, Discretisation of diffusive fluxes on hybrid grids, Journal of Computational Physics 229 (2010) 1425 1447.

[30] L. Flandrin, Cell-centered methods for Euler and Navier-Stokes computations on unstructured meshes, Ph.D. thesis, Université de Bordeaux I, 1995.

[31] L. Flandrin, P. Charrier, B. Dubroca, A robust finite-volume method for computations of two-dimensional unstructured hybrid meshes, in: S. Wagner, E. Hirschel, J. Périaux, R. Piva (Eds.), Computational Fluid Dynamics'94, Wiley, New York, 1994, pp. 301 308.

[32] W. Anderson, D. Bonhaus, An implicit upwind algorithm for computing turbulent flows on unstructured grids, Computers & Fluids 23 (1994) 1 21.

[33] B. van Leer, Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method, Journal of Computational Physics 32 (1979) 101 136.

[34] D. Mavriplis, Revisiting the least-squares procedure for gradient reconstruction on unstructured meshes, in: 16th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, Orlando, Florida, 23-26 June,AIAA Paper 2003-3986.

[35] A. Jalali, M. Sharbatdar, C. Ollivier-Gooch, Accuracy analysis of unstructured finite volume discretization schemes for diffusive fluxes, Computers & Fluids 101 (2014) 220 232.

[36] E. Sozer, C. Brehm, C. Kiris, Gradient calculation methods on arbitrary polyhedral unstructured meshes for cell-centered CFD solvers, in: 52nd AIAA Aerospace Sciences Meeting, National Harbor, Maryland, 13-17 January, AIAA Paper 2014-1440.

[37] E. Moore, On the reciprocal of the general algebraic matrix, Bulletin of the American Mathematical Society 26 (1920) 394 395.

[38] R. Penrose, A generalized inverse for matrices, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society 51 (1955) 406 413.

[39] E. Shima, K. Kitamura, T. Haga, Green-Gauss/weighted-least-squares hybrid gradient reconstruction for arbitrary polyhedra unstructured grids, AIAA Journal 51 (2013) 2740 2747.

[40] F. Dubois, O. Michaux, Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations for Hypersonic Ramps with the NS3GR Solver, in: J. Désidéri, R. Glowinski, J. Périaux (Eds.), Hypersonic Flows for Reentry Problems, Proceeding of a Workshop held in Antibes, France, 22-25 January 1990, volume II: Test Cases - Experiments and Computations, Springer-Verlag, 1991, pp. 258 269.

[41] F. Dubois, Lemmes Finis pour la Dynamique des gaz, hal-00733937, 2012.

[42] J. Breil, P.-H. Maire, A cell-centered diffusion scheme on two-dimensional unstructured meshes, Journal of Computational Physics 224 (2007) 785 823.

[43] P. Roe, Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes, Journal of Computational Physics 43 (1981) 357 372.

[44] B.van Leer, Towards the ultimate conservative difference scheme.V.A second-order sequel to Godunov's method, Journal of Computational Physics 32 (1979) 101 136.

Résumé :
Nous nous intéressons dans cette thèse au développement et à la mise en oeuvre de schémas numériques Volumes Finis d'ordre élevé pour des maillages non-structurés. Il s'agit de mettre en place les ingrédients numériques pour réaliser des simulations aux grandes échelles avec le code numérique elsA.
Les schémas numériques proposés sont basés sur une approche directionnelle, afin de limiter le coût CPU et de réduire la molécule de points. La partie convective du schéma numérique doit être d'ordre élevé. L'ordre élevé est obtenu en utilisant différents gradients sur un stencil prédéféni utilisant 4 cellules. Deux gradients sont utilisés pour la partie convective : le gradient Green-Gauss et le gradient "UIG".
Pour la partie diffusive, le gradient "UIG" est utilisé. Ce gradient a été développé durant la thèse et permet d'avoir un gradient moyen d'ordre 2 sur chaque interface. Ce gradient a été étudié et validé sur différents cas-tests.
Les schémas numériques d'ordre élevé ont été analysés théoriquement avec des analyses d'ordre et de stabilité. Il a été montré que ces schémas peuvent atteindre l'ordre 5 sur des hexaèdres et l'ordre 3 sur des triangles équilatéraux.
Suite à cette analyse, les différents schémas ont été d'abord testés en 1D sur un cas classique d'advection, puis ont été validés sur le cas de convection du vortex isentropique.

Mots-clés : Volumes Finis, schéma convectif d'ordre élevé, simulation aux grandes échelles, non-structuré, stencil directionnel, gradient

Abstract :
This study will present the development and results of high-order Finite Volume schemes for unstructured grids. The goal is to prepare numerical tools to perform Large Eddy Simulations with the indutrial solver elsA.
These numerical schemes are based on a directional approach in order to limitate the CPU cost and reduce the stencil. The convective part of the scheme needs to be high order and this is obtained by the use of gradients on a four-cell stencil. Two gradients are used for the convective part, the Green-Gauss gradient and the "UIG" gradient.
For the diffusive part, the "UIG" gradient is used. It was developped during this study and allows to recover a second-order accurate scheme. This gradient was validated theorically and numerically on some test cases.
High order numerical schemes were studied theorically with order and frequency analysis. It was shown that these schemes are fifth-order accurate on regular hexaedral elements and third-order accurate on equilateral triangles.
Following this analysis, these schemes were tested in 1D on an advection test case and were then validated on the convection of an isentropic vortex.

Keywords : Finite Volume, High Order convection scheme, Large Eddy Simulation, Unstructured, Directional stencil , Gradient