

Vers une solution numérique de référence pour un écoulement 3D de convection mixte : démarche et résultats.

Marc MEDALE^{1*}, Xavier NICOLAS², Stéphane GLOCKNER³, Stéphane GOUNAND⁴

¹Laboratoire IUSTI (UMR CNRS 6595), 5 rue Enrico Fermi – 13453 Marseille cedex 13

²Laboratoire MSME (UMR CNRS 8208), 5 bd Descartes – 77454 Marne-la-Vallée

³Laboratoire TREFLE (UMR CNRS 8508), 16 avenue Pey Berland – 33607 Pessac Cedex

⁴CEN/Saclay, DEN/DM2S/SFME/LTMF, Bâtiment 454 – 91191 Gif-sur-Yvette Cedex

* (auteur correspondant : marc.medale@polytech.univ-mrs.fr)

Résumé - Nous présentons dans cette communication la démarche que nous avons adoptée pour conduire un exercice de comparaison de codes de calculs (benchmark) sur une configuration d'écoulement 3D de convection mixte, ainsi que la synthèse des résultats que nous avons obtenus. L'objectif de cette action vise à proposer une première solution numérique tridimensionnelle de référence sur ce type de configuration afin de permettre, une fois celle-ci admise et reconnue par la communauté, de valider des codes de calculs.

Nomenclature

A	rappor de forme longitudinal (L/h)	\mathbf{v}	vecteur vitesse (u,v,w), $m.s^{-1}$
B	rappor de forme transversal (l/h)	<i>Symboles grecs</i>	
L	longueur, m	α	diffusivité thermique, $m^2.s^{-1}$
l	largeur, m	ν	viscosité cinématique, $m^2.s^{-1}$
h	hauteur, m	θ	température adimensionnée
p	pression, pa	<i>Indices et exposants</i>	
Pr	Nombre de Prandtl (ν/α)	c	chaud
Ra	Nombre de Rayleigh ($g\beta(T_c-T_f)h^3/\alpha\nu$)	e	entrée
Re	Nombre de Reynolds ($U_{moy}h/\nu$)	f	froid

1. Introduction

La validation des codes de calcul représente une activité d'importance dans le domaine du calcul scientifique. Cependant, celle-ci devient fastidieuse et délicate pour des configurations 3D, non linéaires ou instationnaires, en raison des possibles intrications et couplages entre les différentes variables, erreurs de discrétisation spatiale et temporelle. Dans ces situations, il est donc tout aussi déterminant de connaître la méthode avec laquelle sont obtenues les solutions de référence que leurs valeurs elles-mêmes, fussent-elles qualifiées de référence.

Lorsque l'on ne dispose pas de solution analytique (ou quasi-analytique) pour le problème considéré, on peut néanmoins effectuer la validation d'un code de calcul en confrontant ses résultats à une solution numérique, dite de référence (benchmark). Cette dernière peut être obtenue à partir d'approximations numériques discrètes [1], intrinsèquement entachées d'erreurs de discrétisation qui sont spécifiques à chaque méthode de discrétisation des équations aux dérivées partielles (différences finies, volumes finis, éléments finis, méthodes spectrales, etc.) [2]. Les deux principes fondamentaux mis en œuvre pour la construction d'une solution numérique de référence sont fondés, d'une part sur la possibilité de quantifier les erreurs de discrétisation (à partir de la théorie d'approximation), et d'autre part sur la légitimité, sous certaines hypothèses, d'extrapoler des solutions discrètes en éliminant tout ou

partie des erreurs de discrétisation. Cette dernière opération implique comme condition de se situer dans le domaine de convergence asymptotique des méthodes numériques utilisées [3]. Lorsque les hypothèses intervenant aux différents niveaux du processus sont satisfaites, on peut obtenir une solution extrapolée qui se rapproche de la solution qu'on obtiendrait sur un maillage hypothétique infiniment fin.

Cette méthodologie est disons-le fort séduisante, mais les hypothèses sur lesquelles elle est basée sont très restrictives, si bien que dans de nombreux cas pratiques elle est difficilement applicable, ou bien avec de grandes précautions. Le problème de convection mixte 3D pour lequel nous proposons une solution numérique de référence en est une parfaite illustration.

2. Définition du problème

Le problème pour lequel nous proposons une solution numérique de référence concerne un écoulement de type Poiseuille-Rayleigh-Bénard, qui se développe dans un canal horizontal de section rectangulaire, chauffé à la paroi inférieure et refroidi à la paroi supérieure, tel que schématisé sur la figure 1 et décrit de façon détaillée dans l'appel à contribution [4].

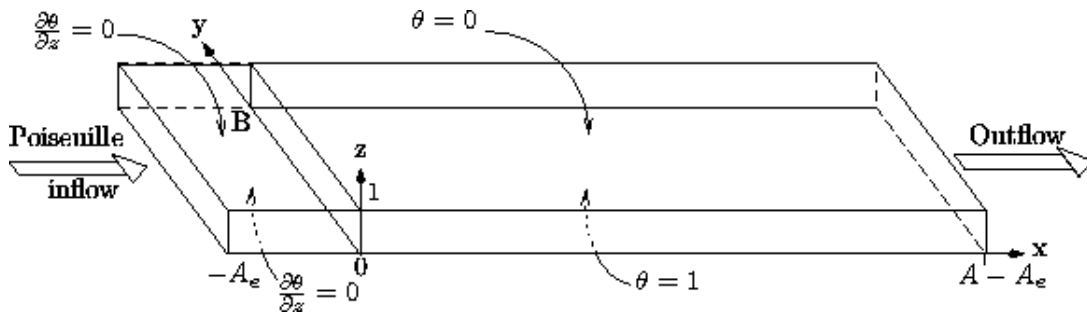


Figure 1 : Schéma du problème de convection mixte considéré (géométrie, conditions aux limites).

2.1. Equations du problème

Pour ce cas test où le fluide est newtonien, l'écoulement est modélisé par les équations de Navier-Stokes auxquelles nous appliquons l'approximation de Boussinesq. En prenant la hauteur (h) du canal comme longueur de référence, la vitesse débitante U_{moy} comme vitesse de référence, ρU_{moy}^2 comme pression de référence et h/U_{moy} comme temps de référence, ainsi qu'en introduisant la température adimensionnelle $\theta = (T - T_f)/(T_c - T_f)$, les équations du problème s'écrivent sous la forme sans dimension suivante :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1)$$

$$\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + 1/Re \nabla^2 \mathbf{v} + Ra/(Pr Re^2) \theta \mathbf{k} \quad (2)$$

$$\partial_t \theta + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \theta = 1/(Pr Re) \nabla^2 \theta \quad (3)$$

Les conditions aux limites associées à ce problème sont les suivantes :

- section d'entrée ($x = -A_e$) : $u = u_{Pois}(y, z)$, $v = w = 0$ et $\theta = 0$ (où $u_{Pois}(y, z)$ représente la valeur de l'écoulement de Poiseuille en tout point de la section d'entrée);
- section de sortie ($x = A - A_e$) : condition laissée au libre choix des contributeurs ;
- paroi horizontale inférieure ($z = 0$) : $u = v = w = 0$; $\partial_z \theta = 0$ (adiabatique) pour $-A_e \leq x < 0$ puis $\theta = 1$ (isotherme) pour $0 \leq x \leq A - A_e$;
- paroi horizontale supérieure ($z = 1$) : $u = v = w = 0$; $\partial_z \theta = 0$ (adiabatique) pour $-A_e \leq x < 0$ puis $\theta = 0$ (isotherme) pour $0 \leq x \leq A - A_e$;
- parois verticales ($y = 0$ et $y = B$) : $u = v = w = 0$; $\partial_y \theta = 0$ (adiabatique).

2.2. Valeurs des paramètres de calcul pour la solution recherchée

La géométrie du domaine de calcul est parallélépipédique et définie par les rapports d'aspect longitudinal ($A=50$) et transversal ($B=10$). Les paramètres de l'écoulement sont fixés par l'intensité de la convection forcée ($Re=50$) et naturelle ($Ra=5000$), ainsi que les caractéristiques du fluide (air : $Pr=0,7$). Selon la définition du problème présentée en §2.1, ces valeurs des paramètres conduisent à une solution stationnaire à dix rouleaux longitudinaux, présentée sur la figure 2.

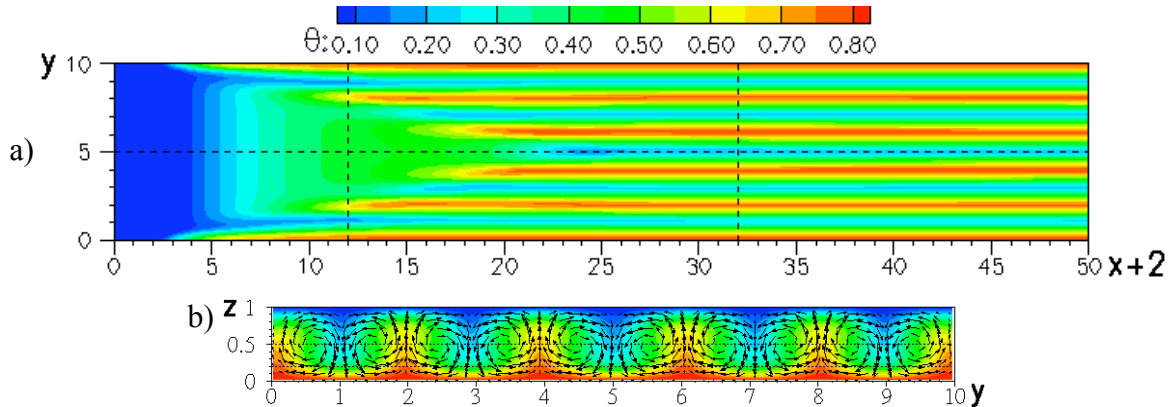


Figure 2 : Solution numérique du problème. a) Champ de température sur le plan médian horizontal. b) Champs de température et de vitesse dans la section transversale à $x=30$.

3. Contributions à l'établissement d'une solution de référence

Suite à l'appel à contribution publié dans [4], les quatre auteurs de la présente communication ont calculé avec leur code de recherche la solution stationnaire de ce problème avec plusieurs résolutions spatiales pour proposer ensuite une solution extrapolée par la méthode de Richardson. Les discrétisations spatiales consenties par les quatre participants sont relativement conséquentes, notamment pour les maillages les plus raffinés. Comme les points (cellules ou nœuds) sont équidistants dans chaque direction, les discrétisations spatiales sont représentées par les nombres de points (cellules ou nœuds) du domaine de calcul dans chaque direction d'espace (N_x , N_y et N_z , cf. tableau 1). Il est à noter que les contributeurs #2-3-4 ont considéré un domaine de calcul représentant le demi-domaine $0 \leq y \leq B/2$, tirant profit de la symétrie de la solution par rapport au plan médian $y=B/2$, alors que le contributeur #1 a considéré pour domaine de calcul le domaine entier. Quelques informations sur les méthodes numériques et maillages utilisés par chaque contributeur sont aussi reportées dans le tableau 1.

Contribution	# 1	# 2	# 3	# 4
Contributeur	Xavier Nicolas	Marc Medale	Stéph. Glockner	Stéph. Gounand
Méthode numérique	différences finies 2 nd ordre	éléments finis quad. (v, θ), lin. p	volumes finis 2 nd ordre	éléments finis quad. (v, θ), lin. p
Nombre de points de maillage	$400 \times 134 \times 40$	$601 \times 121 \times 41$	$600 \times 160 \times 40$	$601 \times 121 \times 49$
	$600 \times 200 \times 60$	$901 \times 181 \times 61$	$900 \times 240 \times 60$	$751 \times 151 \times 61$
N_x, N_y, N_z	$800 \times 268 \times 80$	$1351 \times 271 \times 91$	$1350 \times 360 \times 90$	$801 \times 161 \times 65$
	$1200 \times 400 \times 120$			$1001 \times 201 \times 81$
Sym. / plan vert.	non	oui	oui	oui

Tableau 1 : Détails des méthodes et paramètres numériques utilisés par les quatre contributeurs.

On peut remarquer que les trois méthodes de discrétisation les plus répandues sont représentées dans ce benchmark (différences finies, volumes finis et éléments finis). En l'absence d'une quelconque singularité du problème continu, les schémas et méthodes numériques utilisés conduisent à un ordre formel de convergence de deux pour les contributeurs #1 et #3, tandis que pour les contributeurs #2 et #4 il est de trois pour les champs de vitesse ou température et de deux pour le champ de pression. Il convient aussi de noter que les algorithmes de résolution du problème d'écoulement incompressible et des systèmes algébriques sont totalement différents, tout comme l'implémentation de la condition limite de sortie. Enfin, les implémentations de ces modèles numériques sont totalement indépendantes, puisqu'elles ont été réalisées dans quatre codes de recherche fort différents.

3.1. Extrapolation par la méthode de Richardson

La méthode d'extrapolation de Richardson est basée sur un développement en série de Taylor de la quantité à extrapoler, qui n'a de sens que si la fonction est continue et dérivable. Ceci constitue donc la principale condition nécessaire, mais non suffisante pour pouvoir l'utiliser. La première étape de construction consiste donc à calculer plusieurs solutions discrètes du problème avec différentes résolutions spatiales. Comme dans le domaine de convergence asymptotique d'une méthode numérique les erreurs de discrétisation spatiale sont fonction de la résolution spatiale, on peut en déterminer l'ordre de convergence spatial, particulier au problème considéré. À partir de là, la méthode d'extrapolation de Richardson consiste à extrapoler judicieusement les solutions discrètes précédemment calculées [1-3].

Les quantités intégrales dont nous avons calculé l'extrapolation de Richardson sont l'énergie cinétique de l'écoulement, la différence de pression entre les sections d'entrée et de sortie, la température moyenne au sein du domaine de calcul, ainsi que les flux de quantité de mouvement et d'énergie sur les frontières du domaine de calcul. Les quantités locales sont les extrema le long de certaines lignes du domaine de calcul des variables primitives du problème, ainsi que ceux du nombre de Nusselt. Les grandeurs à fournir pour l'établissement des valeurs de référence, ainsi que leur localisation spatiale est précisé dans [4]. Les détails de la méthode utilisée pour la détermination de la solution de référence, ainsi que les valeurs locales et intégrales sont présentés dans un article actuellement en fin de rédaction et qui sera très prochainement soumis pour publication [5]. C'est pourquoi dans cette communication nous concentrons notre présentation sur la synthèse des résultats.

4. Synthèse des résultats obtenus

Tout d'abord, le premier résultat qui ressort de cet exercice de comparaison est que lorsque les conditions d'application de la méthode sont vérifiées, les solutions extrapolées par la méthode de Richardson (à trois ou quatre maillages selon les contributeurs) ne diffèrent d'un contributeur à l'autre qu'au-delà du quatrième ou cinquième chiffre significatif sur la plupart des champs calculés. Ceci nous permet par conséquent de proposer une solution de référence qui soit la moyenne des solutions extrapolées issues des quatre contributeurs. À titre d'exemple, nous présentons dans le tableau 2 les valeurs intégrales extrapolées (à partir de solutions discrètes calculées sur trois ou quatre grilles, selon les contributeurs), l'ordre de troncature associé à l'extrapolation de Richardson, ainsi que l'écart relatif entre les solutions sur le maillage le plus fin et extrapolées. Enfin, la dernière colonne présente les valeurs de référence proposées pour chaque quantité, assorties d'une incertitude et de la valeur relative de cette incertitude. Les quantités intégrales considérées dans ce tableau sont : l'énergie cinétique du fluide en écoulement (multipliée par deux), la différence de pression entre les sections d'entrée et de sortie, et la température moyenne.

	#1	#2	#3	#4	Référence
$2Ec^{ex}$	1,292446	1,292452	1,292455	1,292458	1,292452
α_{Ec}	2,22	2,92	2,00	1,75	$\pm 0,000006$
$Dist_{Ec}$	$2,55 \times 10^{-5}$	$2,35 \times 10^{-7}$	$-7,74 \times 10^{-5}$	$-3,86 \times 10^{-5}$	$4,64 \times 10^{-6}$
Δp^{ex}	14,40647	14,40649	14,40678	14,40681	14,40664
$\alpha_{\Delta p}$	2,03	1,99	2,00	1,75	$\pm 0,00017$
$Dist_{\Delta p}$	$3,91 \times 10^{-4}$	$9,36 \times 10^{-5}$	$-3,08 \times 10^{-4}$	$-1,80 \times 10^{-5}$	$1,18 \times 10^{-5}$
Tm^{ex}	0,448594	0,448604	0,448606	0,448612	0,448603
α_{Tm}	1,19	1,18	1,02	1,18	$\pm 0,000009$
$Dist_{Tm}$	$-2,32 \times 10^{-4}$	$4,68 \times 10^{-5}$	$2,65 \times 10^{-4}$	$1,04 \times 10^{-4}$	$2,01 \times 10^{-5}$

Tableau 2 : Valeurs obtenues par chaque contributeur et celles proposées comme référence

Le second résultat important est que pour le problème considéré, les hypothèses d'application de la méthode d'extrapolation de Richardson ne sont strictement respectées qu'en un nombre limité de zones du domaine de calcul. Plusieurs causes permettent de d'expliquer cette situation. La première est que, par son principe de construction, la méthode d'extrapolation de Richardson ne permet pas de calculer une solution extrapolée en tout point où le champ considéré possède une valeur identique (ou très proches) sur deux maillages différents. Ceci nous impose de choisir des tailles de maillage suffisamment différentes pour les simulations, et de conserver un nombre de chiffres significatifs adapté pour le calcul de l'extrapolation. Cependant, ces recommandations, bien que nécessaires, ne sont hélas pas suffisantes. En effet, le problème physique peut induire lui-même une forte probabilité pour que les profils des valeurs se croisent dans les zones de fortes variations de ses quantités, comme dans les zones d'établissement. C'est effectivement le cas dans notre problème où il existe une longue zone d'établissement thermoconvective, s'étalant entre la section de début de chauffage ($x=0$) et au-delà de l'abscisse $x=30$, au cours de laquelle l'écoulement change radicalement de structure, passant d'un écoulement de Poiseuille à un écoulement à dix rouleaux longitudinaux. Cette zone est clairement observable sur le champ de température dans le plan médian horizontal, présenté sur la figure 2a.

Enfin, le troisième résultat marquant est que la juxtaposition de conditions aux limites différentes sur une même frontière peut conduire à une dégradation significative de l'ordre de convergence des méthodes numériques classiques. En effet, pour se rapprocher des conditions opératoires mises en œuvre sur le banc expérimental développé au laboratoire FAST [6], nous avons introduit dans la définition du problème une zone d'établissement hydrodynamique qui est adiabatique pour $-A_e \leq x < 0$, (cf. figure 1) et est immédiatement suivie de conditions aux limites isothermes sur les parois horizontales inférieure et supérieure. Il résulte de cette juxtaposition de conditions aux limites que le champ de température aux parois horizontales est continu, mais que son gradient est discontinu, rendant le problème continu singulier en ces régions. Bien que cette situation ne soit en rien contre-indiquée par les méthodes numériques que nous utilisons (à la condition que le maillage coïncide avec ce changement de type de conditions aux limites, ce que nous avons respecté), les résultats que nous avons obtenus mettent en évidence une nette dégradation de l'ordre de convergence des méthodes numériques par rapport à leur ordre formel. Ceci se manifeste en particulier sur l'ordre de convergence associé à l'extrapolation de Richardson de la température moyenne sur le domaine de calcul (noté α_{Tm}) par rapport à ceux associés à l'énergie cinétique (noté α_{Ec}) et à la différence de pression entrée-sortie (noté $\alpha_{\Delta p}$). Ces résultats sont illustrés dans le tableau 2, dans lequel on note que l'ordre de convergence est d'environ 1,2 pour le champ de température, quel que soit l'ordre de convergence formel du modèle numérique utilisé, alors

qu'il est proche de l'ordre formel pour les deux autres grandeurs globales (énergie cinétique et pression). De plus, en aval de ces zones de discontinuité de conditions aux limites, nous avons pu noter des comportements assez différents entre les quatre solutions extrapolées obtenues, rendant particulièrement délicate l'interprétation de l'extrapolation de Richardson.

5. Conclusion

Nous avons proposé un problème 3D de convection mixte qui puisse servir à la validation des codes de calculs intéressés par ce domaine. Pour cela, nous présentons d'une part la méthode que nous avons utilisée pour proposer une solution de référence et d'autre part quelques valeurs proposées comme solution de référence à ce problème. Dans les zones où les hypothèses d'application de la méthode d'extrapolation de Richardson sont respectées, les solutions extrapolées à partir des calculs réalisés sur trois ou quatre maillages (selon les contributeurs) sont en très bon accord (quatre à cinq chiffres significatifs communs sur la plupart des champs). Cependant, la configuration choisie du problème introduit plusieurs subtilités qui exigent de nombreuses précautions et restrictions dans l'utilisation de la méthode d'extrapolation de Richardson. Enfin, la juxtaposition sur une même surface de conditions aux limites de type adiabatique et Dirichlet induit une singularité de la solution continue du problème, qui se traduit par une dégradation significative des ordres de convergence des méthodes numériques (différences finies, volumes finis et éléments finis). Ceci rappelle, s'il en était besoin, que l'ordre de convergence effectif d'un modèle numérique sur un problème donné est le minimum de l'ordre de convergence formel de la méthode ou du schéma utilisé et de la régularité du problème continu considéré.

Références

- [1] K. F. Alvin, W. L. Oberkampf, B. M. Rutherford and K. V. Diegert, Methodology for characterizing modeling and discretization uncertainties in computational simulation, *Sandia Report* 2000-0515.
- [2] P. J. Roache, Quantification Of Uncertainty In Computational Fluid Dynamics, *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, 29 (1997), 123–160.
- [3] W. L. Oberkampf and T. Trucano, Verification and validation in computational fluid dynamics, *Sandia Report* 2002-0529, also in *Progress in Aerospace Sciences*, 38 (2002) 209-272.
- [4] M. Medale and X. Nicolas, Call for Contributions: Towards numerical benchmark solutions for 3D mixed convection flows in rectangular channels heated from below, *Int. J. Thermal Sc.*, 45 (2006) 331-333.
- [5] X. Nicolas, M. Medale, S. Glockner and S. Gounand, Use of Richardson extrapolation to establish a first numerical benchmark solution for three-dimensional mixed convection flows in rectangular channels, très prochainement soumis pour publication.
- [6] H. Pabiou, S. Mergui and C. Bénard, Wavy secondary instability of longitudinal rolls in Rayleigh-Bénard-Poiseuille flows, *Journal of Fluid Mechanics*, 542 (2005), 175-194.

Remerciements

Les deux premiers auteurs remercient l'IDRIS pour les ressources de calcul fournies (projets n° 06-1823 et 07-1823). Le deuxième auteur remercie Pr. S. Xin du CETHIL de lui avoir fourni le code en différences finies qu'il avait développé au LIMSI. Le troisième auteur remercie la région Aquitaine pour le co-financement du cluster du laboratoire TREFLE.