

Simulation du transfert de masse et de chaleur par Calcul Extérieur Discret

D. Razafindralandy^a, A. Hamdouni^b, R. Ayoub^c

Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement

Université La Rochelle

a) drazafin@univ-lr.fr

b) aziz.hamdouni@univ-lr.fr

c) rama.ayoub1@univ-lr.fr

Résumé :

La formulation en calcul extérieur des équations de Navier-Stokes anisothermes est présentée. Ces équations sont ensuite discrétisées par la méthode de calcul extérieur discret (DEC). Les résultats numériques par cette méthode sont comparés aux solutions connues (analytiques ou numériques)

Abstract :

The intrinsic exterior calculus formulation of the anisothermal Navier-Stokes equations is presented. The equations are then discretized with the Discrete Exterior Calculus method (DEC). The numerical results are compared to known (analytical or numerical) solutions.

Mots clefs : géométrie différentielle, DEC, mécanique des fluides

1 Introduction

Depuis un certain temps, un intérêt sur les intégrateurs géométrique apparaît. En effet, on constate que les schémas de discrétisation numériques respectant la structure de l'équation ont un bon comportement sur la reproduction des propriétés physiques des équations.

Plusieurs types d'intégrateurs géométriques existent, correspondants aux diverses structures géométriques. Ici, nous nous intéressons à une propriété plus en amont de la géométrie différentielle, qui est la structure d'homologie. Cette structure résulte de la propriété fondamentale $d^2 = 0$, où d est l'opérateur de dérivation extérieure. Formulée en calcul extérieur, cette propriété regroupe les identités du calcul vectoriel $\text{rot grad} = 0$ et $\text{div rot} = 0$ dans le cas particulier de \mathbb{R}^3 .

En simulation numérique, les opérateurs rot , grad et div sont généralement discrétisés séparément. Les identités ci-dessus ne sont alors pas préservées par les systèmes numériques. En conséquence, une masse, une circulation, un potentiel ou une portance parasites peuvent apparaître dans la solution numérique. La préservation de ces identités peut être accomplie en préservant la propriété d'homologie $d^2 = 0$, à condition de travailler en calcul extérieur. C'est le but de certaines méthodes de discrétisation

spatiale comme la discrétisation mimétique [1], le Calcul Extérieur Discret (DEC) [2] et le Calcul Extérieur en Éléments Finis (FEEC) [5].

La méthode utilisée ici est la DEC qui utilise les cochaînes comme formes discrètes. Elle a été utilisée en mécanique des fluides pour la simulation des écoulements des fluides non-visqueux, la résolution des équations de Darcy et des équations de Navier-Stokes dans des configurations basiques [3, 4].

Dans cet article, on s'intéresse aux fluides anisothermes. Dans la première partie, la méthode DEC sera décrite. On présentera alors les outils discrets nécessaires. Dans la section suivante, les équation de Navier-Stokes anisothermes seront reformulées en calcul extérieur. La discrétisation temporelle est présentée dans la section 3. Et finalement on expose quelques résultats numériques dans la section 4.

2 Calcul Extérieur Discret (DEC)

La DEC (Discret Exterior Calculus) est une théorie discrète de calcul extérieur qui préserve l'exactitude de la suite de de Rham. Partant d'une équation écrite en calcul extérieur, la discrétisation par DEC consiste à discrétiser le domaine, à remplacer les formes différentielles en des formes discrètes et enfin à remplacer les opérateurs continus par leurs correspondants discrets.

La discrétisation d'un domaine Ω de \mathbb{R}^n , se fait habituellement par des subdivisions simpliciales. Si $\dim \Omega=3$, alors Ω est subdivisée en des tétraèdres. On note K l'ensemble composé des n -simplexes (les tétraèdres), leurs faces (les triangles) et les faces des faces (les cotés) jusqu'au nœuds. Chaque élément de K est associé à une orientation, sauf les sommets. On note K_k l'ensemble des k -simplexes orientés de K :

$$K_k = \{ \sigma \in K, \sigma \text{ orienté}, \dim \sigma = k \}.$$

Les formes différentielles sont l'outil de base du calcul extérieur. En DEC représentées par des cochaînes qui sont leurs versions discrètes en cochaînes, puis on présente la discrétisation des opérateurs.

2.1 Formes différentielles discrètes

Dans la théorie continue une k -forme différentielle ω peut être vue comme une application qui à chaque k -sous-variété C de dimension k , associe un nombre réel :

$$\int_C \omega. \quad (1)$$

Cette propriété assure une dualité entre k -formes et k -sous-variétés et elle est utilisé en DEC pour définir les formes différentielles discrètes.

Soit Λ_k l'espace vectoriel des combinaisons linéaires formelles des éléments de K_k

$$\Lambda_k = \text{span } K_k = \left\{ c = \sum_{\sigma_i \in K_k} c_i \sigma_i, c_i \in \mathbb{R} \right\}.$$

Un élément de Λ_k est nommé k -chaîne. Une k -forme, ou une k -cochaîne, est une élément du dual $\Lambda^k(K) = \Lambda_k^*(K)$ de $\Lambda_k(K)$. Comme les éléments de K_k forment une base de Λ_k , une k -forme discrète est simplement une application qui, à chaque élément de K_k , associe un nombre réel :

$$\omega \in \Lambda^k : \begin{array}{ccc} K_k & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ \sigma & \longmapsto & \langle \omega, \sigma \rangle. \end{array} \quad (2)$$

Concrètement, une k -cochaîne ω est un tableau dont les éléments sont les $\langle \omega, \sigma_i \rangle$ avec $\sigma_i \in K_k$.

Le bord d'un k -simplexe est la somme formelle des $(k-1)$ -simplexes qui l'entourent. Dans cette somme à, chaque $(k-1)$ -simplexe est attribué un signe, suivant si son orientation est compatible avec celle du k -simplexe considéré. Par exemple, le bord de la face f_1 dans la figure 1 est : $\partial f_1 = e_1 + e_2 - e_3$.

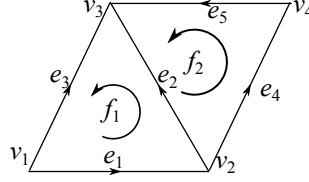


FIGURE 1 – Exemple de maillage orienté, les flèches représentent l'orientation de chaque face et coté.

2.2 Discrétisation des opérateurs

L'opérateur de bord ∂ définie une variété de Λ_k à Λ_{k-1} . Il peut être représenté par une matrice. Par exemple, l'opérateur de bord sur le maillage de la figure 1 est

$$\partial_{|\Lambda_2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & -1 \\ -1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \partial_{|\Lambda_1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Dans l'équation (3), $\partial_{|\Lambda_k}$ est la restriction de ∂ sur Λ_k .

L'opérateur de dérivation extérieure d est défini comme dual de l'opérateur de bord ∂ :

$$\langle d\omega, c \rangle = \langle \omega, \partial c \rangle, \quad \text{pour tout } \omega \in \Omega_k, c \in K_{k+1}. \quad (4)$$

C'est une application linéaire de Λ_k dans Λ_{k+1} . On peut remarquer que la relation (4) est simplement l'expression du théorème Stokes si l'application $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est une intégration.

La matrice d_k de la restriction de d sur une k -forme est la transposé de la matrice $\partial_{|\Lambda_{k+1}}$:

$$d_k = \partial_{|\Lambda_{k+1}}^T.$$

Par exemple, si une 0-forme ω prend les valeurs ω_1 et ω_2 aux sommets v_1 et v_2 de la figure 1, alors

$$\langle d\omega, e_1 \rangle = \langle \omega, v_2 - v_1 \rangle = \omega_2 - \omega_1.$$

Et si ω est une 1-forme, alors

$$\langle d\omega, f_1 \rangle = \langle \omega, e_1 \rangle + \langle \omega, e_2 \rangle - \langle \omega, e_3 \rangle.$$

La figure 2 présente une 0-forme ω arbitraire, sa dérivée extérieure $d\omega$ et $d^2\omega$. Dans cet exemple,

$$d^2\omega = 0. \quad (5)$$

En fait, cette relation est valable pour toute k -forme. Ceci est dû à la dualité entre ∂ et d , et au fait que

$\partial^2 = 0$, signifiant que le bord d'un bord est l'ensemble vide.

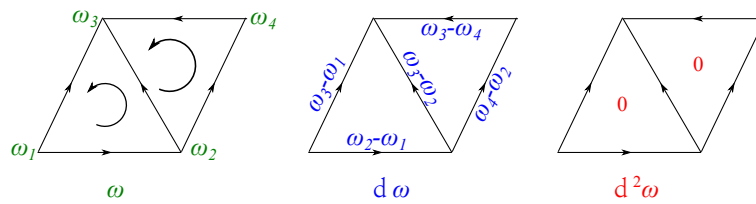


FIGURE 2 – Une 0-forme discrète ω avec $\langle \omega, v_i \rangle$ et sa première et seconde dérivée $d\omega$ et $d^2\omega$

En conclusion, la DEC est construite de sorte que l'exactitude du complexe de de Rham est préservée à l'échelle discrète. On a deux suites exactes, une pour ∂ et la deuxième pour d (tableau 1). De plus, par construction de l'opérateur de dérivation extérieur, le théorème de Stokes est aussi préservé.

$$\begin{array}{ccccccc} \Lambda^0 & \xrightarrow{d} & \Lambda^1 & \xrightarrow{d} & \dots & \xrightarrow{d} & \Lambda^{n-1} & \xrightarrow{d} & \Lambda^n & \xrightarrow{d} & 0 \\ 0 & \xleftarrow{\partial} & \Lambda_0 & \xleftarrow{\partial} & \Lambda_1 & \xleftarrow{\partial} & \dots & \xleftarrow{\partial} & \Lambda_{n-1} & \xleftarrow{\partial} & \Lambda_n \end{array}$$

Tableau 1 : Suites d'homologies discrètes

L'opérateur \star de Hodge, le produit intérieur et le produit extérieur peuvent aussi être discrétisés([7]). Pour la discrétisation des opérateurs grad, rot et div, notons $\flat : T\Omega \rightarrow \Lambda^1$, l'isomorphisme qui identifie un vecteur à une 1-forme :

$$u^\flat(u') = u \cdot u' \quad \text{pour tout } u, u' \in T\Omega, \tag{6}$$

Rappelons que $(\text{grad } f)^\flat = df$, $(\text{rot } u)^\flat = \star du^\flat$, $\text{div } u = \star d \star u^\flat$ dans le cas continu (voir tableau 2). Ces équations permettent alors de discrétiser grad, rot et div. Et comme $d^2 = 0$ exactement avec la DEC, il est facile de vérifier que $\text{rot grad} = 0$ et $\text{div rot} = 0$ exactement.

$$\begin{array}{ccccccc} C^\infty & \xrightarrow{\text{grad}} & T\Omega & \xrightarrow{\text{rot}} & T\Omega & \xrightarrow{\text{div}} & C^\infty \\ \downarrow = & & \downarrow \flat & & \downarrow \star \flat & & \downarrow \star \\ \Lambda^0 & \xrightarrow{d} & \Lambda^1 & \xrightarrow{d} & \Lambda^2 & \xrightarrow{d} & \Lambda^3 \end{array}$$

Tableau 2 : Correspondance entre les opérateurs en calcul tensoriel et en calcul extérieur

3 Simulation d'un écoulement de fluide anisotherme

Considérons un fluide Newtonien de densité ρ , viscosité cinématique ν , coefficient de dilatation thermique β et diffusion thermique k dans un domaine simplement connexe Ω . Dans la limite d'approximation de Boussinesq, l'évolution de la vitesse u , la pression p et la température θ sont gouvernées par les équations de Navier-Stokes anisothermes

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \text{div}(u \otimes u) + \frac{1}{\rho} \text{grad } p - \nu \Delta u + \beta g \theta e_y = 0, \\ \text{div } u = 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} + \text{div}(u \theta) - k \Delta \theta = 0. \end{cases} \tag{7}$$

Les équations (7) est la formulation tensorielle du problème. Dans la suite, la formulation en calcul extérieur est établi.

3.1 Formulation en calcul extérieur de l'équation

Notons $v = u^\flat$ la 1-forme associée à la vitesse. La condition d'incompressibilité devient :

$$\delta v = 0 \quad \text{où } \delta = \star d \star \quad (8)$$

En appliquant \flat à l'équation (7), on obtient :

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} + i_{v^\sharp} dv + \frac{1}{\rho} d\bar{p} - v \delta dv + \beta g \theta dy = 0, \\ \delta v = 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} - \delta(\theta v) + k \delta d\theta = 0. \end{cases} \quad (9)$$

Dans (9), $\bar{p} = p + \frac{1}{2} \rho u^2$ est la pression dynamique. L'opérateur \sharp est l'inverse de \flat , et $v^\sharp = u$. La condition d'incompressibilité dans (9) nous informe que $\star v$ est une forme fermée. Le Lemme de Poincaré garantit l'existence d'une 0-forme ψ tel que $\star v = d\psi$ ou

$$v = s \star d\psi \quad \text{où } s = (-1)^{n-1}.$$

La forme, ψ est la fonction courante habituelle ou son opposé, suivant la parité de la dimension n de Ω . Ensuite, pour éliminer la pression dynamique, l'opérateur d est appliqué à l'équation de quantité de mouvement. Les équations (9) deviennent alors

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} d \star d\psi + d(i_{v^\sharp} d \star d\psi) - v d \delta d \star d\psi + s \beta g d(\theta dy) = 0, \\ v = s \star d\psi, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} - \delta(\theta v) + k \delta d\theta = 0. \end{cases} \quad (10)$$

Si nécessaire, la pression dynamique peut être calculée auxiliairement en appliquant l'opérateur codifférentiel δ à l'équation de la quantité de mouvement dans (9). Le système (10) est discrétisé spatialement avec la DEC en remplaçant chaque forme et chaque opérateur par sa version discrète.

3.2 Discrétisation temporelle de l'équation

La discrétisation en temps est faite comme suit.

— D'abord, $\psi^{n+1/2}$ est approximé par un schéma Euler explicite :

$$\left[d \star d \right] \psi^{n+1/2} = dv^n + \frac{\Delta t}{2} [-di_{v^\sharp n} dv^n + v d \delta dv^n - s \beta g d(\theta^n dy)]$$

— Une fois $\psi^{n+1/2}$ calculé, la vitesse (plus précisément, le flux) $v^{n+1/2}$ est déduit :

$$v^{n+1/2} = s \star d\psi^{n+1/2}. \quad (11)$$

— Ensuite, ψ^{n+1} est résolu semi-implicitement :

$$\left[\frac{1}{\Delta t} d \star d + di_{v^{n+1}/2} d \star d - v d \delta d \star d \right] \psi^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} d v^n - \beta g d (\theta^n dy).$$

— La vitesse est de nouveau calculé :

$$v^{n+1} = s \star d \psi^{n+1}. \quad (12)$$

— Finalement, la température est résolue avec un schéma implicite :

$$\left[\frac{1}{\Delta t} + \star d \star v^{n+1} \Lambda \cdot + k \delta d \right] \theta^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \theta^n. \quad (13)$$

Notons que grâce (12) et le fait que $d^2 = 0$, v^{n+1} vérifie *exactement* la condition d'incompressibilité

$$\delta v = 0.$$

Par conséquent, chaque fois que nécessaire, la pression dynamique peut être calculée en utilisant :

$$\left[\delta d \right] \bar{p}^{n+1} = -\delta i_{v^{n+1}} d v^{n+1} + v \delta \delta d v^{n+1} - \beta g \delta (\theta^{n+1} dy). \quad (14)$$

Notons que l'application de δ sur l'équation de quantité de mouvement dans (9) est équivalent, en calcul tensoriel, à l'application de l'opérateur de divergence à l'équation de quantité de mouvement dans (7). Alors, si $\text{div} v$ n'est pas exactement zero, donc la résolution de (14) introduirait une pression parasite supplémentaire.

4 Résultats numériques

Cavité différentiellement chauffée

On fait le teste sur la température qui se propage dans une cavité carré. Le problème est décrit dans [6]. Les cotés gauche et droit de la cavité sont maintenus à une température constante, tandis que le haut et le bas sont adiabatiques. Une condition de non-glissement est imposée sur tous les murs de la cavité. (voir 3)

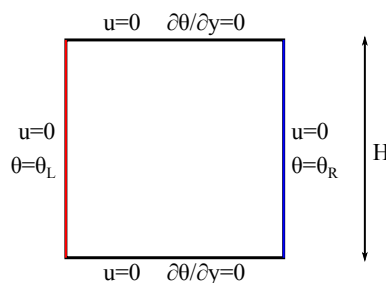
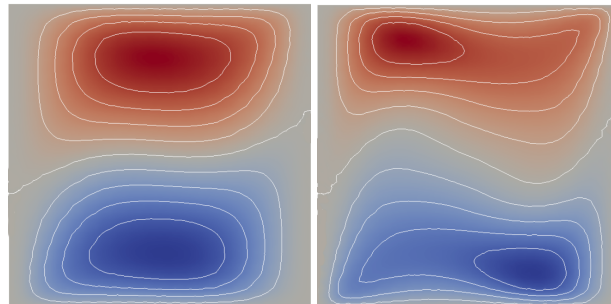


FIGURE 3 – Géométrie de la cavié chauffée

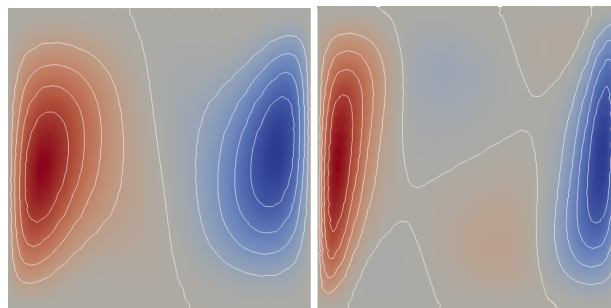
Pour la simulaion, Prandtl est pris égal à 0.71, et deux valeurs de Rayleigh sont utilisées, 10^4 et 10^5 . Les résultats sont comparés avec ceux de Davis dans [6], qui sont obtenus par des simulations en différences finies. Quelques isolignes des composantes verticales et horizontales de la vitesse sont présents

dans la figure (3). Les lignes de contour de la fonction du courant et de la température sont présentés dans la figure (4). Elles sont toutes similaires à celles dans [6].

D'autres tests ont été effectués. Par exemples, dans le cas de vortex de Taylor, les résultats numériques sont cohérents avec les solutions analytiques. Ces tests seront exposés lors de la présentation orale.

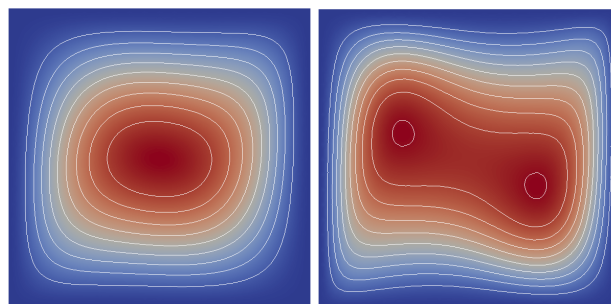


a) Vitesse horizontale

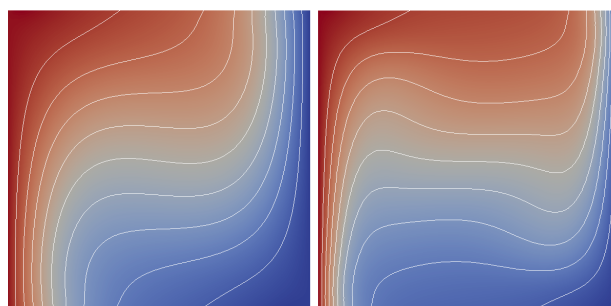


b) Vitesse verticale

Figure 3 : Lignes de contour de la vitesse pour $Re = 10^4$ (gauche) et $Re = 10^5$ (droite).



a) Fonction du courant



b) Température

Figure 4 : La fonction du courant et lignes de contour de la température pour $Re = 10^4$ (gauche) et $Re = 10^5$ (droite).

5 Conclusion

La formulation des équations de Navier-Stokes anisothermes a été présentée. Elle est ensuite discrétisée par la méthode de calcul extérieur discret. Les solutions numériques montrent un bon accord avec les solutions de références. La vitesse vérifie exactement la conditions d'incompressibilité.

La discrétisation DEC n'est qu'à ses premiers pas. On a toutefois déjà pu montrer qu'elle peut être mise en œuvre en mécanique des fluides. Ces propriétés assurent que la condition d'incompressibilité est respecté au niveau discret. Il n'y a donc pas de production de masse artificielle. On sait aussi qu'elle offre une discrétisation cohérentes des opérateurs différentiels. D'autres propriétés de la DEC sont encore à explorer.

Références

- [1] P. Bochev and J. Hyman. Principles of Mimetic Discretizations of Differential Operators, pages 89-119. Springer New York, New York, NY, 2006.
- [2] M. Desbrun, A. Hirani, M. Leok, and J. Marsden. Discrete exterior calculus. arXiv :math/0508341, 2005.
- [3] S. Elcott, Y. Tong, E. Kanso, P. Schröder, and M. Desbrun. Stable, circulation-preserving, simplicial fluids. ACM Transactions on Graphics, 26(1), 2007
- [4] A. Hirani, K. Nakshatrala, and J. Chaudhry. Numerical method for darcy flow derived using discrete exterior calculus. International Journal for Computational Methods in Engineering Science and Mechanics, 16 :151-169, 2015.
- [5] D. Arnold, R. Falk, and R. Winther. Finite element exterior calculus : from Hodge theory to numerical stability. Bulletin of the American Mathematical Society, 47 :281-354, 2010.
- [6] G. De Vahl Davis. Natural convection of air in a square cavity : A bench mark numerical solution. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 3(3) :249-264, 1983.
- [7] A. Hirani. Discrete Exterior Calculus. PhD thesis, California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA, 2003.