

RAPPORT DE STAGE
Master 2 Professionnel
Modèles Mathématiques et Méthodes Informatiques
UFR MIG
Université Paul Sabatier
Lieu de Stage : **CERFACS**

Sujet du stage :

MISE EN ŒUVRE D'UNE APPROCHE NON STRUCTURÉE DANS
elsA

présenté par :
Arnaud Fosso Pouangué

soutenu le 06 septembre 2007

Tuteur de Stage : M. Abdel Kader MOJTABI (UPS)
Maître de Stage : M. G. PUIGT (CERFACS)



Référence CERFACS : WN/CFD/07/88

Table des matières

Remerciements	4
Introduction	5
1 Généralités	7
1.1 Equations d'Euler et de Navier-Stokes	7
1.2 Approche VF	7
1.2.1 Principe	8
1.2.2 Discrétisation des flux	9
1.3 Etat des lieux dans elsA structuré	9
1.3.1 Les solveurs convectifs	10
1.3.2 Les solveurs diffusifs	10
2 Solveurs diffusifs en non structuré	11
2.1 Deux grandes approches VF	11
2.2 Solveurs diffusifs	12
2.2.1 Méthode “5p”	12
2.2.2 Méthode “arête”	12
2.2.3 Méthodes “diamant”	13
2.2.4 Méthode d'Eymard et al.	14
2.2.5 Méthode des moindres carrés	15
2.2.6 Méthodes inspirées des Eléments Finis (EF)	15
2.2.7 Conclusion sur les solveurs diffusifs	15
3 Etude de la convergence des solveurs diffusifs	16
3.1 Problème d'étude	16
3.2 Rappels pour l'étude théorique	17
3.2.1 Consistance	17
3.2.2 Stabilité	18
3.3 Etude théorique	19
3.3.1 Maillage de carrés	20
3.4 Tests numériques	21
3.4.1 Principe	22

3.4.2	Résultats numériques	23
4	Construction d'une version hybride d'elsA	28
4.1	Algorithmique et structures de données	28
4.1.1	Structures de données	28
4.1.2	Algorithmes	29
4.2	Conditions de raccord entre blocs	30
4.2.1	Condition de raccord entre blocs non-structurés.	30
4.2.2	Condition de raccord entre blocs structurés et non-structurés	31
4.3	Implantation dans elsA	33
4.3.1	Etat initial	33
4.3.2	Travaux en cours	33
4.3.3	Perspectives immédiates	34
	Conclusion	35
	Bibliographie	37

Remerciements

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

Je remercie le professeur Abdel Kader MOJTABI d'avoir accepté d'encadrer ce stage.

Je remercie très sincèrement mon maître de stage, Guillaume PUIGT pour son inégalable disponibilité et ses conseils qui ont été indispensables à l'avancement de ce projet.

Je remercie aussi très amicalement mes collègues Fahmi BEN AHMED, Emmanuel GERMAINE et Jean DASSÉ pour leur aide et leur agréable compagnie.

Mes remerciements s'adressent aussi à toute l'équipe CFD particulièrement les membres de AAM, les stagiaires et doctorants qui ont permis que ce stage se passe dans une atmosphère des plus agréables.

Je veux exprimer ma profonde gratitude à mes parents qui ont consenti d'énormes sacrifices pour que cette première année en France se passe dans les meilleures conditions. Je leur dédie toute la réussite que je pourrai avoir.

A tous ceux et celles que je ne peux nommer ici, je vous prie de trouver dans cette dernière phrase ma reconnaissance pour tout le soutien et l'encouragement que vous m'avez prodigué durant ce travail

Introduction

elsA (ensemble logiciel de simulation en Aérodynamique) est un code industriel développé par l'ONERA en collaboration avec le CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique) permettant, sur une plateforme unique, la simulation en Aérodynamique interne et externe. **elsA** permet aussi la résolution des équations RANS et U-RANS avec modèles de turbulence. La méthode de discrétisation est la méthode des Volumes Finis (VF) qui est actuellement implantée en utilisant des maillages structurés (ensembles d'hexaèdres repérés par des triplets (i, j, k)).

Quoiqu'offrant de nombreuses facilités pour l'implantation de méthodes numériques grâce à son type de repérage, les maillages structurés rendent difficile la prise en compte de géométries complexes. L'implantation d'une approche non structurée (maillages contenant des tétraèdres, pyramides, prismes qui n'utilise pas un repérage de type (i, j, k)) s'avère donc nécessaire compte tenu des besoins industriels que **elsA** doit satisfaire.

Toutefois, une étude, effectuée par Jameson et présentée en 2004, a montré que des calculs effectués sur un maillage structuré d'hexaèdres comme s'il était non structuré entraîne un surcoût de 25% en temps CPU, ce qui est énorme du point de vue des applications industrielles. La meilleure solution est donc celle d'une approche hybride permettant des calculs par blocs, les uns étant structurés et les autres non-structurés.

La réalisation de cette version hybride requiert de répondre à un certain nombre de préoccupations. Tout d'abord il faut pouvoir définir des solveurs vérifiant un certain nombre de contraintes :

- précision ;
- robustesse ;
- compatibilité avec **elsA** existant, i.e. que l'on retombe sur les solveurs utilisés par les solveurs d'**elsA** structuré lorsque le maillage est composé d'hexaèdres ;
- faibles coûts de calculs.

Il est naturel de penser à adapter les solveurs d'**elsA** structuré mais cette adaptation n'est pas toujours évidente à réaliser. Par exemple, il est d'usage de mettre au point des schémas de plus en plus précis en structuré au prix d'un stencil (nombre de cellules voisines intervenant dans le calcul) plus élevé. Cette possibilité est réduite sur des maillages non structurés car les informations de connectivité ne sont pas implicites mais doivent être stockées. Il va donc y avoir un surcoût de taille mémoire et de recherche pour retrouver les informations dans le voisinage d'un élément. De plus les éléments du maillage non structurés peuvent être très déformés et de nature géométrique différente. Ceci peut mettre en défaut les bonnes

propriétés du schéma adapté. Ces aspects rendent difficile la mise en œuvre des solveurs. En particulier, les solveurs diffusifs qui requièrent l'évaluation des gradients aux interfaces seront un aspect majeur dans la réalisation de la version hybride d'**elsA**.

Comme cela a déjà été dit, du fait que la connectivité n'est plus implicite, les maillages non structurés vont requérir de conserver plus d'informations en mémoire. Un effort de conception important sera consacré à trouver comment doivent être stockées les informations sur les éléments du maillage pour trouver le meilleur compromis entre espace mémoire et durée de traitement. Naturellement, les solutions envisageables seront dépendantes des solveurs utilisés, ainsi les aspects algorithmique et structures de données pourront donc influencer sur le choix des solveurs en vue d'obtenir de bonnes performances.

Une autre préoccupation importante est la mise en œuvre du calcul par blocs, notamment la gestion des conditions de raccords entre blocs (entre blocs non structurés et entre bloc structuré et non structuré). La différence de structuration entre les deux types de blocs engendre un certain nombre de difficultés à résoudre.

Ce document est le rapport du stage effectué au CERFACS en vue de l'obtention du diplôme de Master 2 Professionnel Modèles Mathématiques et Méthodes Informatiques. Le but du stage est de participer à la réalisation de cette version hybride d'**elsA**. Cette participation consiste notamment en :

- l'étude théorique de l'adaptation des solveurs convectifs (Roe + MUSCL, Jameson) ;
- l'étude et l'implémentation de solveurs diffusifs ;
- l'analyse des besoins en terme d'algorithmique et de structures de données ;
- l'étude des conditions de raccord ;
- l'étude de la mise en œuvre de modèles de turbulence à équations de transport.

Toutefois, une présentation détaillée de tout ceci dépasserait les limites de taille permises à ce document. C'est pourquoi, l'accent est mis sur l'étude et l'implémentation de solveurs diffusifs qui a occupé une la plus grande part de temps du stage. Ainsi, après une brève présentation d'**elsA** structuré et de l'état de l'art quant aux approches VF non structurées existantes, une présentation complète de l'étude effectuée sur les solveurs diffusifs en approche non structurée est faite. Un dernier chapitre porte sur les aspects plus techniques tels l'algorithmique, les structures de données, la gestion des conditions de raccords et fait le point sur l'état d'avancement des travaux.

Chapitre 1

Généralités

1.1 Equations d'Euler et de Navier-Stokes

La description macroscopique du comportement dynamique et thermodynamique d'un fluide relève généralement des équations de Navier-Stokes. Ces équations sont des équations de bilan assurant :

- la conservation de la masse ;
- la conservation de la quantité de mouvement ;
- la conservation de l'énergie.

En considérant donc un fluide de masse volumique ρ , de vitesse U et d'énergie E (somme de l'énergie interne e et de l'énergie cinétique), on peut écrire :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho U) = 0, \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho U \otimes U + pI - \tau) = 0, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho E U + pU - \tau \cdot U + q) = 0. \quad (1.3)$$

où p est la pression, τ représente le tenseur des contraintes et q est le flux de chaleur.

Dans le cas d'un fluide parfait, le tenseur de contraintes τ et le flux de chaleur q sont nuls, on retrouve alors les équations d'Euler.

1.2 Approche VF

En tenant compte de lois associées aux équations de Navier-Stokes pour fermer le système, celui-ci peut être écrit sous la forme compacte :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot F(W) + \nabla \cdot G(W, \nabla W) = 0 \text{ dans } \Omega, \forall t. \quad (1.4)$$

où $W = (\rho, \rho U, \rho E)$ représente le vecteur des champs conservatifs évoluant au cours du temps. Dans Eq. 1.4, F représente la convection et G représente la diffusion.

Cette section a pour but de présenter la discrétisation de ce système par la méthode des VF.

1.2.1 Principe

La méthode consiste à découper le domaine global Ω en petits volumes (maillage), et à calculer une approximation des valeurs moyennes des champs conservatifs W sur ces volumes élémentaires ou cellules.

Les briques élémentaires du maillage peuvent être des hexaèdres, des prismes, des pyramides ou des tétraèdres (Fig. 1.1).

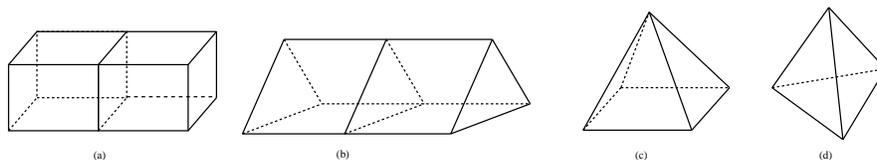


FIG. 1.1 – Types de volumes retenus : (a) deux hexaèdres (b) deux prismes (c) une pyramide (d) un tétraèdre.

Soit K un volume élémentaire dit volume de contrôle. Si l'on suppose que K est fixe dans le temps, formellement, en intégrant Eq. 1.4 sur K , et en utilisant le théorème de Stokes, il vient :

$$\frac{d}{dt} \int_K W d\Omega + \oint_{\partial K} [F(W) + G(W, \nabla W)] \cdot n d\sigma = 0, \forall t. \quad (1.5)$$

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 .

Eq. 1.5 met en évidence la notion de conservation. En d'autres termes, en notant K' un autre volume élémentaire ayant une surface d'intersection (triangle ou un quadrangle) avec K , il faut que le flux surfacique sortant de K soit entrant dans K' : les quantités globales sur l'ensemble du domaine de calcul sont conservées et c'est pourquoi l'équation 1.4 est dite sous forme *conservative*. 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 le contour permet d'obtenir les flux convectif et diffusif respectivement. A ce niveau, il faut noter la présence de gradients dans l'expression du flux diffusif et leur absence dans celle du flux convectif.

1.2.2 Discrétisation des flux

On considère que le contour de K est constitué de n_K faces nommées $(\partial K)_i$, $i = 1, \dots, n_K$. Si l'on pose :

$$\begin{aligned}\bar{W}_K &= \frac{1}{|K|} \int_K W d\Omega \\ \bar{F}_{(\partial K)_i} &= \int_{\partial K_i} F(W) \cdot n d\sigma \\ \bar{G}_{(\partial K)_i} &= \int_{(\partial K)_i} G(W, \nabla W) \cdot n d\sigma\end{aligned}$$

où $|K|$ désigne la mesure du volume K , Eq. 1.5 s'écrit encore :

$$\frac{d}{dt}(|K|\bar{W}_K) + \sum_{i=1}^{n_K} [\bar{F}_{(\partial K)_i} + \bar{G}_{(\partial K)_i}] = 0 \forall t. \quad (1.6)$$

Le terme

$$R_K = \sum_{i=1}^{n_K} [\bar{F}_{(\partial K)_i} + \bar{G}_{(\partial K)_i}]$$

est appelé résidu numérique de modélisation. De Eq. 1.6, on peut obtenir deux principales formulations VF :

- l'une totalement discrétisée en temps et en espace, ceci en intégrant encore Eq. 1.6 entre deux instants successifs de la discrétisation temporelle, pour trouver des champs moyens entre ces deux instants ;
- et l'autre semi-discrétisée en espace, en résolvant Eq. 1.6 pour trouver des champs moyens à chaque instant de la discrétisation temporelle.

Cette dernière formulation a l'avantage de permettre une discrétisation séparée des flux et du terme de dérivée en temps.

De manière générale, une formulation VF sera caractérisée par la méthode d'approximation des flux convectif et diffusif. Le choix de l'approximation sera aussi influencé par le type de maillage utilisé, notamment l'approximation du flux diffusif. En effet, l'évaluation du flux diffusif requiert l'évaluation de gradients, ce qui est assez délicat dans le cas de maillages non structurés.

1.3 Etat des lieux dans elsA structuré

Le code initial d'**elsA** est basé sur une formulation VF s'appuyant sur des cellules de type hexaédrique et sur un repérage structuré des cellules. Les champs sont stockés au centre des cellules. **elsA** permet d'effectuer des calculs sur plusieurs blocs.

Dans **elsA**, conceptuellement, toutes les quantités : champs conservatifs, métrique (volumes, normales d'interfaces)... sont stockées de manière structurée en utilisant un repérage en (i, j, k) des sommets, des cellules et des interfaces par blocs de maillage. Mais pratiquement, pour obtenir de meilleurs performances, l'adressage des cellules est fait de manière

linéaire. L'utilisation de cellules fictives au bord du domaine permet que l'adressage des interfaces reste implicite par rapport à celui des cellules. Les champs conservatifs sont stockés au centre des cellules qui sont donc les volumes de contrôle utilisés dans la méthode VF.

1.3.1 Les solveurs convectifs

Le calcul du flux convectif se fait par interface. Deux méthodes sont généralement utilisées. La première résout un problème de Riemann approché à l'aide du solveur de Roe qui est d'ordre 1. L'approche MUSCL permet d'atteindre l'ordre 2. Pour cela, les champs de part et d'autre de l'interface sont extrapolés (à l'ordre 1) à partir des champs au centre et en utilisant un gradient moyen sur le volume considéré. La seconde utilise le solveur numérique de Jameson qui est d'ordre 2. Quelque soit le solveur, le traitement numérique est construit suivant les directions i , j , et k .

1.3.2 Les solveurs diffusifs

Le traitement du flux diffusif se base lui aussi sur une approche structurée avec un balayage directionnel. La difficulté de ce solveur réside dans la construction des gradients aux interfaces, ces derniers devant être les plus précis possibles et de faible coût numérique. Il existe dans **elsA** trois méthodes pour calculer les gradients aux interfaces :

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

Chapitre 2

Solveurs diffusifs en non structuré

2.1 Deux grandes approches VF

Une étude bibliographique a permis d'identifier deux principales manières de construire des solveurs non-structurés (et hybrides) VF :

- la formulation vertex-centered,
- la formulation cell-centered.

Le principe de la formulation vertex-centered est de stocker les champs conservatifs aux nœuds du maillage, et d'utiliser comme volumes de contrôle, au lieu des cellules de base du maillage, des cellules dites "duales" construites autour des nœuds du maillage. Il existe plusieurs méthodes de construction des cellules duales.

A priori, cette approche ne sera pas retenue car elle pose plusieurs problèmes :

- tout d'abord, la prise en compte des conditions aux limites multiples est difficile ;
- ensuite, elle est réputée mathématiquement non-consistante avec une formulation instationnaire (U-RANS)
- enfin, elle est non-directement compatible avec **elsA** initial car **elsA** utilise une approche VF écrite au centre des cellules ;

Le principe de la formulation cell-centered est d'utiliser une formulation VF directement sur les éléments du maillage. Les flux convectifs et diffusifs sont alors calculés aux frontières des éléments du maillage. Les champs conservatifs sont stockés au centre des cellules du maillage.

Remarque : Cette méthode est intéressante pour plusieurs raisons :

- traitement des conditions aux limites par face du maillage,
- compatible avec **elsA** existant,
- consistante avec l'approche URANS.

C'est cette formulation qui sera donc considérée dans toute la suite de ce document. Nous allons dans la suite de cette section faire une revue de différents solveurs diffusifs mis au point pour cette formulation.

2.2 Solveurs diffusifs

Pour les flux diffusifs qui sont calculés aux interfaces du maillage, il est nécessaire de disposer, comme pour les champs convectifs, de la métrique locale (normales non-unitaires,...) ainsi que des gradients aux interfaces. Dans le cas d'un maillage multi-élément non structuré, c'est le travail théorique le plus difficile car il n'existe pas, à notre connaissance, de schéma remplissant toutes les conditions de stabilité, de précision, de robustesse et de performance.

2.2.1 Méthode "5p"

En étudiant les solveurs disponibles dans **elsA**, il est clair que la méthode "5p" s'adapte sans difficulté. Supposons K un volume, Σ_i , $i = 1, \dots, n_K$ ses faces, le gradient centré du champ W en K s'écrit :

$$\nabla W_K = \frac{1}{|K|} \sum_{i=1}^{n_K} \frac{1}{2} (W_K + W_i) \vec{N}_i,$$

où 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 Σ_i et \vec{N}_i , la normale à la face Σ_i , normée par la surface de Σ_i et extérieure à la face K .

Le gradient sur Σ , interface entre les volumes G et D , obtenu par cette méthode s'écrit alors :

$$\overline{\nabla W}_\Sigma = \frac{1}{2} (\nabla W_G + \nabla W_D)$$

Toutefois, avec cette méthode, deux différences centrées sont utilisées, ce qui provoque la non dissipation des hautes fréquences de la discrétisation. Elle est donc non-utilisable en pratique.

2.2.2 Méthode "arête"

Ici, le gradient à l'interface obtenu par la méthode 5p est ensuite corrigé suivant la direction de l' "arête" fictive reliant les centres des cellules volumiques adjacentes.

Le gradient sur Σ , interface entre les volumes G et D s'écrit alors :

$$\nabla W_\Sigma = \overline{\nabla W}_\Sigma - \left(\overline{\nabla W}_\Sigma \cdot \overrightarrow{C_G C_D} - (W_D - W_G) \right) \frac{\overrightarrow{C_G C_D}}{\|\overrightarrow{C_G C_D}\|^2}, \quad (2.1)$$

où $\overline{\nabla W}_\Sigma$ désigne le gradient obtenu par la méthode 5p, C_G et C_D les centres respectifs des volumes D et G .

Cette méthode a été utilisée par May et Jameson dans leur solveur FloXX [May 05]. Elle est aussi utilisée dans EDGE [FOI 07]. Toutefois, elle n'a été étudiée théoriquement que dans le cadre du solveur vertex-centered N3S-Natur par V. Auffray [Auffray 07] et il est donc opportun d'effectuer une étude théorique et numérique supplémentaire dans le cadre d'une approche cell-centered.

Des variantes de la méthode arête ont été envisagées en procédant différemment à l'un des deux niveaux ci-après :

Au niveau du calcul du gradient centré : Pour évaluer le gradient au centre, les valeurs du champ aux interfaces ne sont pas calculées par moyenne arithmétique des valeurs du champ dans les deux volumes voisins de l'interface mais par une moyenne pondérée par les volumes

$$W_\Sigma = \frac{V_G W_G + V_D W_D}{V_G + V_D} \quad (2.2)$$

Au niveau de la direction de correction : en tenant compte de l'angle d'inclinaison α entre la droite reliant deux centres et la normale à l'interface (Fig. 2.1). L'idée de cette correction est de prendre en compte le fait que l'arête fictive n'est pas colinéaire à la normale de l'interface, en supposant que c'est suivant cette normale que le champ se modifie. Trois types de corrections ont alors été proposées :

- une correction totale de l'arête de correction reliant les deux centres, méthode dite de la "normale" : le vecteur $\overrightarrow{C_G C_D}$ est remplacé par sa projection sur la normale $(\overrightarrow{C_G C_D} \cdot \vec{n}_\Sigma) \vec{n}_\Sigma$;
- une correction partielle qui suppose que c'est le gradient centré qui doit être dirigé suivant la normale, méthode dite "arête corrigée" :

$$\nabla W_\Sigma = \overline{\nabla W_\Sigma} - \left(\overline{\nabla W_\Sigma} \cdot \overrightarrow{C_G C_D} \cos(\alpha) - (W_D - W_G) \right) \frac{\overrightarrow{C_G C_D}}{\|\overrightarrow{C_G C_D}\|^2}. \quad (2.3)$$

- une correction partielle qui suppose que c'est le gradient calculé par différence entre W_D et W_G qui doit être dirigé suivant la normale, méthode dite "arête corrigée 2" :

$$\nabla W_\Sigma = \overline{\nabla W_\Sigma} - \left(\overline{\nabla W_\Sigma} \cdot \overrightarrow{C_G C_D} - (W_D - W_G) \cos(\alpha) \right) \frac{\overrightarrow{C_G C_D}}{\|\overrightarrow{C_G C_D}\|^2}. \quad (2.4)$$

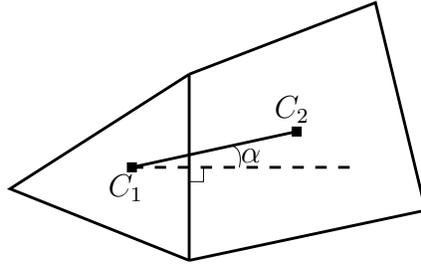


FIG. 2.1 – Méthode arête : variantes considérant l'angle entre l'arête fictive reliant les centres et la normale.

On remarque que les deux niveaux de modification de la méthode arête identifiés peuvent être combinés.

2.2.3 Méthodes “diamant”

Ces méthodes proposent que le calcul du gradient à l’interface entre deux volumes soit fait sur un volume ayant pour sommets les sommets de la face et les centres des deux volumes (Fig. 2.2). Seulement, elles requièrent de reconstruire des valeurs aux nœuds du maillage, ce qui est relativement cher. Deux de ces méthodes ont paru intéressantes :

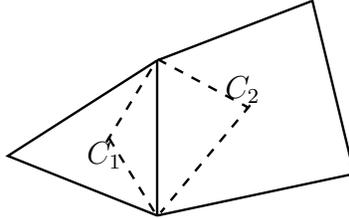


FIG. 2.2 – Méthode diamant : Le gradient à l’interface est calculé sur le volume en pointillés.

La méthode de Coudière et al.

Coudière et al [Coudière 96] proposent de reconstruire les valeurs aux nœuds comme une combinaison linéaire des valeurs des cellules qui entourent le nœud. Les coefficients sont déterminés par la méthode des moindres carrés.

Le gradient à l’interface est ensuite retrouvé par simple différence finie en utilisant le repère local à l’interface constitué du vecteur tangent et du vecteur normal à l’interface. L’usage des moindres carrés rend le pré traitement relativement cher et “possiblement instable”.

La méthode de Le Potier

Le Potier [Le Potier 05] propose de choisir trois points (les plus proches du nœud) parmi les centres de cellules et les centres des arêtes frontières les plus proches et d’utiliser les coordonnées barycentriques du nœud par rapport à ces points pour reconstruire la valeur du champ. Le gradient à l’interface est ensuite calculé par circulation sur les interfaces de la cellule diamant.

Il faut noter que Le Potier propose un schéma pour maillages en triangles, et le centre de la cellule est l’intersection des bissectrices du triangle. Le calcul du centre du cercle inscrit et la recherche des trois points utilisés peut induire un pré-traitement assez coûteux. Toutefois, cette méthode a un coût de reconstruction moins cher en mémoire et en temps de calcul que celle de Coudière.

Il faut noter que ces méthodes risquent, toutes les deux, de coûter énormément pour les maillages en mouvement.

2.2.4 Méthode d’Eymard et al.

Eymard et al. [Eymard 06] ont proposé un solveur spécifiquement adapté aux équations de diffusion avec 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 simple différence finie, tandis que le flux de l'opérateur anisotrope est calculé en utilisant un solveur mis au point par les auteurs. Ils montrent la convergence du solveur à la condition que l'opérateur isotrope admette une borne inférieure non nulle.

La méthode impose que l'arête reliant les centres de deux volumes voisins soit normale à l'interface entre les volumes. Ceci est possible si l'on considère comme centres des cellules, les centres de cercle circonscrit pour des maillages de triangles, mais en général, ce n'est pas toujours possible de choisir des centres vérifiant cette condition.

2.2.5 Méthode des moindres carrés

Cette méthode reconstruit tout d'abord les valeurs aux nœuds du maillage par des moindres carrés. Les valeurs des champs aux interfaces sont alors calculés par moyenne arithmétique des valeurs aux sommets de l'interface. Les gradients au centre d'un volume sont calculés par circulation sur les frontières et les gradients aux interfaces sont calculés par moyenne arithmétique des gradients dans les volumes voisins. On peut évidemment observer que la méthode est coûteuse.

2.2.6 Méthodes inspirées des Eléments Finis (EF)

Ces méthodes consistent à se retrouver dans une configuration où les valeurs sont stockés au nœuds d'un maillage (le dual en supposant les centres des volumes comme les nœuds, ou le primal en reconstruisant les valeurs par une méthode de moindres carrés). Les gradients sont alors évalués en utilisant des EF de type P1. Ces méthodes sont naturellement très coûteuses du fait du passage des champs des centres de cellules vers les nœuds et vice versa.

2.2.7 Conclusion sur les solveurs diffusifs

Après cette revue faite des différents solveurs, il est nécessaire d'effectuer des tests numériques pour vérifier leur fonctionnement effectif. Les méthodes utilisant les moindres carrés et celles proches des EF ont été d'emblée éliminées du fait de leur coût. Les méthodes 5p et arête devront aussi être étudiées théoriquement.

Remarque : Le choix du solveur diffusif non-structuré n'est pas complètement libre. Il faut se fixer comme contrainte de retomber au moins sur l'un des solveurs diffusifs structurés lorsque le solveur diffusif non-structuré sera appliqué à un hexaèdre. A défaut, il faut que le solveur puisse être aisément implanté dans la version structurée d'**elsA**.

Chapitre 3

Etude de la convergence des solveurs diffusifs

Dans ce chapitre est présentée l'étude de convergence des solveurs diffusifs envisagés pour le calcul sur blocs non structurés. Ces solveurs diffusifs sont :

- le solveur utilisant une méthode similaire à la méthode 5p pour l'évaluation du gradient aux interfaces ;
- le solveur utilisant la méthode dite de l'arête pour l'évaluation du gradient aux interfaces ou l'une de ses variantes ;
- les solveurs d'Eymard et al. ;
- les solveurs de Le Potier et de Coudière ;

Les solveurs mis au point respectivement par Eymard, Le Potier et Coudière n'ont pas besoin d'études théoriques, celles-ci ayant déjà été effectuées par ces auteurs. L'étude théorique se fera uniquement pour les méthodes 5p et arête, pour les variantes de la méthode arête, on se contentera des résultats numériques. L'étude théorique comportera l'étude de la consistance et de la stabilité du schéma obtenu, ce qui permettra de conclure sur la convergence par le théorème d'équivalence de Lax.

3.1 Problème d'étude

Cette étude se fera sur un problème de diffusion de chaleur en 2D. On veut étudier les propriétés des discrétisations possibles du flux diffusif pour le problème suivant :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \Delta T, \quad T_0(x, y) \text{ donné}, \quad (3.1)$$

où Δ est l'opérateur de Laplace.

En appliquant la méthode VF, sur un élément Ω_i de volume V_i sur lequel est intégrée Eq. 3.1, on écrit :

$$V_i \frac{d}{dt} T_i = -G_i, \quad (3.2)$$

où

- T_i est une approximation de $\bar{T}_i = \frac{1}{|V_i|} \int_{\Omega_i} T d\Omega$;
- G_i est une approximation de $\alpha \oint_{\partial\Omega_i} \nabla T \cdot n d\sigma$ donnée par

$$G_i = -\alpha \sum \nabla T_{\Sigma_j} \cdot N_{\Sigma_j}. \quad (3.3)$$

Les indices Σ_j représentent les faces du volume Ω_i , N_{Σ_j} la normale extérieure à la face, normée par la mesure de la face, et ∇T_{Σ_j} le gradient évalué sur la face.

Le calcul approché du gradient sur les faces Σ_j fait obtenir G_i sous la forme :

$$G_i = -\alpha \sum_k a_k T_k, \quad (3.4)$$

où T_k est la valeur de T dans un élément Ω_k du maillage.

En utilisant un schéma d'Euler pour la discrétisation de la dérivée en temps, on obtient le schéma ci-dessous :

$$V_i \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \sum_k a_k T_k^n, \quad (3.5)$$

soit

$$T_i^{n+1} = \left(1 + \alpha a_i \frac{\Delta t}{V_i}\right) T_i^n + \alpha \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{k \neq i} a_k T_k^n. \quad (3.6)$$

3.2 Rappels pour l'étude théorique

3.2.1 Consistance

Un schéma numérique est dit consistant si les équations discrétisées tendent vers les équations continues lorsque les pas de discrétisation en temps et en espace tendent vers 0. Il s'agit donc de vérifier que :

$$\left[V_i \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} - \alpha \sum_k a_k T_k^n \right] - \left[V_i \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_i^n - \alpha V_i \Delta T_i^n \right] \rightarrow 0. \quad (3.7)$$

Si $T(x, t)$ est suffisamment régulière, on a, par un développement de Taylor :

$$V_i \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = V_i \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_i^n + O(\Delta t). \quad (3.8)$$

Il ne reste donc qu'à s'assurer que

$$\alpha \sum_k a_k T_k^n - \alpha V_i \Delta T_i^n \rightarrow 0. \quad (3.9)$$

C'est ce qui sera fait en envisageant différents types de maillages.

3.2.2 Stabilité

Un schéma numérique est dit stable si l'erreur n'est pas amplifiée au cours de l'avance en temps. Cette étude peut être faite par une analyse de Von Neumann en considérant une solution harmonique :

$$T_i^n = A^n e^{j(kx_i + k'y_i)} \text{ où } j^2 = -1. \quad (3.10)$$

A partir de Eq. 3.6, on obtient alors

$$(A - (1 + \alpha \frac{\Delta t}{V_i} a_i)) e^{j(kx_i + k'y_i)} = \alpha \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{k \neq i} a_k e^{j(kx_k + k'y_k)} \text{ avec } A = \frac{A^{n+1}}{A^n}. \quad (3.11)$$

On peut ensuite obtenir :

$$(1 + \alpha \frac{\Delta t}{V_i} a_i) - \alpha \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{k \neq i} |a_k| \leq A \leq (1 + \alpha \frac{\Delta t}{V_i} a_i) + \alpha \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{k \neq i} |a_k| \quad (3.12)$$

Le schéma est stable si $|A| \leq 1$. Pour cela, il suffit que

$$\begin{cases} (1 + \alpha \frac{\Delta t}{V_i} a_i) - \alpha \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{k \neq i} |a_k| \geq -1, \\ (1 + \alpha \frac{\Delta t}{V_i} a_i) + \alpha \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{k \neq i} |a_k| \leq 1. \end{cases}$$

soit

$$\begin{cases} -a_i + \sum_{k \neq i} |a_k| \leq 2 \frac{V_i}{\alpha \Delta t}, \\ \sum_{k \neq i} |a_k| \leq -a_i. \end{cases}$$

Il suffit alors que

$$\begin{cases} -a_i \leq \frac{V_i}{\alpha \Delta t}, \\ \sum_{k \neq i} |a_k| \leq -a_i. \end{cases}$$

Pour respecter aussi le principe du maximum discret, il faut généralement imposer que le schéma soit monotone. Il suffit alors que le schéma soit positif. L'ensemble des conditions nécessaires à la stabilité est alors satisfait si

$$-a_i \leq \frac{V_i}{\alpha \Delta t}, \quad (3.13)$$

$$a_k \geq 0 \quad \forall k \neq i \text{ et} \quad (3.14)$$

$$\sum_k a_k = 0. \quad (3.15)$$

Eq. 3.13 exprime juste une contrainte sur le pas de temps qui devra être utilisé.

Vérifier la consistance consistera donc à vérifier que le flux diffusif discrétisé est consistant avec le flux diffusif continu suivant Eq. 3.9, et vérifier la stabilité reviendra principalement à vérifier que la matrice du schéma de calcul du flux diffusif est positive.

3.3 Etude théorique

Afin de fixer les notations, Fig. 3.1 présente un extrait de maillage construit à partir de cellules quadrangulaires. On désire calculer le bilan de flux G_7 pour la cellule C_7 . Pour les maillages de triangles, nous avons choisi, pour simplifier une configuration régulière de triangles équilatéraux (Fig. 3.2).

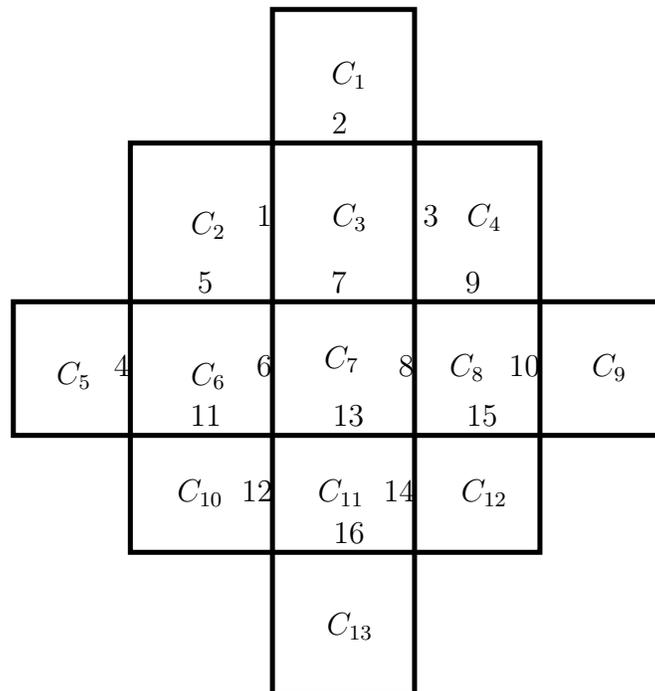


FIG. 3.1 – Configuration géométrique pour l'étude théorique du solveur diffusif en maillage non structuré quadrangulaire : les cellules et les arêtes nécessaire au calcul du flux dans la cellule centrale ont été numérotées.

En effet, chacun des solveurs utilisera *a priori* pour chaque cellule (hormis celles proches du bord) 13 cellules pour les maillages de quadrangles, et 10 cellules pour les maillages de triangles équilatéraux. Ces nombres étant assez élevés, il aurait été fastidieux d'écrire les expressions du flux diffusif à la main. Cette écriture a donc été retrouvée à l'aide du logiciel de calcul formel Maple. Un programme a été élaboré pour effectuer le calcul du gradient et du flux diffusif.

Plusieurs types de maillages quadrangulaires ont été envisagés :

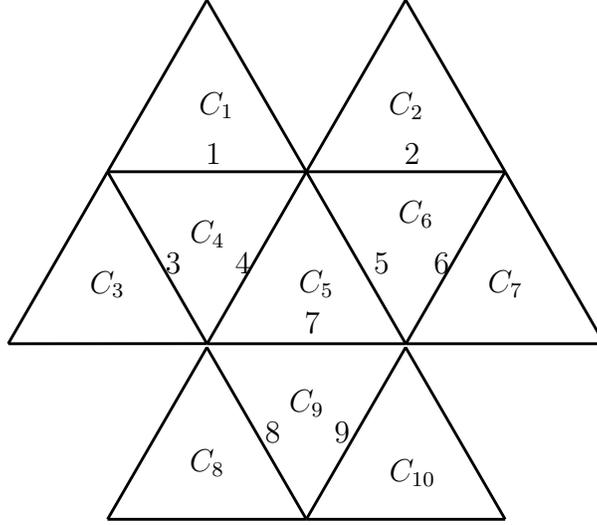


FIG. 3.2 – Configuration géométrique pour l'étude théorique du solveur diffusif en maillage non structuré triangulaire : les cellules et les arêtes nécessaires au calcul du flux dans la cellule centrale ont été numérotées.

- maillage de carrés ;
- maillage de parallélogrammes tous identiques dont les dimensions h_1 , h_2 et l'angle d'inclinaison β sont définis en Fig. 3.3 ;
- maillage de rectangles étirés suivant l'horizontale avec pour facteur de forme k_1 .

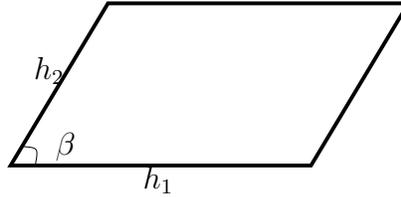


FIG. 3.3 – Volume sous forme de parallélogramme.

Le point suivant détaille les résultats obtenus pour la méthode 5p sur maillage de carrés, mais le résumé de l'étude est faite par le tableau 3.1.

3.3.1 Maillage de carrés

Flux diffusif utilisant la méthode 5p

Simplification formelle des expressions Au moyen du programme Maple, on trouve que :

$$G_7 = -\alpha\left(\frac{1}{4}T_1 + \frac{1}{4}T_5 - T_7 + \frac{1}{4}T_9 + \frac{1}{4}T_{13}\right). \quad (3.16)$$

On constate immédiatement que le bilan de flux dans la cellule C_7 ne dépend pas de la première rangée de cellule entourant ce volume. Ainsi, on retrouve le problème bien connu de découplage pair/impair.

Consistance En effectuant un développement de Taylor des valeurs de T_1 , T_5 , T_9 et T_{13} autour de T_7 , il vient :

$$G_7 = -\alpha h^2 \Delta T + O(h^3). \quad (3.17)$$

Le flux discrétisé obtenu est ainsi consistant avec le flux continu de départ et la méthode est d'ordre 2 en espace.

Stabilité On voit bien que la somme des coefficients des T_i est nulle, et que T_7 a le seul coefficient négatif. Le schéma est donc monotone et par conséquent stable pour les maillages composés de carrés.

Toutefois, même avec un repérage non-structuré, le découplage pair/impair va introduire des oscillations non physiques dans la solution numérique.

Conclusion Le solveur 5p introduit un découplage pair/impair qui induit des oscillations numériques des champs calculés. Toutefois, la méthode est d'ordre 2 en espace et consistante.

		Carrés	Parallélogrammes	Etirés	Triangles équi
5p	Consistance	Oui	Oui	Non	Oui
	Stabilité	Oui	Oui	Oui	Oui
	Monotonie	Oui	Non	Oui	Oui
	Découplage	Oui	Oui	Oui	Oui
Arête	Consistance	Oui	Oui	Non	Oui
	Stabilité	Oui	Oui	Oui	Oui
	Monotonie	Oui	Non	Oui	Oui
	Découplage	Non	Non	Non	Non

TAB. 3.1 – *Récapitulatif de l'étude théorique de 5p et arête.*

3.4 Tests numériques

Pour évaluer numériquement ces solveurs diffusifs, ceux-ci seront appliqués à la résolution d'un problème de diffusion dont la solution exacte est connue. Le comportement numérique du solveur et la comparaison de la solution obtenue avec la solution exacte permettra d'estimer la stabilité et de la précision du solveur.

3.4.1 Principe

Les tests numériques consistent à résoudre numériquement l'équation de diffusion de la chaleur Eq. 3.1 en 2D avec des conditions de Dirichlet aux bords :

$$T_B(x, y, t) = \begin{cases} 0 & \forall (x, t) \in [0, L] \times \mathbb{R}^+ \text{ et } y = 0, \\ \sin(\pi \frac{x}{L}) & \forall (x, t) \in [0, L] \times \mathbb{R}^+ \text{ et } y = L, \\ 0 & \forall (y, t) \in [0, L] \times \mathbb{R}^+ \text{ et } x = 0, \\ \sin(\pi \frac{y}{L}) & \forall (y, t) \in [0, L] \times \mathbb{R}^+ \text{ et } x = L. \end{cases} \quad (3.18)$$

La valeur de α est égale à $0.75\text{m}^2\text{s}^{-1}$. Ce problème admet une unique solution stationnaire [Tomaich 95] qui est présentée en Fig. 3.4 et dont l'expression exacte est :

$$\tilde{T}(x, y) = \frac{1}{\sinh \pi} \left[\sinh(\pi \frac{x}{L}) \sin(\pi \frac{y}{L}) + \sin(\pi \frac{x}{L}) \sinh(\pi \frac{y}{L}) \right]. \quad (3.19)$$

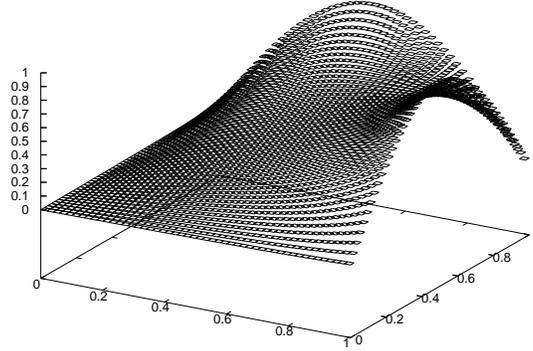


FIG. 3.4 – Solution exacte du problème représentée par les valeurs au centres d'un maillage carré 25×25 cellules.

Pour comparer la solution numérique T à la solution exacte \tilde{T} , on définit la norme L_2 de l'erreur ε qui est donnée par :

$$\varepsilon = \left[\sum_{i=1}^{N_c} V_i (\tilde{T}_i - T_i)^2 \right]^{1/2} \quad (3.20)$$

Si l'on note h le diamètre moyen des volumes du maillage, en supposant qu'on a $\tilde{T} - T = O(h^d)$, on obtient que $\varepsilon = O(h^d)$. En supposant que $\varepsilon = Ch^d$, avec C constante, on trouve que :

$$\log(\varepsilon) = \log(C) + d \log(h). \quad (3.21)$$

L'évolution du logarithme de l'erreur par rapport au logarithme du diamètre moyen du maillage est donc linéaire, et la pente de cette évolution est l'ordre de précision du solveur.

3.4.2 Résultats numériques

Solveurs non structurés

L'étude numérique a été effectuée sur quatre types de maillages : carrés, rectangles étirés, quadrangles quelconques et triangles (cf fig. 3.5). Le terme de dérivée en temps a été discrétisé au moyen d'un schéma en temps Euler. Les tests ont été effectués pour trois valeurs moyennes de diamètres : 0.05, 0.01, 0.005.

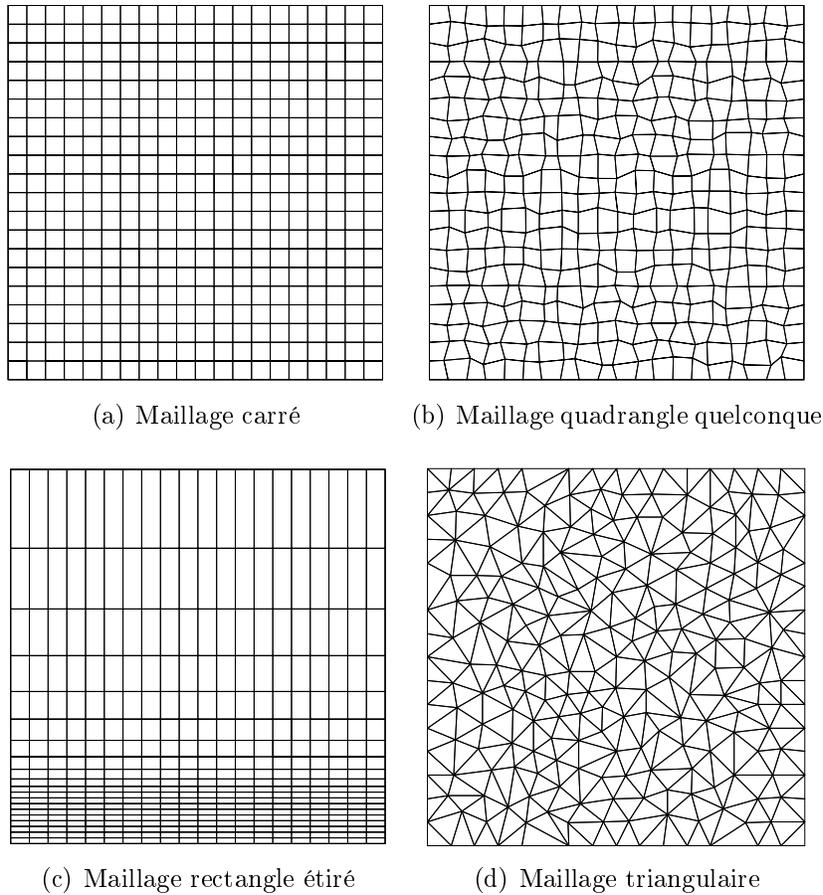
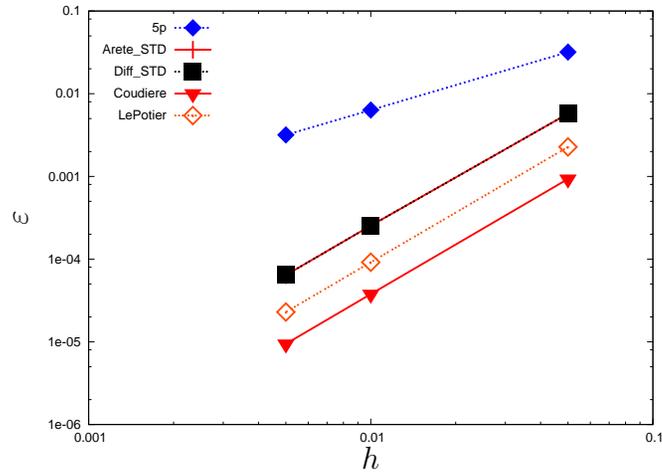


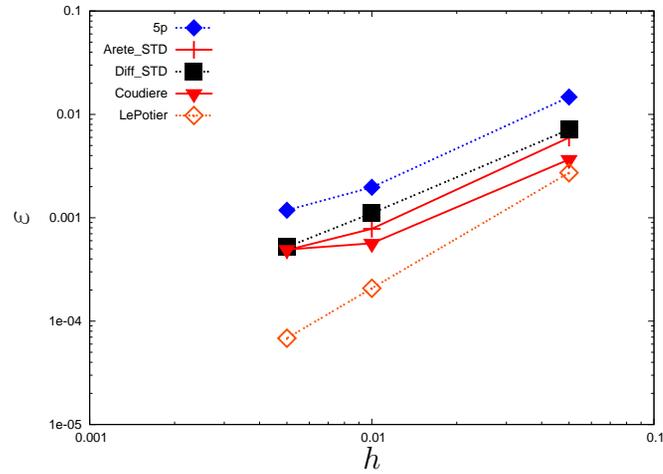
FIG. 3.5 – *Exemples de maillages utilisés.*

Pour des raisons non identifiées, la méthode d'Eymard et al. s'est comportée de la même manière pour le cas test étudié. Les ordres pour chaque type de maillages sont donnés dans Tab. 3.3.

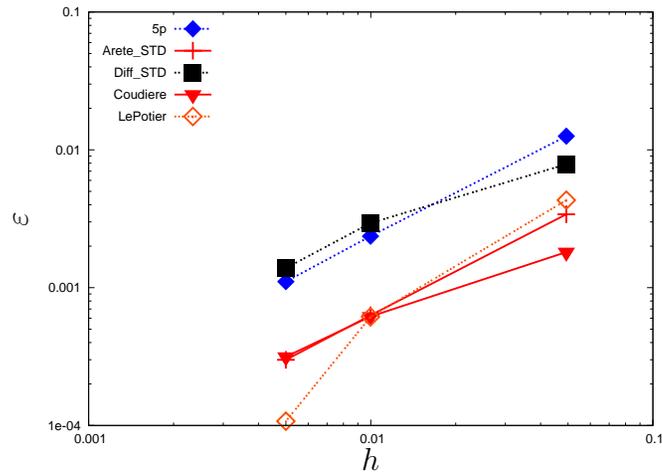
Fig. 3.6 présente donc l'évolution du logarithme de l'erreur en fonction du logarithme du diamètre moyen h sur les différents types de maillages pour les méthodes les plus intéressantes.



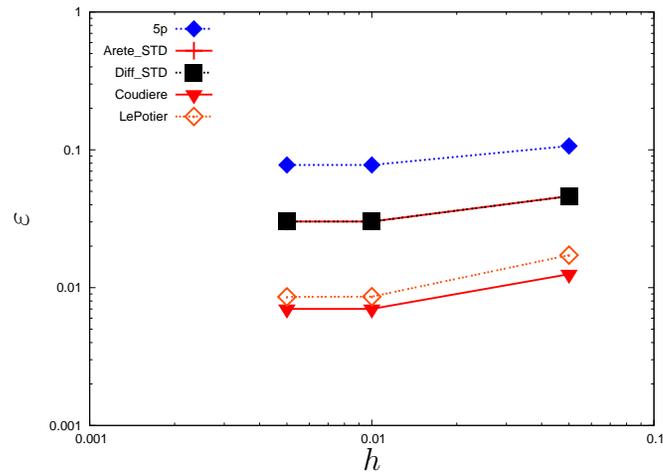
(a) Sur maillages de carrés



(b) Sur maillages de quadrangles quelconques



(c) Sur maillages de triangles



(d) Sur maillages de rectangles étirés

FIG. 3.6 – Evolution du logarithme de l'erreur en fonction du logarithme du diamètre moyen du maillage pour les solveurs non structurés.

Abbréviation	Descriptif
5p	Méthode 5p standard.
Arete_STD	Méthode arête standard.
Arete_CORR	Pour le calcul du gradient dans une cellule, les valeurs des champs aux interfaces sont calculées par Eq. 2.2
Normale_STD	Semblable à la méthode arête, sauf que la direction de correction est celle de la normale.
Normale_CORR	Méthode normale, sauf que pour le calcul du gradient dans une cellule, les valeurs des champs aux interfaces sont calculées par Eq. 2.2
Diff_STD	Méthode de différences centrées standard.
Aretec1_STD	Semblable à la méthode arête, sauf que la correction se fait suivant Eq. 2.3
Aretec1_CORR	Méthode arête corrigée, sauf que pour le calcul du gradient dans une cellule, les valeurs des champs aux interfaces sont calculées par Eq. 2.2
Aretec2_STD	Semblable à la méthode arête, sauf que la correction se fait suivant Eq. 2.4
Aretec2_CORR	Méthode arête corrigée 2, sauf que pour le calcul du gradient dans une cellule, les valeurs des champs aux interfaces sont calculées par Eq. 2.2
LePotier	Méthode diamant de Le Potier.
Coudiere	Méthode diamant de Coudière.

TAB. 3.2 – Descriptif des méthodes

	Carré	Quad	Triangle	Etiré
5p	1.00	1.20	1.05	0.15
Arete_STD	1.94	1.21	1.06	0.21
Arete_CORR	1.94	1.03	0.99	0.20
Normale_STD	1.94	1.16	0.69	0.21
Normale_CORR	1.94	1.08	0.69	0.20
Diff_STD	1.94	1.15	0.68	0.21
Aretec1_STD	1.00	1.20	1.05	0.15
Aretec1_CORR	1.00	1.10	1.10	0.20
Aretec2_STD	1.00	1.20	1.05	0.15
Aretec2_CORR	1.00	1.08	1.10	0.20
LePotier	1.99	1.60	1.77	0.35
Coudiere	1.99	1.05	0.65	0.29

TAB. 3.3 – *Ordre des méthodes pour les différents types de maillage.*

Les résultats obtenus permettent de conclure que la méthode de Le Potier est manifestement la meilleure de toutes. Toutefois, toutes sont prises à défaut sur des maillages étirés. On

constate que le solveur 5p présente de meilleurs résultats sur les quadrangles quelconques et les triangles que sur les carrés. Cela peut s'expliquer par le fait que l'irrégularité des formes des cellules a atténué le découplage pair/impair.

Solveurs d'elsA structuré

Pour des besoins de comparaison, le cas test a été résolu avec les solveurs d'elsA en utilisant des maillages carrés et rectangles étirés. Les ordres de convergence sont donnés par le tableau 3.4 et illustrés par la figure 3.7. Les ordres pour maillages rectangles étirés n'ont pas été marqué puisqu'il n'y avait manifestement pas convergence. On peut donc constater

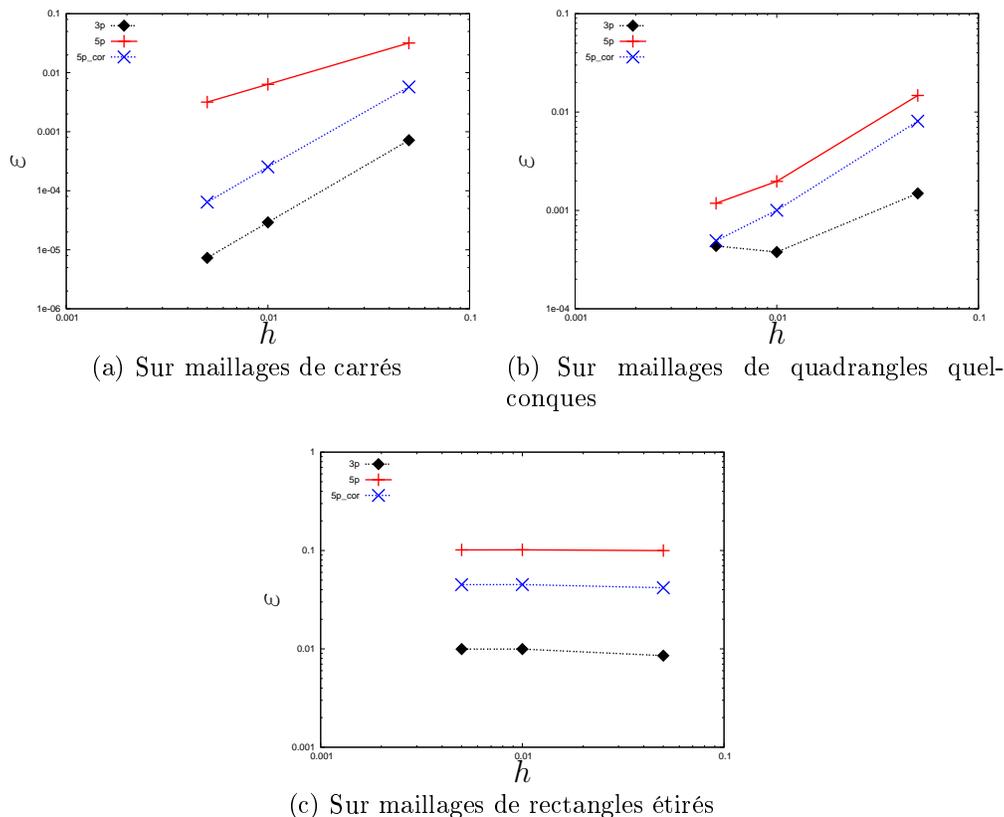


FIG. 3.7 – Evolution du logarithme de l'erreur en fonction du logarithme du diamètre moyen du maillage pour les solveurs d'elsA structuré.

que les meilleurs solveurs non structurés présentent des résultats comparables sinon meilleurs notamment sur les maillages étirés.

En conclusion, les solveurs Arête et Le Potier fournissent des résultats intéressants. Ils peuvent être utilisés à la fois sur les maillages structurés que sur des maillages non structurés avec des résultats comparables à ceux des solveurs déjà implémentés dans elsA. Le solveur 5p existant déjà en structuré, il est naturel d'intégrer aussi son adaptation au cas non structuré.

	Carrés	Quads	Etiré
3p	1.99	0.68	-
5p	1.00	1.20	-
5p_cor	1.94	1.27	-

TAB. 3.4 – *Ordre des méthodes d'elsA structuré pour les différents types de maillage.*

Chapitre 4

Construction d'une version hybride d'elsA

Ce chapitre traite d'aspects plus techniques dans la réalisation de la version hybride d'elsA. Il y sera question de l'algorithmique et des structures de données utilisées et aussi de la gestion des conditions de raccord. En effet, les conditions aux limites "standard" imposent un flux d'interface qui est aussi facile à prendre en compte en structuré qu'en non-structuré. L'attention sera donc portée sur les conditions de raccord car le but est d'arriver à effectuer des calcul multi blocs en parallèle en utilisant des blocs structurés et non structurés à la fois.

4.1 Algorithmique et structures de données

En terme d'algorithmique, la clé consiste à remarquer que le calcul des flux (diffusif et convectif) peut s'effectuer de manière bénéfique par une boucle sur les interfaces. Le flux calculé sur une interface avec une normale quelconque est alors compté positivement pour l'une des cellules voisines et négativement pour l'autre. Cette remarque met en exergue la nécessité de posséder une structure spécifique regroupant des données liées aux interfaces du maillages.

4.1.1 Structures de données

Eléments du maillage

Etant donné le choix de la formulation cell-centered, il est évident qu'il faut gérer des données propres à un élément du maillage. L'ensemble des éléments du maillage peut être représenté par un tableau \mathcal{T}_1 à `nbre_elements_maillage` entrées (une entrée par élément du maillage). Pour chaque entrée i , ce tableau donne :

- les champs conservatifs en i ,
- le volume de la cellule en i ,
- les champs connexes de la cellule (viscosité, pression, centre, gradient centré,...)

- les incréments en i (initialisés à 0) qui seront mis à jour au fur et à mesure que les solveurs seront pris en compte (diffusif, convectif, terme source).

Interfaces du maillage

Comme présenté plus avant, le calcul des flux numériques se fait de manière naturelle par interface (frontière ou non). La complexité de calcul est alors linéaire par rapport au nombre d'interfaces du maillage.

Pour une interface donnée, il est nécessaire de connaître ses deux cellules voisines qui seront appelées cellules de gauche et de droite. Concrètement, lors de la lecture du maillage, la cellule à gauche d'une interface est la première cellule rencontrée contenant celle-ci, et la cellule à droite est la seconde. Cette méthode conduit à une situation où, pour une face aux bords, seule la cellule de gauche sera interne au bloc non structuré.

La seule normale considérée pour l'interface est alors celle dirigée de la cellule gauche vers la cellule droite.

Ainsi soit Σ une interface, C_G et C_D , ses volumes à gauche et à droite respectivement. Soit \vec{N}_Σ , la normale stockée sur la face Σ , et donc dirigée du volume à gauche vers le volume à droite.

La normale à l'interface Σ et extérieure à C_G est :

$$\vec{N}_{C_G, \Sigma} = \vec{N}_\Sigma, \quad (4.1)$$

et la normale à l'interface Σ et extérieure à C_D est :

$$\vec{N}_{C_D, \Sigma} = -\vec{N}_\Sigma. \quad (4.2)$$

Ceci a évidemment une influence sur le calcul des gradients et des flux numériques.

L'ensemble des interfaces peut donc être représentée par un tableau \mathcal{T}_2 contenant la liste des interfaces du maillage (interfaces internes disposant des états droit et gauche + interfaces de conditions aux limites) tel que, pour toute interface i , nous puissions obtenir :

- la normale à l'interface,
- le numéro des cellules droite et gauche dans la numérotation de \mathcal{T}_1 si elles existent,
- au type de condition limite si l'une des cellules n'existe pas.

Finalement, afin d'accéder rapidement aux interfaces conditions aux limites, des tableaux spécifiques peuvent être créés.

4.1.2 Algorithmes

Calcul du gradient centré par circulation

Le gradient centré calculé par circulation sur les faces d'un volume peut être calculé suivant l'algorithme suivant :

```

subroutine calcul_grad_centre_cellule(i_interface, normale, etat_gauche, etat_droit, &
    & grad_gauche, grad_droit)
    grad_gauche=grad_gauche+0.5*(etat_gauche+etat_droit)*normale
    grad_droit=grad_droit-0.5*(etat_gauche+etat_droit)*normale
end subroutine

```

Calcul du flux diffusif

L’algorithme de calcul des flux diffusifs est le suivant :

```

pour i = 1, elements
    calcul de la densite de flux par circulation sur l’element
fin_pour
pour i = 1, Nbre_interface
    charger les gradients cellule de gauche GCG et de droite GCD
    calculer le gradient d’interface gradf
    calculer le flux diffusif fxd avec gradf, normale, champs cellule de gauche et droite
    incrementer le flux dans la cellule de gauche
    decrementer le flux dans la cellule de droite
fin_pour

```

4.2 Conditions de raccord entre blocs

4.2.1 Condition de raccord entre blocs non-structurés.

Une condition aux limites de raccord entre blocs non-structurés est nécessaire et doit être mise en œuvre dès que possible. En effet, l’intérêt de l’approche non-structurée réside aussi dans la possibilité de découper les gros blocs non-structurés et de les gérer en utilisant les techniques de parallélisme basées sur l’approche MPI ¹. Cela permet de charger de manière uniforme tous les processeurs requis et ainsi d’espérer atteindre un speed-up le plus linéaire possible.

Au sein d’un bloc et hors conditions aux limites “physiques”, le traitement des schémas de discrétisation convectif et diffusif est basé sur une approche orientée aux faces entre volumes de contrôle. Ainsi, pour la condition de raccord entre blocs structurés et non-structurés, deux techniques sont utilisables :

1. une méthode sans recouvrement où les champs manquant par rapport à une interface sont fournis à la volée par MPI,
2. une méthode avec recouvrement où les cellules manquantes de part et d’autre d’une face sont effectivement construites, remplies par MPI et sont updatées par échange MPI et non par l’avance en temps des solveurs.

La méthode 1 ne sera pas retenue car cette technique a pour inconvénient de stresser le gestionnaire des échanges MPI. De plus, cela obligerait aussi à réfléchir afin de pénaliser

¹Multi Process Interface

le moins possible les communications (communications asynchrones). Enfin, ce n'est pas vraiment compatible avec **elsA** actuel qui est conçu pour que le même exécutable soit lancé sur tous les processeurs et que les échanges MPI n'interviennent qu'au niveau des conditions de raccord entre blocs (famille des "join").

La méthode 2 semble donc plus indiquée. L'idée de la méthode 2 est représenté en Fig. 4.1. Le principe est le suivant : on reconstruit lors d'un pré-traitement des cellules fictives fictives afin de remplir les états droits et gauches manquants pour un traitement par face entre cellules. Notons qu'une cellule ne partageant qu'un noeud du maillage avec une cellule de bord n'est pas construite.

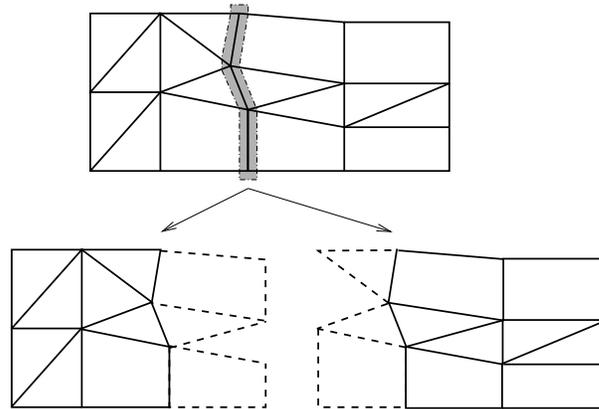


FIG. 4.1 – Découpage du maillage au niveau de la zone grisée et traitement en 2 blocs. Les cellules en pointillés représentent les cellules fictives utilisées pour échanger les champs au niveau de la condition de raccord de join non-structuré.

4.2.2 Condition de raccord entre blocs structurés et non-structurés

Problématique de la condition de raccord

Cette condition de raccord a commencée à être étudiée avant le début du stage, et a fait l'objet d'une présentation effectuée par G. Puigt lors de la réunion ONERA - CERFACS - Université de Bordeaux 1 qui s'est tenue le 7 février 2007 à l'ONERA. Cette partie intègre des éléments de cette présentation.

Les conditions de raccord avec "matching des cellules" entre blocs structurés utilisent une technique de cellules fictives dans lesquelles sont recopiés des champs. C'est ainsi que par copie, l'information passe d'un bloc à l'autre (Fig. 4.2). Les cellules fictives sont soit construites par symétrie des cellules du domaine de calcul, soit par échange avec les cellules internes du bloc adjacent (cellules grisées et hachurées). Avec les solveurs standards, 2 rangées de cellules fictives sont construites.

Afin de simplifier le traitement de la condition aux limites pour la partie structurée, il serait efficace de traiter le raccord entre un bloc structuré et un bloc non-structuré grâce à

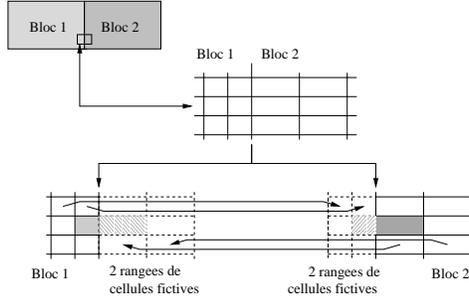


FIG. 4.2 – *Cellules fictives pour le traitement des conditions aux limites. Exemple du join classique. Sens des échanges des champs entre les cellules réelles (trait plein) et les cellules fictives (pointillés).*

des hexaèdres, ce qui permet d’avoir un traitement très proche de celui utilisé en structuré (Fig. 4.3). En particulier, pour les raccords de type “join match”, il sera facile de remplir des cellules fictives pour la partie structurée avec les champs conservatifs issus des cellules hexaédriques.

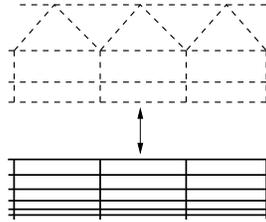


FIG. 4.3 – *Traitement de la condition de raccord entre blocs structurés (traits pleins) et non-structurés (traits pointillés) basé sur la construction de 2 rangées de cellules hexaédriques dans le maillage non-structuré.*

Toutefois, sur le plan pratique, l’utilisation de ce type de raccord peut poser des problèmes numériques à cause de la hauteur de la frontière entre blocs structurés et non-structurés dans la couche limite. En effet, près des parois, les maillages structurés nécessitent un raffinement dans la direction normale à la paroi, tandis que les maillages non-structurés utilisent des cellules de taille la plus uniforme possible. Ainsi, il est possible d’obtenir des situations pathologiques, comme celles présentées en Fig. 4.4.

La solution proposée consiste à appliquer une solution équivalente à la technique des “hanging nodes” utilisée dans le solveur Tau du DLR. L’idée est de construire un raccord non-coïncidant entre les blocs structurés et non-structurés afin que les cellules du bloc non-structuré aient des tailles presque uniformes dans toutes les directions du maillage (Fig. 4.5.)

La solution proposée ici est une solution permettant de coupler avec le moins d’efforts possibles les parties structurée et non-structurée d’**elsA**.

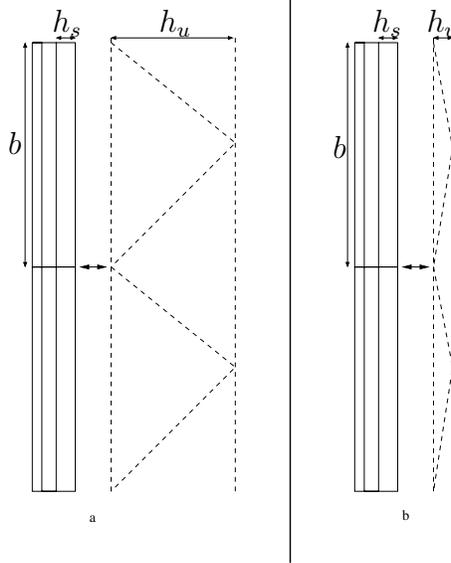


FIG. 4.4 – *Problématique des aspects ratio des mailles lors du raccord entre blocs structurés et non-structurés. Cas a : $h_u/b \simeq 1$ mais $h_u \gg h_s$, cas b : $h_u \simeq h_s$ mais $h_u/b \ll 1$.*

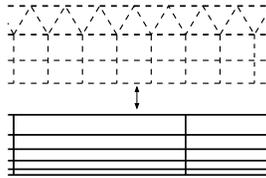


FIG. 4.5 – *Traitement de la condition de raccord entre blocs structurés (traits pleins) et non-structurés (traits pointillés) basé sur la construction de 2 rangées de cellules hexaédriques dans le maillage non-structuré non totalement coïncidentes avec les cellules du bloc structuré.*

4.3 Implantation dans elsA

4.3.1 Etat initial

La stratégie des éditeurs d'**elsA** a été de mettre en place une première version hybride ne résolvant que les équations d'Euler (flux convectif uniquement). C'est le solveur de Roe qui a été adapté pour cette première version. Celle-ci inclut aussi un certain nombre d'éléments de l'analyse qui a été faite de la structure de données et de l'algorithmique.

4.3.2 Travaux en cours

Le travail au cours du stage complète donc cette version par le calcul du gradient centré qui permettra l'extension à l'ordre 2 du solveur de Roe et par l'implémentation de solveurs

diffusifs pour avoir la résolution complète des équations de Navier-Stokes. Les solveurs arête et de Le Potier ont été choisis et sont cours d'implémentation. Ils seront certainement validés d'ici la fin du stage. Le stage s'achèvera probablement sur la mise en œuvre des conditions de raccord avec échanges MPI entre blocs non structurés.

4.3.3 Perspectives immédiates

Le problème important des conditions limites a fait et fait encore l'objet d'une étude approfondie. Dans ce rapport, compte tenu des contraintes d'espace, n'ont été présentés que quelques éléments. Des algorithmes entiers ont été élaborés au cours du stage pour la parallélisation des solveurs de Roe, de Jameson et des solveurs diffusifs pour le calcul avec blocs non structurés. La gestion des conditions de raccord entre bloc non structuré et bloc structuré pose encore un certain nombre de difficultés.

La résolution des équations RANS avec modèles de turbulence à équations de transport (Spalart-Almaras) a été étudiée et sera certainement une extension immédiate de la version qui sera livrée à la fin du stage.

Conclusion

Le but du stage était de participer à la réalisation d'une version hybride du logiciel **elsA**. Le travail a notamment consisté en l'adaptation de l'extension à l'ordre 2 par approche MUSCL du solveur de Roe, en l'adaptation du solveur de Jameson, en l'étude et en la mise en œuvre de solveurs diffusifs non structurés, en l'étude des conditions de raccord entre blocs dans une approche hybride et en l'étude théorique de la prise en compte de modèles de turbulence. L'existant d'**elsA** a imposé comme contrainte d'utiliser une approche VF cell-centered.

En définitive, en ce qui concerne :

- l'étude théorique et numérique de solveurs diffusifs :

Trois solveurs ont été choisis pour être implantés dans **elsA** hybride : 5p, arête, Le Potier. Ces solveurs ont eu sur le cas test des résultats comparables à ceux déjà utilisés dans **elsA** structuré. Le solveur de Le Potier quoiqu'ayant l'ordre de convergence le plus élevé sur les cas tests pourra s'avérer très coûteux pour des maillages en mouvement. Ces solveurs sont en cours d'implémentation dans **elsA** hybride.

- L'adaptation des solveurs Roe + MUSCL et de Jameson :

Quoique pas détaillée dans ce document, elle a été étudiée et a aidé à la conception de structures de données qui seront une base stable aux développements d'**elsA** hybride.

- L'algorithmique et les structures de données :

L'étude des solveurs à mettre en œuvre a mis en évidence qu'une approche de calcul par boucles sur les interfaces permettait d'obtenir une complexité optimale. La gestion de deux structures de données principale a été identifiée : une structure liée aux cellules du maillage et une structure liée aux interfaces. Il a été choisi de stocker les informations de connectivité dans la structure liée aux interfaces, ce qui permettait d'éviter des redondances de données.

- Les conditions de raccord :

L'étude des conditions de raccord entre blocs non structurés peut être considérée comme achevée. L'implémentation de ces conditions de raccord fera l'objet des derniers développements du stage. Les conditions de raccord entre blocs structuré et non structuré sont encore en cours d'étude à cause des différences existant entre ces deux types de blocs.

- L'étude de la mise en œuvre de modèles de turbulence à équations de transport :

La prise en compte de modèles de turbulence à équations de transport, notamment le modèle de Spalart-Almaras a été étudiée et fera certainement l'objet de développement dans **elsA** hybride dans un futur proche.

Quoique les différents développements n'aient pu être terminés dans les limites de temps

imparties à ce stage, il faut toutefois souligner que les différentes études théoriques réalisées permettront un gain de temps important pour des choix de développement stables de la version hybride d'**elsA**. De manière immédiate, l'exécution de cas tests plus complexe permettra de valider l'implémentation des solveurs diffusifs.

Bibliographie

- [Auffray 07] Valérie Auffray. *Etude Comparative de Schémas Numériques pour la Modélisation de Phénomènes Diffusifs sur Maillages Multiéléments*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007.
- [Coudière 96] Yves Coudière, Jean-Paul Vila & Philippe Villedieu. *Convergence of a Finite Volumes Scheme for a Diffusion Convection Problem*. In F Benkhaldoun & R editors Vilsmeier, editeurs, *Finite Volumes for Complex Applications 1*, pages 161–168. Hermès, 1996.
- [Eymard 06] Robert Eymard, Thierry Gallouët & Raphaële Herbin. *A Cell-centred Finite Volume Approximation for Second Order Partial Derivative Operators with Full Matrix on Unstructured Meshes in any Space Dimension*. *IMA Journal of Numerical Analysis*, vol. 26, pages 326–353, April 2006.
- [FOI 07] FOI, Swedish Defence Research Agency, SE-164 90 Stockholm. *Edge Theoretical Formulation*, March 2007. FOI dnr 03-2870, Issue 4.1.0. [**en ligne**]. Disponible sur : www.foi.se/upload/projects/edge/documentation-latest/edge-theory.pdf (consulté le 18.07.07).
- [Le Potier 05] Christophe Le Potier. *Schéma Volumes Finis Monotone pour des Opérateurs de Diffusion fortement Anisotropes sur des Maillages de Triangles Non Structurés*. *Comptes Rendus Mathématique*, vol. Volume 341, Issue 12, pages 787–792, December 2005.
- [May 05] G. May & A. Jameson. *Unstructured Algorithms for Inviscid and Viscous Flows Embedded in a Unified Solver Architecture : Flo3xx*. In 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, numéro AIAA-2005-318, January 10-13 2005.
- [Tomaich 95] George Timothy Tomaich. *A Genuinely Multi-Dimensional Upwinding Algorithm For The Navier-Stokes Equations On Unstructured Grids Using A Compact, Highly-Parallelizable Spatial Discretization*. PhD thesis, University of Michigan, 1995.