Principes de base des méthodes numériques utilisées dans le code SUNFLUIDH pour la simulation des écoulements incompressibles

Yann FRAIGNEAU

LIMSI-CNRS, Bâtiment 508, BP 133 F-91403 Orsay cedex, France

Table des matières

1	Intr	oduction	3										
2	Méthodes numériques pour la résolution des équations de Navier—Stokes												
	2.1	2.1 Présentation des équations de Navier-Stokes											
	2.2	Discrétisation des équations de Navier-Stokes	3										
		2.2.1 Maillages décalés	4										
		2.2.2 Discrétisation spatiale des termes de l'equation de Navier-Stokes	6										
		2.2.3 Discrétisation temporelle	9										
		2.2.4 Résolution du système de Helmholtz par la méthode ADI	10										
	2.3	Méthode de prédiction-projection incrémentale											
	2.4	Présentation de la méthode											
	2.5	Discrétisation de l'équation de Poisson	12										
3	Exte	ension aux équations de conservation de grandeurs scalaires	13										
4	Ren	arques sur les équations de Poisson et de Helmholtz discrétisées	13										
5	Conditions aux limites 14												
	5.1	Condition aux limites de type Dirichlet	14										
	5.2	Conditions aux limites de type Neumann	15										
	5.3	Conditions de symétrie	16										
	5.4	Conditions de frontière libre	16										
		5.4.1 Conditions d'entrée à débit imposé	16										
		5.4.2 Conditions de sortie	16										
	5.5	Conditions de paroi	17										

1 Introduction

L'objectif de ce document est de présenter les méthodes numériques utilisées dans le code SUNFLUIDH. Ce code a été développé en 2011 au LIMSI pour la simulation numérique des écoulements incompressibles et dilatables sous hypothèse de faible nombre de Mach. Il permet de traiter différents types d'écoulement de convection naturelle et forcée et offre la possibilité de définir une géométrie du milieu relativement complexe à l'aide de corps immergés de différentes formes. Le maillage étant de type cartésien, la seule restriction sur la géométrie est que les parois des corps immergés doivent être alignées avec le maillage. Le code possède également un jeu étendu de conditions aux limites permettant de définir un grand nombre de cas d'étude. Dans un souci de simplification, la présentation des méthodes numériques impliquées dans le code se limitera au cadre d'un écoulement incompressible bidimensionnel, où seule l'intégration numérique des équations de Navier-Stokes sera détaillée. Dans un premier temps, nous aborderons la notion de maillages décalés (de type MAC) utilisés pour la discrétisation des équations. Puis, nous présenterons les schémas de discrétisation spatiale et temporelle utilisés. Nous verrons comment l'hypothèse d'incompressibilité est imposée à l'aide de la méthode de prédiction-projection incrémentale. Un bref point sera fait sur les méthodes numériques utilisées pour intégrer les équations discrétisées. Enfin, nous passerons en revue les différents types de conditions aux limites définis dans le code.

2 Méthodes numériques pour la résolution des équations de Navier—Stokes

2.1 Présentation des équations de Navier-Stokes

Nous nous plaçons dans le contexte de la simulation des écoulements incompressibles sur un domaine borné Ω , limité par la frontière $\partial \Omega$. Dans le cas d'un écoulement monophasique, isotherme, à propriétés physiques uniformes et constantes, l'écoulement est gouverné par le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla)\vec{V} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \vec{V} & \text{sur } \Omega \\ \nabla . \vec{V} = 0 & \text{sur } \Omega \\ + Conditions \ aux \ limites & \text{sur } \partial \Omega \end{cases}$$

 \vec{V} et P étant les champs de vitesse et de pression, respectivement et ν la viscosité cinématique du fluide. Dans les sections suivantes, nous allons présenter les méthodes numériques adoptées pour discrétiser les équations de Navier–Stokes (*cf.* section 2.2) et pour garantir l'hypothèse d'incompressibilité du fluide (*cf.* section 2.3). Le traitement des conditions aux limites fera l'objet de la section 5.

2.2 Discrétisation des équations de Navier-Stokes

Les méthodes numériques présentées sont basées sur une approche volumes finis d'ordre deux en temps et en espace. La discrétisation spatiale des équations est réalisée sur maillages décalés en se basant sur les schémas numériques centrés. La discrétisation temporelle repose sur la méthode Euler retardé d'ordre 2 (ou Backward Differentiation Formula – BDF2). Afin de renforcer la stabilité numérique en fonction du pas de temps, nous utilisons une méthode semi-implicite, où seuls les termes visqueux des équations de Navier–Stokes sont définis à l'instant t^{n+1} . Les termes convectifs sont seulement définis explicitement, à partir des champs des grandeurs connues aux instants précédents (t^n et t^{n-1}). Cette approche permet d'accroître le pas de temps, la stabilité du schéma numérique étant principalement reliée à la condition CFL et non plus au critère de stabilité basé sur le Reynolds de maille, beaucoup plus sévère, induit par les termes visqueux dans un formalisme purement explicite. Le détail sur les méthodes de discrétisation est fournie dans les paragraphes suivants en se focalisant sur une configuration 2D, par souci de simplification des écritures.

2.2.1 Maillages décalés

La représentation discrète des champs de vitesse et de pression est effectuée sur maillages décalés. Chaque grandeur (pression et composantes de vitesse) est définie sur son propre maillage et les maillages se trouvent décalés les uns par rapport aux autres d'une demi-maille suivant une direction particulière . Autrement dit, si on définit la pression P au centre de la maille, les composantes de vitesse U et V sont localisées au centre des interfaces de la maille (*cf.* figure 1).



FIGURE 1 – Positions des composantes de vitesse U (rouge), V (bleu) et de la pression (noir) sur la grille de calcul.

Cette formulation présente l'énorme avantage d'assurer la concordance des opérateurs gradient, divergence et laplacien discretisés à l'ordre 2 et de respecter ainsi les relations vectorielles qui les relient. Il en résulte intrinsèquement une meilleure stabilité numérique de la méthode de prédiction–projection par rapport à une discrétisation sur maillage colocatif (toutes les grandeurs sont définies aux mêmes points de discrétisations d'un maillage unique). Il convient d'adopter une convention permettant de définir les différentes grandeurs sur une grille commune couvrant le domaine de calcul.

Considérons un domaine bidimentionnel rectangulaire D, de longueur L_x et de hauteur L_y . La position de chaque point du domaine est définie dans un repère cartésien orthonormé dont l'origine est placée dans le coin inférieur gauche par les coordonnées x, y. Dans un souci de simplification, le maillage est considéré cartésien, orthogonal et la discrétisation du domaine conduit à $N_x \times N_y$ mailles suivant les deux directions. Le maillage associé à la pression P, également commun à l'ensemble des grandeurs scalaires, que l'on notera \mathcal{M}_c , admet les caractéristiques suivantes (*cf.* figure 2) :

- les coordonnées discrètes $x_c(i)$ et $y_c(j)$ définissent la position du centre de la maille $\mathcal{M}_c(i, j)$, où sont localisées les grandeurs scalaires. (Le maillage étant cartésien, x ne dépend que de i et y que de j)
- les coordonnées $x_i(i)$ et $y_i(j)$ définissent la position des interfaces supérieures de la maille (i, j) et serviront à repérer les composantes de vitesse. Les relations entre les coordonnées des interfaces et centrées sont :

$$x_c(i) = \frac{x_i(i-1) + x_i(i)}{2}$$
$$y_c(j) = \frac{y_i(j-1) + y_i(j)}{2}$$

– les dimensions de chaque maille $\mathcal{M}_c(i, j)$ sont définies par :

$$\Delta X c_i = x_i(i) - x_i(i-1)$$

$$\Delta Y c_j = y_i(j) - y_i(j-1)$$

- Le volume de contrôle de la maille (la surface en 2D) est défini comme le produit des tailles de maille dans chacune des directions

$$\Delta V c_{i,j} = \Delta X c_i \cdot \Delta Y c_j$$

A partir des caractéristiques de \mathcal{M}_c , il est possible de définir les deux maillages décalés \mathcal{M}_u et \mathcal{M}_v associés aux composantes de vitesse U et V, respectivement. Les caractéristiques de chacune des grilles sont les suivantes (*cf.* figure 2) :

$$\mathcal{M}_{u} \begin{cases} \text{Coordonnées de } U_{i,j} &: (x_{i}(i), y_{c}(j)) \\ \text{Dimensions de maille} &: \\ \Delta X u_{i} = x_{c}(i+1) - x_{c}(i) \\ \Delta Y u_{j} = y_{i}(j) - y_{i}(j-1) = \Delta Y c_{j} \\ \text{Volume de contrôle} &: \\ \Delta V u_{i,j} = \Delta X u_{i} \times \Delta Y u_{j} \\ \text{Coordonnées de } V_{i,j} &: (x_{c}(i), y_{i}(j)) \\ \text{Dimensions de maille} &: \\ \Delta X v_{i} = x_{i}(i+1) - x_{i}(i) = \Delta X c_{i} \\ \Delta Y v_{j} = y_{c}(j+1) - y_{c}(j) \\ \text{Volume de contrôle} &: \\ \Delta V v_{i,j} = \Delta X v_{i} \cdot \Delta Y v_{j} \end{cases}$$



FIGURE 2 – Représentation complète des maillages décalés \mathcal{M}_c , \mathcal{M}_u et \mathcal{M}_v : Positions des différents jeux de coordonnées, de la pression (noir) et des composantes de vitesse U (rouge) et V (bleu) ainsi que des volumes de controle associés.

Les mailles périphériques de la grille de calcul sont réservées à la gestion des conditions aux limites, on les nomme mailles fictives ou fantômes (ghost cells). Si on considère que les trois grilles de calcul ont les mêmes dimensions $N_x \times N_y$ (pour des raisons pratiques de programmation liés à la taille des tableaux), alors les points discrets à l'intérieur du domaine de calcul sont :

 $\begin{array}{ll} \text{Pour}\mathcal{M}_{c} & : [2, N_{x} - 1] \times [2, N_{y} - 1] \\ \text{Pour}\mathcal{M}_{u} & : [2, N_{x} - 2] \times [2, N_{y} - 1] \\ \text{Pour}\mathcal{M}_{v} & : [2, N_{x} - 1] \times [2, N_{y} - 2] \end{array}$

On remarquera que les maillages décalés associés aux composantes de vitesse sont définies avec une maille de moins suivant la direction de la composante de vitesse concernée. Dans ce cas, les points associées aux conditions aux limites sont en coïncidence avec les bords du domaine de calcul. Sinon, ils se trouvent à l'exterieur du domaine de calcul et appartiennent aux mailles fictives (ghost cells) (*cf.* figure 3).

2.2.2 Discrétisation spatiale des termes de l'equation de Navier-Stokes

Considérons l'équation de Navier-Stokes pour les écoulement incompressible écrite sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + NL(\vec{V}) = -\nabla P + L(\vec{V})$$

L est l'opérateur associé aux flux visqueux et NL celui se rapportant aux flux de convection. Nous présentons dans cette section la discrétisation de ces opérateurs pour les deux com-



FIGURE 3 – Positions des composantes de vitesse et de la pression sur le maillage. Composante longitudinale de vitesse U (en rouge), composante normale de vitesse V (en bleu), pression (en noir). Noeuds à l'intérieur du domaine de calcul (cercles pleins), noeuds associés aux conditions aux limites (cercles vides).

posantes de vitesse U et V. Dans le cas des flux de convection, deux variantes couramment utilisées sont présentées : la formulation conservative ($NL = \nabla . ({}^t \vec{V} . \vec{V})$) et la formulation convective ($NL = (\vec{V} \cdot \nabla)\vec{V}$). Les propriétés physiques de l'écoulement sont supposées uniformes. La discrétisation est formulée à partir de schémas centrés du second ordre suivant une approche volumes finis, en se référant aux éléments de la métrique associés aux différents maillages décrits précédemment (les maillage étant supposés réguliers).

- Composantes GP du gradient de pression

Pour U

$$GP_{i,j} = \frac{P(i+1,j) - P(i,j)}{\Delta X u_i}$$

Pour ${\cal V}$

$$GP_{i,j} = \frac{P(i, j+1) - P(i, j)}{\Delta Y v_j}$$

- Flux visqueux

 $L_{i,j} = \nu . (D.\phi_{i,j} + a_{x,p}.\phi_{i+1,j} + a_{x,m}.\phi_{i-1,j} + a_{y,p}.\phi_{i,j+1} + a_{y,m}.\phi_{i,j-1}) \quad ; \quad \phi = U, V$ Les indices p et m désignent respectivement les interfaces de maille supérieures et inférieures où sont calculés les flux pour chacune des directions x et y. D et a sont les coefficients diagonaux et extra-diagonaux résultant du calcul de bilan de flux.

$$Pour U \begin{cases} a_{x,p} = \frac{1}{(x_i(i+1) - x_i(i)) \cdot \Delta X u_i} \\ a_{x,m} = \frac{1}{(x_i(i) - x_i(i-1)) \cdot \Delta X u_i} \\ a_{y,p} = \frac{1}{(y_c(j+1) - y_c(j)) \cdot \Delta Y u_j} \\ a_{y,m} = \frac{1}{(y_c(j) - y_c(j-1)) \cdot \Delta Y u_j} \\ a_{x,m} = \frac{1}{(x_c(i+1) - x_c(i)) \cdot \Delta X u_i} \\ a_{x,m} = \frac{1}{(x_c(i) - x_c(i-1)) \cdot \Delta X u_i} \\ a_{y,p} = \frac{1}{(y_i(j+1) - y_i(j)) \cdot \Delta Y u_j} \\ a_{y,m} = \frac{1}{(y_i(j) - y_i(j-1)) \cdot \Delta Y u_j} \\ D = -(a_{x,p} + a_{x,m} + a_{y,p} + a_{y,m}) \end{cases}$$

- flux de convection en formulation conservative

$$\text{Pour } U \begin{cases} \overline{U}_{i,j}^{,x} &= \frac{U_{i+1,j} + U_{i,j}}{2} \\ \overline{V}_{i,j}^{,x} &= \frac{V_{i+1,j} + V_{i,j}}{2} \\ \overline{U}_{i,j}^{,y} &= \frac{U_{i,j+1} + U_{i,j}}{2} \\ NL_{i,j} &= \frac{\overline{U}_{i,j}^{,x} \cdot \overline{U}_{i,j}^{,x} - \overline{U}_{i-1,j}^{,x} \cdot \overline{U}_{i-1,j}^{,x}}{\Delta X u_{i}} + \frac{\overline{U}_{i,j}^{,y} \cdot \overline{V}_{i,j}^{,x} - \overline{U}_{i,j-1}^{,y} \cdot \overline{V}_{i,j-1}^{,x}}{\Delta Y u_{j}} \\ \end{cases} \\ \text{Pour } V \begin{cases} \overline{V}_{i,j}^{,x} &= \frac{V_{i+1,j} + V_{i,j}}{2} \\ \overline{U}_{i,j}^{,y} &= \frac{U_{i,j+1} + U_{i,j}}{2} \\ \overline{V}_{i,j}^{,y} &= \frac{V_{i,j+1} + V_{i,j}}{2} \\ NL_{i,j} &= \frac{\overline{U}_{i,j}^{,y} \cdot \overline{V}_{i,j}^{,x} - \overline{U}_{i-1,j}^{,y} \cdot \overline{V}_{i-1,j}^{,x}}{\Delta X v_{i}} + \frac{\overline{V}_{i,j}^{,y} \cdot \overline{V}_{i,j}^{,y} - \overline{V}_{i,j-1}^{,y} \cdot \overline{V}_{i,j-1}^{,y}}{\Delta Y v_{j}} \end{cases} \end{cases}$$

- flux de convection en formulation convective

$$\begin{aligned} \operatorname{Pour} U \begin{cases} \overline{V}_{i,j}^{,x} &= \frac{V_{i+1,j} + V_{i,j}}{2} \\ NL_{i,j} &= \frac{1}{2} U_{i,j} \left(\frac{U_{i+1,j} - U_{i,j}}{\Delta X c_{i+1}} + \frac{U_{i,j} - U_{i-1,j}}{\Delta X c_{i}} \right) \\ &+ \frac{1}{2} \left(\overline{V}_{i,j}^{,x} \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{\Delta Y v_{j}} + \overline{V}_{i,j-1}^{,x} \frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{\Delta Y v_{j-1}} \right) \\ \\ \operatorname{Pour} V \begin{cases} \overline{U}_{i,j}^{,y} &= \frac{U_{i,j+1} + U_{i,j}}{2} \\ NL_{i,j} &= \frac{1}{2} \left(\overline{U}_{i,j}^{,y} \frac{V_{i+1,j} - V_{i,j}}{\Delta X u_{i}} + \overline{U}_{i-1,j}^{,y} \frac{V_{i,j} - V_{i-1,j}}{\Delta X u_{i-1}} \right) \\ &+ \frac{1}{2} V_{i,j} \left(\frac{V_{i,j+1} - V_{i,j}}{\Delta Y c_{j+1}} + \frac{V_{i,j} - V_{i,j-1}}{\Delta Y c_{j}} \right) \end{aligned}$$

2.2.3 Discrétisation temporelle

La discrétisation temporelle repose sur un schéma de type euler retardé d'ordre deux (ou Backward Differentiation Formula – BDF2). Si on suppose le pas de temps d'intégration numérique Δt constant, ce schéma s'écrit de la façon suivante :

$$\left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t}\right)^{n+1} = \frac{3\mathbf{V}^{n+1} - 4\mathbf{V}^n + \mathbf{V}^{n-1}}{2\Delta t} + O(\Delta t^2)$$

V définit l'une ou l'autre des composantes de vitesse (U, V). L'exposant n indique l'état du champ de vitesse à l'instant t_n . Afin de relaxer la contrainte de stabilité numérique sur le pas de temps, nous utilisons une version semi-implicite des équations de Navier-Stokes, c'est à dire que seuls les termes visqueux sont définis à l'instant t_{n+1} . Le bilan des flux convectifsNLest estimé à l'instant t_{n+1} par extrapolation linéaire des flux calculés aux instants t_n et t_{n-1} comme suit :

$$NL^{n+1} = 2NL^n - NL^{n-1}$$

La composante adéquate du gradient de pression GP est définie explicitement pour des raisons liées à la méthode de prédiction-projection que nous présenterons plus tard. Nous obtenons alors la formulation semi-discrète suivante :

$$\frac{3\mathbf{V}^{n+1} - 4\mathbf{V}^n + \mathbf{V}^{n-1}}{2\Delta t} + NL^{n+1} = -GP^n + \nu \,\nabla^2 \,\mathbf{V}^{n+1}$$

Ce qui nous conduit à la résolution d'une équation de type Helmholtz pour chacune des composantes de vitesse :

$$\left(\mathbb{1} - \frac{2\nu\Delta t}{3}\nabla^2\right) V^{n+1} = S_V$$

avec

$$S_V = \frac{4\mathbf{V}^n - \mathbf{V}^{n-1}}{3} - \left(GP^n + NL^{n+1}\right) \cdot \frac{2\Delta t}{3}$$

2.2.4 Résolution du système de Helmholtz par la méthode ADI

Ce système peut être résolu à l'aide d'une approche directe, comme la méthode ADI (Alternating Direction Implicit method). La discrétisation spatiale des équations de Navier–Stokes étant à l'ordre 2, l'opérateur de Helmholtz à la particularité d'être tridiagonal par bande (tridiagonale en 1D, pentadiagonal en 2D, heptadiagonal en 3D) et à diagonale dominante. Il est alors possible d'approcher cet opérateur par une factorisation des opérateurs tridiagonaux 1Dassociées à chacune des directions du problème. En 2D, on obtient

$$\left(\mathbb{1} - \frac{2\nu\Delta t}{3}\nabla^2_{\cdot}\right) \approx \left(\mathbb{1} - \frac{2\nu\Delta t}{3}\nabla^2_{x}\right) \left(\mathbb{1} - \frac{2\nu\Delta t}{3}\nabla^2_{y}\right)$$

Toutefois, pour conserver l'ordre 2 en temps, il convient de légèrement modifier la discrétisation des équations de Navier-Stokes de manière à ce que l'inconnue du système de Helmholtz ne soient plus le champ \mathbf{V}^{n+1} mais son incrément temporel $\Delta \mathbf{V} = \mathbf{V}^{n+1} - \mathbf{V}^n$. Pour faire apparaître cet incrément, il suffit simplement d'ajouter et soustraire aux équations de Navier-Stokes discrétisées la contribution explicite des flux visqueux :

$$\frac{3\mathbf{V}^{n+1} - 4\mathbf{V}^n + \mathbf{V}^{n-1}}{2\Delta t} = -GP^n + \nu \nabla \cdot^2 \mathbf{V}^{n+1} - NL^{n+1}$$
$$= -GP^n + \nu \nabla \cdot^2 \mathbf{V}^{n+1} - \nu \nabla \cdot^2 \mathbf{V}^n + \nu \nabla \cdot^2 \mathbf{V}^n - NL^{n+1}$$
$$= -GP^n + \nu \nabla \cdot^2 \left(\mathbf{V}^{n+1} - \mathbf{V}^n\right) + \nu \nabla \cdot^2 \mathbf{V}^n - NL^{n+1}$$

On peut alors reformuler le système de Helmholtz initial suivant la forme incrémentale

$$\left(\mathbb{1} - \frac{2\nu\Delta t}{3}\nabla^2\right)\Delta V^{n+1} = S_V$$

avec

$$S_V = \frac{\mathbf{V}^n - \mathbf{V}^{n-1}}{3} - \left(GP^n + NL^{n+1} + \nu + \nabla^2 \mathbf{V}^n\right) \cdot \frac{2\Delta t}{3}$$

Comme nous l'avons déjà précisé, la résolution de ce système bidimensionnel par la méthode ADI revient à approcher l'opérateur de Helmholtz par factorisation de deux opérateurs monodimensionnels

$$\left(\mathbb{1} - \frac{2\nu\Delta t}{3}\nabla_x^2\right) \left(\mathbb{1} - \frac{2\nu\Delta t}{3}\nabla_y^2\right) \Delta V^{n+1} = S_V$$

Ce qui permet de substituer la résolution du système initial par la résolution successive de deux systèmes mono-dimensionnels

$$\begin{cases} \left(\mathbb{1} - \frac{2\nu\Delta t}{3}\nabla_x^2\right)\Delta V^* = S_V\\ \left(\mathbb{1} - \frac{2\nu\Delta t}{3}\nabla_y^2\right)\Delta V^{n+1} = \Delta V^* \end{cases}$$

La discrétisation spatiale de l'opérateur laplacien étant réalisée au second ordre, les systèmes sont tridiagonaux à diagonale dominante et peuvent être résolus de manière très efficace à l'aide de l'algorithme de Thomas. Dans le cas d'une configuration géométrique tridimensionnelle, la méthode est identique si ce n'est qu'il y a trois système à résoudre au lieu de deux.

2.3 Méthode de prédiction–projection incrémentale

2.4 Présentation de la méthode

Après avoir présenté la façon de calculer l'avancement temporel du champ de vitesse, nous allons voir comment satisfaire la contrainte à divergence nulle sur le champ de vitesse. En fait, cette méthode nous permet à la fois de calculer la mise à jour du champ de pression P^{n+1} et de satisfaire la contrainte ∇ . $V^{n+1} = 0$. Elle repose sur le théorème de Hodge–Helmholtz.

Soit un champ vectoriel $\overrightarrow{V^*}$ de classe $\mathcal{C}^1(\Omega, \mathbb{R}^3)$ ou Ω est soit un domaine compact et connexe¹ de frontière $\partial\Omega$ supposée régulière (ou régulière par morceaux), soit \mathbb{R}^3) lui-même. Alors $\exists \overrightarrow{A} \in \Omega$ et $\exists \psi \in \Omega$ tel que :

$$\overrightarrow{V^*} = \nabla \times \vec{A} + \nabla \psi$$

Si un champ vectoriel \vec{V} est solénoïdal (∇ . $\vec{V} = 0$), alors \vec{V} dérive d'un potentiel vecteur, c'est à dire que :

$$\vec{V} = \nabla \times \vec{A}$$

Appelons V^* le champ de vitesse obtenu à t_{n+1} à partir de l'intégration des équations de Navier–Stokes suivant la méthode décrite précédemment (*cf.* section 2.2). Ce champ n'est pas à divergence nulle, mais à partir de la décomposition de Hodge–Helmholtz, il est possible de définir le champ de vitesse solénoïdal V^{n+1} que l'on souhaite obtenir comme

$$\mathbf{V}^{n+1} = \mathbf{V}^* -
abla \psi$$

Il reste alors à formuler une équation pour calculer ψ . Pour cela, on reprend les équations de Navier–Stokes utilisées pour calculer V^* où le gradient de pression est défini de manière explicite (en t_n) et on considère V^{n+1} solution de la même équation à la différence près que le gradient de pression est défini à l'instant t_{n+1} . Les autres termes étant de nature explicite (rappelons que NL^{n+1} est une estimation résultant d'une extrapolation linéaire), ils demeurent inchangés.

$$\frac{3\mathbf{V}^* - 4\mathbf{V}^n + \mathbf{V}^{n-1}}{2\Delta t} + NL^{n+1} = -\nabla P^n + \nu \nabla \cdot^2 \mathbf{V}^*$$
$$\frac{3\mathbf{V}^{n+1} - 4\mathbf{V}^n + \mathbf{V}^{n-1}}{2\Delta t} + NL^{n+1} = -\nabla P^{n+1} + \nu \nabla \cdot^2 \mathbf{V}^{n+1}$$

En soustrayant la première équation à la seconde, en appliquant l'opérateur divergence au résultat et en considérant que ∇ . $\mathbf{V}^{n+1} = 0$, on obtient l'équation de Poisson suivante² :

$$\nabla^2 \phi = \frac{3 \nabla V^*}{2\Delta t}$$

avec $\phi = (P^{n+1} - P^n) + \nu \nabla V^*$

La résolution de l'équation de Poisson avec les conditions aux limites appropriées permet simultanément la mise à jour du champ de pression et du champ de vitesse à divergence nulle

^{1.} Cette hypothèse n'est pas essentielle puisque le théorème peut s'appliquer séparément sur chaque partie connexe

^{2.} En prenant la forme incrémentale des équations de Navier-Stokes discrétisées, nous aurions obtenu le même résultat.

à l'aide des relations suivantes :

$$P^{n+1} = P^n + \phi - \nu \nabla \cdot \mathbf{V}^*$$
$$\mathbf{V}^{n+1} = \mathbf{V}^* - \Delta t \nabla \phi$$

On remarque que ϕ n'est autre qu'un champ scalaire identique à ψ à un coefficient Δt près. Dans la pratique, notamment lorsque la vicosité cinématique du fluide n'est pas uniforme (à cause d'une dépendance en température par exemple), on a tendance à négliger le terme associé aux effets visqueux pour la mise à jour de la pression, ce terme prenant une forme beaucoup plus complexe alors qu'il est en fait d'autant plus négligeable que le nombre de Reynolds est élevé. En résumé, l'avancement temporel du champ de vitesse et de la pression s'effectue en deux étapes : En résumé, l'avancement temporelle du champ de vitesse et de la pression s'effectue en deux étapes :

- L'étape de prédiction où les équations de Navier-Stokes sont résolues suivant la méthode décrite section 2.2 pour estimer le nouveau champ de vitesse, mais où l'hypothèse d'imcompressibilité n'est pas satisfaite.
- La résolution d'une équation de Poisson pour obtenir un champ scalaire qui correspond à l'incrément temporel de la pression et dont le gradient permet de corriger le champ de vitesse de manière à satisfaire la contrainte à divergence nulle. C'est l'étape de projection.

2.5 Discrétisation de l'équation de Poisson

Le champ discret de ϕ , à l'instar de la pression, est défini sur le maillage \mathcal{M}_c . En configuration 2D, la discrétisation de l'opérateur laplacien est formulée de la façon suivante :

$$L_{i,j} = (D.\phi_{i,j} + a_{x,p}.\phi_{i+1,j} + a_{x,m}.\phi_{i-1,j} + a_{y,p}.\phi_{i,j+1} + a_{y,m}.\phi_{i,j-1})$$

$$\begin{cases}
a_{x,p} = \frac{1}{(x_c(i+1) - x_c(i)) \cdot \Delta X c_i} \\
a_{x,m} = \frac{1}{(x_c(i) - x_c(i-1)) \cdot \Delta X c_i} \\
a_{y,p} = \frac{1}{(y_c(j+1) - y_c(j)) \cdot \Delta Y c_j} \\
a_{y,m} = \frac{1}{(y_c(j) - y_c(j-1)) \cdot \Delta Y c_j}
\end{cases}$$

 $D = -(a_{x,p} + a_{x,m} + a_{y,p} + a_{y,m})$ La divergence du champ de vitesse V^* est définie au centre des mailles $\mathcal{M}_c(i, j)$ comme :

$$\nabla . \left(\mathbf{V}^* \right)_{i,j} = \frac{U_{i,j} - U_{i-1,j}}{\Delta X c_i} + \frac{V_{i,j} - V_{i,j-1}}{\Delta Y c_j}$$

La résolution du système $L \cdot \phi = \frac{3 \cdot div(\mathbf{V}^*)}{2\Delta t}$ peut être réalisée à l'aide de différentes méthodes itératives. Nous retiendrons ici la méthode de Gauss-Seidel Relaxé couplée à une méthode multigrille qui presente le double avantage d'être efficace et adaptée à tous types de configurations géométriques.

3 Extension aux équations de conservation de grandeurs scalaires

Toute grandeur scalaire Ψ est définie sur le même maillage \mathcal{M}_c que la pression. Il peut s'agir de la température T, de la concentration d'une espèce C ou autre. Supposons que cette grandeur Ψ soit gouvernée par une simple équation d'advection-diffusion :

$$\begin{cases} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \Psi = \kappa \, \nabla^2 \Psi & \text{sur } \Omega \\ + Conditions \ aux \ limites & \text{sur } \partial \Omega \end{cases}$$

(Où κ représente la conductivité thermique, si $\Psi = T$, ou le coefficient de diffusion, si $\Psi = C$.)

En utilisant la métrique associée au maillage \mathcal{M}_c , la discrétisation spatiale et temporelle à l'ordre 2 de cette équation en suivant la même méthodologie que celle utilisée pour les équations de Navier-Stokes (*cf.* section 2.2) conduit à la formulation d'une équation de type Helmholtz analogue qui peut également être résolue par la méthode ADI (*cf.* section 2.2.4).

4 Remarques sur les équations de Poisson et de Helmholtz discrétisées

Dans le cadre d'une discrétisation spatiale d'ordre deux telle que nous l'avons présentée, la formulation implicite de ces équations conduit à la résolution d'un système matriciel possédant la même structure de type tridiagonale par rapport à une direction donnée (tridiagonale en 1D, penta-diagonale en 2D, hepta-diagonale en 3D). En se plaçant dans une configuration monodimensionnelle constituée d'une grille de calcul à N points, les systèmes d'équations discrètes de Helmholtz ou de Poisson s'écrivent sous la forme :

$$\begin{pmatrix} d_1 & ep_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & em_i & d_i & ep_i & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & \cdots & \cdots & 0 & em_N & d_N \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta \Phi_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \delta \Phi_i \\ \vdots \\ \vdots \\ \delta \Phi_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_1 \\ \vdots \\ s_i \\ \vdots \\ s_N \end{pmatrix}$$

 $\delta\Phi$ représentant l'incrément temporel associé à la grandeur Φ intégrée entre les instants t_n et t_{n+1} (composantes de vitesse, pression, température, ...). Les éléments non-nuls des matrices sont facilement identifiables en se référant à la discrétisation des termes visqueux des équations de Navier-Stokes ou de l'opérateur laplacien (*cf.* sections 2.2.2 et 2.5). Rappelons que les termes diagonaux sont directement dépendants des termes extra-diagonaux :

- Pour l'équation de Poisson (laplacien) :

$$d_i = -(em_i + ep_i)$$

- Pour l'équation de Helmhotz :

$$d_i = 1 - (em_i + ep_i)$$

Ce formalisme va nous permettre de définir les différents types de conditions aux limites classiques rencontrés dans les problèmes de simulation numérique.

5 Conditions aux limites

Dans cette section, nous allons nous intéresser à la formulation des conditions aux limites associées aux équations de Navier–Stokes et de Poisson dans le cadre de la méthode de prédiction–projection que nous venons de présenter. Afin de simplifier les écritures, nous nous limiterons à une formulation mono-dimensionnelle où l'indice l fera référence aux indices de maille dans une direction perpendiculaire au plan définissant la limite du domaine de calcul (cf. figure 4). Mais le principe reste le même dans les configurations 2D et 3D.

Comme nous l'avons signalé section 2.2.1, nous avons défini les limites du domaine en coïncidence avec les interfaces du maillage \mathcal{M}_c associé aux grandeurs scalaires. De ce fait, seule la composante normale de vitesse est directement positionnée sur le plan limite. Pour les autres grandeurs, le plan limite est localisé entre deux nœuds de discrétisation (cf. figure 4). Nous référencerons par l'indice BC la position de la condition aux limites de chaque grandeur $\Phi = \{U, V, P\}$ et par l'indice $BCS = BC \pm 1$, l'indice de la maille voisine appartenant au domaine de calcul (le signe est relatif à la position du plan limite sur l'interface supérieure ou inférieure de la maille).

Dans les sections suivantes, nous passons en revue les conditions aux limites les plus souvent utilisées.



FIGURE 4 – Définition de la position des conditions aux limites de vitesse et de pression par rapport au maillage M_c .

5.1 Condition aux limites de type Dirichlet

C'est la condition pour laquelle la grandeur aux limites est fixée. Si la condition de Dirichlet est directement définie sur un nœud du maillage, alors :

$$\Phi_{BC} = \Phi_0$$

 Φ_0 étant la valeur que l'on cherche à imposer. Les éléments du système matriciel sont modifiés comme suit :

$$em_{BC} = ep_{BC} = 0; d_{BC} = 1; s_{BC} = \Delta \Phi_0$$

 $\delta \Phi_0$ étant l'incrément temporel correspondant à la valeur que l'on cherche à imposer à l'instant t_{n+1} (On rappelle que les équations de Helmholtz ou de Poisson sont sous forme incrémentale, c'est à dire que leur solution se rapporte à l'incrément temporel $\delta \Phi = \Phi_{n+1} - \Phi_n$ plutôt que Φ_{n+1}).

Il peut arriver que l'on souhaite imposer la condition de Dirichlet à l'interface de la maille qui se trouve en coïncidence avec le plan limite, où il n'existe pas de point de discrétisation pour la grandeur concernée (par exemple, une condition de non-glissement de la vitesse tangentielle à la paroi). Dans ce cas, on suppose que la valeur imposée Φ_0 est bien définie sur le plan limite, à mi-chemin entre les points d'indices BCS et BC. La condition aux limites dans la maille fictive est alors définie par extrapolation linéaire :

$$\Phi_{BC} = 2 \cdot \Phi_0 - \Phi_{BCS}$$

Pour le système matriciel, on a recourt à une petite astuce qui consiste à supposer que le point de discrétisation BC est bien défini sur le plan limite (même si dans les faits, il est situé une demi-maille plus loin, au centre de la maille fantôme). Les éléments du système matriciel sont modifiés comme suit : On a toujours :

$$em_{BC} = ep_{BC} = 0; d_{BC} = 1; s_{BC} = \delta\Phi_0$$

Mais on corrige également les éléments matriciels en *BCS*. Si le plan limite est défini sur l'interface supérieure de maille $l + \frac{1}{2}$, alors :

- on corrige $ep_{BCS} = \frac{ep_{BCS}}{2}$ (la distance au plan limite étant d'une demi-maille).
- on redéfinit le terme diagonal d_{BCS} à partir de la relation correspondante associée au système de Helmholtz ou de Poisson (*cf.* section 5).
- s_{BCS} et em_{BCS} restent inchangés.

Si le plan limite est défini sur l'interface inférieure de maille $l - \frac{1}{2}$, alors :

- on corrige $em_{BCS} = \frac{em_{BCS}}{2}$.
- on redéfini le terme diagonal d_{BCS} à partir de la relation correspondante associée au système de Helmholtz ou de Poisson (*cf.* section 5).
- s_{BCS} et ep_{BCS} reste inchangés.

5.2 Conditions aux limites de type Neumann

C'est la condition pour laquelle la valeur dérivée première de la grandeur Φ , notée $\partial_{BC}\Phi$ est imposée entre les points discrets BC et BCS. Soit h la distance entre ces deux points, la condition aux limites explicite alors définie par la relation :

$$\Phi_{BC} = \Phi_{BCS} \mp \partial_{BC} \Phi \cdot h$$

Le signe dépend si la condition aux limite est associée à l'interface de maille supérieure $l + \frac{1}{2}$ ou inférieure $l - \frac{1}{2}$. Les éléments du système matriciel sont modifiés comme suit :

- on corrige $ep_{BCS} = 0$
- on redéfinit le terme diagonal d_{BCS} à partir de la relation correspondante associée au système de Helmholtz ou de Poisson (*cf.* section 5)

$-s_{BCS}$ et em_{BCS} restent inchangés

Précisons que le fait de mettre à zero le terme extra-diagonal découle du fait que la dérivée des incréments temporels de Φ est nulle si $\partial_{BC}\Phi$ est constant au cours du temps. De ce fait, on notera que la valeur de Φ_{BC} est isolée du système et nécessitera une mise à jour explicite après résolution du système matriciel.

Rappelons que les conditions de type Neumann sont les conditions aux limites usuelles pour la résolution de l'équation de Poisson.

5.3 Conditions de symétrie

Si l'on considère que le plan limite est un plan de symétrie, alors les conditions de symétrie sont définis comme une condition de Dirichlet à valeur nulle pour la composante de vitesse normale qui est directement définie sur le plan et une condition Neumann à dérivée nulle pour toutes les autres grandeurs.

5.4 Conditions de frontière libre

Ce sont les conditions aux limites les plus délicates à définir. Elles dépendent beaucoup du contexte de la simulation que l'on cherche à réaliser et de manière générale, on peut dire que c'est un sujet de recherche encore ouvert, notamment dans le domaine des écoulements incompressible. Dans l'hypothèse d'écoulements de convection forcée, les conditions de frontières libres peuvent être grandement simplifiées en ce sens qu'elles se réduisent généralement à des conditions d'entrée à débit imposé (écoulement forcément rentrant) ou de sortie (écoulement exclusivement sortant).

5.4.1 Conditions d'entrée à débit imposé

Les conditions aux limites pour chaque composante de vitesse sont de type Dirichlet (ce qui revient à fixer le débit de l'écoulement), il en est généralement de même pour la température. Les conditions sur la pression sont de type Neumann en considérant une dérivée nulle.

5.4.2 Conditions de sortie

Ces conditions peuvent être plus ou moins sophistiquées. Nous présentons ici la version la plus simple : toutes les grandeurs sont définies par des conditions de type Neumann. Toutefois une correction supplémentaire est apportée à la composante normale de vitesse afin de respecter la conservation de la masse, et donc la condition d'incompressibilité. Par conséquent, une correction sur la composante normale du champ de vitesse est définie de telle sorte à satisfaire la conservation du débit.

$$U_{BC} = U_{BCS} + \epsilon$$
$$\epsilon = \frac{1}{S}(Q_0 - \int_S U_{BCS} \cdot dS)$$

S étant la surface du plan de sortie et Q_0 , le débit d'entrée.

5.5 Conditions de paroi

Pour les composantes de vitesse, on applique généralement des conditions de Dirichlet de valeur nulle traduisant les conditions classiques d'adhérence et d'imperméabilité pour les composantes tangentielles et normale, respectivement. Les conditions de Dirichlet sont toujours définies sur le plan limite associé à la paroi. Pour la composante normale de vitesse, elles sont donc directement définies sur le noeud discret positionné sur la paroi, pour les composantes tangentielles, elles sont définies à mi-distance des points de discrétisation, l'un étant dans l'écoulement, l'autre dans partie solide définissant la paroi. Les conditions sur la pression sont de type Neumann en considérant une dérivée nulle. Les conditions aux limites sur les quantités scalaires telles que la température peuvent être soit de type Dirichlet (grandeur imposée) ou de type Neumann (flux de la grandeur imposé). A l'instar des composantes tangentielles de vitesse, les conditions aux limites sont définies au niveau de la paroi, à mi-distance des noeuds fluide et solide.

5.6 Conditions de périodicité

Pour l'ensemble des grandeurs physiques, les conditions périodiques sont définies telles que :

$$\Phi_{BC} \begin{cases} \Phi_1 = & \Phi_{N-1} \\ \Phi_N = & \Phi_2 \end{cases}$$

Lorsque le système tridiagonal défini section 4 est résolu par une méhode itérative, alors il suffit simplement de mettre à jour les conditions aux limites après chaque itération. Si la résolution du système est réalisée au moyen d'une méthode directe, alors le système tridiagonale, dont la taille initiale est $N \times N$, est modifié afin d'y incorporer les conditions aux limites périodiques. Le nouveau système est alors de taille $N - 1 \times N - 1$ et prend la forme suivante :

$\int d_1$	ep_1	0	•••	•••	•••	ep_{N-1}		$\langle \delta \Phi_1 \rangle$		$\left(\begin{array}{c} s_1 \end{array} \right)$
··.	·.	۰.	·			0		÷		
0	۰.	·	۰.	۰.		÷		:		:
:	۰.	em_i	d_i	ep_i	·	÷	•	$\delta \Phi_i$	=	s_i
:		۰.	۰.	·	·	0		:		:
0			۰.	۰.	·	·		÷		
em_1		• • •	• • •	0	em_{N-1}	d_{N-1}		$\left(\delta\Phi_{N-1}\right)$		(s_{N-1})

Après la résolution de ce système, il ne reste plus qu'à effectuer la mise à jour des grandeurs $\Phi_{BC=N} = \Phi_2$.