

Chapitre I :

Rappels sur les méthodes numériques

I.1. Généralités sur la CFD

I.1.1. Définition

La CFD, "Computational Fluid Dynamics" (« Dynamique des Fluides Numérique »), est un ensemble de méthodes numériques permettant d'obtenir une solution approximative d'un problème de dynamique des fluides et/ou de transfert thermique. Les équations qui interviennent sont celles de la mécanique des fluides (les équations d'Euler, les équations de Navier-Stokes) que l'on peut éventuellement coupler aux équations de transfert thermique ou de réaction chimique., résolues par des méthodes numériques.

La MFN a grandi d'une curiosité mathématique pour devenir un outil essentiel dans pratiquement toutes les branches de la dynamique des fluides, de la propulsion aérospatiale aux prédictions météorologiques en passant par le dessin des coques de bateaux. Dans le domaine de la recherche, cette approche est l'objet d'un effort important, car elle permet l'accès à toutes les informations instantanées (vitesse, pression, concentration) pour chaque point du domaine de calcul, pour un coût global généralement modique par rapport aux expériences correspondantes.

I.1.2. Intérêts de la CFD

Pour traiter un problème de mécanique des fluides, on peut le résoudre soit par une approche :

- **Analytique** : le grand avantage de cette approche est qu'elle permet d'avoir des solutions exactes. Cependant, elle est limitée pour des cas très simples en formulant un certain nombre d'hypothèses ;
- **Expérimentale** : c'est sûrement l'approche qui représente le mieux la réalité. En contrepartie, elle est souvent difficile à mettre en œuvre et nécessite un certain temps pour résoudre tous les problèmes qu'on peut rencontrer. Sans oublier qu'elle peut devenir très vite très coûteuse ;
- **Numérique** : elle permet de faire moins d'hypothèses qu'une approche analytique et permet de traiter des problèmes relativement complexes. De plus, elle peut être moins coûteuse qu'une approche expérimentale. Par contre, elle est limitée par l'ordre des méthodes numériques utilisées, la précision du modèle et les moyens de calcul mis en œuvre.

I.1.3. Méthodologie

De manière générale, la résolution d'un problème de MFN passe par trois grandes phases :

1. la préparation du problème : ceci passe par la définition d'une géométrie, d'un maillage discrétisant le domaine de calcul, du choix des modèles et méthodes numériques employés ;
2. la résolution numérique du problème qui passe par l'exécution d'un programme informatique. Bien des problèmes suscitant un minimum d'intérêt nécessitent des ordinateurs aux très grandes capacités ;
3. l'exploitation des résultats : on vérifie d'abord leur cohérence, puis ils sont examinés afin d'apporter des réponses aux questions posées par le problème de MFN de départ.

L'exploitation des résultats passe le plus souvent par des logiciels de post-traitement scientifique utilisés dans de nombreuses branches de la physique, ou bien par les modules de post-traitement disponibles dans certains logiciels de MFN commerciaux.

I.2. Méthodes numériques

Une solution à ces équations aux dérivées partielles peut être calculée numériquement sur un domaine discrétisé par application de différentes méthodes :

- **Méthode des différences finies ;**
- **Méthode des éléments finis ;**
- **Méthode des volumes finis.**

Contrairement à la méthode des différences finies qui met en jeu des approximations des dérivées intervenant dans les équations à l'aide de développement en série de Taylor, les méthodes des volumes finis et des éléments finis exploitent des approximations d'intégrales. Toutefois, la méthode des volumes finis se base directement sur la forme dite forte de l'équation à résoudre, alors que la méthode des éléments finis se fonde sur une formulation variationnelle de l'équation (on parle aussi de formulation faible) : on décompose la solution sur une base de fonctions tests.

Dans le cas de la méthode aux volumes finis, les termes de flux sont évalués aux interfaces entre les volumes. Cette méthode est conservative, donc parfaitement adaptée à la résolution de lois de conservation. Plus de 90% des codes de calculs en CFD utilisent cette méthode.

A cause du caractère non-linéaire des équations de Navier-Stokes, la résolution des équations se fait souvent de manière itérative à partir des conditions initiales. Dans le cas d'un calcul instationnaire, par exemple, ce calcul itératif est effectué à chaque pas de temps. Le solveur cherche alors une solution des champs de pression, vitesse, température, (. . .) qui équilibre le système de lois de conservation (masse, quantité de mouvement, énergie). Le critère d'arrêt de ce calcul itératif, imposé par l'utilisateur, est souvent basé sur le résidu des variables. Lorsque celui-ci devient faible (il a baissé de 3 à 4 ordres de grandeur), cela est un signe que le calcul itératif a convergé vers une valeur donnée et peut-être arrêté.

I.3. Equations de la mécanique des fluides

□ Equation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0$$

Pour un fluide Newtonien incompressible ($\rho = \text{cte}$), l'équation se réduit à :

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0$$

□ Equations de quantité de mouvement (équations de Navier-Stokes)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial (\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = F_i - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right]$$

Où :

$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}_i)$: représente le taux de variation de la quantité de mouvement,

$\frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j}$: représente le taux net de transport de quantité de mouvement suivant la direction i, par mouvement du fluide.

$\frac{\partial P}{\partial x_i}$: représente les forces dues à la pression.

$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right]$: représente les forces nettes de viscosité.

F_i : Représente les forces volumiques suivant la direction i.

L'exemple le plus courant des forces volumiques est celui de la pesanteur, pour laquelle $\vec{F} = \rho \cdot \vec{g}$.

□ Equation d'énergie

$$\rho \cdot C_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j T) \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] + q + \mu \Phi$$

Où :

k : la conductivité thermique

C_p : la chaleur spécifique à pression constante.

ρ : la masse volumique.

q : la génération de chaleur par unité de volume (densité de chaleur volumique)

μ : viscosité dynamique du fluide.

Φ : la dissipation visqueuse.

Conditions aux limites

Pour résoudre les équations aux dérivées partielles, il faut indiquer les conditions aux limites à l'instant initial. Il s'agit en général de définir :

- sur les parois (le vecteur vitesse est nécessairement parallèle à la paroi) :
 - ✓ s'il s'agit d'une paroi parfaitement glissante ou s'il faut prendre en compte la viscosité,
 - ✓ la température de paroi et éventuellement le coefficient d'échange thermique si l'on résout l'équation de la chaleur ;

- sur les surfaces ouvertes :
 - ✓ s'il s'agit d'une entrée ou d'une sortie (le flux est à sens unique), ou éventuellement s'il s'agit d'une ouverture dans laquelle le flux peut être dans les deux sens (introduit des instabilités numériques),
 - ✓ imposer un champ de vitesse ou un débit, ou bien imposer une pression statique moyenne,
 - ✓ imposer une température uniforme ou un flux d'enthalpie si l'on résout l'équation de la chaleur.

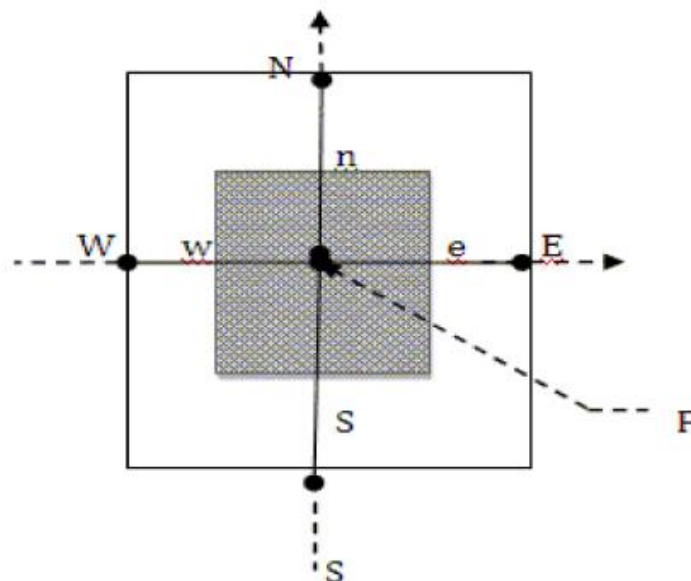
Lors de la définition des conditions aux limites, il faut prendre en compte la stabilité du calcul : la résolution des équations se fait de manière approchée, en plusieurs étapes, et il importe que l'on se rapproche à chaque étape de la solution (convergence, calcul stable). Les conditions aux limites donnant le calcul le plus stable sont :

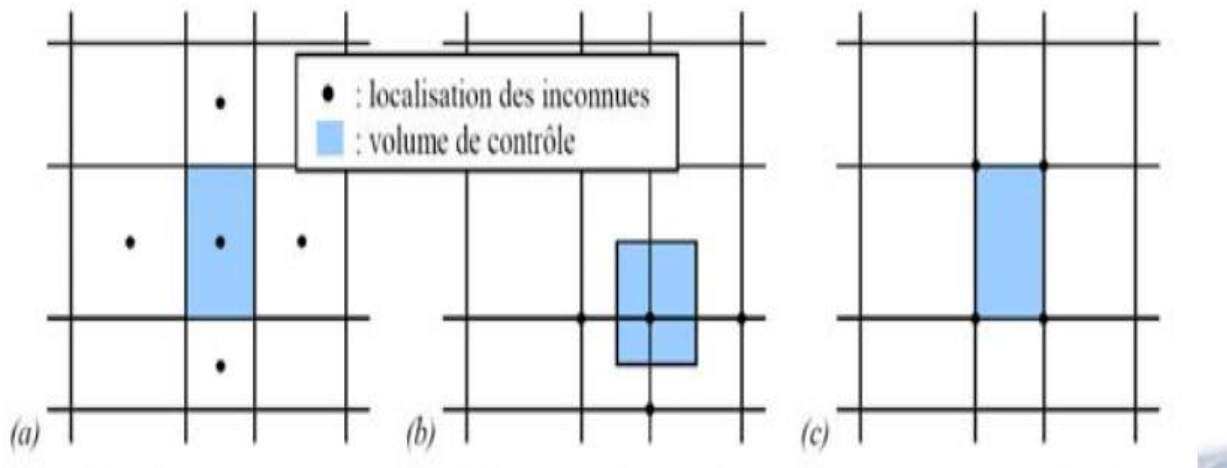
- une entrée sur laquelle on impose une vitesse ou un débit ;
- une sortie sur laquelle on impose une pression.

L'inverse — pression imposée en entrée, vitesse ou débit imposé en sortie — est un peu moins stable mais se résout bien. Par contre, le fait de définir une pression en entrée *et* en sortie, ou bien un flux (vitesse ou débit) en entrée *et* en sortie, débouche en général sur un calcul instable (le logiciel n'arrive pas à s'approcher de la solution).

I.4. Principe de la Méthode des Volumes Finis

Le principe de cette méthode est de subdiviser le domaine de calcul en un nombre fini de sous-domaines élémentaires jointifs, appelés volumes de contrôle puis, intégrer les équations aux dérivées partielles sur chaque volume de contrôle. Ce dernier englobe un nœud dit “nœud principal”. Ceci nous conduit à l'obtention d'une équation algébrique simple appelée « équation discrétisée » qui est propre à chaque nœud du domaine. Donc, si celui-ci est constitué de n -nœuds, on aurait n -équations algébriques à résoudre, il y a donc, autant de nœuds que de volumes de contrôle d'où la performance de la méthode des volumes finis comparativement aux autres méthodes. La dernière étape de cette méthode est la résolution du système d'équations obtenu par l'une des méthodes de résolution des équations algébriques linéaires.





Dans le cas de la méthode aux volumes finis, les termes de flux sont évalués aux interfaces entre les volumes. Cette méthode est conservative, donc parfaitement adaptée à la résolution de lois de conservation. Plus de 90% des codes de calculs en CFD utilisent cette méthode.

A cause du caractère non-linéaire des équations de Navier-Stokes, la résolution des équations se fait souvent de manière itérative à partir des conditions initiales. Dans le cas d'un calcul instationnaire, par exemple, ce calcul itératif est effectué à chaque pas de temps. Le solveur cherche alors une solution des champs de pression, vitesse, température, (. . .) qui équilibre le système de lois de conservation (masse, quantité de mouvement, énergie). Le critère d'arrêt de ce calcul itératif, imposé par l'utilisateur, est souvent basé sur le résidu des variables. Lorsque celui-ci devient faible (il a baissé de 3 à 4 ordres de grandeur), cela est un signe que le calcul itératif a convergé vers une valeur donnée et peut-être arrêté.

I.5. Etapes de la CFD

I.5.1. CAO

Toute simulation CFD commence par la réalisation de la géométrie en 2D ou 3D, soit avec un logiciel intégré au code de calcul CFD soit à l'aide d'un logiciel de CAO. Dans le deuxième cas, la géométrie doit être exportée en un format lisible par le logiciel de maillage.

I.5.2. Maillage

La génération du maillage (2D ou 3D) est une phase très importante dans une analyse CFD, vu son influence sur la solution calculée. Un maillage de très bonne qualité est essentiel pour l'obtention d'un résultat de calcul précis, robuste et signifiant. La qualité du maillage a un sérieux impact sur la convergence, la précision de la solution et surtout sur le temps de calcul. Une bonne qualité de maillage repose sur la minimisation des éléments présentant des « distorsions » (skewness en anglais), et sur une bonne « résolution » dans les régions présentant un fort gradient (couches limites, ondes de choc, . . .). Un bon maillage doit également être suffisamment « lisse ».

a. Composants du maillage

Le domaine de calcul est défini par un maillage qui représente le fluide et les faces solides qui interviennent.

- “Cell” : volume de contrôle divisant la géométrie ;
- “Face” : frontière d'une “cell”, où sont définies les conditions aux limites ;

- “Edge” : frontière d’une “face” ;
- “Node” : point de maillage ;
- “Zone” : groupe de “nodes”, “faces” et/ou “cells”.

b. Choix du type de maillage

On définit les maillages structurés, et non structurés (voir Fig. 2).

• Maillage structuré (quadra/hexa)

Un maillage structuré est un maillage qui peut être généré en reproduisant plusieurs fois une maille élémentaire. Dans ce type de maillage, tout nœud peut être repéré par un doublet ou un triplet (i, j, k). Le maillage structuré tire profit de la numérotation et la topologie est implicite (stockage quasi-nul). En 2D, les éléments sont des quadrilatères, en 3D ce sont des hexaèdres. Il présente les avantages suivants :

- Economique en nombre d’éléments, présente un nombre inférieur de mailles par rapport à un maillage non structuré équivalent.

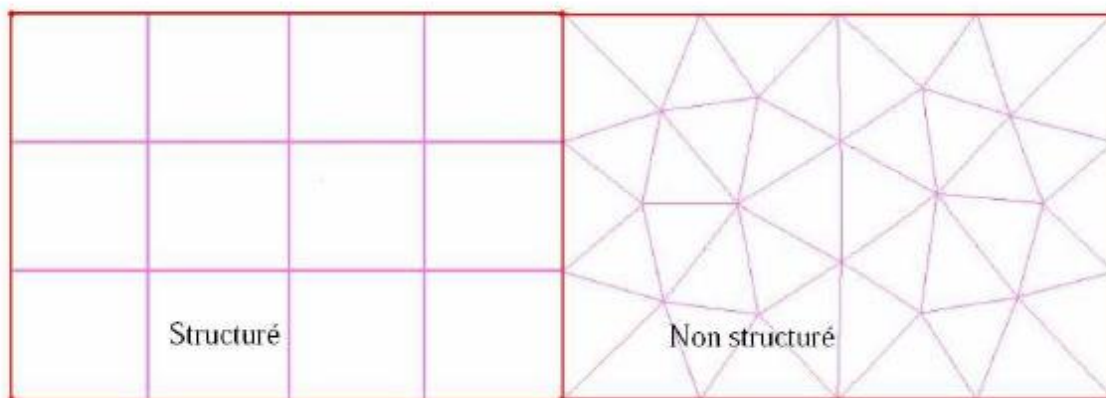


Figure I.1 : Maillages structurés et non structurés

- Lorsque l’écoulement moyen est aligné avec le maillage, un maillage structuré réduit les risques d’erreurs numériques.

Ses inconvénients :

- Difficile à générer dans le cas d’une géométrie complexe.
 - Difficile d’obtenir une bonne qualité de maillage pour certaines géométries complexes.
- Il est beaucoup plus facile à générer en utilisant une géométrie à blocs multiples.

• Maillage non structuré (tri/tétra)

Les éléments de ce type de maillage sont générés arbitrairement sans aucune contrainte quant-à leur disposition.

Ses avantages :

- Peut être généré sur une géométrie complexe tout en gardant une bonne qualité des éléments,
- Les algorithmes de génération de ce type de maillage (tri/tétra) sont très automatisés.

Ses inconvénients :

- Très gourmand en nombre de mailles comparativement au maillage structuré.
- Impose une structure de données gourmande en capacités de stockage.
- Engendre des erreurs numériques (fausse diffusion) qui peuvent être plus importantes si on le compare avec le maillage structuré.

• Maillage hybride

Maillage généré par un mélange d'éléments de différents types, triangulaires ou quadrilatéraux en 2D, tétraédriques, prismatiques, ou pyramidaux en 3D. Il combine les avantages des maillages structurés et non structurés.

c. Techniques générales de génération du maillage

En pratique, il n'existe pas de règle précise pour la création d'un maillage valable, cependant il existe différentes approches qui permettent d'obtenir une grille acceptable. Nous pouvons résumer ces règles ainsi :

- Maintenir une bonne Qualité des éléments,
- Assurer une bonne Résolution dans les régions à fort gradient,
- Assurer un bon Lissage dans les zones de transition entre les parties maillage à fin et les parties à maillage grossier,
- Minimiser le nombre Total des éléments (temps de calcul raisonnable).

On peut se souvenir de ces règles en utilisant la formulation mnémotechnique QRLT.

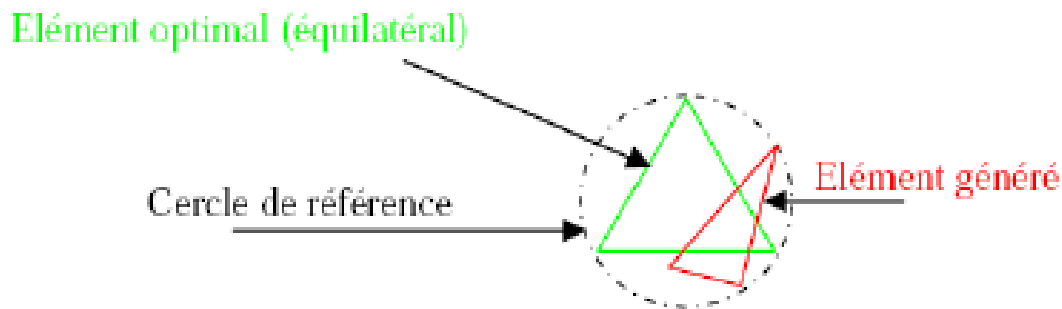


Figure I.2 : Définition de la skewness sur un volume triangulaire

Le facteur de distorsion F_d (skewness) peut être défini de deux façons différentes. Pour des éléments triangulaires ou tétraédriques, le calcul est basé sur le volume équilatéral (voir Fig I.2) :

$$F_d = \frac{\text{Taille}_{\text{element optimal}} - \text{Taille}_{\text{element généré}}}{\text{Taille}_{\text{element optimal}}}$$

L'autre formulation, applicable pour tout élément, est basée sur la déviation angulaire, avec θ les angles de l'élément :

$$F_d = \max \left\{ \frac{\theta_{\max} - 90}{90}, \frac{90 - \theta_{\min}}{90} \right\}$$

Le facteur de distorsion est nul pour des éléments « parfaits » (carrés, triangles équilatéraux).

Notons que les grandes valeurs du facteur de distorsion induisent des erreurs de calcul et ralentissent considérablement le processus de convergence. Quelques distorsions peuvent être tolérées si elles sont situées

dans des régions à faible gradient. Le tableau 1 illustre la variation de la qualité des éléments de maillage en fonction de la valeur du coefficient de distorsion F_d :

F_d	0-0.25	0.25-0.50	0.50-0.80	0.80-0.95	0.95-0.99	0.99-1.00
Qualité	Excellente	Bonne	Acceptable	Pauvre	Très pauvre	Mauvaise

Tableau I.1. : Qualité associé au facteur de distorsion

Résolution

La notion de résolution concerne plus particulièrement les zones qui présentent un fort gradient, ainsi une bonne résolution —un maillage localement plus fin— permet de mieux décrire les phénomènes physiques qui existent dans ces zones telles que les ondes de choc, ou les phénomènes liés à la couche limite. La plupart des maillages proposent des méthodes de maillage particulières pour réaliser en proche paroi des maillages structurés dont on maîtrise la taille (voir Fig. I.3).

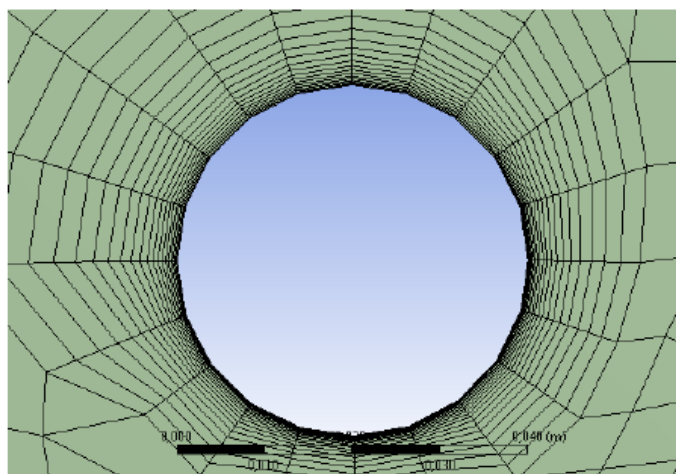


Figure I.3 : Exemple de maillage proche d'une paroi « maillage de couche limite »

Lissage

Le changement dans la taille des éléments du maillage d'une zone maillée à une autre doit être graduel, la variation de la taille des éléments de deux zones adjacentes ne doit idéalement pas dépasser 20% à 30% (voir Fig. I.4).

$$\frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i} \leq 1.2$$

Figure I.4 : Evolution de la taille des éléments

Nombre total d'éléments

Un nombre important d'éléments de maillage permet sans doute d'améliorer la précision des calculs, mais pénalise les ressources informatiques en terme de mémoire et alourdit le système. En conséquence, un compromis entre précision et temps de calcul s'impose. Des techniques existent pour économiser un certain nombre d'éléments :

- Utilisation des maillages non uniformes, en concentrant la bonne qualité du maillage uniquement dans les zones où c'est nécessaire,
- Utilisation de la fonction adaptation de maillage pour raffiner uniquement sur des zones bien précises (si le code possède cette option),
- Utilisation des éléments de maillage hexaédriques dans les zones adéquates.

d. Convergence en maillage

Dans une modélisation CFD, la solution doit être indépendante de la densité du maillage pour être sûr du réalisme de la solution que donne le solveur après convergence.

De manière systématique, pour tout calcul par CFD on se doit de réaliser et de présenter un test de convergence en maillage, en reportant l'évolution d'une grandeur, tant qu'à faire que l'on souhaite mesurer par la simulation en cours —un coefficient de transfert thermique par exemple — en fonction de la taille du maillage que l'on raffine successivement (voir Fig. I.5).

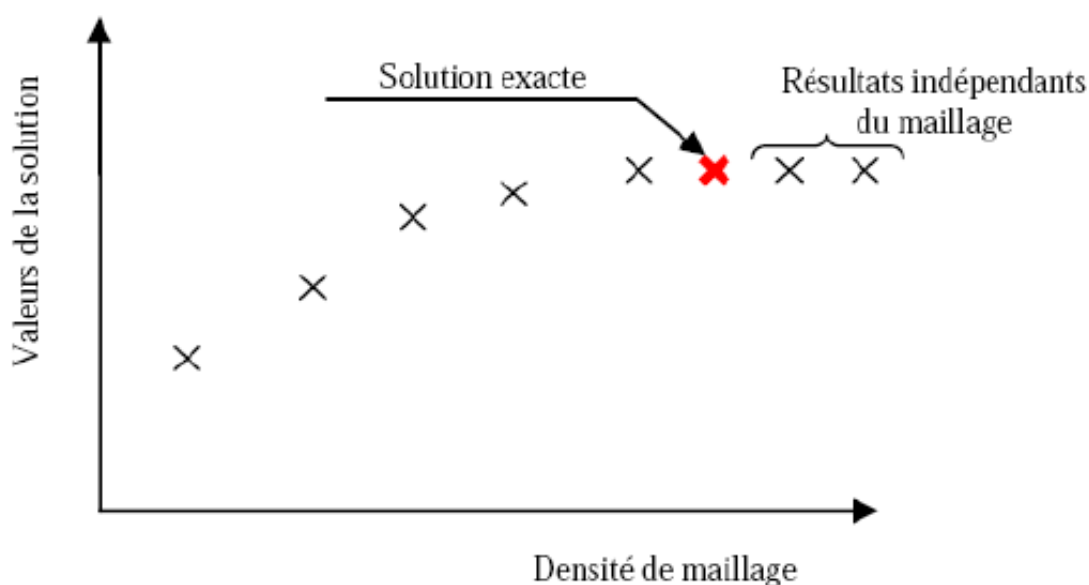


Figure I.5 : Test de convergence en maillage

I.4. Les logiciels de simulation

ANSYS, Inc. est un éditeur de logiciels spécialisé en simulation numérique. L'entreprise a son siège à Canonsburg en Pennsylvanie aux États-Unis. Ses produits majeurs sont des logiciels qui mettent en œuvre la méthode des éléments finis, afin de résoudre des modèles préalablement discrétisés. La société possède de nombreuses filiales à travers le monde, notamment en Europe et en Asie.

-Principaux produits

- **ANSYS Structural** : Ce produit permet d'effectuer des simulations mécaniques en calcul de structures. Ses principales capacités sont :

l'analyse statique

l'analyse modale

l'analyse harmonique (réponse forcée)

l'analyse temporelle

la gestion de différentes situations non-linéaires (contacts, plasticité matériaux, grands déplacements ou grandes déformations).

- **ANSYS Mechanical** : Ce produit dispose des mêmes capacités qu'ANSYS structural, en y ajoutant notamment un solveur thermique, avec modélisation du rayonnement.
- **ANSYS CFX et Fluent** : Ces deux logiciels permettent d'effectuer des simulations en matière de mécanique des fluides. Ils portent le nom des compagnies qui les ont développés, rachetées par ANSYS, Inc respectivement en février 2003 et en février 2006.
- **Fluent** est un solveur : il ne comporte pas de mailleur (le maillage doit être réalisé avec un logiciel de maillage, Gambit par exemple, qui est également édité par ANSYS). Fluent est un solveur très utilisé dans l'industrie et à travers le monde. Il est souvent considéré comme une référence dans le domaine de la modélisation fluide. Le paramétrage du modèle se fait par une interface graphique.
- L'un des intérêts de ce logiciel de simulation généraliste, est qu'il dispose d'un nombre relativement important de modèles, pouvant faire face à divers aspects de la mécanique des fluides : écoulements diphasiques (miscible, non miscible, cavitation, solidification), turbulence (LES, $K\epsilon$, $K\omega$, SA, Reynolds stress...), combustion (pré-mélangé et non pré-mélangé), transport de particules, écoulements en milieux poreux, maillages mobiles et dynamiques avec reconstruction du maillage, entre autres.
- Les schémas numériques temporels et spatiaux peuvent être modifiés pour améliorer la convergence.
- Fluent est parallélisé et permet de tirer parti de systèmes multiprocesseurs aussi bien au sein d'une seule machine qu'en réseau (cluster, dual core, plateforme multi-CPU).
- **Gambit** : Un logiciel de maillage édité par la société ANSYS depuis 2006 (l'éditeur historique du logiciel était la société *Fluent*). Ce mailleur permet de créer géométries et maillages avec un grand degré de liberté et une grande précision. Le domaine géométrique peut aussi être importé depuis un fichier CAO. Il assure également le maillage automatique de surfaces et de volumes en parallèle de l'introduction de conditions aux limites. Gambit est souvent considéré comme un mailleur de référence par les modélisateurs utilisant Fluent.