9

Implicitation des flux visqueux

Dans le contexte industriel du développement d'un logiciel de résolution des équations de Navier-Stokes des gaz visqueux, nous montrons que la mise en place d'une phase implicite est facile si le calcul des gradients s'effectue à l'aide de l'approche fonctionnelle proposée par interpolation de Lagrange.

1) Introduction.

• Le logiciel de calcul Ns3gr (Navier-Stokes tridimensionnel non structuré incluant des effets de Gaz Réel) a pour objectif de résoudre les équations de Navier Stokes compressibles en régime laminaire. Il a été élaboré à partir du logiciel Cel3gr qui résout les équations d'Euler par une méthode de volumes finis (voir Michaux [Mi89] et [DM92]). L'extension aux équations de Navier Stokes revient donc essentiellement à ajouter au flux numérique "Euler" le flux visqueux, qui doit être calculé en fonction uniquement des valeurs moyennes des variables conservatives dans les volumes de contrôle et des conditions aux limites.

• L'expression algébrique des flux visqueux est rappelée au second paragraphe. Le point crucial est selon nous l'évaluation précise du gradient de vitesse et de température aux interfaces du maillage. Ce problème est rapidement évoqué au troisième paragraphe. La mise en œuvre d'un schéma implicite afin d'échapper à la condition de stabilité de Courant-Friedrichs-Lewy est nécessaire

Rapport de recherche Aerospatiale Lanceurs [Du91], avril 1991. Traduction en "TEX" juillet 2003. Edition février 2011 ; 11 pages.

lorsqu'on étudie ce type de problème parabolique. Nous nous proposons d'utiliser un schéma d'Euler rétrograde linéarisé, proposé et réalisé pour le fluide parfait dans [Du89b] et [Mi91]. Il est donc nécessaire d'évaluer la dérivée du flux par rapport aux variables conservatives ; une approche classique est décrite au quatrième paragraphe. Celle-ci pouvant conduire à des problèmes pour la prise en compte des conditions aux limites, nous proposons une approche directe au cinquième paragraphe.

2) Expression des flux visqueux.

• L'écriture sous forme conservative des équations de Navier-Stokes est classique. Nous ne cherchons pas dans cette note à être exhaustif. Pour une description détaillée de la modélisation, on pourra consulter par exemple Peyret-Viviand [PV75]. Nous notons $f_j(W, \nabla W)$ la j^o contribution $(j = 1,2,3)$ du flux visqueux. C'est un vecteur de $\mathbb{R}^5$ qui est fonction des variables conservatives W, et de leur gradient ∇W, où :

(2.1) $$W = (\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E)^{\mathrm{t}} .$$

• A partir du champ de vitesse $\mathbf{u} = (u, v, w)$, nous introduisons le tenseur du taux de déformations :

(2.2) $$\epsilon_{i,j} = \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \Big) .$$

Le tenseur des contraintes visqueuses τ est une fonction linéaire et isotrope du tenseur ϵ et l'on a :

(2.3) $$\tau_{i,j} = \lambda \,\mathrm{div}\, \mathbf{u}\, \delta_{i,j} + 2\mu\, \epsilon_{i,j} .$$

L'hypothèse de Stokes exprime que le tenseur des contraintes σ où :

(2.4) $$\sigma_{i,j} = -p\,\delta_{i,j} + \tau_{i,j}$$

a une trace donnée par la seule contribution du terme de pression p, ce qui fournit la relation :

(2.5) $$3\lambda + 2\mu = 0 .$$

Toutefois, nous conserverons dans la suite les deux viscosités λ et μ. Le flux de chaleur q obéit à la loi de Fourier :

(2.6) $$q = -k \nabla T .$$

Les coefficients λ, μ et k sont supposés être uniquement fonction de la température :

(2.7) $$\lambda = \lambda(T) , \qquad \mu = \mu(T) , \qquad k = k(T).$$

• L'expression des flux $f_j(W, \nabla W)$ est très simple :

$$f_1 \;=\; (0\,,\,-\tau_{1,1}\,,\,-\tau_{1,2}\,,\,-\tau_{1,3}\,,\,-u\,\tau_{1,1}\,-\,v\,\tau_{1,2}\,-\,w\,\tau_{1,3}\,+\,q_x)^{\mathrm{t}} \tag{2.8}$$

$$f_2 \;=\; (0\,,\,-\tau_{2,1}\,,\,-\tau_{2,2}\,,\,-\tau_{2,3}\,,\,-u\,\tau_{2,1}\,-\,v\,\tau_{2,2}\,-\,w\,\tau_{2,3}\,+\,q_y)^{\mathrm{t}} \tag{2.9}$$

$$f_3 \;=\; (0\,,\,-\tau_{3,1}\,,\,-\tau_{3,2}\,,\,-\tau_{3,3}\,,\,-u\,\tau_{3,1}\,-\,v\,\tau_{3,2}\,-\,w\,\tau_{3,3}\,+\,q_z)^{\mathrm{t}}\,. \tag{2.10}$$

Le long d'une facette Σ du maillage de surface $|\,\Sigma\,|$ et de normale n, nous devons évaluer le flux normal Φ, de composantes Φ_i :

$$\Phi_i \;=\; \frac{1}{|\Sigma|}\int_\Sigma f_{i\,j}(W\,,\,\nabla W)\;n_j\;\mathrm{d}\gamma. \tag{2.11}$$

Bien entendu, on a :

$$\Phi_1 \;\equiv\; 0 \tag{2.12}$$

puisqu'il n'y a pas de dissipation de masse dans le fluide. Le calcul des trois contributeurs d'impulsion Φ_2, Φ_3, Φ_4 et d'énergie Φ_5 est détaillé ci-dessous :

$$\Phi_2 \;=\; -\tau_{1,1}\,n_x \;-\; \tau_{2,1}\,n_y \;-\; \tau_{3,1}\,n_z$$

$$\Phi_2 \;=\; \left\{\begin{array}{l} -\Big[\,\lambda\Big(\dfrac{\partial u}{\partial x}+\dfrac{\partial v}{\partial y}+\dfrac{\partial w}{\partial z}\Big)+2\,\mu\,\dfrac{\partial u}{\partial x}\,\Big]\,n_x \\ \qquad -\,\mu\Big(\dfrac{\partial u}{\partial y}+\dfrac{\partial v}{\partial x}\Big)\,n_y \;-\,\mu\Big(\dfrac{\partial u}{\partial z}+\dfrac{\partial w}{\partial x}\Big)\,n_z \end{array}\right.$$

$$\Phi_2 \;=\; \left\{\begin{array}{lll} -(\lambda+2\,\mu)\,n_x\,\dfrac{\partial u}{\partial x} & -\;\mu\,n_y\,\dfrac{\partial u}{\partial y} & -\;\mu\,n_z\,\dfrac{\partial u}{\partial z} \\ -\,\mu\,n_y\,\dfrac{\partial v}{\partial x} & -\;\lambda\,n_x\,\dfrac{\partial v}{\partial y} & \\ -\,\mu\,n_z\,\dfrac{\partial w}{\partial x} & & -\;\lambda\,n_x\,\dfrac{\partial w}{\partial z} \end{array}\right. \tag{2.13}$$

$$\Phi_3 \;=\; -\tau_{1,2}\,n_x \;-\; \tau_{2,2}\,n_y \;-\; \tau_{3,2}\,n_z$$

$$\Phi_3 \;=\; \left\{\begin{array}{l} -\,\mu\Big(\dfrac{\partial u}{\partial y}+\dfrac{\partial v}{\partial x}\Big)\,n_x \;-\Big[\,\lambda\Big(\dfrac{\partial u}{\partial x}+\dfrac{\partial v}{\partial y}+\dfrac{\partial w}{\partial z}\Big)+2\,\mu\,\dfrac{\partial v}{\partial y}\,\Big]\,n_y \\ \qquad -\,\mu\Big(\dfrac{\partial v}{\partial z}+\dfrac{\partial w}{\partial y}\Big)\,n_z \end{array}\right.$$

$$\Phi_3 \;=\; \left\{\begin{array}{lll} -\,\lambda\,n_y\,\dfrac{\partial u}{\partial x} & -\;\mu\,n_x\,\dfrac{\partial u}{\partial y} & \\ -\,\mu\,n_x\,\dfrac{\partial v}{\partial x} & -\;(\lambda+2\,\mu)\,n_y\,\dfrac{\partial v}{\partial y} & -\;\mu\,n_z\,\dfrac{\partial v}{\partial z} \\ & -\,\mu\,n_z\,\dfrac{\partial w}{\partial y} & -\;\lambda\,n_y\,\dfrac{\partial w}{\partial z} \end{array}\right. \tag{2.14}$$

$$\Phi_4 \;=\; -\tau_{1,3}\,n_x \;-\; \tau_{2,3}\,n_y \;-\; \tau_{3,3}\,n_z$$

$$\Phi_4 \;=\; \left\{ \begin{array}{l} -\,\mu \Big(\dfrac{\partial u}{\partial z} + \dfrac{\partial w}{\partial x} \Big)\, n_x \;-\; \mu \Big(\dfrac{\partial v}{\partial z} + \dfrac{\partial w}{\partial y} \Big)\, n_y \\ \qquad -\Big[\lambda \Big(\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial v}{\partial y} + \dfrac{\partial w}{\partial z} \Big) + 2\,\mu\, \dfrac{\partial w}{\partial z} \Big]\, n_z \end{array} \right.$$

$$\Phi_4 \;=\; \left\{ \begin{array}{lll} -\lambda\, n_z\, \dfrac{\partial u}{\partial x} & & -\;\mu\, n_x\, \dfrac{\partial u}{\partial z} \\ & -\,\lambda\, n_z\, \dfrac{\partial v}{\partial y} & -\;\mu\, n_y\, \dfrac{\partial v}{\partial z} \\ -\,\mu\, n_x\, \dfrac{\partial w}{\partial x} & -\;\mu\, n_y\, \dfrac{\partial w}{\partial y} & -\,(\lambda + 2\,\mu)\, n_z\, \dfrac{\partial w}{\partial z}\,. \end{array} \right. \tag{2.15}$$

$$\Phi_5 \;=\; \left\{ \begin{array}{l} -\,(\, u\,\tau_{1,\,1} + v\,\tau_{1,\,2} + w\,\tau_{1,\,3}\,)\, n_x + q_x\, n_x \\ -\,(\, u\,\tau_{2,\,1} + v\,\tau_{2,\,2} + w\,\tau_{2,\,3}\,)\, n_y + q_y\, n_y \\ -\,(\, u\,\tau_{3,\,1} + v\,\tau_{3,\,2} + w\,\tau_{3,\,3}\,)\, n_z + q_z\, n_z \end{array} \right.$$

$$\Phi_5 \;=\; \left\{ \begin{array}{l} u\,\big(-\tau_{1,\,1}\, n_x - \tau_{2,\,1}\, n_y - \tau_{3,\,1}\, n_z \big) \\ +\; v\,\big(-\tau_{1,\,2}\, n_x - \tau_{2,\,2}\, n_y - \tau_{3,\,2}\, n_z \big) \\ +\; w\,\big(-\tau_{1,\,3}\, n_x - \tau_{2,\,3}\, n_y - \tau_{3,\,3}\, n_z \big) \\ -\; k\, \Big(\dfrac{\partial T}{\partial x}\, n_x + \dfrac{\partial T}{\partial y}\, n_y + \dfrac{\partial T}{\partial z}\, n_z \Big) \end{array} \right.$$

$$\Phi_5 \;=\; u\,\Phi_2 \;+\; v\,\Phi_3 \;+\; w\,\Phi_4 \;-\; k\, \frac{\partial T}{\partial n}\,. \tag{2.16}$$

• Le flux Φ est donc une fonction **linéaire** des gradients de vitesse et de tempéra-ture sur l'interface Σ, dont les coefficients sont fonctions uniquement de la vitesse et de la température sur l'interface, compte tenu de la relation (2.7). Nous pouvons donc écrire :

$$\Phi \;=\; \Phi(U, \nabla U) \tag{2.17}$$

où U est un vecteur à quatre composantes seulement :

$$U \;=\; (u,\, v,\, w,\, T)^{\rm t}\,. \tag{2.18}$$

3) Rappel du principe du calcul des gradients.

• Nous avons abordé dans [Du89c] le problème d'évaluation du gradient sur les interfaces d'un maillage non structuré en fonction des variables de calcul au centre des éléments du maillage. La solution proposée n'a pas été retenue pour cette version du logiciel fluide, au profit d'une approche plus simple à programmer et plus mathématique, décrite rapidement dans [DM93], étudiée en détail dans un cadre bidimensionnel structuré par J. Mercier et I. Terrasse [MT89] puis proposée dans un cadre général [Du92] et rappelée ci-dessous.

• Nous notons U l'une des variables du vecteur U défini en (2.18). L'idée de base est élémentaire : la dérivation est un **opérateur linéaire et local**. Le gradient de U sur la face f est donc une combinaison linéaire des valeurs de ce champ dans les éléments voisins ; on note cet ensemble $V(f)$:

$$V(f) \;=\; \text{ensemble de degrés de liberté } \sigma \text{ voisins de la face } f\,. \tag{3.1}$$

Les coefficients de la combinaison linéaire sont notés $\alpha(f,\,\sigma)$; on a la relation fondamentale :

$$\nabla U(f) \;=\; \sum_{\sigma \in V(f)} \alpha(f,\,\sigma)\;\sigma(U)\,. \tag{3.2}$$

• Notons que pour les faces touchant la frontière, l'ensemble des degrés de liberté $V(f)$ est composé de valeurs $\sigma(U)$ dans les éléments autour de f et de valeurs du champ U sur la face f elle-même ou les faces voisines de f ; si une condition de Neumann est imposé au champ W (*c.f.* par exemple une condition de paroi adiabatique pour le champ de température), la dérivée normale est elle-même un degré de liberté. Nous avons donc :

$$\left\{ \begin{array}{lll} \sigma(f) \;=\; U(K)\,, & K \text{ élement voisin de } f, & \text{ou} \\ \sigma(f) \;=\; U(g)\,, & g \text{ face voisine de } f, & \text{ou} \\ \sigma(f) \;=\; \dfrac{\partial U}{\partial n}(g)\,, & g \text{ face voisine de } f, & \textit{etc.} \end{array} \right. \tag{3.3}$$

Pour chaque face f du maillage, nous devons d'abord déterminer les degrés de liberté σ voisins de f qui composent l'ensemble $V(f)$ puis calculer les coefficients $\alpha(f,\,\sigma)$ en écrivant que la relation (3.2) est **exacte** pour W décrivant un ensemble de fonctions $T(f)$ bien choisi.

• Dans le cas particulier d'un maillage en hexaèdres structuré, nous avons choisi de prendre comme ensemble $V(f)$ les dix éléments que fournit la méthode des cellules décalées de Hollanders-Lerat-Peyret [HLP85], c'est-à-dire :

$$V(f) \;=\; \{\, K \in \mathcal{T}\,,\; \exists\, a \text{ arête de } \mathcal{T}\,,\; a \subset \partial K \cap \partial f \,\} \tag{3.4}$$

où $\mathcal{T}$ désigne génériquement le maillage. Pour être complet, nous décrivons l'ensemble $T(f)$ qui permet de calculer les $\alpha(f,\,\sigma)$. Notons O le centre de gravité de f, n la normale à la face et a_1, a_2 deux médianes joignant les milieux de deux arêtes opposées formant le bord ∂f de f.

• Nous introduisons l'espace des polynomes de degré un dans la direction normale :

$$P_1(n) \;=\; \{\, W \,:\, x \longmapsto W(x) \;=\; a \,+\, b\, x{\bullet}n \,\} \tag{3.5}$$

et un sous espace $\widetilde{Q_2}(f)$ des fonctions Q_2 dans la direction tangentielle :

$$\widetilde{Q_2}(f) \;=\; \left\{\, W(x) \;=\; \alpha \,+\, \beta\, a_1{\bullet}x \,+\, \gamma\, a_2{\bullet}x \,+\, \delta\,(a_1{\bullet}x)^2 \,+\, \epsilon\,(a_2{\bullet}x)^2 \,\right\}. \tag{3.6}$$

L'espace des fonctions tests $T(f)$ est le produit tensoriel des deux espaces précédents :

$$T(f) \;=\; P_1(n(f)) \otimes \widetilde{Q_2}(f) \tag{3.7}$$

et est bien de dimension 10. Dans le cas d'un maillage régulier de pas constant h, il est facile de voir que le schéma défini par (3.2), (3.4) - (3.7) et la condition

$$\text{la relation (3.2) est exacte}, \;\; \forall\, W \in T(f) \tag{3.8}$$

correspond exactement au calcul par cellules décalées de Hollanders, Lerat et Peyret [HLP85].

• Pour une face f sur le bord $\partial\Omega$ du domaine, nous devons prendre plus de points dans la direction normale puisqu'alors le schéma aux différences finies sous jacent est décentré. Nous remplaçons (3.4) par une condition un peu plus complexe. Soit K l'élément de $\mathcal{T}$ contenant la face f dans son bord (le cobord de f est composé d'un seul élément puisque $f \in \partial\Omega$) et $\mathcal{A}$ l'ensemble des arêtes du bord de K ne rencontrant pas f. Nous posons :

$$V(f) \;=\; \left\{ \begin{array}{c} \text{degrés de liberté } \sigma, \exists\, a \text{ arête du maillage } \mathcal{T}, \\ a \subset \partial\sigma \cap (\partial f \cup \mathcal{A}) \end{array} \right\}. \tag{3.9}$$

Dans le cas d'un maillage structuré en hexaèdres, $V(f)$ est composé de 15 degrés de liberté : dix de type “élément” (cf. (3.3)), cinq de type “face” sur les faces de la frontière. On remplace l'espace des fonctions tests $T(f)$ défini par la relation (3.7) par l'espace suivant :

$$T(f) \;=\; P_2(n(f)) \otimes \widetilde{Q_2}(f) \tag{3.10}$$

où $P_2(n)$ est l'espace des fonctions polynomiales de degré 2 dans la direction normale :

$$P_2(n) \;=\; \{\, W \,:\, x \longmapsto W(x) \;=\; a \,+\, b\, x{\bullet}n \,+\, c\,(x{\bullet}n)^2 \,\}. \tag{3.11}$$

• On peut réinterpréter très simplement le calcul du gradient à la frontière (3.2) (3.6) (3.8) - (3.11) dans un cas monodimensionnel. On oublie les degrés de liberté dans la direction tangente à la face f et l'ensemble $V(f)$ des degrés de liberté voisins est simplement composé de la façon suivante :

$$V(f) \;=\; \Big\{ U(0),\; U\Big(\frac{h}{2}\Big),\; U\Big(\frac{3\,h}{2}\Big) \Big\} \tag{3.12}$$

avec f placé en 0, et h égal au pas du maillage. L'ensemble $T(f)$ est alors égal à P_2 et les conditions (3.2) (3.8) reviennent à choisir pour le gradient en zéro celui de l'interpolé de Lagrange de degré deux passant par des valeurs données en $x = 0, \frac{h}{2}, \frac{3\,h}{2}$:

$$\nabla U(f) \;=\; \frac{1}{3\,h} \left(-8\, U(0) \;+\; 9\, U\Big(\frac{h}{2}\Big) \;-\; U\Big(\frac{3\,h}{2}\Big) \right). \tag{3.13}$$

On retrouve dans ce cas encore (structuré et régulier) l'approche classique en volumes finis où la relation (3.13) apparaît dans une annexe de [HM87].

• Nous terminons ce paragraphe en précisant la façon dont on calcule les composantes de la vitesse dans la relation (2.16) ainsi que la valeur de la température à l'interface entre deux mailles, nécessaire pour calculer les coefficients λ, μ et k (*c.f.* la relation (2.1)). On a choisi une simple moyenne à deux points portant sur les deux éléments K et L qui contiennent la face f dans leur bord et constituent le cobord $C(f)$ de f :

$$(3.14) \qquad U(f) \;=\; \sum_{\sigma \in C(f)} \beta(f, \sigma)\, \sigma(U)\,.$$

où $\beta(f, \sigma)$ correspond à une interpolation affine.

4) Utilisation de la méthode de Beam et Warming.

• Pour dériver le flux visqueux Φ calculé aux relations (2.13) - (2.15), il est commode, avec Beam-Warming [BW78] (voir également [HLP85] et [HM87]) de considérer U et ∇U comme deux variables **indépendantes** :

$$(4.1) \qquad \Phi \;=\; \Phi(U, \nabla U)\,.$$

On a alors : $\quad \mathrm{d}\Phi \;=\; \dfrac{\partial \Phi}{\partial U}\,\mathrm{d}U \;+\; \dfrac{\partial \Phi}{\partial(\nabla U)}\,\mathrm{d}(\nabla U)\,, \quad$ soit

$$(4.2) \qquad \mathrm{d}\Phi \;=\; \left(\frac{\partial \Phi}{\partial U} \;-\; \mathrm{div}\Big(\frac{\partial \Phi}{\partial(\nabla U)} \Big) \right) \mathrm{d}U \;+\; \mathrm{div}\left(\frac{\partial \Phi}{\partial(\nabla U)}\,\mathrm{d}U \right).$$

• Dans la suite de cette note, on **néglige** dans le terme $\frac{\partial \Phi}{\partial U}$ les dérivés de λ, μ et k par rapport à la température :

$$(4.3) \qquad \frac{\partial}{\partial T}\,(\lambda,\, \mu,\, k) \;=\; 0\,.$$

On en déduit donc :

$$(4.4) \qquad \frac{\partial \Phi_2}{\partial U} \;=\; \frac{\partial \Phi_3}{\partial U} \;=\; \frac{\partial \Phi_4}{\partial U} \;=\; 0$$

$$(4.5) \qquad \frac{\partial \Phi_5}{\partial U} \;=\; (\,\Phi_2\,,\, \Phi_3\,,\, \Phi_4\,,\, 0\,)$$

avec U écrit dans l'ordre de (2.18). On a par ailleurs :

$$
(4.6) \qquad \left\{ \begin{array}{rcl}
\dfrac{\partial \Phi_2}{\partial(\partial_x U)} &=& \big(-(\lambda+2\mu)\, n_x \,,\, -\mu\, n_y \,,\, -\mu\, n_z \,,\, 0 \big) \\
\dfrac{\partial \Phi_2}{\partial(\partial_y U)} &=& \big(-\mu\, n_y \,,\, -\lambda\, n_x \,,\, 0 \,,\, 0 \big) \\
\dfrac{\partial \Phi_2}{\partial(\partial_z U)} &=& \big(-\mu\, n_z \,,\, 0 \,,\, -\lambda\, n_x \,,\, 0 \big)
\end{array} \right.
$$

$$
(4.7) \qquad \left\{ \begin{array}{rcl}
\dfrac{\partial \Phi_3}{\partial(\partial_x U)} &=& \big(-\lambda\, n_y \,,\, -\mu\, n_x \,,\, 0 \,,\, 0 \big) \\
\dfrac{\partial \Phi_3}{\partial(\partial_y U)} &=& \big(-\mu\, n_x \,,\, -(\lambda+2\mu)\, n_y \,,\, -\mu\, n_z \,,\, 0 \big) \\
\dfrac{\partial \Phi_3}{\partial(\partial_z U)} &=& \big(0 \,,\, -\mu\, n_z \,,\, -\lambda\, n_y \,,\, 0 \big)
\end{array} \right.
$$

$$
(4.8) \qquad \left\{ \begin{array}{rcl}
\dfrac{\partial \Phi_4}{\partial(\partial_x U)} &=& \big(-\lambda\, n_z \,,\, 0 \,,\, -\mu\, n_x \,,\, 0 \big) \\
\dfrac{\partial \Phi_4}{\partial(\partial_y U)} &=& \big(0 \,,\, -\lambda\, n_z \,,\, -\mu\, n_y \,,\, 0 \big) \\
\dfrac{\partial \Phi_4}{\partial(\partial_z U)} &=& \big(-\mu\, n_x \,,\, -\mu\, n_y \,,\, -(\lambda+2\mu)\, n_z \,,\, 0 \big)
\end{array} \right.
$$

$$
(4.9) \left\{ \begin{array}{l}
\dfrac{\partial \Phi_5}{\partial(\partial_x U)} = \big(-2\mu\, u\, n_x - \lambda\, \mathbf{u}{\bullet}n ,\, -\mu\,(u n_y + v n_x) ,\, -\mu\,(u n_z + w n_x) ,\, -k\, n_x \big) \\
\dfrac{\partial \Phi_5}{\partial(\partial_y U)} = \big(-\mu\,(u n_y + v n_x) ,\, -2\mu\, v\, n_y - \lambda\, \mathbf{u}{\bullet}n ,\, -\mu\,(v n_z + w n_y) ,\, -k\, n_y \big) \\
\dfrac{\partial \Phi_5}{\partial(\partial_z U)} = \big(-\mu\,(u n_z + w n_x) ,\, -\mu\,(v n_z + w n_y) ,\, -2\mu\, w\, n_z - \lambda\, \mathbf{u}{\bullet}n ,\, -k\, n_z \big)
\end{array} \right.
$$

et on en déduit facilement :

$$
(4.10) \qquad \frac{\partial \Phi_j}{\partial U} \;-\; \mathrm{div}\bigg(\frac{\partial \Phi_j}{\partial(\nabla U)} \bigg) \;=\; 0 \,, \qquad j = 2,\, 3,\, 4 \,.
$$

On a par ailleurs :

$$
\frac{\partial}{\partial x} \big(-(\lambda+2\mu)\, u\, n_x - \lambda\, v\, n_y - \lambda\, w\, n_z \big) \;+\; \frac{\partial}{\partial y} \big(-\mu\, u\, n_y - \mu\, v\, n_x \big) +
$$

$$
+ \frac{\partial}{\partial z} \big(-\mu\, u\, n_z \,-\, \mu\, w\, n_x \big) \; \Phi_2 \;+\; (\mu - \lambda) \bigg(\frac{\partial v}{\partial x}\, n_y \,-\, \frac{\partial v}{\partial y}\, n_x \,+\, \frac{\partial w}{\partial x}\, n_z \,-\, \frac{\partial w}{\partial z}\, n_x \bigg)
$$

et on en déduit l'expression du terme de gauche de (4.10) avec $j = 5$:

$$
(4.11) \qquad \frac{\partial \Phi_5}{\partial u} \,-\, \mathrm{div}\bigg(\frac{\partial \Phi_5}{\partial(\nabla u)} \bigg) \;=\; (\lambda - \mu) \bigg(\frac{\partial v}{\partial x}\, n_y \,-\, \frac{\partial v}{\partial y}\, n_x \,+\, \frac{\partial w}{\partial x}\, n_z \,-\, \frac{\partial w}{\partial z}\, n_x \bigg)
$$

$$\frac{\partial \Phi_5}{\partial v} - \mathrm{div}\Big(\frac{\partial \Phi_5}{\partial (\nabla v)} \Big) \,=\, (\lambda - \mu) \Big(\frac{\partial u}{\partial y} n_x - \frac{\partial u}{\partial x} n_y + \frac{\partial w}{\partial y} n_z - \frac{\partial w}{\partial z} n_y \Big) \tag{4.12}$$

$$\frac{\partial \Phi_5}{\partial w} - \mathrm{div}\Big(\frac{\partial \Phi_5}{\partial (\nabla w)} \Big) \,=\, (\lambda - \mu) \Big(\frac{\partial u}{\partial z} n_x - \frac{\partial u}{\partial x} n_z + \frac{\partial v}{\partial z} n_y - \frac{\partial v}{\partial y} n_z \Big) \tag{4.13}$$

$$\frac{\partial \Phi_5}{\partial T} - \mathrm{div}\Big(\frac{\partial \Phi_5}{\partial (\nabla T)} \Big) \,=\, 0\,. \tag{4.14}$$

• Après avoir calculé le premier facteur du premier terme du second membre de l'identité (4.2), nous exprimons le second facteur $\mathrm{d}U(f)$ en fonction des variations des variables conservatives $\mathrm{d}W$ dans les éléments voisins, en notant :

$$W \,=\, (\,\rho\,,\, q_x\,,\, q_y\,,\, q_z\,,\, \epsilon\,)^{\mathrm{t}}\,, \tag{4.15}$$

on a simplement, par dérivation de (3.14) :

$$\mathrm{d}U(f) \,=\, \sum_{\sigma \in C(f)} \beta(f,\,\sigma)\; \sigma(\mathrm{d}U)\,. \tag{4.16}$$

Or, pour K dans le cobord de f, on a :

$$\mathrm{d}U(K) \,=\, \Big(-\frac{u}{\rho}\mathrm{d}\rho + \frac{1}{\rho}\mathrm{d}q_x\,,\, -\frac{v}{\rho}\mathrm{d}\rho + \frac{1}{\rho}\mathrm{d}q_y\,,\, -\frac{w}{\rho}\mathrm{d}\rho + \frac{1}{\rho}\mathrm{d}q_z\,,\, \mathrm{d}T \Big)^{\mathrm{t}}\,. \tag{4.17}$$

Pour un gaz réel à l'équilibre chimique, l'expression $\mathrm{d}T(U)$ fait appel au diagramme de Mollier du gaz. Pour un gaz parfait polytropique, nous pouvons détailler complètement l'algèbre :

$$T \,=\, \frac{e}{C_v} \,=\, \frac{1}{C_v} \Big(\frac{\epsilon}{\rho} - \frac{1}{2\,\rho^2} \, (q_x^2 + q_y^2 + q_z^2) \Big) \tag{4.18}$$

et finalement,

$$\mathrm{d}T \,=\, -\frac{C_v\, T - |\,u\,|^2}{\rho\, C_v}\, \mathrm{d}\rho \,-\, \frac{1}{\rho\, C_v}\, (u\, \mathrm{d}q_x \,+\, v\, \mathrm{d}q_y \,+\, w\, \mathrm{d}q_z) \,+\, \frac{1}{\rho\, C_v}\, \mathrm{d}\epsilon\,. \tag{4.19}$$

• Si on note β_g (respectivemet β_d) la valeur du coefficient $\beta(f, \bullet)$ de la relation (3.14) pour l'élément à gauche (respectivement à droite) de la face f, nous avons :

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\partial \Phi_5}{\partial (\partial U)} - \mathrm{div}\Big(\frac{\partial \Phi_5}{\partial (\nabla U)} \Big) \,=\, (4.11) \Big(\frac{\beta_g}{\rho_g}\, \mathrm{d}q_{x,\,g} \,+\, \frac{\beta_d}{\rho_d}\, \mathrm{d}q_{x,\,d} \Big) \\ & \quad + \;\; (4.12) \Big(\frac{\beta_g}{\rho_g}\, \mathrm{d}q_{y,\,g} \,+\, \frac{\beta_d}{\rho_d}\, \mathrm{d}q_{y,\,d} \Big) \,+\, (4.13) \Big(\frac{\beta_g}{\rho_g}\, \mathrm{d}q_{z,\,g} \,+\, \frac{\beta_d}{\rho_d}\, \mathrm{d}q_{z,\,d} \Big) \\ & \quad + \;\; \frac{\beta_g}{\rho_g} \big(-u_g\, (4.11) \,-\, v_g\, (4.12) \,-\, w_g\, (4.13) \big)\, \mathrm{d}\rho_g \\ & \quad + \;\; \frac{\beta_d}{\rho_d} \big(-u_d\, (4.11) \,-\, v_d\, (4.12) \,-\, w_d\, (4.13) \big)\, \mathrm{d}\rho_d\,. \end{aligned} \right. \tag{4.20}$$

Le second terme du membre de droite de la relation (4.2) se calcule facilement pour les faces internes du maillage. On a en effet :

$$(4.21) \qquad \nabla\big(A(U)\,\mathrm{d}U\big)(f) \;=\; \sum_{\sigma \in V(f)} \alpha(f,\,\sigma)\;\sigma\big(A(U)\,\mathrm{d}U\big)\,.$$

et il suffit de remplacer $A(U)$ par les expressions calculées en (4.6) - (4.9) pour achever le calcul du jacobien. Notons toutefois que si σ est un degré de liberté qui correspond à une condition de Neumann, c'est-à-dire :

$$(4.22) \qquad \sigma(U) \;=\; \frac{\partial U}{\partial n}(g)\,,$$

Le calcul du terme $\sigma(A(U)\,\mathrm{d}U)$ n'est pas simple :

$$\sigma(A(U)\,\mathrm{d}U) \;=\; \frac{\partial}{\partial n}(A(U)\,\mathrm{d}U)(g)$$

$$(4.23) \qquad \sigma(A(U)\,\mathrm{d}U) \;=\; \Big[\,\frac{\partial}{\partial n}(A(U))\,\mathrm{d}U \;+\; A(U)\,\mathrm{d}\Big(\frac{\partial U}{\partial n}\Big)\Big](g)\,.$$

Le dernier terme $\mathrm{d}\big(\frac{\partial U}{\partial n}\big)$ est donné, mais la dérivée normale $\frac{\partial}{\partial n}(A(U))$ fait à nouveau appel à l'opérateur gradient au moins pour les termes de flux d'énergie (relation (4.9)), ce qui rend donc problématique une mise en œuvre simple et générale de cette approche.

5) Une approche directe.

• Bien que l'approche classique puisse en général s'appliquer pour calculer la dérivée des flux visqueux, nous pouvons mettre en œuvre une méthode plus simple, compte tenu du calcul aisé du gradient aux interfaces (relation (3.2)). Pour les flux d'implusion Φ_2, Φ_3, Φ_4, on a, en négligeant la variation des viscosités λ et μ avec la température, une combinaison linéaire du gradient de U (*c.f.* relations (2.13) - (2.15)) :

$$(5.1) \qquad \Phi_j \;=\; \sum_{l\,=\,1}^{4}\,\sum_{k\,=\,1}^{3}\; a_{jkl}\;\frac{\partial U_l}{\partial x_k}\;; \qquad j \;=\; 2,\,3,\,4$$

et

$$(5.2) \qquad \frac{\partial U_l}{\partial x_k} \;=\; \sum_{\sigma \in V(f)} \alpha(f,\,\sigma)_{k,\,l}\;\;\sigma(U_l)\;.$$

Nous remarquons que la dépendance par rapport à l ("composante" de U dans (2.18)) permet de prendre en compte un calcul du gradient éventuellement différent pour les composantes de la vitesse et de la température au bord du domaine puisque les conditions limites associées à ces champs peuvent différer.

Nous en déduisons :

$$(5.3) \qquad \mathrm{d}\Phi_j \;=\; \sum_{l=1}^{4} \sum_{k=1}^{3} \sum_{\sigma \in V(f)} \; a_{jkl} \; \alpha(f,\,\sigma)_{k,\,l} \;\; \sigma(\mathrm{d}U_l) \; ; \qquad j \;=\; 2,\,3,\,4\,.$$

• On exprime ensuite $\mathrm{d}U_l$ en fonction de $\mathrm{d}W$ dans le cas des faces intérieures (cf. relations (4.17) et (4.19)) ou bien cette expression est donnée explicitement dans le cas des conditions aux limites, ce qui achève le calcul dans ce cas. Pour le flux d'énergie Φ_5, il suffit de dériver la relation (2.16) :

$$(5.4) \quad \mathrm{d}\Phi_5 \;=\; u\,\mathrm{d}\Phi_2 + v\,\mathrm{d}\Phi_3 + w\,\mathrm{d}\Phi_4 + \Phi_2\,\mathrm{d}u + \Phi_3\,\mathrm{d}v + \Phi_4\,\mathrm{d}w - k\,\mathrm{d}\Big(\frac{\partial T}{\partial n}\Big)\,.$$

Les trois premiers termes du second membre de (5.4) se calculent aisément à l'aide de la relation (5.3) et de la valeur de la vitesse à l'interface calculée en (3.14). Les trois termes suivants résultent d'une simple dérivation de la relation (3.14) :

$$(5.5) \qquad \mathrm{d}U(f) \;=\; \sum_{\sigma \in C(f)} \; \beta(f,\,\sigma)\; \sigma(\mathrm{d}U)$$

et de jacobiens très simples (4.17) et (4.19). Le dernier terme est exactement du type de ceux traités pour établir la relation (5.3). On notera simplement à nouveau que la relation (4.19), ici indispensable, n'est valable sous cette forme que pour un gaz parfait polytropique. La dérivation du flux d'énergie Φ_5 est donc simple avec cette approche.