



HAL
open science

Contribution aux méthodes de cut-cells pour la CFD : La méthode LS-STAG pour les fluides visqueux incompressibles

Olivier Botella

► **To cite this version:**

Olivier Botella. Contribution aux méthodes de cut-cells pour la CFD : La méthode LS-STAG pour les fluides visqueux incompressibles. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université de Lorraine, 2020. tel-03106067v1

HAL Id: tel-03106067

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-03106067v1>

Submitted on 11 Jan 2021 (v1), last revised 19 Jan 2021 (v2)

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Contribution aux méthodes de cut-cells pour la CFD : La méthode LS-STAG pour les fluides visqueux incompressibles

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 7 décembre 2020

pour l'obtention d'une

Habilitation de l'Université de Lorraine

(mention **Energie et Mécanique**)

par

Olivier Botella

Composition du jury

<i>Président :</i>	Jean-Pierre CROISILLE	Professeur Université de Lorraine
<i>Rapporteurs :</i>	Paola CINNELLA	Professeure Sorbonne Université
	Kaï SCHNEIDER	Professeur Université Aix-Marseille
	Laurent CORDIER	Directeur de Recherches CNRS Université de Poitiers
<i>Examineurs :</i>	Sébastien KIESGEN	Maître de conférences Université de Lorraine
	Fatmir ASLLANAJ	Chargé de Recherches CNRS Université de Lorraine
<i>Invité :</i>	Salaheddine SKALI-LAMI	Maître de conférences Université de Lorraine

Mis en page avec la classe thesul.

Table des matières

Introduction générale	1
Partie I Carrière scientifique et activités d'enseignement	5
Chapitre 1 CV et synthèse de carrière	7
1.1 Curriculum vitae	7
1.2 Synthèse de carrière	7
Chapitre 2 Activités pédagogiques et responsabilités collectives	9
2.1 Présentation des activités pédagogiques	9
2.2 Synthèse des enseignements	10
2.3 Direction, animation, montage de formations	11
2.4 Diffusion, rayonnement, activités internationales	13
2.5 Responsabilités collectives	13
Chapitre 3 Activités de recherche, diffusion, rayonnement et contrats de recherche	15
3.1 Synthèse des activités de recherche	15
3.1.1 Présentation des activités	15
3.1.2 Thèse de Doctorat, INRIA et Laboratoire J.A. Dieudonné, Université de Nice-Soplia Antipolis	15
3.1.3 Stage post-doctoral, Center for Turbulence Research (CTR), Université de Stanford	17
3.1.4 Maître de Conférences, LEMTA (Université de Lorraine)	19
3.2 Activités de Valorisation et de Transfert	20
3.3 Encadrement doctoral et scientifique	21
3.4 Diffusion, rayonnement, contrats de recherche	21
3.4.1 Activités éditoriales	21

3.4.2	Participation à des jurys de thèse (hors établissement)	22
3.4.3	Invitations dans des universités étrangères	22
3.4.4	Participation à des contrats de recherche	22
Chapitre 4 Liste classée des publications		25
4.1	Articles publiés dans revues internationales à comité de lecture	25
4.2	Actes publiés de conférences internationales, congrès et colloques	26
4.3	Rapports de recherche	27
4.4	Congrès sans actes	27
Chapitre 5 Liste des co-directions de thèses et de stages de Master		31
5.1	Liste des co-directions de thèses	31
5.2	Liste des co-directions de stages de Master	32
Partie II La méthode LS-STAG pour les écoulements de fluides visqueux in-		35
compressibles		
Chapitre 6 Les fondements de la méthode LS-STAG		37
6.1	Introduction au chapitre	37
6.2	Les équations de Navier-Stokes pour un fluide incompressible	37
6.2.1	Formulation locale	37
6.2.2	Lois constitutives considérées	38
6.2.3	Formulation intégrale	41
6.3	Les méthodes de frontières immergées/cut-cells en CFD	42
6.3.1	Les différentes classes de méthodes pour traiter les cut-cells	43
6.3.2	Problèmes soulevés par les méthodes de cut-cells	44
6.4	Les méthodes numériques <i>symmetry-preserving</i> pour la simulation de fluides incom-	
	pressibles	47
6.4.1	Les invariants globaux des équations de Navier-Stokes	48
6.4.2	Lois de conservation discrètes pour l'équation de transport	48
6.4.3	Lois de conservation discrètes pour les équations de Navier-Stokes	53
6.5	Chronologie du développement de la méthode LS-STAG	56
6.5.1	La méthode LS-STAG/2PT	57
6.5.2	La méthode LS-STAG/DCM	60
Chapitre 7 Eléments de la discrétisation LS-STAG		63
7.1	Introduction au chapitre	63
7.2	Notations et paramètres géométriques des cut-cells	64

7.2.1	Paramètres géométriques des faces fluides d'une cut-cell	67
7.2.2	Paramètres géométriques de la face solide d'une cut-cell	68
7.2.3	Calcul du volume d'une cut-cell	70
7.2.4	Volumes de contrôle pour l'équation de quantité de mouvement	71
7.3	Etapes clés de la discrétisation LS-STAG	73
7.3.1	Discrétisation de l'équation de continuité	75
7.3.2	Gradient de pression discret	75
7.3.3	Discrétisation des flux diffusifs normaux	76
7.4	Discrétisation des flux diffusifs tangentiels sur les faces fluides	78
7.4.1	Discrétisation 2PT des contraintes tangentielles	78
7.4.2	Discrétisation DCM des contraintes tangentielles	79
7.5	Discrétisation des flux diffusifs sur la face solide	81
7.5.1	Discrétisation 2PT des contraintes tangentielles à la paroi	83
7.5.2	Discrétisation DCM des contraintes tangentielles à la paroi	84
7.6	Discrétisation <i>skew-symmetric</i> des flux convectifs	87
7.7	Intégration en temps et implémentation informatique	91
Chapitre 8 Applications de la méthode LS-STAG		95
8.1	Introduction au chapitre	95
8.2	Précision spatiale 2D des méthodes LS-STAG/2PT et DCM : écoulement dans une cellule de Taylor-Couette cylindrique	96
8.2.1	Description de la configuration et paramètres numériques	96
8.2.2	Solution de conduction pure	97
8.2.3	Solution de Navier-Stokes	101
8.3	Simulation d'écoulements non-newtoniens	102
8.3.1	Discrétisation pour fluides viscoélastiques	105
8.3.2	Discrétisation pour fluides pseudo-plastiques	109
8.3.3	Exemples de simulations numériques	111
8.4	Convection naturelle autour d'un cylindre chauffé	115
8.5	Écoulement autour d'un cylindre dans une conduite de section carrée	119
8.5.1	Description de la configuration et paramètres numériques	119
8.5.2	Résultats et discussion	121
8.6	Écoulement autour d'une sphère	124
Chapitre 9 Conclusion générale et projet de recherche		131
9.1	Introduction au chapitre	131
9.2	Perspectives sur la méthode LS-STAG	131

9.3	Projet de recherche : Modélisation numérique des interactions rayonnement-turbulence. Application à la combustion des nouveaux carburants	134
9.3.1	Enjeu sociétal	134
9.3.2	Présentation générale	134
9.3.3	Extension de la méthode LS-STAG aux écoulements compressibles	136
Partie III	Sélection d'articles sur la méthode LS-STAG	139
Chapitre 10	Articles sur la méthode LS-STAG/2PT	141
10.1	La méthode LS-STAG/2PT pour fluides newtoniens 2D	142
10.2	La méthode LS-STAG/2PT pour fluides viscoplastiques 2D	176
10.3	La méthode LS-STAG/2PT pour fluides viscoélastiques 2D	194
10.4	La méthode LS-STAG/2PT pour fluides newtoniens et viscoplastiques en géométries 3D-extrudées	226
Chapitre 11	Article sur la méthode LS-STAG/DCM	241
11.1	La méthode LS-STAG/DCM en géométries 2D et 3D-extrudées	242
Bibliographie		255

Introduction générale

Dans ce manuscrit, je présente les travaux de recherche que j’ai effectué depuis mon affectation en tant que maître de conférences à l’Université de Lorraine en septembre 2001. Ces activités sont réalisées au laboratoire LEMTA¹, et plus particulièrement dans le groupe de recherche dédié à la mécanique des fluides et à la rhéologie², dont la démarche scientifique relève essentiellement des sciences expérimentales et de la modélisation physique. Bien que ma formation initiale repose sur les mathématiques appliquées et la mécanique des fluides numérique (CFD³), je me suis familiarisé aux problématiques liées aux fluides complexes et à la rhéologie, et il est apparu pertinent de développer un code de CFD interne au groupe, qui soit suffisamment “ouvert” pour permettre d’implémenter et de valider la pertinence de nos modèles rhéologiques. Ce code de calcul est basé sur une méthode numérique originale de type “frontières immergées”/ *cut-cell* [104, 147, 144, 22] : la méthode LS-STAG (Level-Set, STAGgered). Cet acronyme est issu des deux éléments constitutifs de la méthode : l’arrangement décalé (*staggered*) des variables de la méthode MAC classique [67] pour résoudre les équations de Navier-Stokes, et la représentation implicite des géométries complexes sur la grille de calcul cartésienne par fonctions *level-set* [115]. Afin de motiver le développement de ce code de recherche, et de justifier pourquoi la méthode LS-STAG se situe en rupture par rapport aux méthodes CFD classiques, il est pertinent de rappeler les principales difficultés rencontrées par les codes de calcul utilisant des maillages non-structurés ajustés à la frontière (*body-fitted*).

Les applications avancées en CFD concernent des écoulements en géométries tridimensionnelles très complexes, dont les phases de création CAO et de maillage sont très gourmandes en homme-heures et nécessitent des utilisateurs très expérimentés. Ces maillages *body-fitted* sont de type non-structuré (cellules hexaédriques, tétraédriques, *etc ...*), et utilisent donc un adressage indirect qui requiert de grandes ressources informatiques [15]. En outre, il est très difficile d’assurer la qualité de ces maillages (cellules non distordues, denses en zone de proche paroi, *etc ...*), ce qui impacte négativement la convergence et la précision de la solution numérique [136]. Une alternative prometteuse est représentée par les codes de calcul de type frontières immergées/cut-cells utilisant des grilles cartésiennes qui ne sont pas alignées avec la géométrie. La génération d’une grille cartésienne est quasi-triviale, et les

1. Laboratoire Energies & Mécanique Théorique et Appliquée - UMR 7563.

2. Je fais actuellement partie de l’opération scientifique (OS) “Écoulements de poudres et de suspensions”, créée au printemps 2019.

3. CFD : *Computational Fluid Dynamics*.

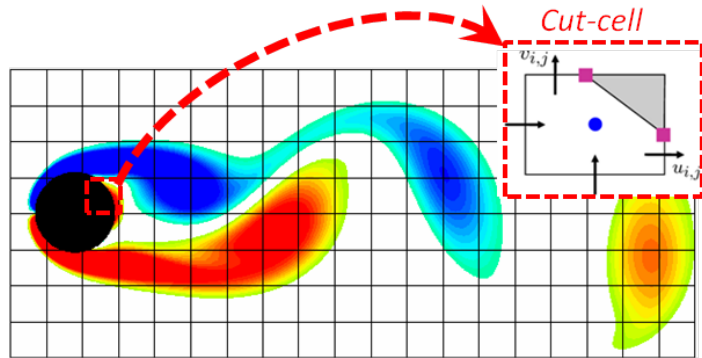


FIGURE 1 – Représentation d'un maillage de type cut-cell.

méthodes numériques reposent sur des discrétisations cartésiennes extrêmement robustes et optimisées, qui ne nécessitent qu'une fraction des ressources informatiques d'un code non-structuré. En outre, le calcul d'écoulements en géométrie mobile s'effectue sur une grille fixe, sans remaillage du domaine de calcul comme pour les méthodes *body-fitted*. Une des difficultés notables des méthodes de frontières immergées est lié aux *cut-cells* de proche paroi (Fig. 1), qui sont créées par l'intersection du maillage cartésien avec la frontière immergée. Le traitement numérique de ces cellules, qui peuvent avoir une forme très irrégulière et une taille arbitrairement petite par rapport aux cellules cartésiennes, pose un problème crucial pour la précision et stabilité de la solution numérique. L'une des contributions majeures de la méthode LS-STAG à ce type de méthodes est de proposer une discrétisation originale dans les cut-cells qui préserve l'une des propriétés remarquables de la méthode MAC cartésienne : la conservation de la contrepartie discrète des invariants globaux de l'écoulement (masse, quantité de mouvement et énergie cinétique totale [121, 41]). Cette propriété permet d'assurer une stabilité accrue à la solution numérique, mais aussi de guider la construction de la discrétisation dans les cut-cells. La méthode LS-STAG a initialement été développée pour les écoulements de fluides newtoniens en géométries bidimensionnelles au début de la thèse de Y. Cheny (2005-9), avant d'être ensuite appliquée aux géométries mobiles, aux fluides non-newtoniens (viscoplastiques et viscoélastiques), notamment dans la thèse de F. Nikfarjam (2013-2018), et a récemment été étendue aux géométries 3D dans la thèse de B. Portelenelle (2016-19). La présentation des étapes clés du développement de la méthode LS-STAG est au cœur de la partie scientifique de ce document.

Ce document se décompose en 3 parties.

- La première partie synthétise ma carrière d'enseignant-chercheur : un curriculum vitae, une présentation de mes activités pédagogiques et responsabilités collectives, une synthèse de mes activités de recherche depuis ma thèse. Elle s'achève par la liste classée de mes publications scientifiques et de mes co-directions de thèses et de Master.
- La seconde partie présente en 4 chapitres mes principales activités de recherche autour de la méthode LS-STAG. Le chapitre 6 présente les concepts clés sur lesquels repose la méthode LS-STAG, telles les méthodes de frontières immergées/cut-cells et les méthodes *symmetry-preserving*

qui conservent les invariants globaux des équations de Navier-Stokes, et s'achève par une chronologie du développement de la méthode LS-STAG. Le chapitre 7 présente de façon unifiée les différents développements qui ont permis de construire la discrétisation des équations de Navier-Stokes pour une cut-cell 3D de forme arbitraire. Le chapitre 8 est consacré aux différentes simulations numériques réalisées avec le code de calcul LS-STAG. Le dernier chapitre est une conclusion générale où sont présentées les perspectives de développement à court terme de la discrétisation LS-STAG, suivi de la présentation d'un projet de recherche portant sur la simulation numérique des interactions rayonnement-turbulence.

- En complément de cet exposé de la méthode LS-STAG, la dernière partie du document rassemble une sélection d'articles sur la méthode qui ont été à ce jour publiés dans des revues internationales de rang A.

Première partie

Carrière scientifique et activités
d'enseignement

Chapitre 1

CV et synthèse de carrière

1.1 Curriculum vitae

Né le : 22/09/1969 à Nice (06)	Nationalité : Française
Tél. : 03 72 74 42 98	Courriel : olivier.botella@univ-lorraine.fr
Maître de conférences : N° 60 MCF 0641	Section CNU : 60 (Mécanique, génie civil)
NOMINATION : le 1 ^{er} Septembre 2001 (titularisé le 1 ^{er} Sept. 2002)	
ETABLISSEMENT D’AFFECTATION STATUTAIRE : Faculté des Sciences de Nancy, Université de Lorraine (UL)	
GRADE : MCF CN – 7 ^{ème} échelon depuis le 1 ^{er} janvier 2018	
Laboratoire de Rattachement : LEMTA ^a - UMR 7563 (CNRS – Université de Lorraine)	
ADRESSE : 2, Avenue de la Forêt de Haye - BP 90161 - 54505 VANDOEUVRE - FRANCE	
DIRECTEUR DU LABORATOIRE : Pascal Boulet (PR UL)	
OPÉRATION SCIENTIFIQUE : Hydrodynamique et Rhéophysique (Groupe de Recherche : Milieux Fluides, Rhéophysique)	
PAGE WEB : http://lemta.univ-lorraine.fr/	
Thèmes de Recherche : Mécanique des Fluides Numérique – Ecoulements de Fluides Complexes – Calcul Scientifique et Analyse Numérique – Méthode de Frontières Immergées/Cut-Cells	

a. Laboratoire Energies & Mécanique Théorique et Appliquée.

1.2 Synthèse de carrière

► **1998 : Doctorat de l’Université de Nice - Sophia Antipolis (UNSA)**, spécialité “Sciences de l’Ingénieur”

– DIRECTEUR : Roger Peyret (DR CNRS)

- LABORATOIRES D’ACCUEIL : **Projet SINUS**, de l’INRIA Sophia Antipolis, et **Laboratoire J. A. Dieudonné**, de l’UNSA.
- TITRE : Résolution Numérique de Problèmes de Navier-Stokes Singuliers par une Méthode de Projection Tchebychev.
- MOTS CLÉS : Equations de Navier-Stokes, Schémas de projection, Méthode spectrale Tchebychev, Problèmes singuliers, Singularités de coins, Développement asymptotiques, Fluide incompressible, Approximation à faible nombre de Mach, Simulation numérique directe.
- FINANCEMENT : Allocation de recherche *MESR* N° 94 – 52. SOUTENUE : le 1^{er} juillet 1998.
- JURY : A. Pumir (*prés.*), P. Haldenwang (*rapp.*), R. Temam (*rapp.*), R. Peyret (*dir.*), P. Bontoux, H. Guillard.
- MENTION : Très honorable, avec félicitations du jury.
- ▶ **Septembre 1998 à Août 2001 : Stage post-doctoral** au “*Center for Turbulence Research*” (CTR) de l’Université de Stanford (Californie), financé par une bourse post-doctorale du CTR.
 - **Etude principale** : Développement d’une méthode numérique de B-splines pour la simulation directe d’écoulements turbulents, avec P. Moin (*Stanford U.*) et K. Shariff (*NASA/Ames*).
MOTS CLÉS : B-splines ; Méthode de collocation ; Equations de Navier-Stokes ; Méthode des pas fractionnaires ; Matrice de masse ; Fluide incompressible ; Turbulence.
 - **Etude annexe** : Formulation de conditions aux limites approchées (“lois de paroi”) en LES par méthodes de contrôle optimal, afin de diminuer les contraintes de résolution dans la couche limite turbulente. Etude conduite lors du “*2000 Summer Program*” du CTR, avec principalement J. Baggett (*U. Wisconsin*) et F. Nicoud (*CERFACS*).
MOTS CLÉS : Couche limite turbulente ; Lois de paroi ; Ecoulement en canal plan ; LES ; Contrôle optimal.
- ▶ **Septembre 2001** : Nomination à un poste de Maître de Conférences à l’Université Henri-Poincaré (UHP), puis Université de Lorraine (UL) à partir de 2012 lors de la fusion des établissements supérieurs de Lorraine.
- ▶ **2005-2014** : Responsable pédagogique du parcours L3 Mécanique-Energétique (ME) de la Faculté des Sciences (FST) de Nancy.
- ▶ **Depuis 2017** : Coordination de la coopération universitaire entre l’UL et les universités KazNU et KazNITU (Almaty, Kazakhstan) dans le domaine des énergies, en collaboration avec le centre “Géo-Energies” d’Almaty.

Chapitre 2

Activités pédagogiques et responsabilités collectives

2.1 Présentation des activités pédagogiques

Depuis ma nomination à un poste de MCF, mon activité d'enseignement se déroule dans la filière Mécanique - Energétique² (ME) de la FST de Nancy. Outre la responsabilité pendant 6 ans de l'enseignement de la mécanique du solide niveau L2, mes activités s'articulent essentiellement autour de l'apprentissage de l'analyse numérique et du calcul scientifique dans cette filière, en adéquation avec mes thématiques de recherche. Cela m'a permis de donner cohérence et homogénéité à cet enseignement du L2 au M2 (même si je n'interviens qu'en L3 et M1) :

- Apprentissage progressif des méthodes numériques (analyse numérique « classique » en L3, méthodes numériques pour les EDP de la mécanique en M1 S7, méthodes spécifiques pour la mécanique des fluides à partir du M1 S8),
- Unifications des logiciels utilisés dans la filière (utilisation de Matlab-Simulink à partir du L2, ANSYS-FLUENT à partir du M1 S7),
- Création de TP originaux (notamment ANSYS-FLUENT) en lien étroit avec l'enseignement de la mécanique des fluides dans la filière. Je mentionne aussi que le nombre important d'étudiants dans la filière (l'enseignement niveau L3 était mutualisé avec le parcours Génie-Civil de 2009 à 2018) m'a conduit à gérer une équipe pédagogique (MCF, moniteurs et ATER) pour les séances de TD et TP démultipliées.

Mon implication forte dans la filière ME (j'ai été responsable du parcours L3 de 2005 à 2014) m'a amené à encadrer de nombreux projets étudiants :

2. Depuis l'accréditation 2018 : Licence Physique - parcours MFE *Mécanique des Fluides et Energie*, et Master Energie (anciennement : Licence SPI Mécanique-Génie Civil - parcours ME *Mécanique-Energétique* et Master MEPP *Mécanique-Energie-Produits*).

- De 2001 à 2015 : je prenais en charge (avec un collègue EC) l’UE S6 du L3 ME dédiée aux projets bibliographiques (par binôme d’étudiants),
- Depuis 2001, j’ai encadré 15 projets laboratoires niveau M1 (MEPP, ENSEM, Ecole des Mines). Ces projets, qui ont pour vocation d’initier à la recherche, ont pour certains été prolongés en stages d’été, ou ont débouchés sur des publications (Refs. [A10], [B9-10] en annexe).
- 8 stages en laboratoire niveau Master 2 (cf. Activité scientifique)

Outre mes enseignements à la FST, j’effectue chaque année depuis 2016 un séjour de 2 semaines à l’université Al Farabi-KazNU (Almaty, Kazakhstan) pour donner le cours « Computational Fluid Dynamics » (40h, en anglais) dans le M1 SRE¹ délocalisé à Almaty. Ces séjours m’ont permis de nouer des liens étroits avec les universités kazakhstanaïses, les attachés de l’ambassade française chargés de la coopération universitaire, et m’ont conduit à monter plusieurs programmes de Master que je présenterai ci-après.

2.2 Synthèse des enseignements

Depuis de nombreuses années, j’interviens principalement dans le L3 MFE (dont l’effectif oscille depuis ma nomination en 2001 entre 20 et 40 étudiants, avec une moyenne de 25) et dans le M1 Energie (effectif de 20-40 étudiants, avec de nombreux étudiants étrangers admis sur titre). Mon service 2019-2020, qui inclus depuis l’an dernier des primes pédagogiques pour la responsabilité de la co-diplomation avec l’Université KazNU, est représenté dans le tableau 2.1.

Diplôme	Effectif 2019-20	UE ou EC	CM	TD	TP	ETD
L3 MFE	23	Analyse numérique S5	14	16		37
L3 MFE	23	TP Matlab S5			12	12
M1 ENERGIE	20	Analyse numérique S7	18	18	0	45
M1 ENERGIE	20	TP Matlab + Fluent S7			48	48
M1 ENERGIE	20	EDO-Systèmes dynamiques S7	6	6	12	27
M1 ENERGIE	20	Mécanique fluides numérique S8	12	6	12	36
Master ENERGIE		PRP		15		15
		TOTAL	50	61	84	220

TABLE 2.1 – Service d’enseignement à la FST en 2019-20.

1. Master International *Subterranean Reservoirs of Energy* (SRE) de l’Ecole Nationale Supérieure de Géologie de Nancy (ENSG).

2.3 Direction, animation, montage de formations

- ▶ **2005-2013** : Responsable pédagogique du parcours L3 Mécanique-Energétique (ME) de la licence « Sciences de la Matière » de la FST de Nancy.
- ▶ **2013-2014** : Responsable pédagogique du parcours L3 Mécanique-Energétique (ME) de la licence « SPI Mécanique-Génie Civil » de la FST de Nancy et Metz.

Mon implication forte dans la filière ME m'a conduit à prendre la responsabilité du parcours L3 pendant 9 ans, et participé à l'élaboration de 3 habilitations de Licence. Initialement, ce parcours faisait partie de la licence « Sciences de la Matière » de Nancy. Suite à la fusion des établissements supérieurs lorrains, j'ai participé en 2012 à la création de la licence « Sciences pour l'Ingénieur » (SPI) de l'UL, qui a regroupé de 2013 à 2018 les parcours de mécanique, génie mécanique et génie civil des sites FST de Metz et Nancy.

- ▶ **2017-2019** : Responsable du programme international de Master “ENERGY-ALMATY”, partenariat entre l'UL, le centre « Géo-Energies » d'Almaty (Kazakhstan), et plusieurs universités kazakhstanaïses.
- ▶ **Juin 2018-2020** : Porteur du projet MIC ERASMUS+ entre l'UL, KazNU et KazNITU. Montant : 77 k€.
- ▶ **Depuis la rentrée 2019** : Responsable du double-diplôme de Master “Mechanics-Energy” porté par l'UL et KazNU.

Le centre « Géo-Energies » existe à Almaty depuis bientôt 10 ans. Créé au départ par l'UL et les deux grandes universités nationales du Kazakhstan, Al Farabi (KazNU, scientifique) et Satpaïev (KazNITU, technique), il proposait à l'origine un parcours de formation aboutissant à un double diplôme UL-Université kazakhstanaïse, basé sur un M1 spécifique à Almaty, où une partie des enseignements est assurée par l'UL, et sur une année de M2 SRE à Nancy. Ce parcours a vu passer un certain nombre d'étudiants qui occupent maintenant des postes clés dans l'industrie du pétrole et du gaz au Kazakhstan, ou dans les administrations du pays. C'est un levier d'influence française très intéressant, et aussi une formation qui intéresse les entreprises françaises du secteur de l'énergie présentes dans ce pays. Le centre « Géo-Energies » bénéficie d'un soutien fort et constant du MAE¹ qui finance l'équivalent d'un ETP à Almaty pour piloter localement ses activités.

A la suite des contacts noués lors de mes séjours à Almaty, le Centre a pris en 2017 une nouvelle dimension avec l'ouverture d'un programme de Master “ENERGY-ALMATY” centré sur les énergies du futur, ouvert à des étudiants de nouvelles universités kazakhstanaïses partenaires (IITU, UIB, AUET, Caspian). Ce programme permet d'élargir l'offre de formation de 1 à 4 Masters dans les domaines de l'énergie, de l'ingénierie pétrolière et des ressources géologiques, et comprend des cours donnés dans différentes composantes de l'UL selon le schéma représenté dans la figure 2.1.

1. MAE : ministère des affaires étrangères.

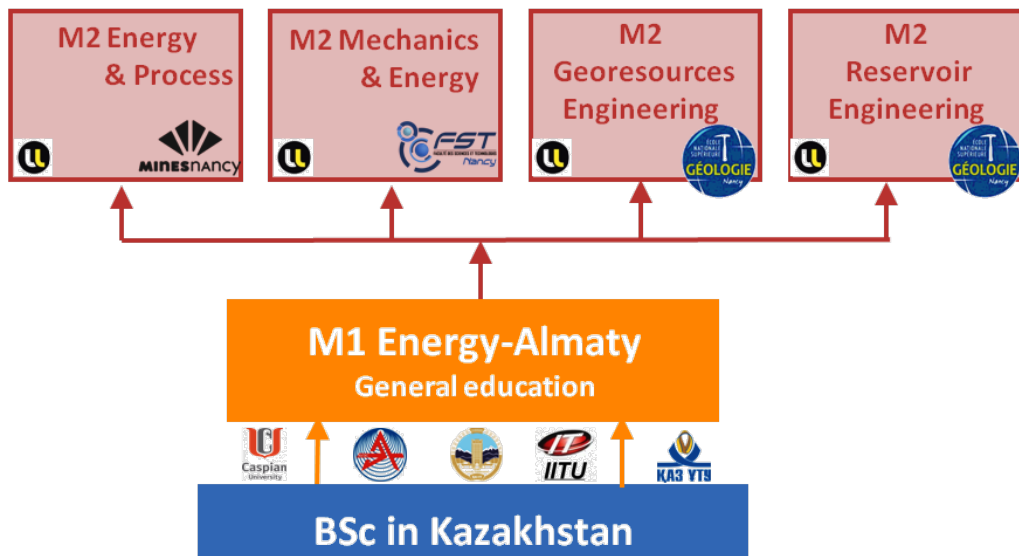


FIGURE 2.1 – Organisation du programme international de Master “ENERGY-ALMATY”.

Le M1 “ENERGY-ALMATY”, s’est ouvert à Almaty à la rentrée 2017, et en juin 2018 le programme a reçu le soutien d’un programme de mobilité internationale ERASMUS+ d’un montant de 78k€, pour l’échange d’étudiants, de professeurs et personnels (notamment les professeurs de KazNITU T. Entsepaïev et Y. Belyaïev à l’automne 2019, et A. Abdelkarrime, co-administratrice du centre « Geo-Energies », au printemps 2019).

Durant ses 2 années d’activité, ce programme a permis à 37 étudiants kazakhstanaïses de venir étudier en M2 à l’UL sous le statut de boursier du gouvernement français (bourses d’études franco-kazakhstanaïse Abaï-Verne et MOPGA), leur a permis de réaliser leur stage de fin d’études dans un laboratoire de recherches français, et a notamment débouché sur la création de 4 thèses d’université françaises à la rentrée 2019 (G. Akhmetova et Z. Tungatarova à l’UL, K. et N. Rysbaeva à Bordeaux), financées par une bourse Abaï-Verne ou allocation doctorale.

Suite à la défaillance du soutien de certains partenaires kazakhstanaïses à ce programme de Master, le Centre a été conduit à recentrer son offre de formation à la seule université KazNU, soutien indéfectible et principal pilier de la coopération universitaire UL-Kazakhstan, afin de construire de véritables doubles-diplômes franco-kazakhstanaïses. La première année, localisée à Almaty et qui inclus des enseignements réalisés par des enseignants-chercheurs de l’UL, permettra de sélectionner les étudiants de KazNU qui effectueront leur année de M2 à l’UL, et qui pourront bénéficier du double-diplôme UL-KazNU. A la rentrée 2019-20, ce programme de doubles-diplômes a débuté pour deux spécialités, la Mécanique-Energie et le “Reservoir Engineering”, et sera étendue dans les prochaines années à d’autres disciplines comme le génie des procédés ou les mathématiques.

2.4 Diffusion, rayonnement, activités internationales

- ▶ **Du 15/09 au 19/09/2014** : Enseignant-chercheur invité à l'Université Polytechnique de Bucarest (UPB, Roumanie) dans le cadre du programme ERASMUS+.
- ▶ **Du 28/06 au 01/07/2016** : Enseignant-chercheur invité à l'UPB, programme ERASMUS+.
- ▶ **2016 – Présent** : Enseignant-chercheur invité (2 semaines/an, 40h de cours sur la CFD) à l'Université KazNU (Almaty, Kazakhstan).
- ▶ **Du 17/01 au 20/01/2017** : membre de la délégation UL à Almaty pour présenter le nouveau programme de Master "ENERGY-Almaty".
- ▶ **Du 30/01 au 02/02/2018** : membre de la délégation UL à Almaty pour l'évolution des coopérations universitaires.

Outre les activités au Kazakhstan décrites ci-dessus, je mentionne que dans le cadre des accords bilatéraux ERASMUS entre la FST et l'Université Polytechnique de Bucarest (UPB, Roumanie), j'ai effectué deux séjours à l'UPB dans le cadre de la mobilité d'enseignement et organisation de la mobilité. Lors de ces séjours, j'ai donné des enseignements dans le cours « Rhéologie et rhéométrie » du Master IMSET de la faculté de génie mécanique et mécatronique, rencontré les étudiants du Master MEPP en séjour ERASMUS à l'UPB, présenté aux collègues roumains la nouvelle offre de formation de la FST (Master « Energie » successeur de MEPP, accrédité à partir de 2018-2019) afin d'intensifier les échanges d'étudiants.

2.5 Responsabilités collectives

- ▶ **Sept. 2014-juin 2018** : Membre élu (collège B) du conseil de secteur PGCM de la faculté des Sciences de l'UL.
- ▶ **Depuis Fév. 2015** : Membre nommé du conseil scientifique et technique d'EXPLOR.
- ▶ **Depuis Mars 2019** : Responsable de la communication web de l'OS «Ecoulements de poudres et de suspensions ».

Eu égard aux activités pédagogiques et scientifiques que j'ai détaillé ailleurs, mes activités de responsabilités collectives sont plus restreintes. J'ai notamment participé à la vie de mon établissement en tant que membre de commission des spécialistes, de conseil de composante, et du mésocentre de calcul EXPLOR¹, récemment créé pour fédérer les besoins en calcul intensif des divers laboratoires de l'UL.

1. Mésocentre pour le calcul scientifique mutualisé de l'UL : <http://explor.univ-lorraine.fr/>.

Chapitre 3

Activités de recherche, diffusion, rayonnement et contrats de recherche

3.1 Synthèse des activités de recherche

3.1.1 Présentation des activités

Mon travail de recherche entre dans le cadre de la mécanique des fluides numérique (CFD²), et porte sur le développement de méthodes numériques originales pour les fluides incompressibles (méthodes de collocation avec polynômes de Tchebychev ou bases de B-splines, méthodes volumes-finies de type frontières immergées/cut-cells) et leur application à la simulation d'écoulements transitionnels, turbulents, et rhéologiquement complexes (pseudoplastiques, viscoélastiques). Mes travaux se décomposent en 3 phases distinctes mais thématiquement complémentaires (thèse, post-doc, poste de MCF) qui sont présentées ci-dessous de façon chronologique.

3.1.2 Thèse de Doctorat, INRIA et Laboratoire J.A. Dieudonné, Université de Nice-Soplia Antipolis

Ces travaux sont motivés par le développement de méthodes numériques de haute précision pour la résolution d'écoulements de fluides incompressibles présentant des singularités, qui sont généralement causées par l'imposition de conditions aux bords discontinues, ou qui changent de type, tel le problème représenté sur la figure 3.1. La présence de singularités pose des difficultés dans la résolution numérique de ces écoulements, car la solution calculée perd de sa précision au voisinage des points singuliers. Ce phénomène se trouve amplifié pour des méthodes de haut degré comme les méthodes spectrales de type Tchebychev, dont la précision dépend de la régularité de la solution. Un traitement de ces singularités doit donc être envisagé afin de préserver, autant que possible, la haute précision des méthodes spectrales.

2. CFD : *Computational fluid dynamics*.

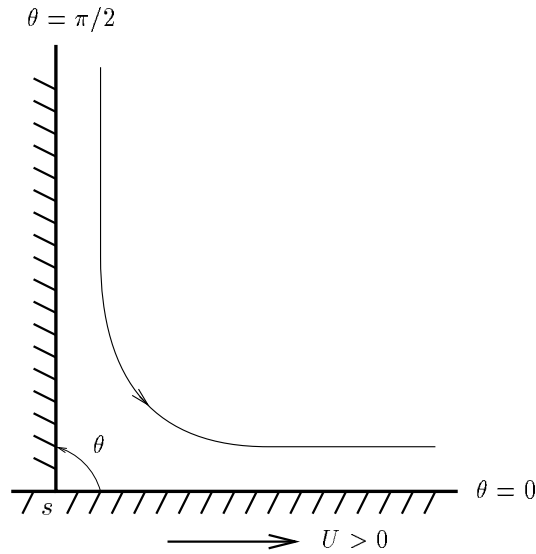


FIGURE 3.1 – Écoulement au voisinage du point de contact O entre une paroi fixe et une paroi glissante de vitesse U . La solution asymptotique de Moffatt [106] prédit que la vorticité prends une valeur infinie au point O .

Une première étape de ce travail a consisté à développer l’outil de base : un code de calcul de haute précision en temps et en espace pour la résolution des équations de Navier-Stokes. La discrétisation temporelle est effectuée par une méthode des pas fractionnaires (ou de projection[148], et la discrétisation spatiale utilise la méthode de collocation-Tchebychev $\mathbb{P}_N \times \mathbb{P}_{N-2}$ [24, 124]. Cette discrétisation à l’avantage de ne pas engendrer de modes parasites pour la pression, et de ne pas nécessiter la formulation de conditions aux limites artificielles pour la pression. Ma contribution principale à ce type de méthodes fut la construction de schémas de projection du second et troisième ordre de type *Adams-Bashforth/Backward Differentiation Formula* (AB/BDF), bien adaptés la résolution d’équations d’évolution “raides” (“*stiff*”) telles les équations de Navier-Stokes [11], qui sont tels que la précision temporelle de la pression est identique à celle de la vitesse. Ces résultats ont conduits à la rédaction de la publication [A1] (cf. liste de mes publications dans le chapitre 4).

Le traitement des singularités des équations de Navier-Stokes est abordé dans une seconde étape. Avec la technique introduite par Moffatt [106], la solution au voisinage d’un point singulier peut s’obtenir analytiquement sous la forme d’un développement asymptotique, et il est alors possible de soustraire cette partie à la solution complète de manière à calculer numériquement une solution plus régulière. Cette technique de soustraction a été appliquée au calcul de divers écoulements singuliers (problème classique de la cavité entraînée, écoulement à faible nombre de Mach dans une chambre à piston, *etc ...*, cf. publications [A3] et [A4]) et a permis, en particulier, d’obtenir des solutions numériques de très grande précision pour l’écoulement de la cavité entraînée qui font maintenant référence (publication [A2], citée près de 400 fois dans *SCOPUS* en janvier 2020).

Les techniques numériques développées durant ma thèse ont donné de nombreux enseignements qui ont nourri les méthodes numériques que j’ai développées ensuite :

- La version au second-ordre du schéma de projection AB/BDF, qui a démontré lors de ma thèse un bon compromis entre stabilité, précision et simplicité algorithmique, sera utilisé dans tous les codes de simulations que je développerai par la suite.
- L’utilisation de discrétisations compatibles vitesse-pression permet de s’affranchir aisément des nombreuses difficultés liées au traitement de l’incompressibilité, telles les oscillations parasites de pression et la conservation discrète de la masse totale. Ces idées se retrouvent dans les schémas numériques que j’ai développés par la suite, telle la méthode de B-splines aux nœuds décalés développée durant mon stage post-doctoral, puis la discrétisation volumes-finies LS-STAG pour géométries complexes que je développe actuellement au LEMTA.
- Le traitement des singularités dues aux conditions aux limites m’a sensibilisé à l’importance de la qualité de la discrétisation numérique au voisinage des parois solides et des interfaces. Ces réflexions ont conduit à la discrétisation LS-STAG dans les cellules cartésiennes avoisinant une paroi solide irrégulière.

3.1.3 Stage post-doctoral, Center for Turbulence Research (CTR), Université de Stanford

Mon activité au “Center for Turbulence Research” (CTR) a été consacrée au développement d’une méthode de B-splines, bases de polynômes par morceaux à support compact et au pouvoir de résolution “quasi-spectral”, pour la simulation numérique d’écoulements turbulents. Ce travail a fait partie de l’effort de recherche du CTR pour développer, à terme, des méthodes de haute fidélité et efficaces en temps CPU pour la simulation numérique directe (DNS) et la simulation des grandes échelles (LES) des écoulements turbulents en géométries complexes.

Les travaux de Kravchenko *et coll.* [87] au CTR ont démontré la grande aptitude des B-splines pour la DNS sur maillages non-conformes structurés par blocs. Néanmoins, leur méthode de Galerkin pour des B-splines à divergence nulle s’est révélée trop coûteuse en temps CPU, notamment lors de l’évaluation des termes convectifs. En prolongement de ces efforts, mon intérêt s’est dirigé vers le développement de méthodes de B-splines par l’approximation de collocation.

Deux difficultés principales ont été surmontées afin de construire un code numérique de B-splines de haute précision et efficace en temps CPU. La première fut de développer une discrétisation vitesse-pression utilisant des bases de B-splines aux nœuds décalés (*staggered*, *cf.* Fig. 3.2) selon une approche similaire à la méthode de projection $\mathbb{P}_N \times \mathbb{P}_{N-2}$ de ma thèse. Cette méthode originale, qui permet de générer une discrétisation vitesse-pression compatible dont l’ordre de précision est arbitraire, a été évaluée avec succès pour des écoulements bidimensionnels (*cf.* publication [A5]).

Ensuite, il s’est trouvé nécessaire de réduire le coût CPU de la méthode, qui est alourdie par la résolution itérative de l’équation discrète pour la pression. Cela nous a conduit à développer une modification dite “semi-consistante” du schéma de B-splines original, en construisant des inverses approchés creux de la matrice de masse “consistante”, et qui peuvent être vu comme une généralisation de la technique de condensation de masse des éléments finis. La méthode de B-spline semi-consistante,

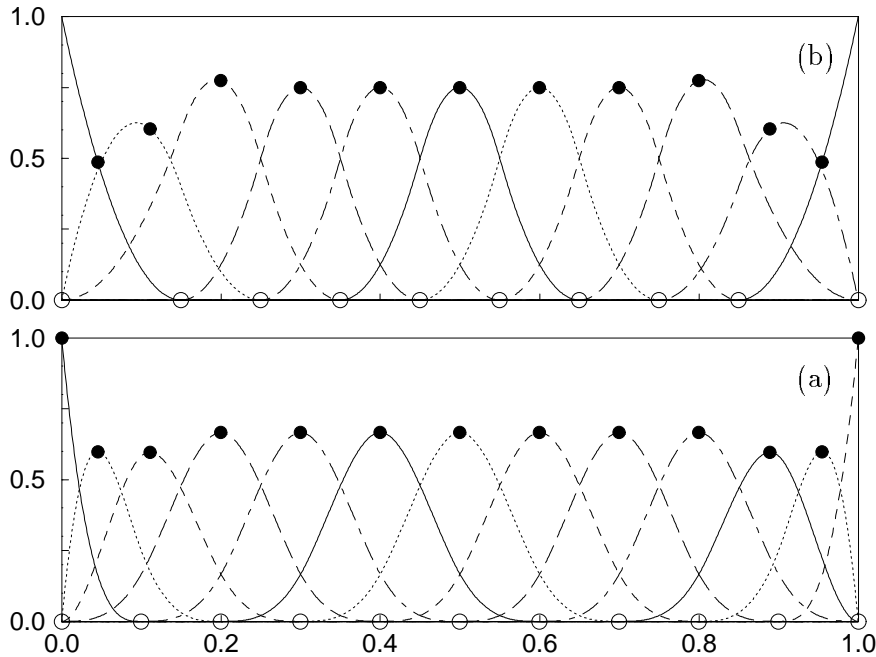


FIGURE 3.2 – Bases de B-splines décalées pour l'approximation des équations de Navier-Stokes, sur une distribution uniforme de nœuds (○). Les bases sont d'ordre 4 pour (a) la vitesse, et d'ordre 3 pour (b) la pression. Dans cette figure, les points de collocation (●) sont situés au maximum des fonctions de base de la vitesse.

qui a la propriété de générer un opérateur de pression qui soit creux et facilement inversible, a permis une diminution très sensible du coût des calculs instationnaires, tout en conservant l'ordre de précision de la méthode originale. Ces travaux ont conduit à la rédaction de la publication [A7] et à un article de revue sur l'utilisation des B-splines en mécanique des fluides numérique [A6].

Ce stage au sein d'un centre spécialisé dans la simulation numérique de la turbulence m'a permis de développer mes compétences dans ce domaine et de tirer les enseignements suivants :

- Les méthodes numériques pour géométries complexes (sur maillages curvilignes ou non uniformes) souffrent de problèmes de précision dans les cellules dégénérées et de lourdeurs d'implémentation informatique (taille mémoire, temps de calcul). Par contre, les techniques sur grilles cartésiennes, et en particulier la méthode de frontières immergées qui a été appliquée avec succès aux écoulements turbulents durant mon stage au CTR [167], m'ont semblé une alternative prometteuse que j'ai décidé de développer à la suite de ma nomination à un poste de MCF.
- L'utilisation de schémas non dissipatifs et qui conservent discrètement les invariants globaux de l'écoulement (masse, quantité de mouvement, énergie cinétique totale) se révèle être un point crucial pour la fidélité d'une simulation, plutôt que leur ordre de précision formel [36]. Ce raisonnement sera prolongé lors du développement du code de frontières immergées/cut-cells LS-STAG.

3.1.4 Maître de Conférences, LEMTA (Université de Lorraine)

Mes activités de recherche à l'UL se déroulent au sein de l'opération scientifique (OS) "Écoulements de poudres et de suspensions" nouvellement créée au LEMTA¹. Les thématiques de l'OS s'articulent autour de la modélisation et simulation des milieux dispersés concentrés utilisés dans les procédés industriels (émulsions, polymères, suspensions colloïdales, ...), qui présentent un comportement rhéologiquement complexe sous écoulement (viscosité, élasticité, seuil d'écoulement, ...) lors des différentes phases d'élaboration, de transport, de stockage et d'utilisation. Ces thématiques, qui s'appuient sur des compétences issues de la physico-chimie, la rhéologie des fluides et la mécanique des milieux continus, structurent fortement les activités de notre OS et ont notamment reçu le soutien financier du ministère de la recherche (ACI «jeunes chercheurs») en 2004, et plus récemment celui de la communauté européenne (Projet INTERREG VA «PowderReg» en 2017, ANR (PRCI-DFG) «PASTFLOW» en 2019).

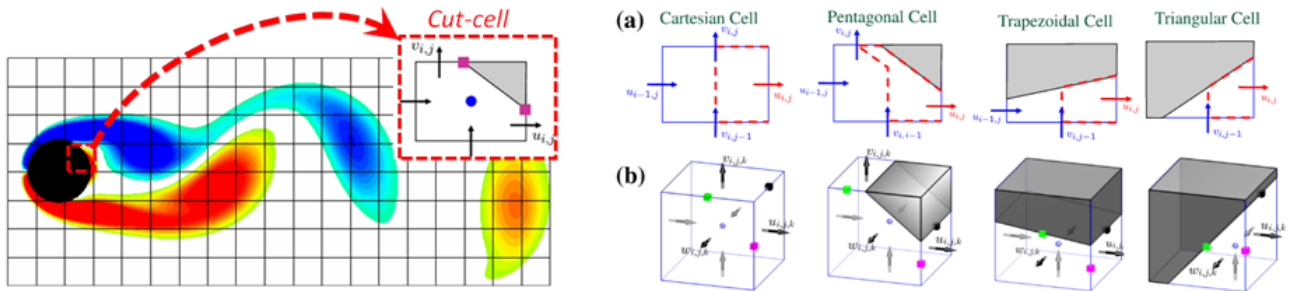


FIGURE 3.3 – A gauche : représentation d'un maillage de type cut-cell. A droite : cellules cartésiennes et cut-cells présentes dans le maillage LS-STAG 2D (a) et 3D extrudé (b).

L'un des objectifs de l'OS est de mener en synergie le développement de bases de données expérimentales avec celui d'un code de simulation suffisamment «ouvert», qui permettrait d'implémenter et de valider la pertinence des modèles rhéologiques développés. C'est dans cette optique que j'ai initié le développement d'un code de mécanique des fluides numérique (CFD) original basé sur les méthodes de frontières immergées/cut-cell [104] : la méthode LS-STAG (Level-Set, STAGgered), qui est basée sur la méthode MAC classique pour grilles cartésiennes décalées (cf. Fig. 3.3), et qui est telle que la frontière irrégulière est représentée par sa fonction level-set [115]. Les méthodes de cut-cell, et en particulier la méthode LS-STAG, se situent en rupture par rapport aux méthodes CFD classiques sur maillages body-fitted, car elles permettent le calcul d'écoulements en géométries irrégulières sur de simples maillages cartésiens, sans nécessité de remailler le domaine de calcul dans le cas de géométries mobiles. Ces travaux sont effectués en collaboration avec Y. Cheny dans le cadre de sa thèse (2005-2009) que j'ai codirigée, et qui se poursuivent depuis sa nomination à un poste de MCF au LEMTA en 2012. La méthode LS-STAG est au cœur de la partie scientifique de ce document, et sera présentée dans les chapitres 6 à 8.

1. L'OS fait partie du groupe de recherche "Milieux fluides, réactifs, multiphasiques".

3.2 Activités de Valorisation et de Transfert

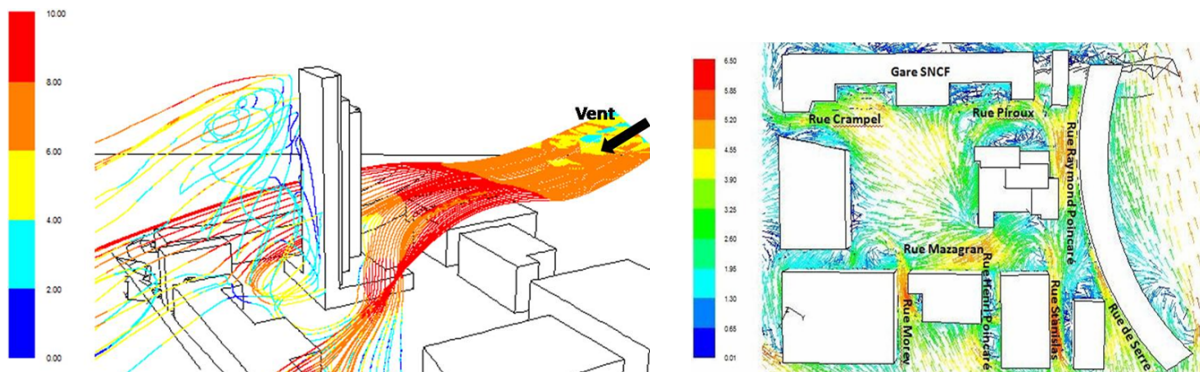


FIGURE 3.4 – A gauche : simulation des mouvements d'air sur la place Thiers à Nancy. A droite : vecteurs vitesse à hauteur des piétons.

En complément de ces travaux de développement de méthodes numériques et de codes de calcul originaux, j'ai développé une activité d'expertise en code commerciaux de simulation numérique (logiciel ANSYS FLUENT) dans une série de contrats de recherche avec divers partenaires industriels. Ces études me permettent de mieux appréhender les objectifs et les attentes du milieu industriel, d'évaluer les potentialités et les limitations des codes de calculs commerciaux afin que l'expérience acquise puisse nourrir le développement du code LS-STAG.

Dans le cadre du contrat de fidélisation entre le LEMTA et ARCELOR-MITTAL *Research*, site de Maizières-les-Metz (pilote par M. Gradeck, PR UL), j'ai participé en 2009-2010 à la prédiction numérique du refroidissement par jet de surfaces à haute température pour les procédés sidérurgiques (publication [C5]), en se basant sur les données expérimentales du refroidissement par eau d'un cylindre tournant obtenues au LEMTA par M. Gradeck. De 2008 à 2011, j'ai été sollicité par la Communauté Urbaine du Grand Nancy (CUGN) pour réaliser des simulations numériques pour la prédiction des vents urbains au sein de la place Thiers à Nancy, dans le cadre du projet de rénovation architectural de l'espace Thiers (Fig. 3.4 et publication [C4]). Cette étude, qui a été menée lors d'une série de projets et stages de l'Ecole des Mines de Nancy, a débouché sur une présentation des résultats devant les maîtres d'œuvre et d'ouvrage du projet de rénovation, et a été valorisé par la publication de 2 articles de vulgarisation dans le quotidien régional *l'Est Républicain*¹. En 2013, une collaboration de recherche a été initiée avec *DELPHI Automotive Systems Luxembourg* pour l'étude numérique de la performance thermo-hydraulique des ailettes à persiennes d'échangeurs de chaleur automobiles (Fig. 3.5). A ce jour, cette collaboration a donné lieu à l'encadrement de 2 stages Masters/Ingénieurs (A. Petrosino en 2014, R. Hoarau en 2015), et un projet de thèse sera déposé au fonds national de la recherche du Luxembourg.

1. Editions datées du 5/11/2008 et du 9/10/2009.

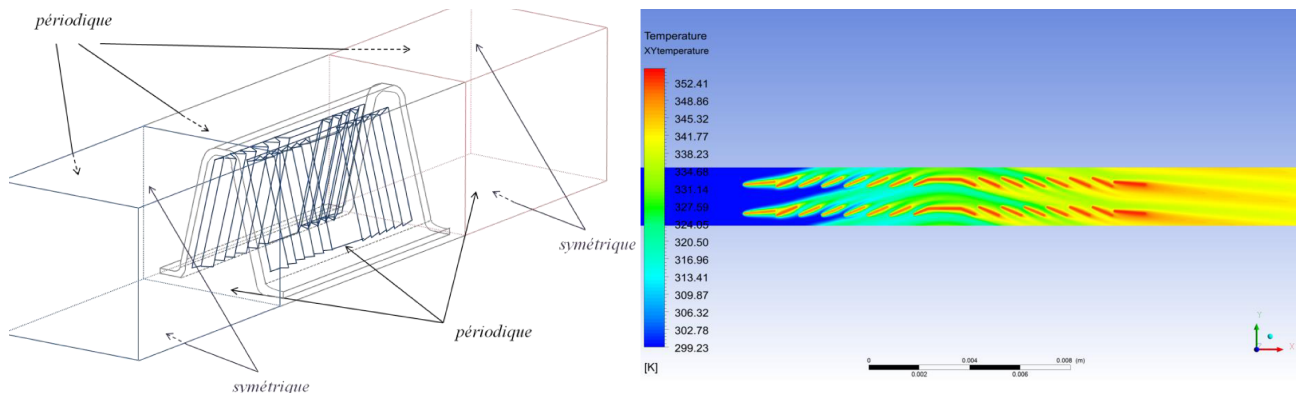


FIGURE 3.5 – Simulation numérique du transfert de chaleur dans une rangée d'ailettes à persiennes.

3.3 Encadrement doctoral et scientifique

J'ai encadré 3 thèses de doctorat portant sur le développement de la méthode LS-STAG : Y. Cheny (2005-2009), qui a ensuite intégré en 2012 le LEMTA sur un poste de MCF et continue à travailler sur la méthode, puis F. Nikfarjam (2013-2018), un ressortissant iranien qui a obtenu la nationalité française et travaille actuellement en France. Une troisième thèse (B. Portelenelle), vient de s'achever en novembre 2019. Les 3 thèses ont été financées par un contrat de l'Ecole Doctorale.

En outre, j'ai encadré 8 stages en laboratoire niveau Master 2 ou ingénieurs 3A (Y. Cheny, 2005 ; M. Lima da Silva, 2009 ; K. Moutaoukil, 2009 ; M. Stoica 2013 ; J. Carlier 2016, S. Yessen 2017, Y. Maksum 2019) sur des sujets portant sur le développement et validation du code LS-STAG, ou sur les divers contrats industriels mentionnés ci-après.

La liste complète de ces encadrements est donnée dans le chapitre 5.

3.4 Diffusion, rayonnement, contrats de recherche

3.4.1 Activités éditoriales

J'ai effectué plus de 40 expertises de manuscrits pour les revues internationales suivantes :

Applied Numerical Mathematics , *Compte-rendus de Mécanique*, *Computers & Fluids*, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, *International Journal for Computational Methods in Engineering Science & Mechanics*, *International of Heat and Mass Transfer*, *International Journal of Thermal Sciences*, *Journal of Computational Physics*, *Journal of Fluid Mechanics*, *Journal of Non-Newtonian Fluid Dynamics*, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*.

1 expertise de projet de monographie pour l'éditeur SIAM¹.

1. Society for Industrial and Applied Mathematics (Philadelphie, PA).

3.4.2 Participation à des jurys de thèse (hors établissement)

J'ai participé au jury de 3 thèses hors UHP/UL. Deux en tant qu'examinateur :

- ▶ **Abdelkader Hammouti** , *Simulation numérique directe en différence finie de l'écoulement d'un fluide incompressible en présence d'une interface rigide*. Thèse de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, décembre 2009,
- ▶ **Ali Abbas** , *Schémas boîte hermitiens - Algorithmes rapides pour la discrétisation des équations aux dérivées partielles*. Thèse de l'Université Paul Verlaine-Metz, novembre 2011.

A l'international, j'ai été membre du "assessment committee" (rapporteur) d'une thèse aux Pays-Bas :

- ▶ **Henri J.L. van der Heiden** , *Modelling Viscous Effects in Offshore Flow Problems - A Numerical Study*. Thèse de l'Université de Groningue (Pays-Bas) ; Directeur : A.E.P. Veldman ; Soutenue le 22/03/2019.

3.4.3 Invitations dans des universités étrangères

Dans le cadre de mes séjours d'enseignant invité à l'UPB (Roumanie) et au Kazakhstan (universités KazNU et KazNITU), j'ai eu l'opportunité de donner plusieurs séminaires scientifiques :

- ▶ The LS-STAG cut-cell/immersed boundary method for incompressible flows in irregular geometries : Basics of the discretization and application to non-Newtonian and viscoelastic liquids. *Department of Thermotechnics, Thermal Machines and Refrigeration Systems, UPB*, 17/09/2014.
- ▶ The LS-STAG cut-cell/immersed boundary solver for incompressible flows in 2D and 3D irregular geometries. *Department of Mathematics and Mechanics, KazNU*, 01/04/2016.
- The LS-STAG cut-cell/immersed boundary solver for incompressible flows in 2D and 3D irregular geometries. *Faculty of Mathematical and Computer Modelling, IITU, Almaty*, 16/03/2017.

Dans le cadre de ma visite au SINTEF/ Université de Trondheim (Norvège, 09/11-12/11/2015) pour un projet de collaboration LS-STAG/SIMCOFLOW, j'ai donné le séminaire suivant :

- ▶ The LS-STAG cut-cell/immersed boundary solver for incompressible flows in 2D and 3D irregular geometries. *Department of Process Technology, SINTEF*, 15/11/2015.

Dans le cadre de ma visite (21-22/03/2019) à l'Université de Groningue (RuG) pour la cérémonie de thèse de H. van der Heiden, j'ai donné le séminaire suivant :

- ▶ The LS-STAG method with diamond cell techniques for flow computation in fully 3D complex geometries. *Bernoulli Institute for Mathematics, Computer Science and Artificial Intelligence, RuG*, 21/03/2019.

3.4.4 Participation à des contrats de recherche

En complément de mes travaux autour du développement du code de calcul LS-STAG et ses applications aux fluides complexes (participation à l'ACI « Fluides Structurés », projets « PowderReg

» et « PASTFLOW »), j'ai développé une activité d'expertise en code commerciaux de simulation numérique (logiciel ANSYS FLUENT) dans une série de contrats de recherche avec des partenaires industriels régionaux (ARCELOR-MITTAL, DELPHI, Communauté urbaine de Nancy). Ces études me permettent de mieux appréhender les objectifs et les attentes du milieu industriel, d'évaluer les potentialités et les limitations des codes de calculs commerciaux afin que l'expérience acquise puisse nourrir le développement du code LS-STAG.

Contrats de recherche évalués suite à appel à projet

- **2004 : BQR de l'UHP** "Soutien aux jeunes équipes de recherches et projets émergents" No. 0013774.
 - PROJET : Ecoulements de fluides structurés : expériences, modélisation et simulations numériques
 - PARTICIPANTS : C. Baravian (MCF UHP), **O. Botella (porteur)**, F. Caton (CR CNRS), L. Cordier (MCF INPL¹).
 - MONTANT : 15 k€ ttc

- **2004 : ACI du Fonds National de la Science** "Jeunes chercheuses et jeunes chercheurs" No. JC8052.
 - PROJET : Ecoulements de fluides structurés : expériences, modélisation et simulations numériques
 - PARTICIPANTS : C. Baravian, **O. Botella**, F. Caton (*porteur*), L. Cordier.
 - MONTANT : 70 k€ ttc

- **2017-20 : Projet européen INTERREG VA**
 - PROJET : "PowderReg", Transport, stockage et mise en forme de poudres d'intérêt industriel.
 - COORDINATEUR : S. Kiesgen (MCF UL).
 - PARTICIPANTS : UL, Université de Liège, de la Sarre, du Luxembourg, de Kaiserslautern.
 - MONTANT : 4 M€ sur 4 ans.
 - Ma participation s'élève à 10% de mon temps plein de travail.

- **2019-2021 : ANR (PRCI-DFG)**
 - PROJET : "PASTFLOW" : Spreading of granular pastes : from the particle to end use properties.
 - COORDINATEUR : S. Kiesgen (MCF UL).
 - PARTICIPANTS : UL et Université de Kaiserslautern.
 - MONTANT : 489 k€ sur 3 ans.
 - Ma participation s'élève à 10% de mon temps plein de travail.

1. Institut National Polytechnique de Lorraine (Nancy, 54).

Contrats de recherche de gré à gré

- **2008 - 9** : Convention “Soutien à la recherche 2008” de la Communauté urbaine du Grand Nancy.
 - PROJET : Etude sur les mouvements d’air place Thiers à Nancy
 - PARTICIPANTS : **O. Botella**, J.-P. Brancher (PR UL).
 - MONTANT : 15 k€ ttc

- **2008 - 10** : Référent numérique dans le cadre du contrat de fidélisation entre *ARCELOR-MITTAL* (centre de Maizière-lès-Metz (57)) et le LEMTA.
 - ACTION : Simulation numérique du refroidissement de tôles d’acier par jet d’eau.
 - PARTICIPANTS : **O. Botella**, M. Hamide (Arcelor-Mittal)
 - MONTANT : 8 k€ ttc annuel.

- **2013 - 15** : Contrat de collaboration de recherche entre *Delphi Automotive Systems* (centre de Luxembourg) et le LEMTA.
 - ACTION : Développement d’outils de simulation numérique prédisant la performance thermo-hydraulique d’échangeurs de chaleur utilisés en automobile
 - PARTICIPANTS : **O. Botella**, M. Gradeck (PR LEMTA), F. Ayad (Delphi)
 - MONTANT : 13 k€.

Chapitre 4

Liste classée des publications

4.1 Articles publiés dans revues internationales à comité de lecture

- [A1] O. BOTELLA. **1997** On the solution of the Navier-Stokes equations using Chebyshev projection schemes with third-order accuracy in time. *Computers & Fluids* **26**, 107-116 ; [doi:10.1016/S0045-7930(96)00032-1]
- [A2] O. BOTELLA & R. PEYRET. **1998** Benchmark spectral results on the lid-driven cavity flow. *Computers & Fluids*, **27**, 421-433 ; [doi:10.1016/S0045-7930(98)00002-4]
- [A3] O. BOTELLA & R. PEYRET. **2001** Computing singular solutions of the Navier-Stokes equations with the Chebyshev collocation method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. **36**, 125-163 ; [doi:10.1002/flid.121]
- [A4] O. BOTELLA, M. FORESTIER, R. PASQUETTI, R. PEYRET & C. SABBAH. **2001** Chebyshev methods for the Navier-Stokes equations : Algorithms and applications. *Nonlinear Analysis*. **47**, 4157-4168 ; [doi:10.1016/S0362-546X(01)00533-8]
- [A5] O. BOTELLA. **2002** On a collocation B-spline method for the solution of the Navier-Stokes equations. *Computers & Fluids*, **31**, 397-420 ; [doi:10.1016/S0045-7930(01)00058-5]
- [A6] O. BOTELLA & K. SHARIFF. **2003** B-spline methods in fluid dynamics. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, **17**, 133-149 ; [doi:10.1080/1061856031000104879]
- [A7] O. BOTELLA. **2006** A high-order mass-lumping procedure for B-spline collocation method with application to incompressible flow simulations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. **41**, 1295-1318 ; [doi:10.1002/flid.435]
- [A8] Y. CHENY & O. BOTELLA. **2009** An immersed boundary/level-set method for incompressible viscous flows in complex geometries with good conservation properties. *European Journal of Computational Mechanics*. **18**, 561-587 ; [doi:10.3166/EJCM.18.561-587]
- [A9] Y. CHENY & O. BOTELLA. **2010** The LS-STAG Method : A new Immersed Boundary / Level-Set Method for the Computation of Incompressible Viscous Flows in Complex Moving Geometries with Good Conservation Properties. *Journal of Computational Physics* **229**, 1043-1076 ; [doi:10.1016/j.jcp.2009.10.007]
- [A10] O. BOTELLA, M. AIT-MESSAOUD, A. PERTAT, C. RIGAL & Y. CHENY. **2015** The LS-STAG immersed boundary method for non-Newtonian flows in irregular geometries : Flow of shear-thinning liquids between eccentric rotating cylinders. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* **29**, 93-110 ; [doi:10.1007/s00162-015-0342-0]

- [A11] O. BOTELLA, Y. CHENY, F. NIKFARJAM & M. STOICA. **2016** Application of the LS-STAG Immersed Boundary/Cut-Cell Method to Viscoelastic Flow Computations. *Communications in Computational Physics*, **20**, 870-901 ; [doi:10.4208/cicp.080615.010216a]
- [A12] F. NIKFARJAM, Y. CHENY, & O. BOTELLA. **2018** The LS-STAG immersed boundary/cut-cell method for non-Newtonian flows in 3D extruded geometries. *Computer Physics Communications* **226**, 67-80 ; [doi:10.1016/j.cpc.2018.01.006]
- [A13] B. PORTELENELLE, O. BOTELLA, & Y. CHENY. **2019** Accurate discretization of diffusion in the LS-STAG cut-cell method using diamond cell techniques. *Computers & Fluids* **189**, 34-45 ; [doi:10.1016/j.compfluid.2019.05.005]

4.2 Actes publiés de conférences internationales, congrès et colloques

- [B1] O. BOTELLA & R. PEYRET. **1997** The Chebyshev approximation for the solution of singular Navier-Stokes problems. *Numerical Modelling in Continuum Mechanics*, M. Feistauer *et al.* eds, pp. 81-90, MAT-FYZPRESS, Prague, République Tchèque.
- [B2] J. S. BAGGETT, F. NICLOUD, B. MOHAMMADI, T. BEWLEY, J. GULLBRAND & O. BOTELLA. **2000** Sub-optimal control based wall models for LES — including transpiration velocity. *Proceedings of the 2000 Summer Program*, pp. 331-342, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. ; [http://ctr.stanford.edu/Summer00/baggett.pdf]
- [B3] O. SÉRO-GUILLAUME, J. MARGERIT & O. BOTELLA. **2002** Asymptotic Analysis : the way from complete physical models to propagation models. *Forest Fire Research and Wildland Fire Safety*, D. Viegas ed., p. 102 & CD-ROM, Millpress, Rotterdam (P.-B.).
- [B4] O. BOTELLA & K. SHARIFF. **2003** Solving the Navier-Stokes equations using B-spline numerical methods. *Numerical Simulations of Incompressible Flows*, M. M. Hafez ed., pp. 277-287, World Scientific, Singapore.
- [B5] O. BOTELLA & Y. CHENY. **2006** On the treatment of complex geometries in a Cartesian grid flow solver with the level set method. *European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 06*, P. Wesseling, E. Oñate & J. Périaux eds., CD-ROM et WEB : [http://proceedings.fyper.com/eccomascfd2006/]
- [B6] Y. CHENY & O. BOTELLA. **2007** La méthode LS-STAG : une nouvelle approche de type Frontière Immersée / “Level-Set” pour le calcul d’écoulements visqueux incompressibles en géométries complexes. 18^{ème} Congrès français de Mécanique, Grenoble, 27-31 août 2007.
- [B7] O. BOTELLA & Y. CHENY. **2010** The LS-STAG Method for Viscous Incompressible Flows in Irregular Geometries : Basics of the Discretization and Application to Viscoelastic Flows. *Proceedings of the ASME 2010 Fluids Engineering Summer Meeting, FEDSM2010, August 1-5, 2010, Montreal, Canada*. [doi:10.1115/FEDSM-ICNMM2010-30964]
- [B8] O. BOTELLA & Y. CHENY. **2010** An Overview of the LS-STAG Immersed Boundary Method for Viscous Incompressible Flows. In “*Computational Fluid Dynamics 2010*” : *Proceedings of the ICCFD6 Conference (St Petersburg, Russia)*, A. Kuzmin (Ed.), pp. 601-606, Springer.

- [B9] O. BOTELLA, M. AIT-MESSAOUD, A. PERTAT, C. RIGAL & Y. CHENY. **2012** Recent progress on the LS-STAG immersed boundary method for complex fluids : Flow of shear-thinning liquids between eccentric rotating cylinders. *Seventh International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD7), Hawaii, July 9-13, 2012* [http://www.iccfd.org/iccfd7/assets/pdf/papers/ICCFD7-2104_paper.pdf]
- [B10] O. BOTELLA, M. AIT-MESSAOUD, A. PERTAT, C. RIGAL & Y. CHENY. **2012** The LS-STAG immersed boundary method for non-Newtonian fluids : Flow of shear-thinning liquids between eccentric rotating cylinders. *6Th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences And Engineering (EC-COMAS 2012), Vienna, Austria, September 10-14, 2012*
- [B11] O. BOTELLA, F. NIKFARJAM, M. STOICA & Y. CHENY. **2014** Entry flow computations of shear-thinning and viscoelastic liquids with the LS-STAG immersed boundary method. *Proceedings of the ICCFD8 conference (paper ICCFD8-2014-0236), Chengdu, China, July 14-18, 2014.*
- [B12] Y. CHENY, F. NIKFARJAM & O. BOTELLA. **2014** Towards a fully 3D version of the LS-STAG immersed boundary/cut-cell method. *Proceedings of the ICCFD8 conference (paper ICCFD8-2014-0371), Chengdu, China, July 14-18, 2014.*
- [B13] O. BOTELLA, Y. CHENY, & F. NIKFARJAM. **2016** The LS-STAG immersed boundary/cut-cell method for non-Newtonian flow and heat transfer in quasi-3D geometries. *COFRET'16- Huitième Edition du Colloque Francophone sur l'Energie-Environnement-Economie et Thermodynamique. Bucarest, Roumanie, 29-30 juin 2016.*
- [B14] B PORTELENELLE, O BOTELLA, Y CHENY. **2018** Accurate discretization of diffusion in the LS-STAG cut-cell method using diamond cell technique. *7th European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECFD 7), 11-15 Juin 2018, Glasgow, Royaume Uni.* [www.eccm-ecfd2018.org/admin/files/filePaper/p482.pdf]

4.3 Rapports de recherche

- [C1] O. BOTELLA. **1996** Résolution des équations de Navier-Stokes par des schémas de projection Tchebychev. *Rapport de recherche INRIA No. 3018.* [<https://hal.inria.fr/inria-00073676/document>]
- [C2] O. BOTELLA. **1999** A velocity-pressure Navier-Stokes solver using a B-spline collocation method. *CTR Annual Research Briefs 1999*, pp. 403-421, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. ; [<http://ctr.stanford.edu/ResBriefs99/botella.pdf>]
- [C3] O. BOTELLA. **2000** A high-order approximate-mass spline collocation scheme for incompressible flow simulations. *CTR Annual Research Briefs 2000*, pp. 149-167, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. ; [<http://ctr.stanford.edu/ResBriefs00/botella.pdf>]
- [C4] BODINIER, J., BOTELLA O., BRANCHER J.-P., EL BAHLOULI, A. E., GUILBAUD, A., HANOTIN, C., & LIMA, M. **2009** Etude des vents au sein de la place Thiers à Nancy. *Rapport de Contrat pour la Communauté urbaine du Grand Nancy.*
- [C5] EL MOUTAOUKIL, K. & BOTELLA O. **2010** Simulation Numérique et Optimisation du Refroidissement par Jet d'Eau d'un Cylindre Tournant. *Rapport de Contrat pour ARCELORMITTAL RESEARCH.*

4.4 Congrès sans actes

- [D1] J. BAGGETT, F. NICOUD, P. MOIN, J. GULLBRAND & O. BOTELLA. **2000** Progress on using optimal

- control theory to find approximate boundary conditions for large eddy simulation. *American Physical Society, 53rd Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, November 19-21, 2000 Washington, DC.*
- [D2] O. BOTELLA. **2001** High-order semi-consistent B-spline scheme for incompressible flow simulations. *First M.I.T. Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, June 19-21, 2001 Cambridge, MA.*
- [D3] O. BOTELLA. & Y. CHENY. **2008** The LS-STAG Method : A new Immersed Boundary / Level-Set Method for the Computation of Incompressible Viscous Flows in Complex Geometries. *5th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2008), Venise, It., 30 Juin - 4 Juillet 2008.*
- [D4] O. BOTELLA. & Y. CHENY **2009** The LS-STAG method for viscoelastic liquids : a new Immersed Boundary / Finite Volume method for flow computations in irregular geometries. *5th Annual European Rheology Conference, 15-17 Avril 2009, Cardiff (Royaume Uni).*
- [D5] Y. CHENY & O. BOTELLA. **2009** The LS-STAG Method for Newtonian and viscoelastic liquid in irregular geometries : Basics of the discretization and benchmark computations. *5th Annual European Rheology Conference, 15-17 Avril 2009, Cardiff (Royaume Uni).*
- [D6] O. BOTELLA. & Y. CHENY **2009** The LS-STAG Method for Incompressible Flows in Irregular Geometries I : Basics of the Discretization and Application to Newtonian Fluids. *Academy Colloquium on Immersed Boundary Methods : Current Status and Future Research Directions (EUROMECH 507 / ERCOFTAC). 15-17 Juin 2009, Amsterdam (Pays-Bas).*
- [D7] Y. CHENY & O. BOTELLA. **2009** The LS-STAG Method for Incompressible Flows in Irregular Geometries II : Application to Viscoelastic Liquids. *Academy Colloquium on Immersed Boundary Methods : Current Status and Future Research Directions (EUROMECH 507 / ERCOFTAC). 15-17 Juin 2009, Amsterdam (Pays-Bas).*
- [D8] O. BOTELLA & C. RIGAL. **2011** Recent progress on the LS-STAG immersed boundary method for the computation of viscoelastic and pseudo-plastic liquids. *7th Annual European Rheology Conference, May 10-14, 2011, Suzdal - Russia.*
- [D9] O. BOTELLA, Y. CHENY, M. AIT-MESSAOUD, A. PERTAT & C. RIGAL. **2013** The LS-STAG immersed boundary method for non-Newtonian and viscoelastic flows in irregular geometries. Applications to the flow of shear-thinning liquids between eccentric rotating cylinders. *Joint EUROMECH / ERCOFTAC Colloquium 549, Leiden, The Netherlands, 17-19 June 2013.*
- [D10] O. BOTELLA, Y. CHENY, C. RIGAL, M. AIT-MESSAOUD & A. PERTAT. **2013** Recent progress on the LS-STAG immersed boundary method for complex fluids : Flow of shear-thinning liquids between eccentric rotating cylinders. *8th Annual European Rheology Conference, April 2-5, 2013 - Leuven, Belgium.*
- [D11] F. NIKFARJAM, Y. CHENY & O. BOTELLA. **2015** The LS-STAG immersed boundary/cut-cell method for non-Newtonian flows in quasi-3D geometries. *22^{ème} Congrès français de Mécanique. Lyon, 24 au 28 Août 2015.*
- [D12] Y. CHENY & O. BOTELLA, F. NIKFARJAM & J. CARLIER. **2016** The LS-STAG immersed boundary/cut-cell method for non-Newtonian flow and heat transfer in quasi-3D geometries. *17th International Congress on Rheology (ICR2016). Aug. 8-13, 2016, Kyoto, Japan.*
- [D13] Y. CHENY, O. BOTELLA, B. PORTELENELLE, F. NIKFARJAM. **2018** An overview of the LS-STAG cut-cell method for flows in 3D extruded geometries. *7th European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECFD 7), 11-15 Juin 2018, Glasgow, Royaume Uni.*

- [D14] B. PORTELENELLE, O. BOTELLA, Y CHENY. **2019** Extension de la méthode de cut-cell LS-STAG aux écoulements incompressibles en géométries 3D arbitraires. *SMAI 2019 - 9ème Biennale des Mathématiques Appliquées et Industrielles*, 13-17 mai 2019, Guidel Plages, France.
- [D15] O. BOTELLA, B. PORTELENELLE, Y CHENY. **2019** Accurate discretization of diffusion in the LS-STAG cut-cell method using diamond cell techniques. *SMAI 2019 - 9ème Biennale des Mathématiques Appliquées et Industrielles*, 13-17 mai 2019, Guidel Plages, France.

Chapitre 5

Liste des co-directions de thèses et de stages de Master

5.1 Liste des co-directions de thèses

[Th1] *Nom de l'étudiant* : Yoann CHENY

- *Titre du travail* : La méthode LS-STAG : une nouvelle approche de type frontière immergée/level-set pour la simulation d'écoulements visqueux incompressibles en géométries complexes. Application aux fluides newtoniens et viscoélastiques.
- *Date début* : 10/2005 *Date fin* : 07/2009 % encadrement : 70
- *Noms et % des co-directeurs* : M. Lebouché (LEMMA, PR UHP) 30%
- *Publications* : [A8]-[A13], [B5]-[B14]
- *Devenir de l'étudiant* : MCF UL-LEMMA, depuis 09/2012

[Th2] *Nom de l'étudiant* : Farahd NIKFARJAM

- *Titre du travail* : Extension of the LS-STAG immersed boundary/cut-cell method to 3D extruded geometries. Application to Newtonian and non-Newtonian flows.
- *Date début* : 10/2013 *Date fin* : 03/2018 % encadrement : 80
- *Noms et % des co-directeurs* : S. Skali-Lami (MCF LEMMA) 20%
- *Publications* : [A11]-[A12], [B11]-[B13]
- *Devenir de l'étudiant* : Stage post-doctoral à l'Université Fédérale de Rio de Janeiro (Brésil)

[Th3] *Nom de l'étudiant* : Brice Portelenelle

- *Titre du travail* : La méthode LS-STAG avec schémas diamants pour l'approximation de la diffusion : une méthode de type "cut-cell" précise et efficace pour les écoulements incompressibles en géométries 3D complexes

- *Date début* : 10/2016 *Date fin* : 11/2019 % encadrement : 80
- *Noms et % des co-directeurs* : S. Skali-Lami (MCF LEMTA) 20%
- *Publications* : [A13], [B14]
- *Devenir de l'étudiant* : Nommé MCF à l'Université de Technologie de Troyes en septembre 2020.

5.2 Liste des co-directions de stages de Master

- [Sm1] *Nom de l'étudiant* : Yoann CHENY (DEA Mécanique – Energétique, INPL-UHP)
- *Titre du travail* : Mise en œuvre d'une méthode de volumes finis pour le fluide d'Oldroyd-B
 - *Date début* : 02/2005 *Date fin* : 07/2005 % encadrement : 100%
- [Sm2] *Nom de l'étudiant* : Karim El Moutouakil (Stage M2 MEPP, UHP-INPL)
- *Titre du travail* : Simulation numérique et optimisation du refroidissement par jet d'eau d'un cylindre tournant
 - *Date début* : 03/2009 *Date fin* : 08/2009 % encadrement : 50%
 - *Noms et % des co-directeurs* : M. Amide (Arcelor Mittal) 50%
- [Sm3] *Nom de l'étudiant* : Marcio Lima Da Silva (Stage Ingénieur ENSMN)
- *Titre du travail* : Etude des mouvements d'air sur la place Thiers à Nancy
 - *Date début* : 08/2009 *Date fin* : 12/2009 % encadrement : 100%
- [Sm4] *Nom de l'étudiant* : Marcela Stoica (Stage M2, Université Polytechnique de Bucarest)
- *Titre du travail* : Modélisation et simulation d'écoulements de fluides viscoélastiques et rhéofluidifiants. Application à l'écoulement dans un canal présentant une contraction brusque
 - *Date début* : 03/2013 *Date fin* : 07/2013 % encadrement : 60%
 - *Noms et % des co-directeurs* : Y. Cheny (LEMTA), 40%
- [Sm5] *Nom de l'étudiant* : Anthony Petrosino (Stage Ingénieur 3A ENSEM)
- *Titre du travail* : Optimisation géométrique des ailettes à persiennes des échangeurs de chaleur automobiles par une étude numérique des performances thermo-hydrauliques
 - *Date début* : 03/2014 *Date fin* : 08/2014 % encadrement : 33%
 - *Noms et % des co-directeurs* : M. Gradeck (PR UL), 33%. F. AYAD (Delphi), 33%
- [Sm6] *Nom de l'étudiant* : Julien Carlier (Stage M2R MEPP, UL)
- *Titre du travail* : Simulation numérique de l'écoulement de dispersions granulaires sur plan incliné
 - *Date début* : 03/2016 *Date fin* : 07/2016 % encadrement : 50%

– *Noms et % des co-directeurs* : Y. Cheny (LEMTA), 50%

[**Sm7**] *Nom de l'étudiant* : Shakir Yessen (Stage M2R SRE-HGM, UL)

– *Titre du travail* : Extension of the LS-STAG flow solver for simulating two-phase flows

– *Date début* : 03/2017 *Date fin* : 07/2017 % encadrement : 50%

– *Noms et % des co-directeurs* : Y. Cheny (LEMTA), 50%

[**Sm8**] *Nom de l'étudiant* : Yelaman Maksum (Stage M2R Energie, UL)

– *Titre du travail* : The LS-STAG method for non-Newtonian flows : Accurate discretization of shear-rate using diamond scheme technique

– *Date début* : 03/2019 *Date fin* : 07/2019 % encadrement : 50%

– *Noms et % des co-directeurs* : Y. Cheny (LEMTA), 50%

Deuxième partie

La méthode LS-STAG pour les écoulements de fluides visqueux incompressibles

Chapitre 6

Les fondements de la méthode LS-STAG

6.1 Introduction au chapitre

Dans ce chapitre nous présentons les concepts clés sur lesquels repose la méthode de cut-cells LS-STAG. La section 6.2 présente les équations que nous considérons, soit les équations de Navier-Stokes incompressibles, ainsi que les différents modèles mathématiques du tenseur des contraintes que nous avons utilisés pour simuler le comportement non-newtoniens des écoulements de fluides visqueux. La section 6.3 présentera les différentes classes des méthodes de frontières immergées et de cut-cells pour la CFD. On s'intéressera principalement aux difficultés soulevées par le traitement numérique des cut-cells, et la manière dont la méthode LS-STAG a contribué à les lever en adoptant une discrétisation dite *symmetry-preserving*. La section 6.4 présente le principe des méthodes numériques *symmetry-preserving* pour la CFD, qui permettent de résoudre avec fidélité les équations de Navier-Stokes en préservant la contrepartie discrète de ses invariants globaux (masse, quantité de mouvement et énergie cinétique totale). Nous accorderons une attention particulière à la méthode de Verstappen et Veldman [166] sur maillages cartésiens MAC, sur laquelle repose la discrétisation LS-STAG dans les cut-cells. Enfin, nous présenterons dans la dernière section la chronologie du développement de la méthode LS-STAG qui sera présentée dans les chapitres suivants.

6.2 Les équations de Navier-Stokes pour un fluide incompressible

6.2.1 Formulation locale

Pour un fluide incompressible, les équations de Navier-Stokes sont constituées par l'équation de conservation de la masse, ou équation de continuité :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \tag{6.1}$$

et l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (6.2)$$

où le tenseur des contraintes visqueuses $\boldsymbol{\tau}$ est supposé symétrique. Dans cette équation, le terme non-linéaire est écrit sous sa forme dite “convective”, et de nombreuses autres formulations du terme convectif peuvent être utilisées pour la résolution numérique de ces équations [163, 41]. La formulation utilisée par la méthode des volumes-finies est la forme “divergence”, qui s'écrit :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}. \quad (6.3)$$

Les équations (6.2) et (6.3) sont analytiquement équivalentes en utilisant l'identité tensorielle :

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \nabla \cdot (\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) - \mathbf{v} \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (6.4)$$

et l'hypothèse d'incompressibilité du fluide (6.1). Néanmoins, lorsque les équations sont discrétisées sur un maillage, ces opérations algébriques ne s'appliquent généralement plus, ce qui conduit à des comportements différents de leur solution numérique. Cette discussion sera poursuivie dans la section 6.4 du manuscrit.

6.2.2 Lois constitutives considérées

En 3D, les équations (6.1) et (6.3) possèdent 13 inconnues (p , u , v , w et les 9 composantes de $\boldsymbol{\tau}$) alors qu'elles ne représentent que 4 équations scalaires. On doit donc fermer le système en introduisant une loi constitutive, ou loi de comportement. Ce type de loi est une relation reliant l'état de contrainte d'un matériau, qui est modélisé par le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\tau}$, à la cinématique de l'écoulement, qui est modélisé par le tenseur des taux de déformations :

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}} = (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T). \quad (6.5)$$

Les coefficients diagonaux de $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$, appelés contraintes normales, sont notés $\dot{\gamma}_{xx}$, $\dot{\gamma}_{yy}$ et $\dot{\gamma}_{zz}$ tels que :

$$\dot{\gamma}_{xx} = 2 \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \dot{\gamma}_{yy} = 2 \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \dot{\gamma}_{zz} = 2 \frac{\partial w}{\partial z}, \quad (6.6a)$$

et les coefficients non-diagonaux, appelés contraintes tangentielles, sont notés $\dot{\gamma}_{xy}$, $\dot{\gamma}_{xz}$ et $\dot{\gamma}_{yz}$, avec :

$$\dot{\gamma}_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \dot{\gamma}_{xz} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}, \quad \dot{\gamma}_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}. \quad (6.6b)$$

Pour les fluides “simples” comme l'air ou l'eau, l'expérience montre que ces deux tenseurs sont reliés par une simple relation de proportionnalité :

$$\boldsymbol{\tau} = \eta \dot{\boldsymbol{\gamma}}, \quad (6.7)$$

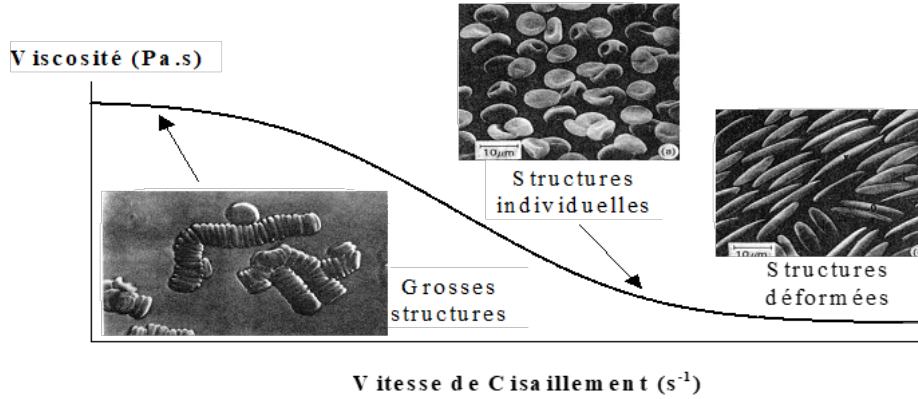


FIGURE 6.1 – Evolution de la viscosité pour un fluide non-newtonien rhéofluidifiant.

où η désigne la viscosité dynamique du fluide, supposée constante. Ce modèle de fluide dit “newtonien” est cependant incapable de prédire le comportement de matériaux dont la structure microscopique complexe peut se casser et se réorganiser au cours d’un écoulement (Fig. 6.1), comme les suspensions de colloïdes ou de polymères considérés dans l’ANR “Écoulements de fluides structurés : expériences, modélisation et simulations numériques”, et les écoulements de poudres et grains des projets “PowderReg” et “PASTFLOW” auxquels j’ai participé (section 3.4.4).

Ainsi, lors des différentes phases du développement de la méthode LS-STAG, j’ai été amené à implémenter diverses lois constitutives permettant de modéliser les comportements classiques d’écoulements non-newtoniens [27, 81, 116]. Plus particulier, je me suis intéressé au comportement pseudo-plastique (rhéofluidifiant ou rhéoépaississant, où la viscosité présente une dépendance vis à vis du taux de cisaillement local) modélisé par des lois du type “fluide newtonien généralisé”, et le comportement viscoélastique, où le matériau peut exhiber le comportement d’un solide élastique ou un fluide visqueux, suivant la façon dont il est sollicité. L’approximation numérique de ces divers modèles rhéologiques a débouché sur une discrétisation unifiée dans le cut-cells, basée sur l’arrangement décalé des inconnues de vitesse-pression-tenseur des contraintes qui sera présenté dans la section 8.3.

Modèle newtonien généralisé pour les fluides pseudo-plastiques

Le modèle non-Newtonien généralisé fait dépendre la viscosité du fluide au taux de cisaillement local en chaque point de l’écoulement [27, 116], de façon que le tenseur des contraintes s’écrive :

$$\boldsymbol{\tau} = \eta(\dot{\gamma})\dot{\boldsymbol{\gamma}}, \quad (6.8)$$

et le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ est un scalaire relié au second invariant du tenseur des déformations (6.5) :

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{\gamma}} : \dot{\boldsymbol{\gamma}}} = \sqrt{2 \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]^2 + \left[\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right]^2 + 2 \left[\frac{\partial v}{\partial y} \right]^2}. \quad (6.9)$$

Les modèle de viscosité non-newtonienne le plus simple est le modèle d'Ostwald de Waele (ou “de loi de puissance”) :

$$\eta(\dot{\gamma}) = k\dot{\gamma}^{n-1}, \quad (6.10)$$

où les paramètres k et n sont des déterminés empiriquement par ajustement des mesures expérimentales de viscosité. Le paramètre de consistance k est une mesure de la viscosité moyenne du fluide, tandis que l'indice n mesure la déviation au comportement newtonien : le cas $n = 1$ correspond à un fluide newtonien, pour $n < 1$ le fluide est rhéofluidifiant, et pour $n > 1$ il est rhéoépaississant. Ce modèle largement utilisée dans l'ingénierie des procédés a la propriété de donner des solutions analytiques pour des écoulements canoniques [27, 78], qui ont permis de valider la discrétisation LS-STAG dans [A10], [A12], [Th2]¹.

Le principal défaut du modèle de loi de puissance est son incapacité de prédire les plateaux newtoniens que peut atteindre la viscosité à des taux de cisaillement faibles (tels que $\eta = \eta_0$) ou élevés (tels que $\eta = \eta_\infty$). Ces défauts sont corrigés par le modèle de Cross :

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_\infty + \frac{(\eta_0 - \eta_\infty)}{1 + (K\dot{\gamma})^m}, \quad (6.11)$$

où K and m sont 2 paramètres d'ajustement empiriques qui peuvent être reliés à ceux du modèle d'Ostwald en observant que $k = \eta_0 K^{-m}$ et $n = 1 - m$ dans la limite où $\eta_0 \gg \eta_\infty$, $K\dot{\gamma} \gg 1$ et η_∞ est négligeable. Le modèle de Cross a notamment été utilisé dans les simulations numériques de fluides non-newtoniens présentés dans la section 8.3.3.

Modélisation de la viscoélasticité

Contrairement à un fluide non-newtonien, la réponse à une sollicitation d'un fluide viscoélastique dépends fortement de la durée de cette sollicitation. La plupart des lois pour fluides viscoélastiques sont basées sur le modèle 1D du fluide de Maxwell [27, 116], qui associe en série un ressort (modèle de solide élastique idéal) et un amortisseur (modèle de fluide visqueux newtonien). La mise sous forme tensorielle de ces lois de comportement repose sur la décomposition du tenseur des contraintes en une partie purement newtonienne (le “solvant”) et une partie élastique comme :

$$\boldsymbol{\tau} = \eta_s \dot{\boldsymbol{\gamma}} + \boldsymbol{\tau}_e, \quad (6.12)$$

où η_s est la viscosité du solvant newtonien et $\boldsymbol{\tau}_e$ le tenseur des contraintes élastiques, qui est régit par une loi constitutive générale de la forme :

$$\boldsymbol{\tau}_e + \lambda \left(\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_e + \alpha \mathbf{D} : \mathbf{D} \right) = 2\eta_e \mathbf{D}, \quad (6.13)$$

où η_e est la viscosité de la contribution élastique, $\lambda \geq 0$ est le temps de relaxation du fluide (le cas $\lambda = 0$ correspond au fluide newtonien) et $\alpha \geq 0$ est le facteur de mobilité. De plus, l'utilisation de la

1. Voir la liste de mes publications et encadrements dans la première partie du document.

dérivée surconvectée ($\overset{\nabla}{\cdot}$) du tenseur des contraintes élastiques :

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \equiv \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{v}^T - \nabla \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (6.14)$$

permet de respecter le principe d'invariance matérielle du modèle.

La loi rhéologique (6.13) est une équation de transport hyperbolique qui, selon la valeur des paramètres viscométriques η_e , λ et α , permet de généraliser les lois rhéologiques classiques telles que la loi d'Oldroyd-B, Giesekus ou White-Metzner [27, 116], et dont les propriétés à modéliser les comportements d'un écoulement viscoélastique et rhéofluidifiant sont résumées dans le tableau 6.1.

Fluid model	Mobility factor	Relaxation time	Solvent viscosity	Polymer viscosity	Shear-thinning	Elastic
Newtonian		$\lambda = 0$	η_s	η_e	X	X
Oldroyd-B	$\alpha = 0$	$\lambda > 0$	η_s	η_e	X	✓
White-Metzner	$\alpha = 0$	$\lambda > 0$	η_s	$\eta_e(\dot{\gamma})$	✓	✓
Giesekus	$\alpha > 0$	$\lambda > 0$	η_s	η_e	✓	✓

TABLE 6.1 – Lois constitutives représentée par l'équation (6.13) et leur propriétés à modéliser les effets viscoélastiques et rhéofluidifiants.

6.2.3 Formulation intégrale

La discrétisation LS-STAG dans les cut-cells repose sur la méthodes des volumes finis (*e.g.* [55, 51, 109]). La formulation intégrale des équations de Navier-Stokes repose sur le théorème de Green-Gauss, qui s'écrit pour un champ scalaire Φ :

$$\int_{\Omega} \nabla \Phi \, dV = \int_{\Gamma} \Phi \mathbf{n} \, dS, \quad (6.15)$$

où \mathbf{n} est le vecteur unitaire dirigé vers l'extérieur du volume Ω et normal à la surface Γ de Ω . Un corollaire de ce théorème est représenté par le théorème de flux-divergence, qui permet de transformer l'intégrale volumique de la divergence d'un champ vectoriel \mathbf{a} en un flux au travers de la surface du volume, soit :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{a} \, dV = \int_{\Gamma} \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} \, dS. \quad (6.16)$$

Ces deux identités seront fréquemment utilisés dans le chapitre suivant pour exprimer les divers termes des équations sous la forme de flux à travers les faces des cellules du maillage, mais aussi pour calculer les différents paramètres géométriques d'une cut-cell comme son volume ou l'expression du vecteur surfacique de ses faces. Après avoir intégré les équations de Navier-Stokes (6.1) et (6.3) dans le domaine Ω et appliqué le théorème de flux-divergence, on obtient :

$$\int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = 0, \quad (6.17)$$

pour la forme intégrale de l'équation de continuité, et :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \, dV + \int_{\Gamma} \rho \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \, dS + \int_{\Gamma} p \mathbf{n} \, dS - \int_{\Gamma} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n} \, dS = 0, \quad (6.18)$$

pour la forme intégrale de l'équation de quantité de mouvement, où l'on a notamment utilisé l'identité $(\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})$. Dans cette dernière équation, nous pouvons alors distinguer différents termes :

- le terme instationnaire $\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \, dV$, qui correspond au taux de variation de la quantité de mouvement dans le volume Ω
- le flux convectif $\int_{\Gamma} \rho \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \, dS$ à travers la surface Γ ,
- le flux de pression $\int_{\Gamma} p \mathbf{n} \, dS$ à travers la surface Γ ,
- le flux diffusif $\int_{\Gamma} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n} \, dS$ à travers la surface Γ .

Ces dénominations seront utilisées pour la suite de ce manuscrit, et on verra dans le chapitre suivant qu'un principe de discrétisation différent devra être appliqué à chacun des ces termes.

Dans le cadre des fluides newtoniens, une simplification importante de l'équation de quantité de mouvement peut être effectuée. En utilisant l'identité :

$$\nabla \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} = \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) = (\nabla \cdot (\nabla \mathbf{v}) + \nabla \nabla \cdot \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v}), \quad (6.19)$$

valable sous l'hypothèse d'incompressibilité du fluide, il est possible de réécrire le terme diffusif de (6.18) en faisant apparaître uniquement le laplacien de vitesse :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \mathbf{v} \, dV + \int_{\Gamma} \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \, dS + \frac{1}{\rho} \int_{\Gamma} p \mathbf{n} \, dS - \nu \int_{\Gamma} \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = 0, \quad (6.20)$$

où $\nu = \eta/\rho$ est la viscosité cinématique du fluide. Cette forme, appelée couramment appelée forme de Laplace des équations de Navier-Stokes [90], permet de découpler le terme diffusif des équations pour chaque composante (u , v , w) de la vitesse, et simplifie la discrétisation en temps lorsque la diffusion est prise implicitement. La discrétisation LS-STAG qui sera présentée dans le chapitre suivant s'appuiera en cas de fluides newtoniens régis par cette forme de Laplace. L'extension aux fluides pseudo-plastiques présentée dans la section 8.3.2 nécessitera de considérer la forme "complète" des équations (6.18) pour $\boldsymbol{\tau}$, donné par (6.8).

6.3 Les méthodes de frontières immergées/cut-cells en CFD

Les méthodes de "frontières immergées" (*Immersed Boundary Methods* (IBM)) et de *cut-cells* sont des alternatives aux méthodes *body-fitted* où la géométrie complexe est "plongée" dans une grille de calcul régulière (que nous supposons ici cartésienne). Ainsi, les faces des cellules ne sont pas alignées avec la géométrie et, comme représentée sur la figure 6.2, on peut distinguer 3 types de cellules :

- Les cellules cartésiennes fluides, où une discrétisation de différences-finies ou volumes-finies classique peut être utilisée pour les équations de mouvement du fluide,

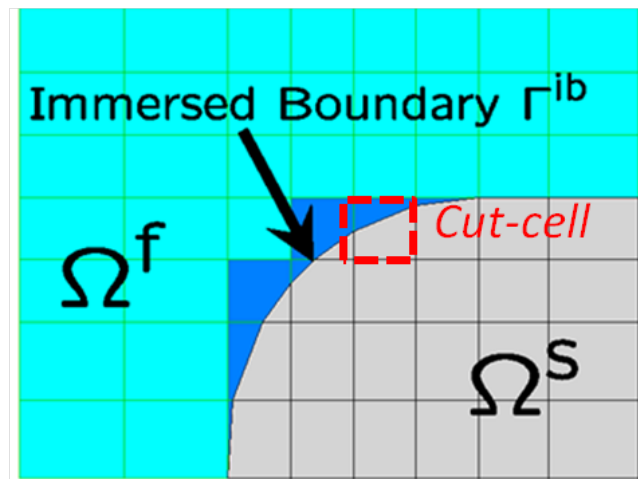


FIGURE 6.2 – Géométrie solide Ω^s immergée dans un maillage cartésien. La partie fluide du domaine de calcul est notée Ω^f , et la frontière immergée est notée Γ^{ib} .

- les cellules cartésiennes solides, où la discrétisation est généralement ignorée,
- Les cellules mixtes mi-fluides/mi-solides, aussi appelées cut-cells, où un traitement spécial doit être réalisé pour discrétiser les équations et/ou imposer les conditions à la paroi solide.

L'avantage principal des méthodes IBM/cut-cells est de grandement simplifier la génération de maillages pour les géométries complexes. La discrétisation dans les cellules cartésiennes repose sur des méthodes de différences-finies ou volumes-finies robustes et précises, mais une difficulté centrale est posée par la présence des cut-cells près de la frontière immergée.

6.3.1 Les différentes classes de méthodes pour traiter les cut-cells

Pour les méthodes IBM, on distingue traditionnellement 2 classes de méthodes pour traiter ces cut-cells :

- Des méthodes de forçage continu (*continuous forcing*), où la géométrie complexe est prise en compte en introduisant un terme force dans les équations de Navier-Stokes, qui sont alors discrétisées et résolues dans le domaine de calcul complet (cellules fluides, solides et cut-cells). Cette classe de techniques comprends notamment la méthode IBM originale de Peskin [123], initialement introduite pour des problèmes d'interaction fluide-structure avec frontières élastiques, et la méthode de pénalisation d'Angot *et al.* [8, 82] qui considère le solide comme un milieu poreux en introduisant un terme volumique de Brinkmann dans les équations.
- Des méthodes de forçage discret (*discrete forcing*), introduites par Fadlun *et al.* [52], où les équations de Navier-Stokes sont discrétisées dans les cellules cartésiennes fluides uniquement, tandis que la solution dans les cut-cells est reconstruite afin de tenir compte des conditions sur la frontière immergée. Depuis l'article classique de Fadlun *et al.* [52], de nombreuses variantes de

la reconstruction de la solution ont été proposées afin d'améliorer la robustesse et la précision des méthodes de *discrete forcing* [16, 156, 119, 110, 83].

La principale conséquence de ces traitements est d'entraîner une perte des propriétés de conservation de la méthode numérique (masse, quantité de mouvement et énergie cinétique totale, *cf.* Section 6.4). La manifestation la plus sévère de ces problèmes est la présence de champs de vitesse à divergence non nulle ou d'oscillations du champ de pression près de la frontière immergée [110, 83, 145].

En contraste, les méthodes de cut-cells ont pour objectif de discrétiser les équations de Navier-Stokes dans les cut-cells. En raison de la forme polyédrique complexe de ces cellules, une discrétisation de volumes-finis est couramment utilisée. Ce type de méthodes a en premier lieu été appliquées à la dynamique des gaz [38, 23, 120], et a ensuite été appliqué aux fluides visqueux incompressibles [175, 155, 50, 85, 37, 29] et compressibles [173, 71, 111, 60]. Bien que les méthodes de cut-cells ont la propriété d'être conservative, la discrétisation dans les cut-cells pose de nombreuses difficultés, comme nous le verrons dans la section suivante.

Il existe de nombreux articles de revues sur les méthodes IBM/cut-cell. L'article de Peskin [122] présente la méthode IBM originale pour frontières élastiques. L'article de Mittal & Iaccarino [104] présente l'état de l'art en 2005 pour la simulation de fluides incompressibles es géométries fixes et mobiles. Plus récemment, Sotiropoulos & Yang [147] discute les méthodes IBM/cut-cell pour la simulation des interactions fluides-structures. Schneider [144] présente les méthodes de pénalisation pour la simulation de la turbulence dans les plasmas. L'article récent de Berger [22] effectue un historique et une revue des méthodes de cut-cells, et discute notamment de la génération des maillages et la simulation de fluides non-visqueux. Mentionnons enfin les mémoires de Master de Badringa [17] et de [61] qui font une revue détaillée des méthodes IBM/cut-cell pour les fluides incompressibles.

6.3.2 Problèmes soulevés par les méthodes de cut-cells

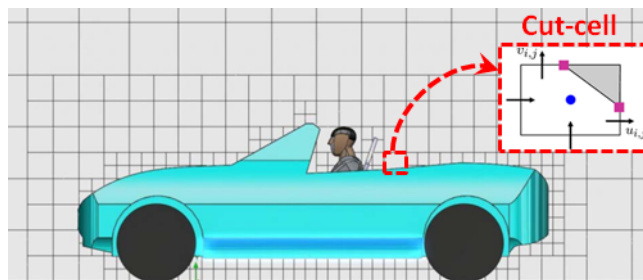


FIGURE 6.3 – Exemple de maillage cartésien à structure hiérarchique.

En dépit des succès remportés par les méthodes de cut-cells, quelques difficultés notables méritent d'être discutées.

- Les maillages cartésiens utilisés par les méthodes de cut-cells ne possèdent pas la propriété de raffinement anisotrope, qui permettrait de densifier localement le maillage autour de la géométrie complexe. Cette propriété serait particulièrement pertinente pour les écoulements 3D de fluides

visqueux à haut nombre de Reynolds, afin de diminuer le coût des simulations. Une alternative repose sur l'utilisation de maillages cartésiens hiérarchiques (Fig. 6.3), cf. [120, 40, 5, 71, 111, 159, 158] pour des exemples d'utilisation de méthodes de cut-cells sur maillages de type AMR¹ ou *octree*.

- Certaines cut-cells peuvent avoir une taille arbitrairement petite par rapport aux cellules cartésiennes (un exemple est donné sur la figure 8.18), ce qui peut impacter négativement la discrétisation en entraînant des contraintes de stabilité excessive pour les intégrations en temps explicite [102] ou des problèmes de convergence des solveurs itératifs. Pour contourner ce *small cut-cell problem*, certains auteurs ont proposé des techniques de *cell-merging* [175, 173] ou *cell-linking* [85] pour fusionner les petites cut-cells avec les cellules environnantes. Néanmoins, le manque d'algorithmes systématiques et robustes pour fusionnement les cellules rends difficile l'application de ces techniques aux cut-cells 3D [147].
- Enfin, une difficulté est liée à l'utilisation de l'arrangement MAC des vitesses dans les cut-cells. Dans une cellule cartésienne, où la pression est située au centroïde et les vitesses au centre des faces (Fig. 6.4), les volumes de contrôle (CVs) de vitesse se construit intuitivement à partir des demi-volumes des cellules voisines. Pour un maillage de cut-cells, la forme précise des CVs décalés de vitesse possède un certain degré d'arbitrarité, comme le montre la figure 6.5 qui présente deux CVs alternatifs considérés dans la méthode de cut-cell de Dröge [49]. Une difficulté connexe est lié au positionnement de la pression dans une cut-cell. Certains auteurs [153, 85, 29] placent la pression au centre de la cellule cartésienne où s'inscrit la cut-cell (Fig. 6.6). Pour les petites cellules triangulaires, [153] remplace la discrétisation par de simples interpolations, tandis que [85, 29] placent la pression à l'extérieur du domaine fluide. Ces difficultés sont amplifiées pour les maillages 3D, où les nombreux types de cut-cells rendent difficile la définition *ad hoc* des CVs de vitesse et d'y adapter la discrétisation. Pour ces raisons, la majorité des méthodes de cut-cell 3D publiées récemment considère principalement des méthodes collocalisées pour les écoulements compressibles [71, 111, 60] ou incompressibles [92].

La discrétisation LS-STAG présentée dans le chapitre suivant a pour objectif de répondre à certaines de ces difficultés. L'utilisation des principes des méthodes numérique *symmetry preserving*, que nous présenterons dans la section suivante, permet de guider la discrétisation dans les cut-cells et de définir sans ambiguïté les CVs de vitesse décalés. L'utilisation de schémas diamants pour la diffusion (section 7.4.2) permet notamment d'obtenir une discrétisation robuste dans les petites cut-cells. Enfin, la discrétisation LS-TAG peut s'appliquer de façon systématique dans les cut-cells de forme arbitraire, ce qui a permis d'obtenir une méthode algorithmiquement efficace pour les géométries complexes 3D.

1. AMR : Adaptive Mesh Refinement.

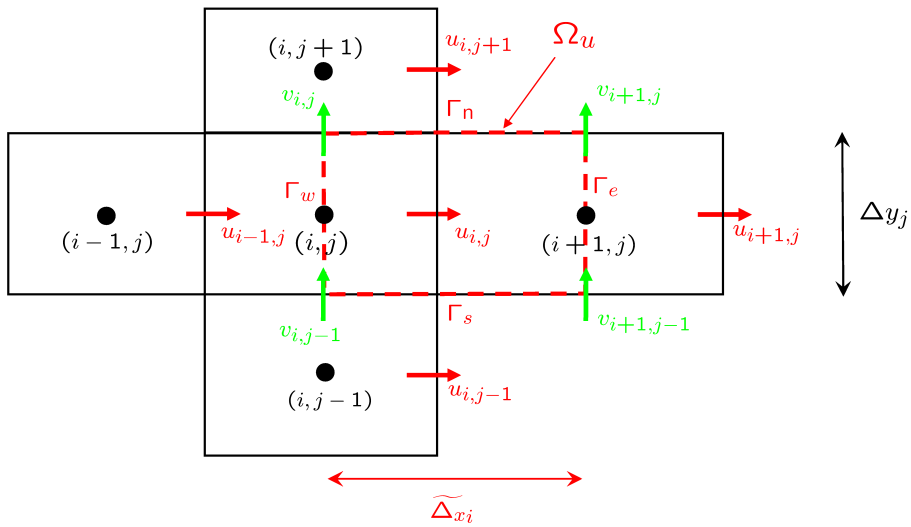


FIGURE 6.4 – Volume de contrôle décalé Ω_u pour la composante $u_{i,j}$, formé de 2 demi-volumes appartenant aux cellules cartésiennes $\Omega_{i,j}$ et $\Omega_{i+1,j}$.

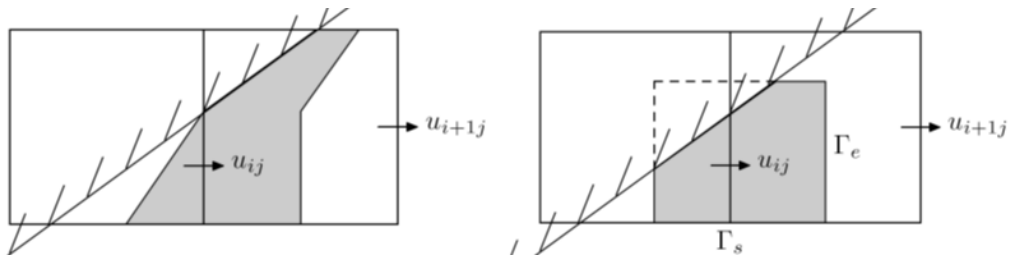


FIGURE 6.5 – Exemples de CVs décalés pour $u_{i,j}$ considérés dans [49].

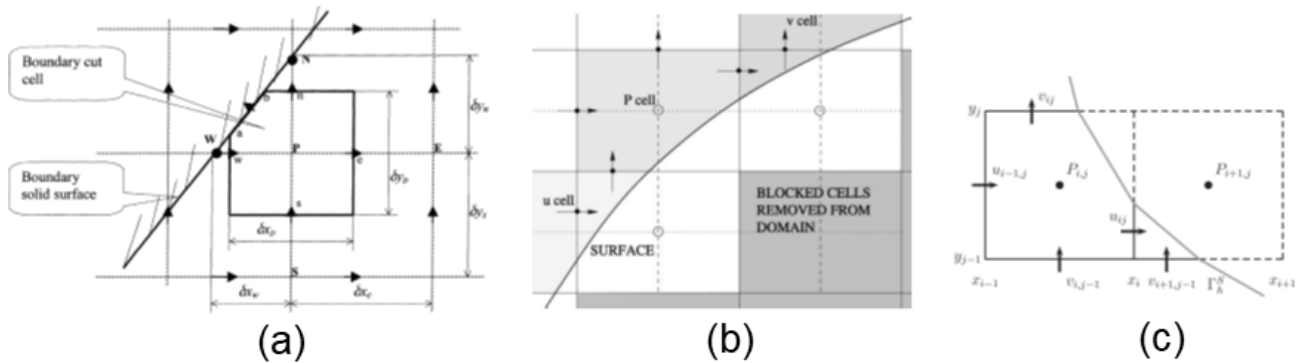


FIGURE 6.6 – CVs décalés pour $u_{i,j}$ considérés dans : [153] (a); [85] (b); [29] (c).

6.4 Les méthodes numériques *symmetry-preserving* pour la simulation de fluides incompressibles

L'intérêt des méthodes numériques qui préservent au sens discret les invariants des systèmes dynamiques a été reconnu dès la fin des années 50 [125]. Portant sur l'équation de la dynamique des tourbillons, les travaux d'Akiyo Arakawa [10, 89] ont montré que ces méthodes permettaient d'effectuer une intégration en temps du système plus longue que les méthodes traditionnelles. Pour les équations de Navier-Stokes en variables primitives, l'utilisation de l'arrangement décalé (*staggered*) des inconnues de vitesse et pression dans la méthode *MAC* de Harlow et Welch [67] a permis de conserver les invariants globaux d'un écoulement tels la masse, la quantité de mouvement et l'énergie cinétique totale. La méthode *MAC* était initialement formulée pour une discrétisation différence-finie au seconde ordre sur maillages cartésiens uniformes et, pour des maillages non-uniformes et des approximations d'ordre supérieur, il faut attendre la fin des années 90 pour que des discrétisations différences-finies [108, 33, 163, 66] et volumes-finies [165, 166] soient proposées, où elles ont notamment montré leur succès pour la simulation de turbulence par DNS¹ et LES². Ces études ont ouvert la voie à de nombreuses extensions aux méthodes numériques sur maillages non-structurés, pour des applications aux géométries complexes (voir les revues récentes [121, 86, 41, 164]). Ces méthodes numériques souvent qualifiées de *physically-consistent* [41], *physics-compatible* [86], *energy-conserving* [140], mais nous retiendrons dans ce manuscrit le terme de méthodes *symmetry preserving* utilisé par Verstappen et Veldman [166], car ces méthodes reproduisent sur la plan discret les propriétés de symétrie fondamentales des équations du mouvement. La méthode *symmetry preserving* de [166], qui étend les propriétés de la méthode *MAC* aux maillages cartésiens non-uniformes, est le point de départ de la méthode de cut-cells LS-STAG.

Dans cette partie, après avoir formulé les invariants globaux des équations de Navier-Stokes, nous considérerons le problème modèle de l'équation de transport scalaire, pour laquelle nous examinerons la conservation discrète des invariants primaires (la "quantité de mouvement" totale) et secondaires (l'"énergie cinétique" totale). Cela nous conduira à introduire le maillage *MAC* sur lequel repose la méthode LS-STAG, et de présenter les conditions que doit respecter la discrétisation de l'équation de transport pour conserver ces invariants sur cellules non-uniformes. Cette exemple sera suivi par l'énoncé des conditions portant sur les divers termes des équations de Navier-Stokes pour vérifier discrètement les invariants globaux. La méthode LS-STAG qui sera présentée dans le chapitre suivant est construite de façon que la discrétisation des divers termes des équations de Navier-Stokes (convection, diffusion, gradient de pression) vérifient ces conditions dans les cut-cells.

1. Direct Numerical Simulation : simulation numérique directe.

2. Large Eddy Simulation : Simulation aux grandes échelles.

6.4.1 Les invariants globaux des équations de Navier-Stokes

Dans le domaine fluide Ω , les invariants d'un écoulement sont la masse totale :

$$\dot{m} \equiv \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{v} \, dV, \quad (6.21a)$$

la quantité de mouvement totale :

$$\mathbf{P}(t) \equiv \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \, dV, \quad (6.21b)$$

et dans le cas limite d'un fluide non-visqueux, l'énergie cinétique totale :

$$E_c(t) \equiv \frac{\rho}{2} \int_{\Omega} |\mathbf{v}|^2 \, dV. \quad (6.21c)$$

La masse et la quantité de mouvement totale sont appelés invariants primaires de l'écoulement car leur loi de conservation dérive simplement de l'intégration dans le domaine fluide des équations de Navier-Stokes (6.3) écrites sous sa forme "divergence", telle que le taux de variation temporelle est régit par la divergence d'un vecteur flux. L'invariant quadratique (6.21c) est appelé invariant secondaire car sa loi de conservation est obtenue après manipulation algébrique des équations de mouvement [121, 41]. Ces lois de conservation, du point de vue continu et discret, seront examinées dans la section 6.4.3. Nous pouvons néanmoins énoncer que, si les conditions aux limites sont négligées, toute méthode numérique conserve ces invariants si elle vérifie la *propriété de conservation locale des flux* sur les faces des cellules. Par contre, il se révélera être plus délicat de construire une méthode numérique préservant un invariant quadratique comme l'énergie cinétique. Pour ce faire nous suivons la démarche de Verstappen et Veldman [166], basée sur une approximation centrée *symmetry preserving* du terme convectif.

6.4.2 Lois de conservation discrètes pour l'équation de transport

Considérons comme modèle l'équation de transport pour un scalaire passif ϕ dans un écoulement stationnaire incompressible, telle que la vitesse de convection \mathbf{v} vérifie l'équation de continuité (6.1). Avec cette hypothèse, l'équation de bilan peut s'exprimer de façon équivalente sous sa forme "divergence" :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} \phi = 0, \quad (6.22)$$

et sa forme "convective" :

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \phi = 0. \quad (6.23)$$

Nous allons comparer les propriétés de la discrétisation de ces 2 équations dans le maillage cartésien non-uniforme représenté sur la figure 6.7, en supposant que les conditions d'adhérence et non pénétration ($\mathbf{v} = 0$, $\phi = 0$) sont imposées sur la paroi *North* Γ_N et *South* Γ_S du domaine Ω . La quantité ϕ est discrétisée au centre des cellules $\Omega_{i,j}$, tandis que la vitesse est placée au centre des faces de la cellule. Cette arrangement des variables est le prototype de l'arrangement décalé de Harlow & Welch [67]

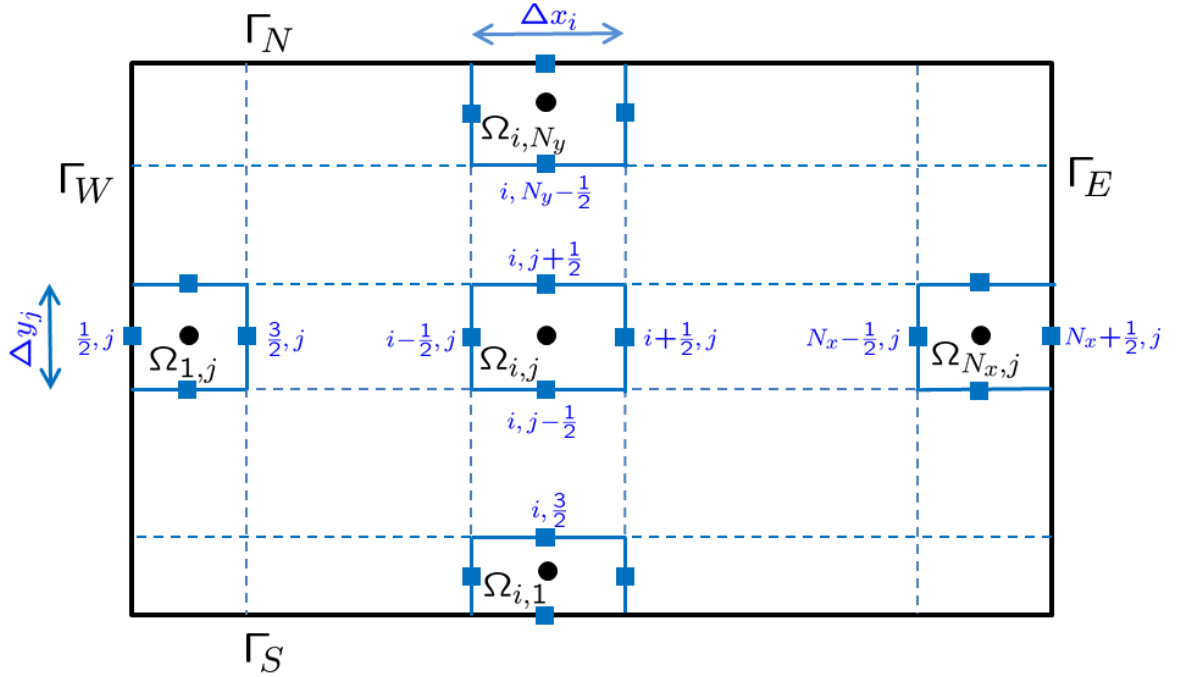


FIGURE 6.7 – Notations utilisées pour la discrétisation de l'équation de transport scalaire sur maillage cartésien non-uniforme. Les pas du maillage dans chaque direction sont notés $\Delta x_i, \Delta y_j$. Les parois du domaine de calcul Ω sont décomposés comme $\Gamma_E \cup \Gamma_W \cup \Gamma_N \cup \Gamma_S$.

pour la discrétisation des équations de Navier-Stokes incompressibles. Sur ce maillage, l'équation de continuité (6.1) est naturellement discrétisée comme :

$$\Delta y_j (u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}) + \Delta x_i (v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}) = 0. \quad (6.24)$$

Cette équation discrète peut être obtenue aussi bien par une méthode de différences finies ou volumes finies [74], et possède la propriété importante de *conservation locale des flux*, qui assure que la discrétisation dans 2 cellules voisines donne lieu à une approximation unique du flux massique $\int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS$ sur leur face commune par la quadrature du point milieu, par exemple $\int_{\Gamma_{i+\frac{1}{2},j}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS \simeq u_{i+\frac{1}{2},j} \Delta y_j$.

La discrétisation de la forme divergence (6.22) dans la cellule $\Omega_{i,j}$, notée $\text{DIV}(\Omega_{i,j})$, s'écrit :

$$\text{DIV}(\Omega_{i,j}) \equiv \Delta y_j (u_{i+\frac{1}{2},j} \phi_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j} \phi_{i-\frac{1}{2},j}) + \Delta x_i (v_{i,j+\frac{1}{2}} \phi_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}} \phi_{i,j-\frac{1}{2}}) = 0. \quad (6.25)$$

La discrétisation doit être complétée par l'interpolation au centre des cellules des données aux faces $\phi_{i+\frac{1}{2},j}$, $\phi_{i,j+\frac{1}{2}}$, qui peut être de type centrée ou décentrée, mais qui à ce stade n'a pas besoin d'être explicitée.

La discrétisation (notée $\text{CONV}(\Omega_{i,j})$) de la forme convective (6.23) s'écrit par exemple :

$$\text{CONV}(\Omega_{i,j}) \equiv \Delta y_j u_{i,j} (\phi_{i+\frac{1}{2},j} - \phi_{i-\frac{1}{2},j}) + \Delta x_i v_{i,j} (\phi_{i,j+\frac{1}{2}} - \phi_{i,j-\frac{1}{2}}) = 0, \quad (6.26a)$$

en posant :

$$u_{i,j} \equiv \frac{1}{2} u_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{1}{2} u_{i-\frac{1}{2},j}, \quad v_{i,j} \equiv \frac{1}{2} v_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} v_{i,j-\frac{1}{2}}. \quad (6.26b)$$

Les schémas (6.26) et (6.26) conduisent à 2 discrétisations distinctes d'une même équation de bilan, du même ordre de précision (formellement au second-ordre si une interpolation au second-ordre des données $\phi_{i+\frac{1}{2},j}$ et $\phi_{i,j+\frac{1}{2}}$ est utilisée), et qui ne coïncident que si la vitesse de convection est constante. La distinction majeure entre ces 2 discrétisations est le respect des lois de conservation globales de l'écoulement.

Considérons en premier lieu la loi de conservation de l'invariant primaire $\int_{\Omega} \phi dV$, qui est l'analogue de la quantité de mouvement totale (6.21b). Cette loi est obtenue en intégrant l'intégration de transport (6.22) dans le domaine Ω :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{v} \phi dV = \int_{\Gamma_E \cup \Gamma_W \cup \Gamma_N \cup \Gamma_S} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \phi dS = 0,$$

et, utilisant les conditions aux limites sur les parois *North* et *South*, conduit à une relation de compatibilité reliant la solution aux parois *East* et *West* :

$$- \int_{\Gamma_W} u \phi dy + \int_{\Gamma_E} u \phi dy = 0. \quad (6.27)$$

Un équivalent discret de cette relation de compatibilité est obtenu en sommant les schémas (6.25) et (6.26) sur l'ensemble des cellules du maillage. Pour le schéma $\text{DIV}(\Omega_{i,j})$, les termes apparaissant aux faces intérieures s'annulent 2 à 2 pour ne laisser que des termes aux parois *East* $(\frac{1}{2}, j)$ et *West* $(N_x + \frac{1}{2}, j)$ du domaine :

$$\sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \text{DIV}(\Omega_{i,j}) = - \sum_{j=1}^{N_y} \Delta y_j u_{\frac{1}{2},j} \phi_{\frac{1}{2},j} + \sum_{j=1}^{N_y} \Delta y_j u_{N_x+\frac{1}{2},j} \phi_{N_x+\frac{1}{2},j}, \quad (6.28)$$

qui correspondent directement à une discrétisation de la condition de compatibilité (6.27) par la quadrature composite du point milieu. Un calcul similaire peut être mené pour le schéma $\text{CONV}(\Omega_{i,j})$, et conduit à :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \text{CONV}(\Omega_{i,j}) = & - \sum_{j=1}^{N_y} \Delta y_j u_{1,j} \phi_{\frac{1}{2},j} + \sum_{j=1}^{N_y} \Delta y_j u_{N_x,j} \phi_{N_x+\frac{1}{2},j} \\ & + \sum_{j=1}^{N_y} \Delta y_j \sum_{i=2}^{N_x-1} (u_{i,j} - u_{i+1,j}) \phi_{i+\frac{1}{2},j} + \sum_{i=1}^{N_x} \Delta x_i \sum_{j=2}^{N_y-1} (v_{i,j} - v_{i,j+1}) \phi_{i,j+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (6.29)$$

Les 2 premiers termes du membre de droite correspondent à une somme sur les parois *East* et *West*, qui peut être vu comme une discrétisation en $\mathcal{O}(\Delta x/2)$ de la condition de compatibilité (6.27). En l'absence de la propriété de conservation locale des flux, les 2 derniers termes de l'équation correspondent à des termes sources artificiels dans chaque cellule $\Omega_{i,j}$, qui sont de l'ordre de l'erreur de troncature du schéma, mais qui peuvent néanmoins donner de larges erreurs numériques pour des équations de transport non-linéaires [74].

En résumé, nous pouvons énoncer que les invariants linéaires sont conservés par une méthode numérique si :

- La propriété de conservation locale des flux est vérifiée,
- Les conditions aux limites sont correctement implémentés dans le schéma, de façon qu’une relation de compatibilité telle que (6.28) soit vérifiée.

Cette dernière propriété est souvent négligée dans la littérature, car pour un maillage *body fitted* la discrétisation conventionnelle des flux sur la face solide des cellules conduit à une approximation consistante de la relation de compatibilité. Par contre, elle est particulièrement pertinente pour les méthodes de cut-cells, où les faces solides des cellules ne sont pas alignées avec les parois du domaine. Pour la méthode LS-STAG, le chapitre 7.5.2 présentera notamment une discrétisation des flux diffusifs sur la paroi solide des cut-cells qui sera consistante avec la force hydrodynamique sur la frontière solide.

Il est à noter que pour la méthode $\text{DIV}(\Omega_{i,j})$, les invariants linéaires sont exactement conservés quel que soit le type d’interpolation (centrée ou décentrée) utilisée. Pour cette raison, les méthodes numériques qui utilisent la forme divergence des équations de bilan, telles la méthode des volumes finis, sont souvent qualifiées de “conservative” [74]. Néanmoins, la conservation des invariants secondaires n’est pas observée par toute les schémas dits “conservatifs”. Examinons maintenant la conservation de l’“énergie” $\int_{\Omega} \frac{1}{2} \phi^2 dV$, dont l’équation de conservation est obtenue par manipulation de (6.22) comme :

$$\int_{\Omega} \phi \nabla \cdot \mathbf{v} \phi dV = \int_{\Omega} \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} \mathbf{v} \phi^2 \right) dV = 0, \quad (6.30)$$

ce qui conduit à la relation de compatibilité :

$$- \int_{\Gamma_W} \frac{1}{2} u \phi^2 dy + \int_{\Gamma_E} \frac{1}{2} u \phi^2 dy = 0. \quad (6.31)$$

Pour le schéma $\text{DIV}(\Omega_{i,j})$, la contrepartie discrète de cette loi de conservation est obtenue en sommant sur toutes les cellules le produit de (6.25) avec $\phi_{i,j}$:

$$\sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \phi_{i,j} \text{DIV}(\Omega_{i,j}) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \Delta y_j \phi_{i,j} \left(u_{i+\frac{1}{2},j} \phi_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j} \phi_{i-\frac{1}{2},j} \right) + \Delta x_i \phi_{i,j} \left(v_{i,j+\frac{1}{2}} \phi_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}} \phi_{i,j-\frac{1}{2}} \right). \quad (6.32)$$

Afin de simplifier cette expression, il est nécessaire de préciser l’interpolation de ϕ au centre des cellules, en posant :

$$\phi_{i+\frac{1}{2},j} = \alpha_{i+\frac{1}{2}}^x \phi_{i,j} + \left(1 - \alpha_{i+\frac{1}{2}}^x \right) \phi_{i+1,j}, \quad \phi_{i,j+\frac{1}{2}} = \alpha_{j+\frac{1}{2}}^y \phi_{i,j} + \left(1 - \alpha_{j+\frac{1}{2}}^y \right) \phi_{i,j+1}, \quad (6.33)$$

où les réels $\alpha_{i+\frac{1}{2}}^x, \alpha_{j+\frac{1}{2}}^y \in [0, 1]$ sont des poids de décentrage. Un exemple important est l’interpolation centrée, telle que les poids :

$$\alpha_{i+\frac{1}{2}}^x = \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}, \quad \alpha_{j+\frac{1}{2}}^y = \frac{\Delta y_{j+1}}{\Delta y_j + \Delta y_{j+1}}, \quad (6.34)$$

donnent une erreur de troncature d’ordre 2 sur maillage non-uniforme, et qui sur maillage uniforme devient simplement $\alpha_{i+\frac{1}{2}}^x = \alpha_{j+\frac{1}{2}}^y = \frac{1}{2}$. Après factorisation des termes quadratiques, le bilan d’énergie

cinétique (6.32) s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \phi_{i,j} \text{DIV}(\Omega_{i,j}) = & - \sum_{j=1}^{N_y} \Delta y_j u_{\frac{1}{2},j} \phi_{1,j} \left[\phi_{\frac{1}{2},j} - \left(1 - \alpha_{\frac{1}{2}}^x\right) \phi_{1,j} \right] \\
 & + \sum_{j=1}^{N_y} \Delta y_j u_{N_x+\frac{1}{2},j} \phi_{N_x,j} \left[\phi_{N_x+\frac{1}{2},j} - \alpha_{N_x+\frac{1}{2}}^x \phi_{N_x,j} \right] \\
 & + \sum_{j=1}^{N_y} \Delta y_j \sum_{i=2}^{N_x-1} \left(1 - 2\alpha_{i+\frac{1}{2}}^x\right) u_{i+\frac{1}{2},j} \phi_{i,j} \phi_{i+1,j} \\
 & + \sum_{i=1}^{N_x} \Delta x_i \sum_{j=2}^{N_y-1} \left(1 - 2\alpha_{j+\frac{1}{2}}^y\right) v_{i,j+\frac{1}{2}} \phi_{i,j} \phi_{i,j+1} \\
 & + \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \dot{m}_{i,j} \phi_{i,j}^2,
 \end{aligned} \tag{6.35}$$

en posant :

$$\dot{m}_{i,j} \equiv \Delta y_j \left[\alpha_{i+\frac{1}{2}}^x u_{i+\frac{1}{2},j} - \left(1 - \alpha_{i-\frac{1}{2}}^x\right) u_{i-\frac{1}{2},j} \right] + \Delta x_i \left[\alpha_{j+\frac{1}{2}}^y v_{i,j+\frac{1}{2}} - \left(1 - \alpha_{j-\frac{1}{2}}^y\right) v_{i,j-\frac{1}{2}} \right] \tag{6.36}$$

Comme pour la conservation de l'invariant linéaire (Eq. (6.28)), les 2 premiers termes de cette forme quadratique correspondent à une relation de compatibilité discrète entre les parois *East* et *West*, et les 3 suivants correspondent à un terme source dans chaque cellule du maillage, qu'il convient d'annuler afin de conserver l'énergie cinétique.

Les seuls poids de décentrage qui annulent le troisième et quatrième terme de la forme quadratique (6.35) sont :

$$\alpha_{i+\frac{1}{2}}^x = \alpha_{j+\frac{1}{2}}^y = \frac{1}{2}, \tag{6.37}$$

sur toutes les faces intérieures du maillage. Ce choix de poids permet ensuite d'annuler le cinquième terme de (6.35), car dans ce cas l'expression de $\dot{m}_{i,j}$ correspond à la divergence discrète (6.24). La relation de compatibilité discrète devient alors :

$$- \sum_{j=1}^{N_y} \Delta y_j u_{\frac{1}{2},j} \phi_{1,j} \left[\phi_{\frac{1}{2},j} - \frac{1}{2} \phi_{1,j} \right] + \sum_{j=1}^{N_y} \Delta y_j u_{N_x+\frac{1}{2},j} \phi_{N_x,j} \left[\phi_{N_x+\frac{1}{2},j} - \frac{1}{2} \phi_{N_x,j} \right] = 0, \tag{6.38}$$

qui correspond à une discrétisation en $\mathcal{O}(\Delta x/2)$ de la relation de compatibilité (6.31).

Ce calcul montre que seule la méthode centrée avec interpolation à poids égaux $\frac{1}{2} - \frac{1}{2}$ permet de conserver l'énergie cinétique : il est bien connu que les discrétisations décentrées (*upwind*) dissipent l'énergie par le biais de la dissipation artificielle. Néanmoins, il est à préciser que l'interpolation $\frac{1}{2} - \frac{1}{2}$ donne une erreur de troncature au second ordre sur maillage uniforme uniquement : dans le cadre des équations de Navier-Stokes, un exemple classique est donné par la méthode *MAC* [67]. Verstappen et Veldman [166] ont ensuite utilisé l'interpolation $\frac{1}{2} - \frac{1}{2}$ pour construire la discrétisation *symmetry preserving* qui étend la méthode *MAC* aux maillages non-uniformes. Même si formellement l'ordre de précision au second-ordre est perdu, ces auteurs ont montré dans [165, 166] la haute fidélité de

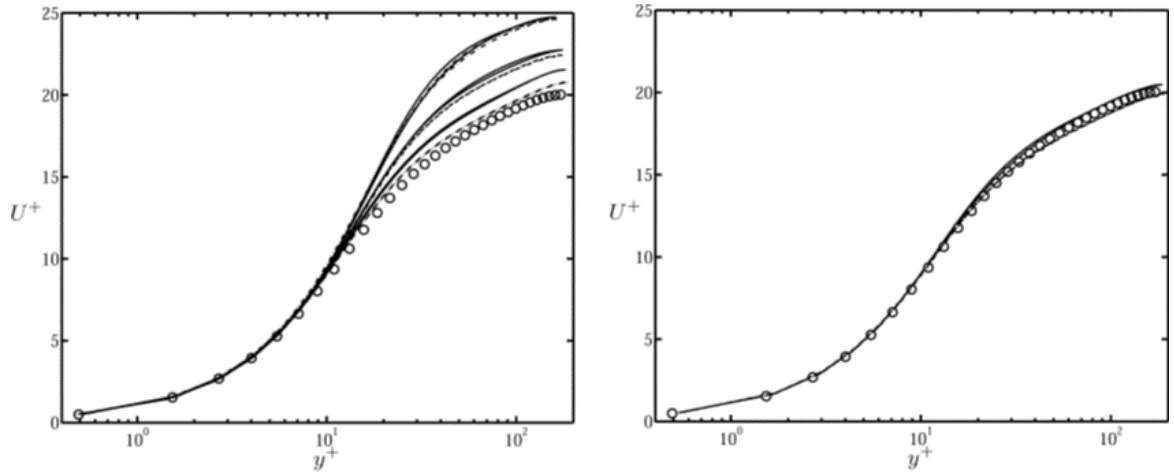


FIGURE 6.8 – Profils de vitesse moyen pour l’écoulement turbulent dans un canal à $Re_\tau = 180$ (d’après [36]). A gauche : comparaison des profils obtenus avec le code de calcul LES *symmetry preserving* du CTR (cercles) et ceux obtenus avec un code *upwind* d’ordre 5, 7 et 9 (de haut en bas) par modèle LES (traits pleins) et par DNS (tirets). A droite : profils obtenus avec le code *upwind* d’ordre 11 et le code LES *symmetry preserving*.

leur discrétisation pour la DNS d’écoulements turbulents canoniques. Une discussion récente de cette interpolation sur maillages non-structurés est donnée dans [164].

La conservation de l’énergie cinétique discrète est reconnue comme apportant une fidélité supérieure à la simulations numérique des écoulements turbulents : de nombreuses applications sont présentées dans [107, 41]. Un exemple classique est représentée par la comparaison réalisée dans [36] pour l’écoulement turbulent dans un canal plan, où une méthode centrée *symmetry-preserving* du second-ordre est comparée à des méthodes décentrées d’ordre élevé. La figure 6.8 montre que la méthode *symmetry-preserving* capture avec précision le comportement logarithmique de la vitesse dans la couche limite, tandis que les méthodes décentrées ont tendance à surestimer le profil de vitesse. L’effet de la dissipation numérique due au décentrage s’atténue néanmoins lorsque l’ordre de précision augmente. Cependant, seule la méthode décentrée d’ordre 11 permet de retrouver des résultats comparables à ceux de la méthode *symmetry-preserving*.

6.4.3 Lois de conservation discrètes pour les équations de Navier-Stokes

Pour les équations de la mécanique des fluides, l’analyse des propriétés de conservation des schémas numériques est grandement facilité en adoptant le formalisme d’opérateurs matriciels, en reconnaissant par exemple que le bilan d’énergie cinétique totale (6.30) peut se réécrire sous la forme :

$$\mathcal{A}_v(\phi, \phi) = 0, \quad (6.39)$$

où l’opérateur bilinéaire $\mathcal{A}_v(\cdot, \cdot)$, qui est défini par :

$$\mathcal{A}_v : (\psi, \phi) \mapsto \int_{\Omega} \psi \nabla \cdot (\mathbf{v}\phi) \, dV = 0, \quad (6.40)$$

possède la propriété d'antisymétrie (*skew-symmetry*) :

$$\mathcal{A}_v(\psi, \phi) = -\mathcal{A}_v(\phi, \psi). \quad (6.41)$$

D'une façon analogue, le bilan d'énergie discret (6.35) peut s'écrire sous la forme matricielle (en négligeant les contributions aux parois) :

$$\Phi^T \mathcal{A}_h[\bar{U}] \Phi = 0, \quad (6.42)$$

où le vecteur Φ contient les inconnues $\phi_{i,j}$ et $\mathcal{A}_h[\bar{U}]$ est la matrice carrée dont les coefficients sont donnés par la forme quadratique (6.35). En utilisant des notations géographiques [55], les 5 coefficients non nuls de cette matrice sont :

$$\mathcal{A}_h[\bar{U}]_E(i, j) = (1 - \alpha_{i+\frac{1}{2}}^x) \bar{u}_{i+\frac{1}{2},j}, \quad \mathcal{A}_h[\bar{U}]_W(i, j) = -\alpha_{i-\frac{1}{2}}^x \bar{u}_{i-\frac{1}{2},j}, \quad (6.43a)$$

$$\mathcal{A}_h[\bar{U}]_N(i, j) = (1 - \alpha_{j+\frac{1}{2}}^y) \bar{v}_{i,j+\frac{1}{2}}, \quad \mathcal{A}_h[\bar{U}]_S(i, j) = -\alpha_{j-\frac{1}{2}}^y \bar{v}_{i,j-\frac{1}{2}} \quad (6.43b)$$

$$\mathcal{A}_h[\bar{U}]_P(i, j) = \dot{m}_{i,j}, \quad (6.43c)$$

en notant avec des barres les débits massiques au travers des faces de la cellule $\Omega_{i,j}$, par exemple : $\bar{u}_{i+\frac{1}{2},j} \equiv \Delta y_j u_{i+\frac{1}{2},j}$. Avec ces notations, l'énergie cinétique discrète est vérifiée si $\mathcal{A}_h[\bar{U}]$ est antisymétrique :

$$\mathcal{A}_h[\bar{U}] = -\mathcal{A}_h[\bar{U}]^T, \quad (6.44)$$

ce qui, bien sûr, conduit à l'interpolation $\frac{1}{2} - \frac{1}{2}$ (6.37) du terme convectif. Ainsi, l'examen des propriétés de conservation d'un schéma numérique revient à considérer les propriétés de symétries de chacun termes des équations [166, 41]. C'est ce formalisme qui a été adopté depuis la thèse de Y. Cheny [Th1], et que nous reprenons dans la suite de ce chapitre.

Conservation des invariants linéaires : masse et quantité de mouvement

Les lois de conservation pour la masse totale (6.21a) et la quantité de mouvement totale (6.21b) sont obtenues après intégration des équations de Navier-Stokes (6.17) et (6.18) dans le domaine fluide Ω^f :

$$\dot{m} = \int_{\Omega^f} \nabla \cdot \mathbf{v} \, dV = \int_{\Gamma_{ib}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = 0, \quad (6.45a)$$

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = - \int_{\Gamma_{ib}} \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS - \mathbf{F}, \quad (6.45b)$$

où $\mathbf{F} = (F_x, F_y, F_z)$ représente la force hydrodynamique agissant sur la frontière immergée Γ_{ib} , telle que ses composantes sont données par :

$$F_x = \int_{\Gamma_{ib}} [p - \eta \dot{\gamma}_{xx}] \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Gamma_{ib}} \eta \dot{\gamma}_{xy} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Gamma_{ib}} \eta \dot{\gamma}_{xz} \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n} \, dS, \quad (6.46a)$$

$$F_y = \int_{\Gamma_{ib}} [p - \eta \dot{\gamma}_{yy}] \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Gamma_{ib}} \eta \dot{\gamma}_{xy} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Gamma_{ib}} \eta \dot{\gamma}_{yz} \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n} \, dS, \quad (6.46b)$$

$$F_z = \int_{\Gamma_{ib}} [p - \eta \dot{\gamma}_{zz}] \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Gamma_{ib}} \eta \dot{\gamma}_{xz} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Gamma_{ib}} \eta \dot{\gamma}_{yz} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \, dS. \quad (6.46c)$$

La contrepartie discrète de ces lois de conservation sera examinée dans le cas d'une viscosité constante pour un schéma numérique qui s'écrit sous la forme matricielle :

$$\mathcal{D}U + \bar{U}^{\text{ib}} = 0, \quad (6.47a)$$

$$\rho \frac{d}{dt}(\mathcal{M}U) + \rho (\mathcal{C}[\bar{U}]U + S^{\text{ib},c}) + \mathcal{G}P - \eta (\mathcal{K}U + S^{\text{ib},v}) = 0, \quad (6.47b)$$

où les vecteurs U et P représentent les inconnues de vitesse et pression, \mathcal{D} est la matrice représentant l'opérateur de divergence discrète, la matrice de masse (diagonale) \mathcal{M} est construite à partir des volumes des cellules fluides, la matrice $\mathcal{C}[\bar{U}]$ et \mathcal{K} représente la discrétisation des termes convectifs et diffusifs, et \mathcal{G} est le gradient de pression discret. En outre, les vecteurs \bar{U}^{ib} , $S^{\text{ib},c}$ et $S^{\text{ib},v}$ représentent les termes de bord pour le débit massique et les flux convectifs et diffusifs, respectivement.

Dans sa thèse [Th1], Y. Cheny a établi la loi de conservation discrète des invariants primaires pour une méthode de cut-cell basée sur l'arrangement décalé MAC représenté sur la figure 6.4. Comme dans l'exemple de la section précédente, ces lois discrètes sont obtenues en sommant le schéma numérique sur toutes les cellules du maillage, ce qui formellement correspond à multiplier les équations (6.47a) et (6.47b) par le vecteur unitaire $\mathbf{1}^T$. Par application de la conservation locale des flux discrets, la masse totale est trivialement conservée, et la conservation de la quantité de mouvement totale conduit aux conditions suivantes sur les flux discrets à la face solide des cut-cells :

- le terme $\rho \mathbf{1}^T \mathcal{C}[\bar{U}]U + \rho \mathbf{1}^T S^{\text{ib},c}$ doit correspondre à la discrétisation des forces d'inertie $\int_{\Gamma^{\text{ib}}} \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS$ sur la frontière immergée,
- le terme $\mathbf{1}^T \mathcal{G}P - \mathbf{1}^T \eta (\mathcal{K}U + S^{\text{ib},v})$ doit correspondre à la discrétisation des forces hydrodynamiques (6.46).

Conservation de l'énergie cinétique totale

La loi de conservation de l'énergie cinétique totale (6.21c) est établie en multipliant l'équation de quantité de mouvement (6.2) par \mathbf{v} et en intégrant sur le domaine fluide. Après application de diverses identités algébriques, on obtient :

$$\frac{dE_c}{dt} = \int_{\Omega^f} \left[\left(\frac{\rho |\mathbf{v}|^2}{2} + p \right) \nabla \cdot \mathbf{v} - \eta |\nabla \mathbf{v}|^2 \right] dV - \int_{\Gamma^{\text{ib}}} \left(\frac{\rho |\mathbf{v}|^2}{2} + p - \eta \nabla \mathbf{v} \right) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS. \quad (6.48)$$

Grâce à l'équation de continuité (6.1), le seul terme restant dans l'intégrale volumique représente la dissipation visqueuse par unité de volume qui est toujours négatif (ou nulle pour un fluide parfait). Les termes présents dans l'intégrale surfacique montrent que la pression et le terme convectif influencent uniquement le bilan d'énergie cinétique par leur action sur les parois du domaine.

La contrepartie discrète du bilan d'énergie cinétique, obtenue par manipulation de l'équation de quantité de mouvement discrète (6.47b), s'écrit [Th1] :

$$\frac{dE_c^h}{dt} = -\rho U^T \frac{\mathcal{C}[\bar{U}]^T + \mathcal{C}[\bar{U}]}{2} U - P^T \mathcal{G}^T U - U^T \frac{\eta (\mathcal{K}^T + \mathcal{K})}{2} U - \rho U^T S^{\text{ib},c} + \eta U^T S^{\text{ib},v}. \quad (6.49)$$

La comparaison de ce bilan discret et le bilan continu (6.48) de l'énergie cinétique nous permet d'énoncer les conditions que doivent vérifier la discrétisation des différents termes des équations de Navier-Stokes :

- la matrice des termes convectifs doit être antisymétrique :

$$\mathcal{C}[\bar{U}] = -\mathcal{C}[\bar{U}]^T. \quad (6.50)$$

- Le gradient de pression discret doit être le dual de l'opérateur divergence :

$$\mathcal{G} = -\mathcal{D}^T, \quad (6.51)$$

- La matrice représentant les termes visqueux $\mathcal{K}^T + \mathcal{K}$ doit être $\mathcal{K}^T + \mathcal{K}$ définie positive.

Les relations (6.50) et (6.51), ainsi que les conditions sur les flux convectif et diffusif à la paroi donnés par la conservation de la quantité de mouvement, vont permettre dans le chapitre suivant de guider la discrétisation LS-STAG dans les cellules cartésiennes et les cut-cells. Par contre, la condition sur la positivité de la matrice de diffusion doit être effectuée par une analyse mathématique *a posteriori* de la stabilité de la discrétisation [51]. Cette analyse a été réalisée notamment dans [58] pour la méthode MAC sur cellules cartésiennes mais, en raison de la forme complexe que peuvent prendre les cut-cells, une telle analyse se révèle beaucoup plus délicate pour une méthode de cut-cells et n'a à notre connaissance pas encore été effectuée.

Il est à préciser que, comme la plupart des travaux cités dans cette section, le développement de la méthode LS-STAG s'est appuyé sur les propriétés de conservation semi-discrètes, où l'influence de la discrétisation temporelle est ignorée. Une revue récente des schémas d'intégration en temps permettant de conserver l'énergie cinétique totale (ou réduire sa perte) est donnée dans [41], et nous discuterons dans le chapitre 9 portant sur les perspectives le développement de ce type de schémas pour la méthode LS-STAG.

6.5 Chronologie du développement de la méthode LS-STAG

Mes travaux sur la méthode LS-STAG ont commencé avec le début de la thèse de Y. Cheny [Th1] en octobre 2005. Depuis cette date, deux autres thèses (F. Nikfarjam [Th2] et B. Portelenelle [Th3]) et une série de publications ([A8]-[A13], [B5]-[B14]) ont contribué au développement de la méthode. A l'issue de la thèse de B. Portelenelle en novembre 2019, ces travaux ont notamment permis de construire discrétisation précise et algorithmiquement efficace pour le calculs d'écoulements en géométries totalement 3D.

A posteriori, il apparaît clairement que le développement de la méthode LS-STAG s'articule autour de deux étapes importantes :

TAG/2PT : Il s'agit de la méthode originale développée dans la thèse de Y. Cheny [Th1], qui utilise une approximation à 2 points (2PT) des contraintes tangentielles (6.6b) des équations de Navier-Stokes.

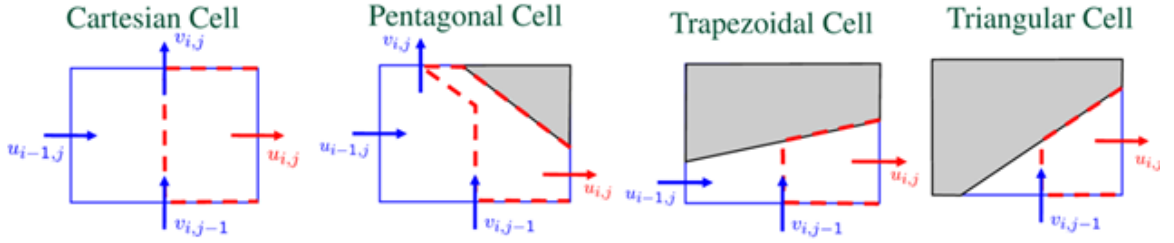


FIGURE 6.9 – Cellule cartésienne et 3 types de cut-cells génériques pour les maillages 2D. Les frontières du 1/2 volume de contrôle pour $u_{i,j}$ sont représentés en traits pointillés rouges.

La discrétisation LS-STAG/2PT a originellement développée pour les cut-cells 2D (Fig. 6.9). Lorsqu'elle a été étendue aux cut-cells 3D-extrudées (Fig. 6.10) dans la thèse de F. Nikfarjam [Th2], les limites de l'approximation 2PT se sont pleinement révélées : une précision spatiale nettement insuffisante du terme diffusif, et une implémentation algorithmique beaucoup trop complexe pour être étendue avec succès aux cut-cells 3D, car la discrétisation du flux diffusif à la paroi doit être effectuée au cas par cas pour chaque type de cut-cells.

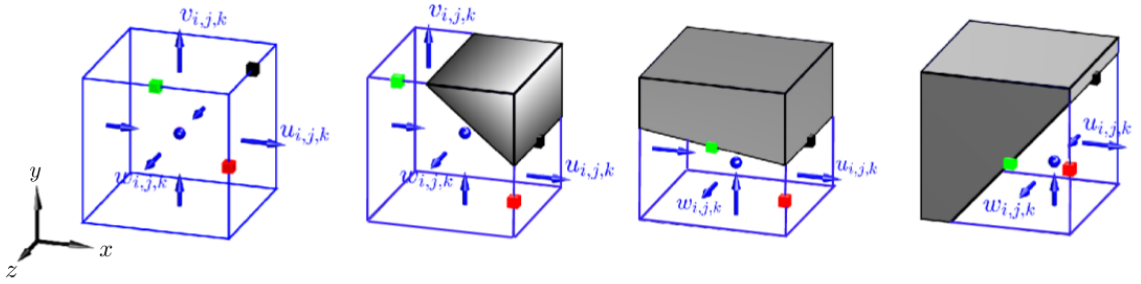


FIGURE 6.10 – Cellule cartésienne et 3 types de cut-cells génériques pour les maillages 3D-extrudés. Les composantes extra-diagonales de $\nabla \mathbf{v}$ sont positionnées aux centres des arêtes en 3D : $\frac{\partial u}{\partial y}$, $\frac{\partial v}{\partial x}$ (■), $\frac{\partial w}{\partial x}$, $\frac{\partial u}{\partial z}$ (■) et $\frac{\partial w}{\partial y}$, $\frac{\partial v}{\partial z}$ (■).

LS-STAG/DCM : Afin d'améliorer la précision de l'approximation 2PT des gradients de vitesse, la thèse de B. Portelenelle [Th3] a développé une version révisée de la méthode LS-STAG qui utilise les schémas diamants, dits DCM : *Diamond Cell method* [77, 42]. Cette approximation DCM a notamment permis de revisiter intégralement la discrétisation du flux diffusif de la méthode LS-STAG/2PT, où disparaît le traitement au cas par cas selon la disposition de la frontière solide dans les *cut-cells*. A l'issue de cette thèse, la méthode LS-STAG DCM a permis de construire une discrétisation systématique, précise et algorithmiquement efficace pour les cut-cells 3D de forme arbitraire.

6.5.1 La méthode LS-STAG/2PT

La discrétisation LS-STAG/2PT a pour point de départ la méthode cartésienne *symmetry-preserving* [166] discutée dans la section précédente, qui a été développée à l'université de Groningen par R. Verstappen

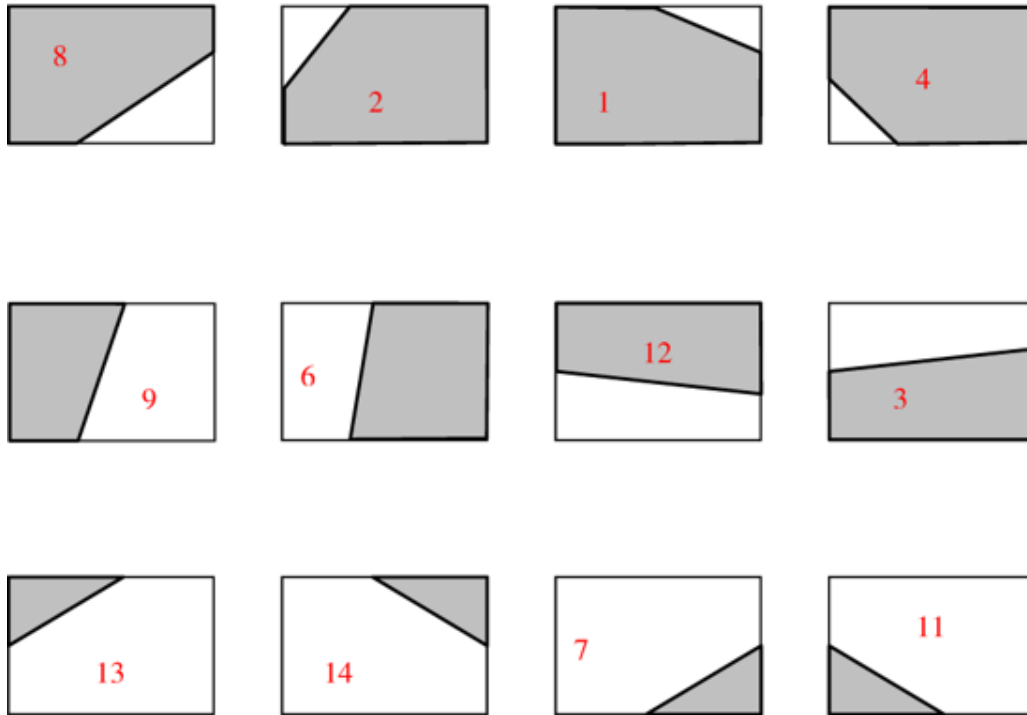


FIGURE 6.11 – Représentation des 12 différents types de cut-cells 2D.

et A. Veldman au début des années 2000. Cette équipe avait ensuite développé sa propre extension aux cut-cells 2D dans [50, 49], avant d'utiliser la discrétisation LS-STAG/2PT pour ses applications sur maillages 3D-extrudées [158, 160, 93, 157]. Dans la thèse de Y. Cheny [Th1], les conditions sur les invariants discrets de la section 6.4.3 sont utilisés pour construire une discrétisation dans les cut-cells 2D, dont toutes les configurations possibles sont représentées sur la figure 6.11. La discrétisation est grandement facilitée en reconnaissant qu'il suffit de ne construire la discrétisation pour les 3 types génériques de cut-cells représentés dans la figure 6.9 :

- Pentagonales (les 4 inconnues de vitesse sont présentes),
- Trapezoidale (seules 3 inconnues de vitesse sont présentes),
- Triangulaires (seules 2 inconnues de vitesse sont présentes),

et la discrétisation dans les autres cut-cells de la figure 6.11 est obtenue par rotation des 3 cut-cells génériques.

A ce stade, la première difficulté est de représenter le volume de contrôle (CV) pour les inconnues de vitesse, qui est formé par 2 demi-volumes de cellules contiguës. Comme mentionnée dans la section 6.3.2, la construction de ces CVs est naturelle pour un maillage cartésien, mais pour un maillage de cut-cell la forme exacte de certaines faces des CVs (et le volume exact du CV) ne peut qu'être définie arbitrairement, comme par exemple la face séparant les inconnues $u_{i-1,j}$ et $u_{i,j}$ de la cut-cell pentagonale de la figure 6.9. L'équipe de Groningen s'était heurtée à cette difficulté lorsque elle a présentée sa propre méthode de cut-cell *symmetry-preserving* [50, 49]. Au contraire, le principe de la

méthode LS-STAG présentée dans [Th1] est de construire une discrétisation pour chaque moitié de CV des 3 cellules génériques de la figure 6.9, de façon que chaque combinaison de 2 demi-CVs donne une discrétisation consistante qui vérifie les invariants discrets des équations de Navier-Stokes. Cette discrétisation était ensuite adaptée à chacune des 12 cut-cells de la figure 6.11, qui sont identifiées dans le code LS-STAG/2PT par un entier obtenu par représentation binaire des sommets fluides/solides de la cellule. Cette représentation *ad hoc* des cut-cells, adaptée de la représentation *staircase* des interfaces décrite dans [63], engendrait une complexité algorithmique non négligeable qui ne sera définitivement levée que dans le cadre de la méthode LS-STAG/DCM.

Cette formulation de la méthode LS-STAG, qui grâce à la discrétisation à 2 points (2PT) des gradients a la propriété de préserver la structure cartésienne à 5 points du stencil, a été appliquée aux écoulements laminaires et transitionnels dans des géométries fixes et mobiles ([A8-A9], [B5-B6]), et a été étendue à la simulation d'écoulements non-newtoniens, tels que les fluides pseudo-plastiques ([A10], [B9-B10]) et viscoélastiques ([A11], [B7-B8], [B11]). La méthode LS-STAG/2PT a été intégrée dans le code COMFLOW d'hydrodynamique navale de l'équipe de Groningen [160, 93, 157] : dans la thèse de H. Van der Heiden [158], elle a été appliquée à la simulation du ballotement-sloshing dans des vaisseaux offshore par méthode VOF-LES. La méthode LS-STAG/2PT a aussi été utilisée par l'équipe de I. Marshvesky de l'Université de Moscou-Bauman pour des problèmes d'aéroélasticité [96, 131, 95, 97] et de simulation de la turbulence [131, 132], ce qui illustre la versatilité de la méthode LS-STAG dans le domaine de la simulation en mécanique des fluides.

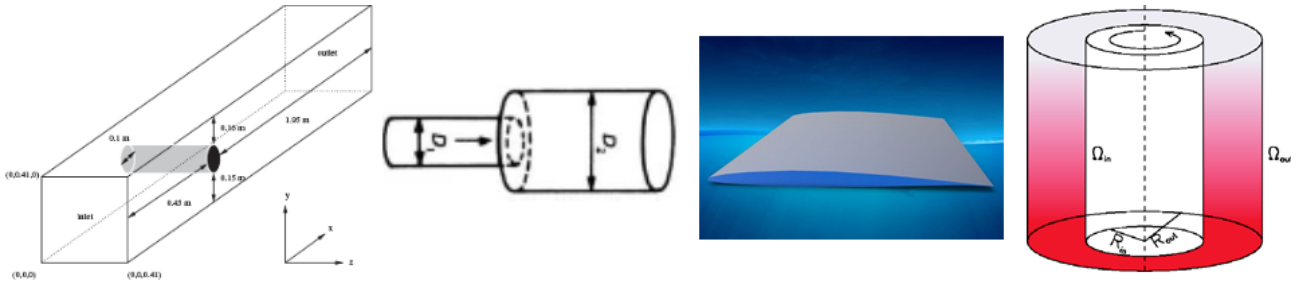


FIGURE 6.12 – Exemples de géométries canoniques 3D-extrudées en CFD.

En dépit des succès pour la simulation d'écoulements bidimensionnels, l'extension directe de la méthode aux géométries 3D se heurte à un défi majeur, qui sera plus amplement discuté dans le chapitre suivant : la discrétisation *ad hoc* dans les 12 types de cut-cells 2D se révèle algorithmiquement trop complexe pour être étendue avec succès aux nombreux types supplémentaires (108) de cut-cells 3D (*cf.* Fig. 6.13). Ce problème est contourné dans la thèse de F. Nikfarjam [Th2] en suivant l'approche du code COMFLOW de l'équipe de Groningen, qui considère uniquement des géométries 3D possédant une symétrie translationnelle dans la 3^{ème} direction, appelées géométries "3D-extrudées"). Dans le maillage d'une géométrie 3D-extrudée, qui concerne une grande variété d'écoulements canoniques en CFD (figure 6.12), on retrouve uniquement les analogues extrudés des 3 *cut-cells* 2D, ce qui a permis d'étendre directement la discrétisation LS-STAG à ces géométries et d'implémenter des lois de

comportement non-newtoniennes.

6.5.2 La méthode LS-STAG/DCM

A l'issue de la thèse de F. Nikfarjam, le code de calcul LS-STAG était entièrement parallélisé et optimisé, et permettait le calcul d'écoulements pseudo-plastiques et caloriporateurs en géométries 3D-extrudées. Ce travail a fait l'objet de plusieurs publications ([A12], [B12-B13]), mais a aussi souligné une difficulté supplémentaire dans le développement d'un code de calcul pour les cut-cells totalement 3D : la discrétisation des flux diffusifs par un simple schéma à deux points (2PT) se révèle insuffisamment précise dans les *cut-cells* 3D-extrudées. Considérons par exemple l'approximation 2PT du gradient normal à la face Est de la cut-cell $\Omega_{i,j,k}$, qui est noté $\partial w / \partial x|_e$ sur la figure 6.14 :

$$\frac{\partial w}{\partial x} \Big|_e \cong \frac{w_{i+1,j,k} - w_{i,j,k}}{\|\mathbf{d}\|}, \quad (6.52)$$

où \mathbf{d} est le vecteur joignant les deux centroïdes voisins. Cette formule perd sa précision au second ordre lorsque l'angle $\alpha = \text{mes}(\mathbf{n}_e, \mathbf{d})$ qui quantifie la non-orthogonalité des *cut-cells* devient grand ($\alpha = 0$ correspond à un maillage orthogonal). Pour les cut-cells totalement 3D, cette perte de précision apparaît pour toutes les composantes tangentielles (6.6b) du tenseur des déformations, mais n'est pas rencontrée dans les cut-cells 2D de la figure 6.9 où l'approximation 2PT des contraintes tangentielles est au second ordre.

Dans la thèse de B. Portelenelle [Th3], ce problème de précision est résolu en utilisant l'outil des schémas diamants (DCM : Diamond Cell Method) qui, à partir de la discrétisation du gradient complet de $w(\mathbf{x})$ dans la cellule diamant représentée en vert dans la figure 6.14, redonnait une précision au second ordre en introduisant une correction de non-orthogonalité à la formule 2PT (6.52), telle que :

$$\frac{\partial w}{\partial x} \Big|_e \cong \frac{w_{i+1,j,k} - w_{i,j,k}}{\|\mathbf{d}\| \cos \alpha} - \tan \alpha \frac{w_N - w_S}{\|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_S\|}, \quad (6.53)$$

où les données aux sommets \mathbf{x}_N et \mathbf{x}_S de la cellule sont reconstruites à partir des conditions aux limites et des inconnues voisines.

La versatilité de la discrétisation DCM permet de l'appliquer à des données centrées aux faces fluides (les composantes de vitesse) ou en cellule (champs scalaires tels que la température), ainsi qu'au calcul des gradients sur la paroi solide des cut-cells. Cela a permis de revisiter intégralement la discrétisation du tenseur des contraintes des équations de Navier-Stokes, où disparaît le traitement au cas par cas des différents types de cut-cells de la méthode LS-STAG/2PT. Ainsi, la méthode LS-STAG/DCM permet d'obtenir une formulation des flux diffusifs unifiée et algorithmiquement efficace pour tous les types de cut-cells, qui soit applicable aux géométries totalement 3D.

Les publications [A13], [B14] présentent l'application de la méthode LS-STAG/DCM aux géométries 2D (cas-test de convection naturelle où la discrétisation DCM est appliquée à l'équation de température) et aux géométries 3D-extrudées, où sa supériorité par rapport à la méthode LS-STAG/2PT est clairement établie. La communication [D14] présente les résultats préliminaires de son application

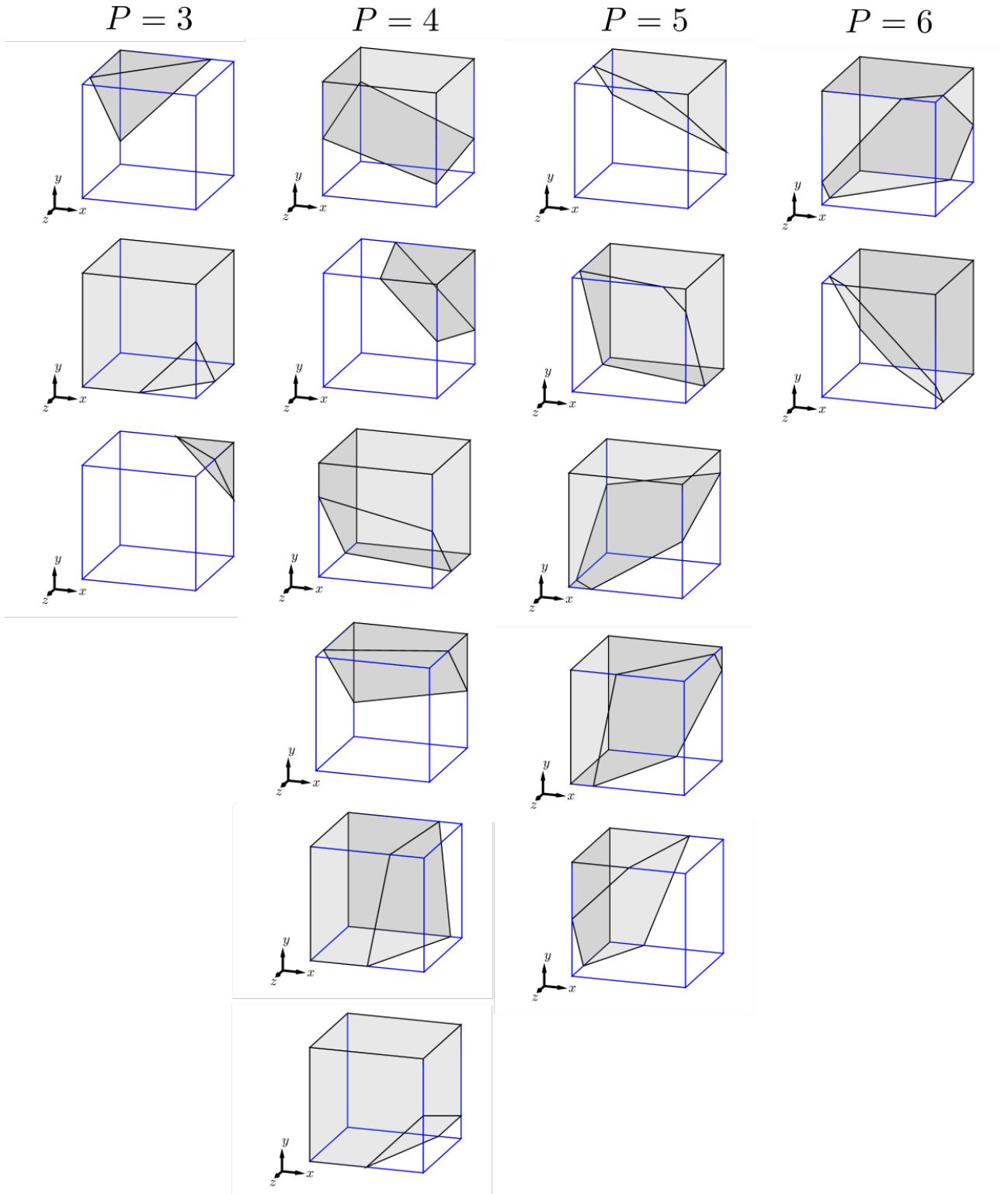


FIGURE 6.13 – Exemples de cut-cells tridimensionnelles classées selon le nombre de sommets P de la frontière solide Γ^{ib} .

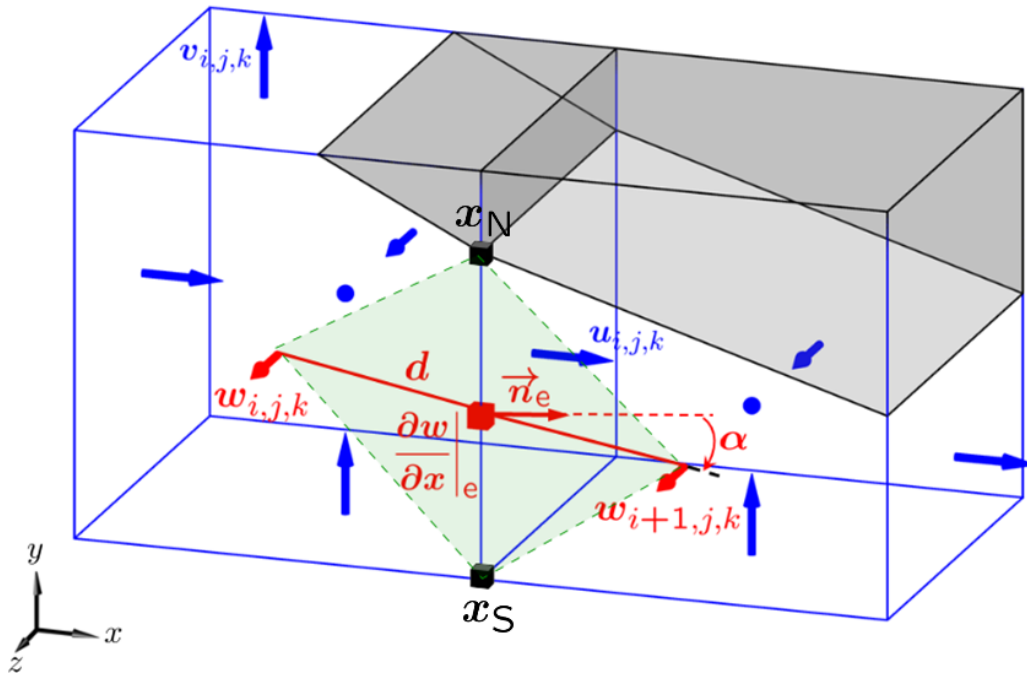


FIGURE 6.14 – Illustration du calcul du gradient normal $\partial w/\partial x|_e$ dans une cut-cell 3D-extrudée.

aux géométries totalement 3D (écoulement dans une cellule de Taylor-Couette sphérique, écoulement à l'aval d'une sphère en rotation) qui sont issus de la thèse de B. Portelenelle [Th3].

Chapitre 7

Eléments de la discrétisation LS-STAG

7.1 Introduction au chapitre

La section 6.5 avait présenté de façon chronologique les différentes étapes du développement de la méthode LS-STAG, qui s’articulent autour des variantes 2PT et DCM. Dans ce chapitre, nous avons pris le parti de présenter de façon unifiée, non chronologique, la discrétisation des équations de Navier-Stokes pour une cut-cell 3D de forme arbitraire. La discrétisation pourra aisément s’appliquer aux cut-cells 2D et 3D extrudées, qui sont les seules pour lesquels la variante 2PT peut s’appliquer. L’extension de la méthode LS-STAG aux écoulements non-newtoniens sera présenté dans le chapitre suivant, dédié aux applications.

La section 7.2 présente l’arrangement décalé des variables dans les cut-cells, ainsi que les paramètres géométriques des cut-cells nécessaires à la discrétisation spatiale. Les sections suivantes sont dédiées à la discrétisation des différents termes des équations de Navier-Stokes selon les principes *symmetry-preserving* de Verstappen & Veldman (section 6.4). Nous présenterons en premier les termes qui possèdent une discrétisation unique pour tout type de cut-cells, et qui est commune aux variantes 2PT et DCM : équation de continuité, gradient de pression, terme instationnaire, flux diffusif normal.

La distinction entre les variantes 2PT et DCM se manifestera pour la discrétisation des flux diffusifs tangentiels : pour le calcul des gradients extra-diagonaux sur les faces fluides des cut-cells 3D, où peuvent s’appliquer la formule 2PT (6.52) ou la formule DCM (6.53), mais aussi sur la face solide des cut-cells, où l’outil DCM permet d’améliorer la discrétisation 2PT du frottement pariétal afin de conserver la quantité de mouvement totale dans tout type de cut-cell. La discrétisation DCM est réalisée de façon à obtenir une implémentation informatique efficace des flux diffusifs tangentiels pour tous les types de cut-cells, où disparaît l’implémentation au cas par cas de la variante 2PT qui ne pouvait s’appliquer aux cut-cells “totalement” 3D.

Lorsque la variante DCM pour cut-cells 3D a été implémentée dans le code LS-STAG [**Th3**], nous avons reformulé la discrétisation *skew-symmetric* du flux convectif, de façon que l’implémentation des termes pariétaux (non-nuls pour des conditions non-homogènes uniquement) s’effectue par un algorithme unifié pour toutes les cut-cells. C’est cet algorithme qui sera présenté dans la section 7.6.

Enfin, la dernière section présentera l'intégration en temps par schémas aux pas fractionnaires semi-implicites, qui sont utilisés depuis les débuts de la méthode LS-STAG [Th1], et présentera ensuite des éléments sur l'implémentation parallèle de la méthode, qui a été réalisée lors de l'écriture du code pour géométries 3D extrudées [Th2].

7.2 Notations et paramètres géométriques des cut-cells

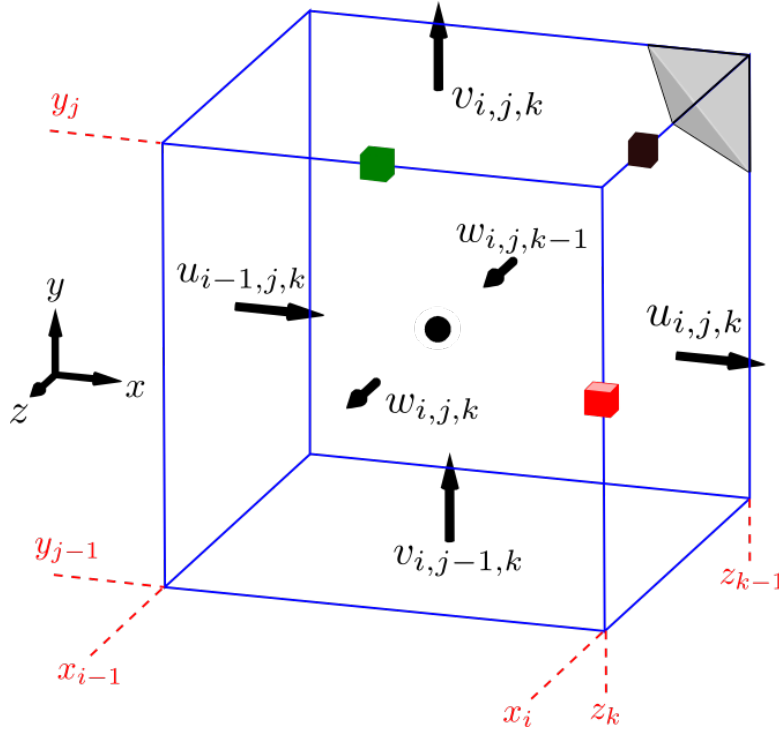


FIGURE 7.1 – Arrangement décalé des variables dans la cut-cell tridimensionnelle $\Omega_{i,j,k}$ inscrite dans une cellule cartésienne dont les sommets sont notés $\mathbf{x}_{i,j,k} = (x_i, y_j, z_k)$. Le pas de discrétisation dans chaque direction est noté $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, $\Delta y_j = y_j - y_{j-1}$, et $\Delta z_k = z_k - z_{k-1}$. Les composantes extra-diagonales de $\nabla \mathbf{v}$ sont positionnées au centroïde des arêtes : $\frac{\partial u}{\partial y}|_{i,j,k}$, $\frac{\partial v}{\partial x}|_{i,j,k}$ (■); $\frac{\partial w}{\partial x}|_{i,j,k}$, $\frac{\partial u}{\partial z}|_{i,j,k}$ (■) et $\frac{\partial w}{\partial y}|_{i,j,k}$, $\frac{\partial v}{\partial z}|_{i,j,k}$ (■).

Nous présentons dans ce chapitre les principaux éléments des 2 variantes de la méthode LS-STAG (2PT et DCM), dont la chronologie a été présentée dans la section 6.5. Par soucis d'homogénéiser les notations utilisées dans les différentes publications sur la méthode LS-STAG, la discrétisation sera présentée pour la cut-cell 3D $\Omega_{i,j,k}$ représentée sur la figure 7.1. Comme pour les méthodes volumes-finies sur maillages non structurés, la surface fluide $\Gamma_{i,j,k}$ de la cut-cell est partitionnée en sept faces élémentaires distinctes (les six faces du cube et une face solide), éventuellement vides, telle que :

$$\Gamma_{i,j,k} = \Gamma_{i,j,k}^e \cup \Gamma_{i,j,k}^w \cup \Gamma_{i,j,k}^n \cup \Gamma_{i,j,k}^s \cup \Gamma_{i,j,k}^t \cup \Gamma_{i,j,k}^b \cup \Gamma_{i,j,k}^{ib}, \quad (7.1)$$

où les notations géographiques usuelles sont utilisées pour dénoter les faces fluides Est, Ouest, Nord, Sud, Top (avant), Bottom (arrière); la paroi solide est notée $\Gamma_{i,j,k}^{\text{ib}}$. La cellule représentée sur la figure 7.1 est un exemple de cut-cell “totalement” 3D, qui ne fait pas partie des 3 types de cut-cells 3D-extrudées de la figure 6.10.

La figure 7.1 illustre l’arrangement décalé des inconnues discrètes : les composantes du vecteur vitesse sont positionnées au centroïde de la partie fluide des faces, tandis que la pression et les inconnues scalaires transportées telles que la température sont placées au centroïde de la cellule. Le positionnement décalé des vitesses induit que les composantes normales (6.6a) du tenseur des déformations $\dot{\boldsymbol{\gamma}} = \nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T$, qui a la même nature physique que la pression (partie diagonale du tenseur des contraintes), sont placées au centroïde de la cellule, tandis que les composantes tangentielles (6.6b) sont situées au centre des arêtes fluides. L’arrangement décalé des contraintes normales et tangentielles, qui est motivé par l’approximation à 2 points du gradient de vitesse dans une cellule cartésienne, par exemple :

$$\dot{\gamma}_{xx}|_{i,j,k} = 2 \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j,k} \cong 2 \frac{u_{i,j,k} - u_{i-1,j,k}}{\Delta x_i}, \quad (7.2a)$$

$$\dot{\gamma}_{xy}|_{i,j,k} = \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j,k} + \left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{i,j,k} \cong \frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j,k}}{\frac{1}{2}\Delta y_j + \frac{1}{2}\Delta y_{j+1}} + \frac{v_{i+1,j,k} - v_{i,j,k}}{\frac{1}{2}\Delta x_i + \frac{1}{2}\Delta x_{i+1}}, \quad (7.2b)$$

sera exploité pour l’approximation numériques des écoulements non-newtoniens de la section 8.3.

Les paramètres géométriques de $\Omega_{i,j,k}$ qui sont pertinents pour la discrétisation volumes-finis sont obtenus à partir de la fonction *level-set* ϕ [115, 114], aussi appelée fonction distance signée, qui permet de représenter implicitement la surface solide telle que :

$$\begin{cases} \phi(\mathbf{x}) < 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega^f, \\ \phi(\mathbf{x}) = 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Gamma^{\text{ib}}, \\ \phi(\mathbf{x}) \geq 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega^{\text{ib}}, \end{cases} \quad (7.3)$$

en la calculant aux sommets $\mathbf{x}_{i,j,k}$ du maillage cartésien (Fig. 7.2(a)), et de déterminer son type (cut-cell, cartésienne fluide ou solide). Par exemple, une cellule telle que la *level-set* prend des valeurs strictement négatives en ses huit sommets est une cellule cartésienne entièrement fluide, des valeurs positives en chaque sommet indique que la cellule est solide, et sinon la cellule est une cut-cell.

Pour toutes les simulations présentées dans ce mémoire, la fonction level-set est définie analytiquement par technique CSG (*Constructive Solid Geometry*) qui permet de bâtir des solides complexes à partir de formes géométriques de base comme des cercles, hyperplans, sphères, *etc.* . . . , qui sont suffisamment simples pour posséder une fonction level-set dont l’expression analytique est connue [70, 115]. Les opérations booléennes de la technique CSG sur les géométries de base, comme l’intersection, la réunion ou la partie complémentaire, peuvent être exprimées comme des opérations algébriques sur leur fonction level-set [115]. Par exemple, considérons le domaine de calcul pour l’écoulement de Taylor-Couette 2D de la section 8.2, représenté sur la figure 8.1 (gauche). Pour calculer la level-set, ce domaine de calcul est décomposé comme $\Omega_f = \Omega_2 \setminus \Omega_1$, où Ω_1 et Ω_2 représentent les domaines intérieurs aux cercles Γ_1

et Γ_2 respectivement. La fonction level-set est alors définie comme $\phi(x, y) = \max(\phi_2(x, y), -\phi_1(x, y))$ avec :

$$\phi_1(x, y) = R_1 - r, \quad \phi_2(x, y) = R_2 - r, \quad (7.4)$$

avec $r = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}$ la distance au centre (x_c, y_c) du domaine.

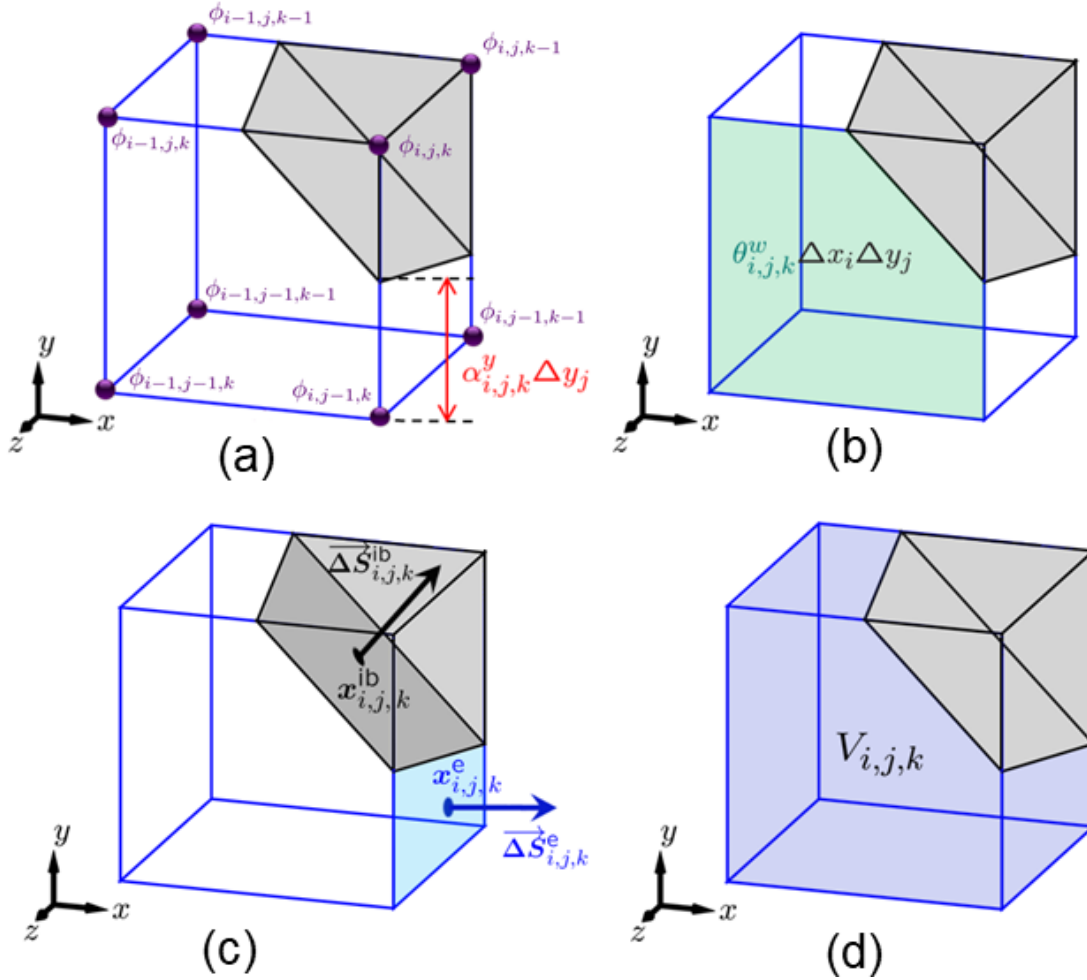


FIGURE 7.2 – Paramètres géométriques d'une cut-cell 3D.

A partir des valeurs de la level-set calculées aux sommets du maillage :

$$\phi_{i,j,k} = \phi(\mathbf{x}_{i,j,k}),$$

il est possible de définir les paramètres géométriques des cellules par une stratégie “bottom-up” : en partant des arêtes d'une cut-cell, puis ses faces, et enfin son volume. Les paramètres géométriques d'une cut-cell qui sont pertinents pour la discrétisation des équations de Navier-Stokes sont représentés sur la figure 7.2 :

- Portion fluide des arêtes, comme par exemple $\alpha_{i,j,k}^y$ sur la figure 7.2(a).

- Paramètres des faces fluides : son aire (notée $\theta_{i,j,k}^w \Delta x_i \Delta y_j$ pour la face coloriée en vert de la figure 7.2(b)) et, comme représenté sur la figure 7.2(c) :
 - les coordonnées du centroïde de la face $\mathbf{x}_{i,j,k}^e$, où est positionnée la composante normale du vecteur vitesse,
 - le vecteur normal surfacique¹ $\Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^e$ de la face.
- Paramètres de la face solide : points d'intersection de la surface solide avec les arêtes du maillage (Section 7.2.2), et vecteur normal surfacique $\Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^{\text{ib}}$ de la face (Fig. 7.2(c)).
- Paramètres volumiques : le volume $V_{i,j,k}$ de la cut-cell (Fig. 7.2(d)).

Ces diverses quantités se calculent à partir de la portion fluide des arêtes de la cellule, qui est une quantité comprise entre 0 (arête entièrement solide) et 1 (arête entièrement fluide). Par exemple, la portion fluide $\alpha_{i,j,k}^y$ de la figure 7.2(a) est obtenue par interpolation linéaire du zéro de la fonction $y \mapsto \phi(x_i, y, z_k)$ dans l'intervalle $[y_{j-1}, y_j]$ comme :

$$\alpha_{i,j,k}^y = \frac{\phi_{i,j-1,k}}{\phi_{i,j-1,k} - \phi_{i,j,k}}. \quad (7.5)$$

Une formule générale valable pour tout type de cellule (fluide, solide ou cut-cell) est donnée dans [Th3].

Il est à préciser que les coordonnées du centroïde de la cut-cell ne serait utile que si une inconnue scalaire, telle que la température, y serait positionnée. A ce jour, la discrétisation d'une équation scalaire n'a été réalisée qu'en 2D avec la méthode LS-STAG/DCM, où le centroïde des cellules correspond au centre des faces 3D. En outre, le positionnement de la pression à l'intérieur d'une cut-cell sera discutée en détail dans la section 7.3.2.

7.2.1 Paramètres géométriques des faces fluides d'une cut-cell

La portion fluide des arêtes permet maintenant de calculer la portion fluide d'une face, *i.e.* le rapport de la surface fluide sur la surface totale d'une face donnée. Par exemple, la figure 7.2(b) représente (en vert) l'aire $\theta_{i,j,k}^w \Delta x_i \Delta y_j$ de la partie fluide de la face $\Gamma_{i,j,k}^t$, telle que la portion fluide $\theta_{i,j,k}^w \in [0, 1]$ est définie par [Th3] :

$$\theta_{i,j,k}^w = \min(\alpha_{i,j-1,k}^x, \alpha_{i,j,k}^x) + \frac{1}{2} \left| \alpha_{i,j-1,k}^x - \alpha_{i,j,k}^x \right| (\alpha_{i-1,j,k}^y + \alpha_{i,j,k}^y). \quad (7.6)$$

Les composantes du vecteur normal surfacique des faces fluides de la cut-cell sont aisément calculées, puisqu'elles sont orientées selon les directions principales \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y ou \mathbf{e}_z de la base canonique. Par exemple, le vecteur $\Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^e$ représenté sur la figure 7.2(c) est orienté selon l'axe \mathbf{e}_x et s'écrit simplement :

$$\Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^e = \theta_{i,j,k}^u \Delta y_j \Delta z_k \mathbf{e}_x. \quad (7.7)$$

1. Vecteur orienté vers l'extérieur de la cellule, de norme égale à l'aire de la face.

Une face fluide de cut-cell 3D peut être vue comme l'analogue d'une cut-cell 2D (cf Fig. 6.9), *c.à.d.* comme un polygone plan de $P = 3, 4$ ou 5 sommets dont le barycentre est facilement calculé [Th2]. Par exemple, les coordonnées du centroïde $\mathbf{x}_{i,j,k}^e$ de la face $\Gamma_{i,j,k}^e$ sont données par :

$$x_{i,j,k}^e = x_i, \quad (7.8a)$$

$$y_{i,j,k}^e = \frac{1}{6\theta_{i,j,k}^u \Delta y_j \Delta z_k} \sum_{p=1}^P (y_p^f + y_{p+1}^f)(y_p^f z_{p+1}^f - y_{p+1}^f z_p^f), \quad (7.8b)$$

$$z_{i,j,k}^e = \frac{1}{6\theta_{i,j,k}^u \Delta y_j \Delta z_k} \sum_{p=1}^P (z_p^f + z_{p+1}^f)(y_p^f z_{p+1}^f - y_{p+1}^f z_p^f), \quad (7.8c)$$

où les sommets de la face sont ici notés \mathbf{x}_p^f , $p = 1, \dots, P$ avec la convention $\mathbf{x}_{P+1}^f = \mathbf{x}_1^f$.

Ces quantités géométriques permettent d'obtenir aisément la discrétisation des flux au travers des faces fluides d'une cut-cell. Par exemple pour une fonction de flux $\mathbf{F} = (F_x, F_y, F_z)$, la quadrature du point milieu appliquée à la face $\Gamma_{i,j,k}^e$ donne :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^e} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS \cong \mathbf{F}(\mathbf{x}_e^G) \cdot \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^e = \theta_{i,j,k}^u \Delta y_j \Delta z_k F_x(\mathbf{x}_{i,j,k}^e). \quad (7.9)$$

La précision spatiale de cette formule est au second ordre.

7.2.2 Paramètres géométriques de la face solide d'une cut-cell

La représentation implicite d'une géométrie complexe par sa fonction *level-set* permet de reconstruire la paroi solide Γ^{ib} des cut-cells à partir de ses points d'intersection avec les arêtes du maillage (notés $\mathbf{x}_{i,j,k}^1, \dots, \mathbf{x}_{i,j,k}^P$, cf. Fig. 7.3). Le centroïde de la face Γ^{ib} est calculé comme l'isobarycentre discret de ses sommets :

$$\mathbf{x}_{i,j,k}^{\text{ib}} = \frac{1}{P} \sum_{p=1}^P \mathbf{x}_{i,j,k}^p. \quad (7.10)$$

En utilisant le théorème de Green-Gauss (6.15) pour la fonction constante $\Phi = 1$ et en séparant la face solide des faces fluides de la cut-cell, le vecteur normal surfacique :

$$\Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^{\text{ib}} = \int_{\Gamma_{i,j,k}^{\text{ib}}} \mathbf{n} dS,$$

s'exprime à partir de ceux des faces fluides comme :

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^{\text{ib}} &= -(\Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^e + \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^w + \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^n + \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^s + \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^t + \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^b) \\ &= [\Delta S_x]_{i,j,k}^{\text{ib}} \mathbf{e}_x + [\Delta S_y]_{i,j,k}^{\text{ib}} \mathbf{e}_y + [\Delta S_z]_{i,j,k}^{\text{ib}} \mathbf{e}_z, \end{aligned} \quad (7.11)$$

avec :

$$[\Delta S_x]_{i,j,k}^{\text{ib}} = (\theta_{i-1,j,k}^u - \theta_{i,j,k}^u) \Delta y_j \Delta z_k, \quad (7.12a)$$

$$[\Delta S_y]_{i,j,k}^{\text{ib}} = (\theta_{i,j-1,k}^v - \theta_{i,j,k}^v) \Delta x_i \Delta z_k, \quad (7.12b)$$

$$[\Delta S_z]_{i,j,k}^{\text{ib}} = (\theta_{i,j,k-1}^w - \theta_{i,j,k}^w) \Delta x_i \Delta y_j. \quad (7.12c)$$

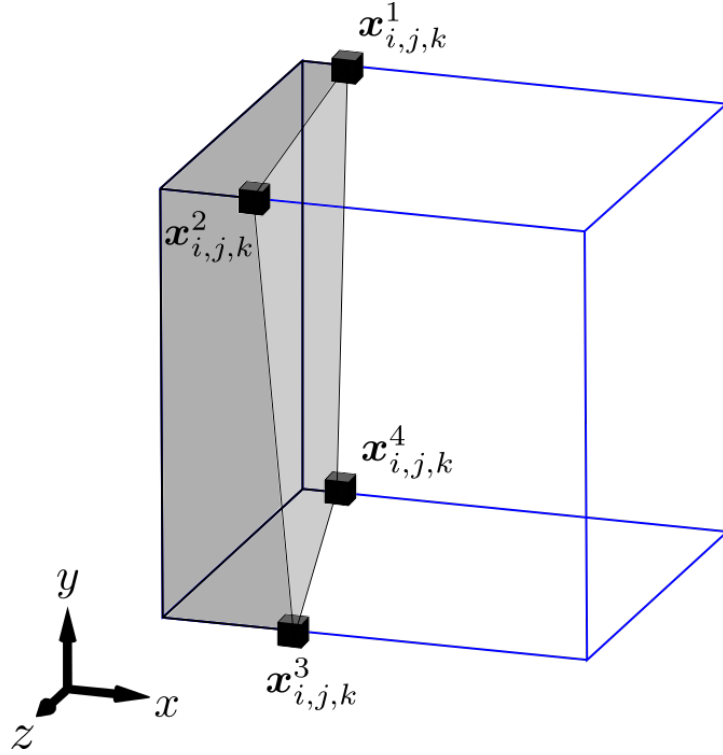


FIGURE 7.3 – Cut-cell tridimensionnelle $\Omega_{i,j,k}$ possédant $P = 4$ points d'intersection avec les arêtes, et dont la surface solide est non plane.

Les flux à la paroi peuvent alors s'exprimer avec une formule de quadrature analogue à (7.9) :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{\text{ib}}} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS \cong \mathbf{F}(\mathbf{x}_{i,j,k}^{\text{ib}}) \cdot \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^{\text{ib}} = [\Delta S_x]_{i,j,k}^{\text{ib}} F_x(\mathbf{x}_{i,j,k}^{\text{ib}}) + [\Delta S_y]_{i,j,k}^{\text{ib}} F_y(\mathbf{x}_{i,j,k}^{\text{ib}}) + [\Delta S_z]_{i,j,k}^{\text{ib}} F_z(\mathbf{x}_{i,j,k}^{\text{ib}}). \quad (7.13)$$

Cette formule sera notamment utilisée dans la section 7.5 pour discrétiser les forces hydrodynamiques et les flux diffusifs à la paroi.

Enfin, les conditions aux limites de type Dirichlet sont obtenues à partir des données aux sommets $\mathbf{x}_{i,j,k}^p$ de la face solide, en faisant l'hypothèse courante en volumes finis qu'elles varient linéairement à la paroi. Ainsi, la valeur prise par le champ $\Phi(\mathbf{x})$ au centroïde $\mathbf{x}_{i,j,k}^{\text{ib}}$ de la face solide est définie par :

$$\Phi_{i,j,k}^{\text{ib}} \cong \frac{1}{P} \sum_{p=1}^P \Phi(\mathbf{x}_{i,j,k}^p). \quad (7.14)$$

Il est important de préciser que toutes ces approximations sont précises au second-ordre lorsque la face solide Γ^{ib} est plane, telles que des cut-cells 2D ou 3D-extrudées. En effet, pour une cut-cell 2D le nombre de points d'intersection P est au plus 2 (Fig. 6.9), ce qui permet de représenter la face solide par un segment de droite, tandis que la face solide d'une cut-cell 3D-extrudée (Fig. 6.10) correspond à une extrusion de ce segment de droite.

Pour une cut-cell "totalement 3D" où le nombre de points d'intersection P peut varier de 3 à 6, la

face solide est uniquement plane pour $P = 3$ (face triangulaire). Des exemples de cut-cells 3D classées selon le nombre de sommets P sont donnés dans la figure 7.5. Pour $P = 4, 5$ ou 6 , la face solide est en toute généralité une surface gauchie : un exemple est donné sur la figure 7.3. Dans ce cas, l'utilisation de la formule (7.11) qui revient à calculer un vecteur surfacique normal "moyen" pour la face solide, et des formules (7.10) et (7.14) qui remplacent le centroïde de la face solide par l'isobarycentre discret des sommets de la face, peuvent engendrer une dégradation de la précision au second-ordre de la discrétisation.

Cette difficulté dans la représentation précise de la paroi solide d'une cut-cell 3D est à notre connaissance peu discutée dans la littérature. Elle a été reconnue dans [120, 173] pour la simulation d'écoulements compressibles non visqueux, et [71, 60] pour des écoulements compressibles visqueux, où des approximations similaires de la face solide sont utilisées. Il serait néanmoins possible d'améliorer la représentation des parois non-planes en la triangulant [4], de façon que les paramètres géométriques soient calculés précisément avec les formules pour polyèdres arbitraires données dans [30, 169].

7.2.3 Calcul du volume d'une cut-cell

Le volume fluide $V_{i,j,k}$ de la cut-cell $\Omega_{i,j,k}$, qui est notamment utilisé pour discrétiser les termes volumiques des équations du mouvement, est calculé à partir flux-divergence (6.16). Cette technique, très répandue dans les méthodes non structurées [28, 109], permet de calculer le volume d'une cut-cell par une formule compacte où apparaissent uniquement les valeurs de la *level-set*.

L'application du théorème de flux-divergence (6.16) au vecteur position $\mathbf{x} = (x, y, z)$ conduit à :

$$3V_{i,j,k} = \int_{\Gamma_{i,j,k}} \mathbf{x} \cdot \mathbf{n} \, dS, \quad (7.15)$$

et en séparant les faces fluides et solide :

$$V_{i,j,k} = \frac{1}{3} \sum_{\text{faces fluides}} \mathbf{x}_f \cdot \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^f + \frac{1}{3} \int_{\Gamma_{i,j,k}^{\text{ib}}} \mathbf{x} \cdot \mathbf{n} \, dS, \quad (7.16)$$

où \mathbf{x}_f correspond à un point quelconque de la face (par exemple un sommet) et l'intégrale sur la face solide non-plane est approximée avec les mêmes hypothèses que dans la section précédente :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{\text{ib}}} \mathbf{x} \cdot \mathbf{n} \, dS \cong \mathbf{x}_{i,j,k}^{\text{ib}} \cdot \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^{\text{ib}}, \quad (7.17)$$

où $\mathbf{x}_{i,j,k}^{\text{ib}}$ est l'isobarycentre donné par (7.10). Finalement, en exprimant les composantes des vecteurs normaux surfaciques, la formule (7.16) se simplifie en :

$$\begin{aligned} V_{i,j,k} \cong & \frac{1}{3} \left[\Delta y_j \Delta z_k \left(\theta_{i-1,j,k}^u (x_{i,j,k}^{\text{ib}} - x_{i-1}) + \theta_{i,j,k}^u (x_i - x_{i,j,k}^{\text{ib}}) \right) \right. \\ & + \Delta x_i \Delta z_k \left(\theta_{i,j-1,k}^v (y_{i,j,k}^{\text{ib}} - y_{j-1}) + \theta_{i,j,k}^v (y_j - y_{i,j,k}^{\text{ib}}) \right) \\ & \left. + \Delta x_i \Delta y_j \left(\theta_{i,j,k-1}^w (z_{i,j,k}^{\text{ib}} - z_{k-1}) + \theta_{i,j,k}^w (z_k - z_{i,j,k}^{\text{ib}}) \right) \right]. \end{aligned} \quad (7.18)$$

Cette formule, valable pour tout type de cut-cell, fait uniquement intervenir les portions fluides de faces et un point appartenant à $\Gamma_{i,j,k}^{\text{ib}}$. Comme pour les paramètres géométriques de la section précédente, cette formule donne le volume exacte uniquement pour des cut-cells dont la surface est plane.

7.2.4 Volumes de contrôle pour l'équation de quantité de mouvement

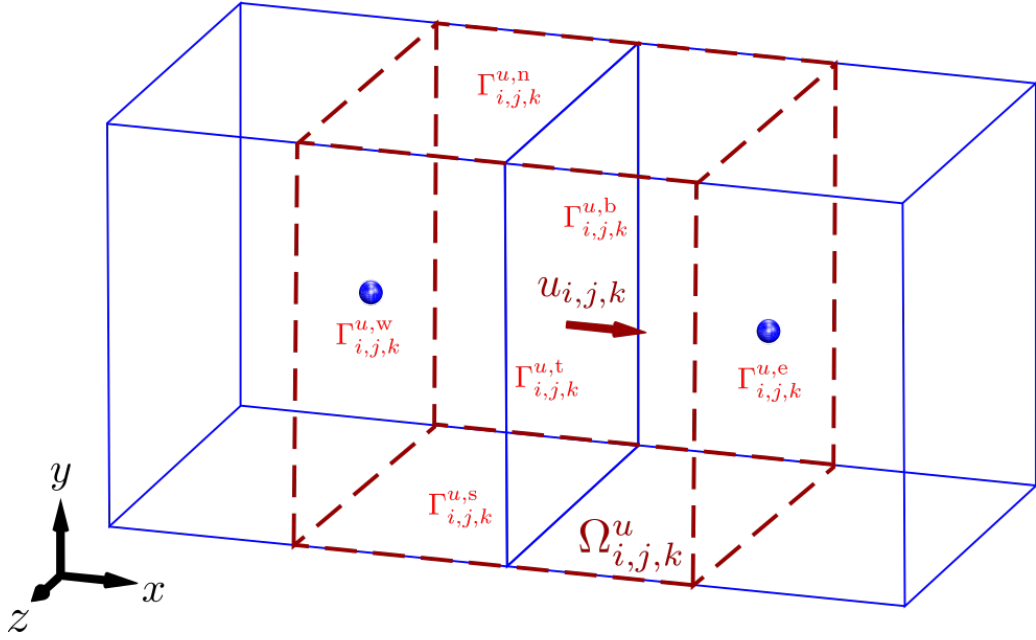


FIGURE 7.4 – Représentation des faces élémentaires du volume de contrôle $\Omega_{i,j,k}^u$ dans le cas où les cellules $\Omega_{i,j,k}$ (à gauche) et $\Omega_{i+1,j,k}$ (à droite) sont cartésiennes.

Comme dans toute méthode numérique sur grilles décalées, l'équation de quantité de mouvement (6.20) est discrétisée dans des volumes de contrôles (CVs) décalés autour de chaque composante de vitesse. Les difficultés rencontrées par les méthodes de cut-cell pour définir ces CVs ont été discuté dans la section 6.3. Dans cette partie, après avoir définies les notations pour un CV issu d'un maillage cartésien, nous allons décrire les CVs utilisés par la méthode LS-STAG.

Pour un maillage composé de cellules cartésiennes, la figure 7.4 montre le CV $\Omega_{i,j,k}^u$ utilisé pour discrétiser l'équation pour $u_{i,j,k}$, qui est formé à partir de demi-volumes des des cellules cartésiennes adjacentes $\Omega_{i,j,k}$ et $\Omega_{i+1,j,k}$. La frontière $\Gamma_{i,j,k}^u$ du CV peut être décomposée en faces élémentaires fluides comme :

$$\Gamma_{i,j,k}^u = \Gamma_{i,j,k}^{u,e} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,w} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,n} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,s} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,t} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,b}. \quad (7.19)$$

Près de la frontière complexe, par exemple celle représentée dans la figure 7.5, où une au moins des 2 cellules $\Omega_{i,j,k}$ et $\Omega_{i+1,j,k}$ est une cut-cell, nous devons ajouter aux 6 faces fluides de la décomposition (7.19) la paroi solide du CV, notée $\Gamma_{i,j,k}^{u,ib}$, qui se décompose comme :

$$\Gamma_{i,j,k}^{u,ib} = \Gamma_{i,j,k}^{u,ib,e} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,ib,w}, \quad (7.20)$$

selon qu'elle appartient à la cellule $\Omega_{i,j,k}$ ($\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,w}$) ou $\Omega_{i+1,j,k}$ ($\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,e}$).

Il est important de préciser que la forme exacte du CV $\Omega_{i,j,k}^u$ n'a pas besoin d'être explicitement connue pour réaliser la discrétisation LS-STAG. En effet, les flux qui apparaissent sur les faces normales

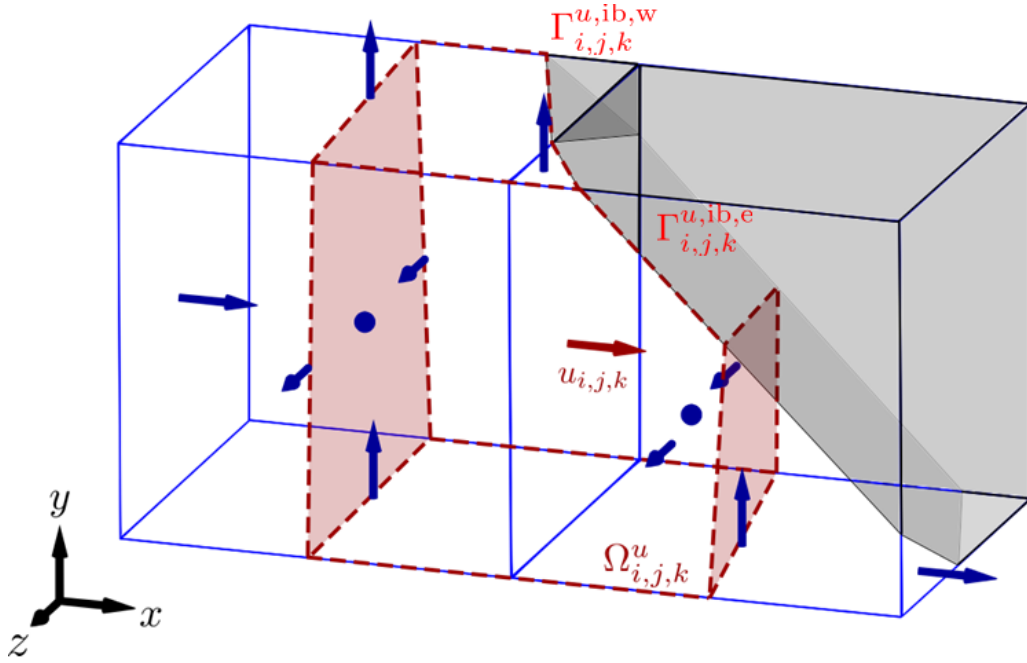


FIGURE 7.5 – Représentation du volume de contrôle $\Omega_{i,j,k}^u$ dans le cas où les cellules $\Omega_{i,j,k}$ (à gauche) et $\Omega_{i+1,j,k}$ (à droite) sont des cut-cells. Les parois normales $\Gamma_{i,j}^{u,ib,w}$ (Ouest) et $\Gamma_{i,j}^{u,ib,e}$ (Est), qui sont internes aux cellules $\Omega_{i,j,k}$ et $\Omega_{i+1,j,k}$, sont représentées de façon schématique par des surfaces verticales colorées en rouge.

$\Gamma_{i,j,k}^{u,e}$ et $\Gamma_{i,j,k}^{u,w}$ seront discrétisés par des considérations algébriques basées selon la conservation des invariants discrets (Sect. 6.4.3), sans que les paramètres géométriques de ces faces n'apparaissent explicitement dans l'expression des flux discrets. Par contre, les flux tangentiels qui apparaissent sur les faces Nord, Sud, Top et Bottom de la décomposition (7.19) sont des surfaces fluides bien définies car elles appartiennent aux faces des cellules cartésiennes, où une discrétisation volumes finis classique peut s'appliquer.

Cette différence notable nous conduit à séparer les différents flux (convectifs, diffusifs, de pression) des équations de Navier-Stokes en contribution normale et tangentielle comme :

$$\int_{\Gamma_{CV}} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_{\Gamma_{CV}} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}_\nu \, dS + \int_{\Gamma_{CV}} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}_\tau \, dS, \quad (7.21)$$

avec $\mathbf{n} = \mathbf{n}_\nu + \mathbf{n}_\tau$, tel que \mathbf{n}_ν et \mathbf{n}_τ représentent les composantes normale et tangentielle du vecteur unitaire normal à la face \mathbf{n} . Dans le cas de l'équation de quantité de mouvement pour u , ces vecteurs unitaires ont pour expression :

$$\mathbf{n}_\nu = (\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n}, 0, 0)^T, \quad \mathbf{n}_\tau = (0, \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n}, \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n})^T. \quad (7.22)$$

7.3 Etapes clés de la discrétisation LS-STAG

Les équations à discrétiser dans le maillage de cut-cells sont l'équation de continuité (6.17) dans la cellule $\Omega_{i,j,k}$:

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = 0, \quad (7.23)$$

la composante horizontale de l'équation de quantité de mouvement (6.20) dans le CV $\Omega_{i,j,k}^u$:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_{i,j,k}^u} u \, dV + \int_{\Gamma_{i,j,k}^u} u(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \, dS + \frac{1}{\rho} \int_{\Gamma_{i,j,k}^u} p \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \, dS - \nu \int_{\Gamma_{i,j,k}^u} \nabla u \cdot \mathbf{n} \, dS = 0, \quad (7.24)$$

et la discrétisation des autres composantes de l'équation de quantité de mouvement sera similaire.

Dans la suite du chapitre, nous allons présenter les étapes importantes de la discrétisation LS-STAG des différents termes de ces équations, qui est construite de façon à préserver les invariants linéaires et quadratiques discutés dans la section 6.4.3. Ces différentes étapes sont :

- Le point de départ de la méthode LS-STAG est la discrétisation de l'équation de continuité (7.23), qui s'écrit matriciellement comme (6.47a) et que nous réécrivons ici :

$$\mathcal{D}U + \bar{U}^{\text{ib}} = 0. \quad (7.25)$$

Cette discrétisation sera décrite dans la section 7.3.1.

- Ensuite, la condition (6.51) permet de définir algébriquement la gradient de pression discret comme le dual de la divergence discrète, soit :

$$\mathcal{G}P = -\mathcal{D}^T P. \quad (7.26)$$

Cette discrétisation sera décrite dans la section 7.3.2.

- La discrétisation des flux diffusifs est la partie la plus délicate de la méthode, et ce sont les améliorations successives apportées depuis la thèse de Y. Cheny [Th1] à l'approximation de leur partie tangentielle qui ont conduit aux variantes 2PT et DCM de la méthode LS-STAG.

En appliquant la décomposition (7.21) au vecteur $\mathbf{F} = \nabla u$, les flux diffusifs sont séparés en contribution normale et tangentielle comme :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^u} \nabla u \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_{\Gamma_{i,j,k}^u} \frac{\partial u}{\partial x} \, dy \, dz + \int_{\Gamma_{i,j,k}^u} \nabla u \cdot \mathbf{n}_\tau \, dS. \quad (7.27)$$

- Dans la section 7.3.3, le flux diffusif normal est discrétisé algébriquement par analogie avec le gradient de pression discret, et la contrainte normale $\partial u / \partial x$ est calculée en utilisant le théorème de Green-Gauss (6.15) appliqué aux cut-cells. Cette construction du flux diffusif normal dans les cut-cells a été mise en œuvre depuis la thèse de Y. Cheny [Th1], et conduit à une formulation discrète qui retrouve la formulation MAC dans les cellules cartésiennes.

— Le flux diffusif tangentiel se décompose suivant les faces du CV comme :

$$\begin{aligned}
 \int_{\Gamma_{i,j,k}^u} \nabla u \cdot \mathbf{n}_\tau \, dS &= \underbrace{\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,n}} \frac{\partial u}{\partial y} \, dx \, dz - \int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,s}} \frac{\partial u}{\partial y} \, dx \, dz}_{\text{faces fluides nord/sud : } \mathbf{n} = \pm \mathbf{e}_y} \\
 &+ \underbrace{\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,t}} \frac{\partial u}{\partial z} \, dx \, dy - \int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,b}} \frac{\partial u}{\partial z} \, dx \, dy}_{\text{faces fluides haut/bas : } \mathbf{n} = \pm \mathbf{e}_z} \\
 &+ \underbrace{\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,e} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,ib,w}} \nabla u \cdot \mathbf{n}_\tau \, dS}_{\frac{1}{2}\text{-faces solides de } \Omega_{i,j,k} \text{ et } \Omega_{i+1,j,k}}.
 \end{aligned} \tag{7.28}$$

La discrétisation des flux sur les faces fluides s'effectue par une quadrature du point milieu, ce qui permet de conserver localement les flux. La discrétisation des contraintes tangentielles $\partial u/\partial y$ et $\partial u/\partial z$ sur les faces est ce qui distingue essentiellement la méthode LS-STAG/2PT (utilisant le schéma à 2 points (6.52)) de la méthode LS-STAG/DCM (utilisant le schéma diamant (6.53)). Ces discrétisations seront discutées dans la section 7.4.

Enfin, la discrétisation des flux sur la face solide sera effectuée dans la section 7.5 de façon à ce qu'elle corresponde à la discrétisation de la force hydrodynamiques sur la paroi des cut-cells adjacentes $\Omega_{i,j,k}$ et $\Omega_{i+1,j,k}$. On discutera des limitations de la discrétisation 2PT, qui propose une approximation *ad hoc* valable uniquement pour les 3 types génériques de cut-cells 2D et 3D-extrudées, et on montrera comment l'outil des schémas diamants permettra de revisiter cette discrétisation, et d'aboutir à la méthode LS-STAG/DCM qui s'applique à tout type de cut-cells 3D.

- Dans la section 7.6, les flux convectifs sont discrétisés dans les cut-cells selon les principes de la discrétisation *symmetry-preserving* de Verstappen et Veldman [166], de façon que la matrice de discrétisation vérifie la condition d'antisymétrie (6.50), soit $\mathcal{C}[\bar{U}] = -\mathcal{C}[\bar{U}]^T$.
- Enfin, l'intégrale de volume du terme instationnaire de (7.24) est approximée par une quadrature du trapèze :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_{i,j,k}^u} u \, dV \cong \frac{d}{dt} u_{i,j,k}(t) \left(\frac{1}{2} V_{i,j,k} + \frac{1}{2} V_{i+1,j,k} \right), \tag{7.29}$$

où apparaît uniquement la moitié de volume des cellules $\Omega_{i,j,k}$ et $\Omega_{i+1,j,k}$ adjacentes à $u_{i,j,k}$. Cette discrétisation est naturelle pour un maillage cartésien (figure 7.4). Pour un maillage de cut-cells, cette approximation a l'avantage de ne pas faire intervenir le volume du CV $\Omega_{i,j,k}^u$, qui est impossible à calculer, et elle est justifiée dans [Th1] par la conservation de la quantité de mouvement totale (6.21b) sur le maillage.

Il est à préciser que dans le cas d'un maillage cartésien (telle que la portion fluide des faces (7.6) vaut 0 ou 1 uniquement), toutes les discrétisations présentées ci-dessous retrouvent la méthode MAC [67] sur maillages uniformes, et la méthode *symmetry-preserving* [166] si le pas de discrétisation est non-uniforme.

7.3.1 Discrétisation de l'équation de continuité

Le point de départ de toute méthode numérique en variables primitives (\mathbf{v}, p) est la discrétisation de l'équation de continuité (7.23), qui exprime l'équilibre des débits massiques :

$$\bar{u}_f \equiv \int_{\Gamma_f} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS, \quad (7.30)$$

sur chaque face “f” de la cellule $\Omega_{i,j,k}$ représentée sur la figure 7.1. En appliquant les quadratures du point milieu (7.9) et (7.13) au vecteur $\mathbf{F} = \mathbf{v}$ sur les faces fluides et solide de la décomposition (7.1), on obtient :

$$\dot{m}_{i,j,k} \equiv \bar{u}_{i,j,k} - \bar{u}_{i-1,j,k} + \bar{v}_{i,j,k} - \bar{v}_{i,j-1,k} + \bar{w}_{i,j,k} - \bar{w}_{i,j,k-1} + \bar{U}_{i,j,k}^{\text{ib}} = 0. \quad (7.31)$$

Cette équation fait notamment apparaître les débits massiques sur les faces fluides, par exemple sur la face $\Gamma_{i,j,k}^e$:

$$\bar{u}_{i,j,k} \cong \Delta y_j \Delta z_k \theta_{i,j,k}^u u_{i,j,k}, \quad (7.32a)$$

qui fait intervenir la portion fluide des faces (7.6), tandis que le débit massique à travers la paroi solide prends l'expression :

$$\bar{U}_{i,j,k}^{\text{ib}} \cong u_{i,j,k}^{\text{ib}} [\Delta S_x]_{i,j,k}^{\text{ib}} + v_{i,j,k}^{\text{ib}} [\Delta S_y]_{i,j,k}^{\text{ib}} + w_{i,j,k}^{\text{ib}} [\Delta S_z]_{i,j,k}^{\text{ib}}, \quad (7.32b)$$

où $\mathbf{v}_{i,j,k}^{\text{ib}} = (u_{i,j,k}^{\text{ib}}, v_{i,j,k}^{\text{ib}}, w_{i,j,k}^{\text{ib}})$ désigne la vitesse au centroïde de la face solide, donnée par (7.14).

L'équation de continuité discrète (7.31) est valable pour tout type de *cut-cells* 2D ou 3D, et préserve la structure à 7 points (5 points en 2D) du stencil cartésien.

7.3.2 Gradient de pression discret

Le gradient de pression est discret est obtenu de façon algébrique comme le dual de l'opérateur divergence (7.26), et s'écrit pour l'équation de quantité de mouvement (7.24) dans $\Omega_{i,j,k}^u$:

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^u} p \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \, dS \cong [\mathcal{G}^x P]_{i,j,k} \equiv \theta_{i,j,k}^u \Delta y_j \Delta z_k (p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}). \quad (7.33)$$

Cette expression fait uniquement apparaître le paramètre géométrique de la face contenant $u_{i,j,k}$, et non ceux des faces normales $\Gamma_{i,j,k}^{u,w}$ et $\Gamma_{i,j,k}^{u,e}$ du CV. Dans le cas où le CV est constitué de 2 demi-cellules cartésiennes (Fig. 7.4), on a $\theta_{i,j,k}^u = 1$ et la formule (7.34) correspond au gradient de pression discret de la méthode MAC, qui est localement conservative car elle exprime une différence de flux sur les faces normales du CV. Par contre, si au moins une demi-cellule est une *cut-cell* (Fig. 7.5), $\theta_{i,j,k}^u \neq 1$ et la formule (7.34) n'est plus conservative : on montrera dans la section 7.5 que ce terme correspond à la contribution de la pression à la force hydrodynamique agissant sur les *cut-cells*.

Cette constatation, et le fait que le centroïde des *cut-cells* n'apparaît pas dans l'expression du gradient de pression discret, montre que la pression prends une valeur constante dans une *cut-cell* et

n'a pas besoin d'être précisément localisée. Ce type d'approximation peut être rapproché de l'élément fini mixte de Raviart et Thomas [128] où la vitesse est approchée par des polynômes par morceaux linéaires, et la pression par des éléments constants. Cette analogie sera exploitée dans la section 8.3.1 pour construire la méthode LS-STAG pour fluides viscoélastiques.

7.3.3 Discrétisation des flux diffusifs normaux

La discrétisation du flux diffusif normal est construite par analogie au gradient de pression discret (7.33), en remarquant qu'il correspondait au terme normal de la décomposition (7.21) pour $\mathbf{F} = p \mathbf{1}$:

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^u} p \mathbf{1} \cdot \mathbf{n}_\nu \, dS = \int_{\Gamma_{i,j,k}^u} p \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \, dS \cong \theta_{i,j,k}^u \Delta y_j \Delta z_k (p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}), \quad (7.34)$$

ce qui conduit à la discrétisation suivante du flux diffusif normal :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^u} \nabla u \cdot \mathbf{n}_\nu \, dS \cong \theta_{i,j,k}^u \Delta y_j \Delta z_k \left[\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1,j,k} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j,k} \right]. \quad (7.35)$$

La contrainte normale $\partial u / \partial x|_{i,j,k}$ est, comme la pression, situé à l'intérieur de la cut-cell $\Omega_{i,j,k}$ dont tous les paramètres géométriques sont bien définis. Par conséquent, ce terme peut être approximé avec le théorème de Green-Gauss (6.15) appliqué à $\Omega_{i,j,k}$, soit :

$$\int_{\Omega_{i,j,k}} \frac{\partial u}{\partial x} \, dV = \int_{\Gamma_{i,j,k}^e} u(\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n}) \, dS - \int_{\Gamma_{i,j,k}^w} u(\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n}) \, dS + \int_{\Gamma_{i,j,k}^{ib}} u(\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n}) \, dS, \quad (7.36)$$

et la quadrature du point milieu appliquée à chaque face conduit à l'expression suivante de la contrainte normale :

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j,k} \cong \frac{\theta_{i,j,k}^u u_{i,j,k} - \theta_{i-1,j,k}^u u_{i-1,j,k} + (\theta_{i-1,j,k}^u - \theta_{i,j,k}^u) u_{i,j,k}^{ib}}{V_{i,j,k} / \Delta y_j \Delta z_k}, \quad (7.37)$$

Cette formule aux différences est valable pour tout type de cut-cell, 2D ou 3D, et prends en compte les conditions aux limites sur la face solide. Dans le cas de cellules cartésiennes, elle permet de retrouver les formules à 2 points usuelles de la méthode MAC. Par exemple, pour une cellule cartésienne éloignée d'une paroi solide ($\theta_{i-1,j,k}^u = \theta_{i,j,k}^u = 1$), Eq. (7.37) conduit à :

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j,k} \cong \frac{u_{i,j,k} - u_{i-1,j,k}}{\Delta x_i}, \quad (7.38a)$$

et dans le cas où la paroi solide est alignée à la frontière *West* de la cellule ($\theta_{i-1,j,k}^u = 0$, $\theta_{i,j,k}^u = 1$), on retrouve l'expression du gradient normal à la paroi :

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j,k} \cong \frac{u_{i,j,k} - u_{i,j,k}^{ib}}{\Delta x_i}. \quad (7.38b)$$

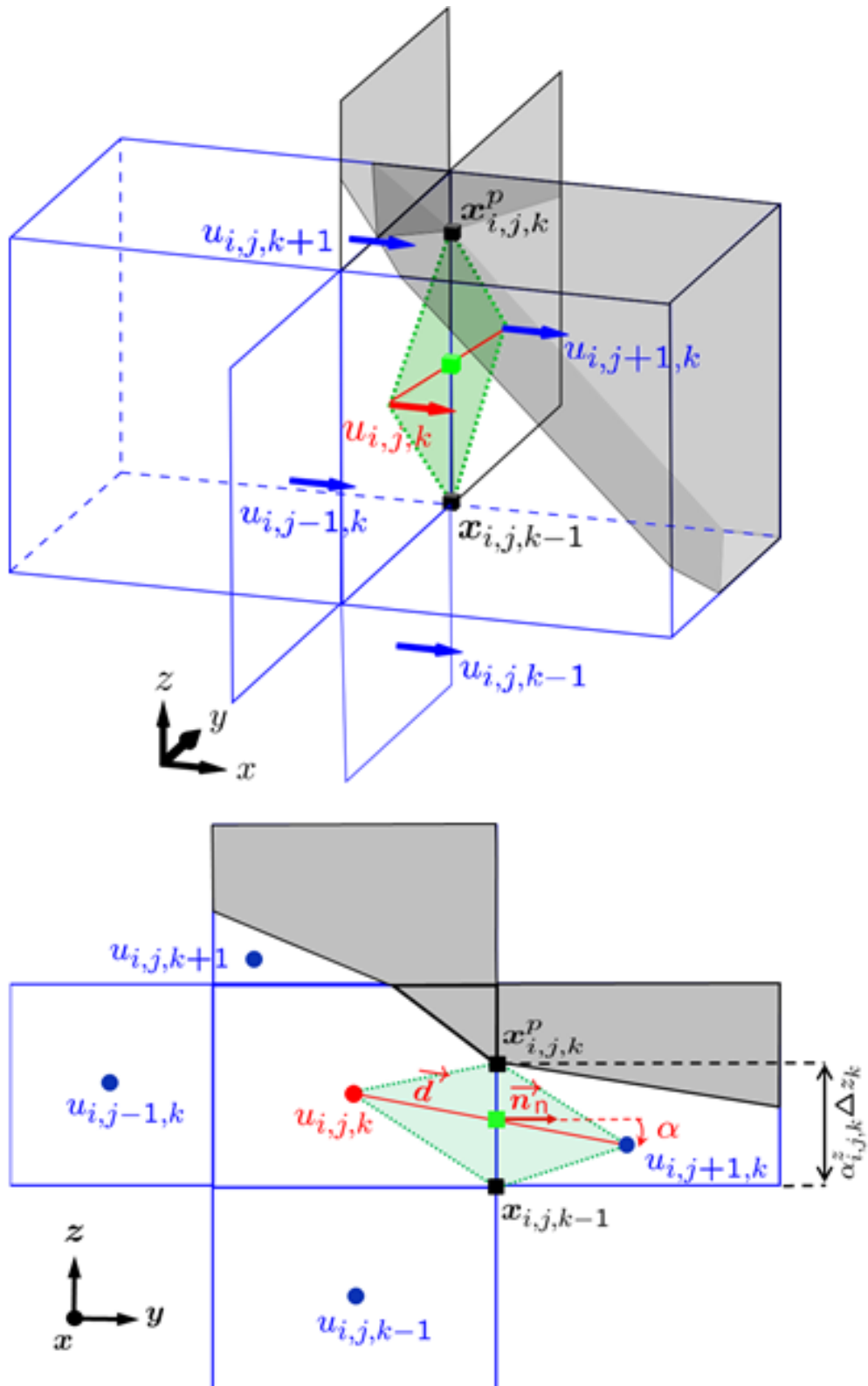


FIGURE 7.6 – Représentation des inconnues utilisées pour discrétiser le flux diffusif tangential (7.39) sur la face Nord $\Gamma_{i,j,k}^{u,n}$. En haut : vue tridimensionnelle du plan $x = x_i$; en bas : coupe dans le plan $x = x_i$. Ce flux est calculé si $\alpha_{i,j,k}^z > 0$, sinon il est mis à zéro.

7.4 Discrétisation des flux diffusifs tangentiels sur les faces fluides

Les flux diffusifs tangentiels (7.28) peuvent être discrétisés par une formulation de volumes finies classique, car chaque face élémentaire Nord, Sud, Top et Bottom de la décomposition (7.19) est une surface fluide bien définie appartenant aux faces des cellules cartésiennes. Considérons par exemple le flux tangential sur la face Nord $\Gamma_{i,j,k}^{u,n}$ du CV de la figure 7.6 (haut), qui est discrétisé comme :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,n}} \nabla u \cdot \mathbf{n}_\tau \, dS = \int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,n}} \frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \, dS \cong \Delta S_{i,j,k}^{u,n} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_n. \quad (7.39)$$

Ce flux est uniquement calculé lorsque la face fluide Nord séparant les inconnues $u_{i,j,k}$ et $u_{i,j+1,k}$ existe dans le CV. En pratique, cela est réalisé en testant la positivité de la portion fluide $\alpha_{i,j,k}^z$ de l'arête qui sépare ces inconnues voisines, comme représenté sur la figure 7.6 (bas). Lorsque $\alpha_{i,j,k}^z = 0$ une paroi solide sépare les inconnues $u_{i,j,k}$ et $u_{i,j+1,k}$: le flux (7.39) est mis à zéro dans le code de calcul, car on applique à la place le flux diffusif pariétal qui sera discuté dans la section (7.5).

Dans (7.39), la surface d'intégration $\Delta S_{i,j,k}^{u,n}$ est construite à partir des moitiés de faces Nord des cellules $\Omega_{i,j,k}$ et $\Omega_{i+1,j,k}$ qui la compose, ce qui donne :

$$\Delta S_{i,j,k}^{u,n} = \frac{1}{2} \Delta S_{i+1,j,k}^n + \frac{1}{2} \Delta S_{i,j,k}^n = \frac{\theta_{i+1,j,k}^v \Delta x_{i+1} + \theta_{i,j,k}^v \Delta x_i}{2} \Delta z_k. \quad (7.40)$$

La contrainte tangentielle $\partial u / \partial y|_n$, qui est représentée par un cube vert sur la figure 7.6, est positionnée au centre de l'arête $[\mathbf{x}_{i,j,k-1}, \mathbf{x}_{i,j,k}^P]$. Comme discuté dans la chronologie de la méthode LS-STAG (section 6.5), nous avons été amené à considérer les variantes 2PT et DCM de la discrétisation de ce terme, qui sont présentées ci-dessous.

7.4.1 Discrétisation 2PT des contraintes tangentiels

La figure 7.6 (bas) montre le CV dans la coupe bidimensionnelle $x = x_i$, qui contient toutes les inconnues intervenant dans la discrétisation du terme $\partial u / \partial y|_n$. Cette propriété remarquable de l'arrangement décalé des variables sur une grille cartésienne va nous permettre d'effectuer un raisonnement 2D dans le plan $x = x_i$ pour discrétiser les contraintes tangentiels au centre des arêtes fluides d'une cut-cell.

La discrétisation la plus simple de ce terme est donnée par la formule à 2 points (2PT) :

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_n \cong \frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j,k}}{\|\mathbf{d}\|}, \quad (7.41)$$

où $\mathbf{d} = \mathbf{x}_{i,j+1,k}^e - \mathbf{x}_{i,j,k}^e$ est le vecteur joignant le centroïde des faces. Dans le cas où \mathbf{d} est colinéaire au vecteur normal à la face $\mathbf{n}_n = \mathbf{e}_y$, la formule (7.41) correspond à la discrétisation cartésienne usuelle. Par contre, pour un CV formé de cut-cell cette formule perd sa précision au second-ordre lorsque la non-colinéarité du maillage augmente, par exemple lorsque l'angle $\alpha = \text{mes}(\mathbf{n}_e, \mathbf{d})$ dans la figure 7.6 (bas) augmente. Cette difficulté, qui est analogue à celle posée par la non-orthogonalité des maillages curvilinéaires et non-structurés [28, 109], a été observé en premier par l'équipe de Groningen [158,

160, 93, 157] pour des cut-cells 3D-extrudées. , plus particulièrement pour les contraintes tangentielles $\partial w/\partial x$ et $\partial w/\partial y$ dans la direction extrudée (Fig. 6.14). Cette équipe a proposé de calculer ces gradients avec une formule *ad hoc* construite par analogie au gradient de pression discret 2D sur la coupe du maillage, soit :

$$\frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{\mathbf{n}} \cong \frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j,k}}{(\frac{1}{2}\Delta S_{i+1,j,k}^e + \frac{1}{2}\Delta S_{i,j,k}^e)/\alpha_{i,j,k}^y \Delta z_k}. \quad (7.42)$$

Les discrétisations 2PT (7.41) et (7.42) des gradients tangentiels ont été utilisées dans la thèse de F. Nikfarjam [Th2] pour sa discrétisation dans les cut-cells 3D-extrudées, qui sera appelée dans la suite du manuscrit *méthode LS-STAG/2PT*. Les résultats numériques reportés dans [Th2], [A12-13] (et partiellement repris dans la section 8.5) ont montré que la méthode LS-STAG/2PT possédait une précision spatiale fortement dégradée.

7.4.2 Discrétisation DCM des contraintes tangentielles

B. Portelenelle [Th3] a ensuite observé qu'il était possible d'améliorer la précision des formules 2PT (7.41) et (7.42) en considérant une formule multi-points, construite dans le plan $x = x_i$ à partir de la discrétisation du gradient complet $\nabla u|_{\mathbf{n}} = (\partial u/\partial y|_{\mathbf{n}}, \partial u/\partial z|_{\mathbf{n}})$ exprimé dans la base locale ($\mathbf{n}_{\mathbf{n}} = \mathbf{e}_y, \mathbf{t}_{\mathbf{n}} = \mathbf{e}_z$) de l'arête $[\mathbf{x}_{i,j,k-1}, \mathbf{x}_{i,j,k}^p]$ (cf. figure 7.6). Cette formule est construite en discrétisant le gradient de vitesse suivant la direction \mathbf{d} comme :

$$\nabla u|_{\mathbf{n}} \cdot \frac{\mathbf{d}}{\|\mathbf{d}\|} = \cos \alpha \frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{\mathbf{n}} + \sin \alpha \frac{\partial u}{\partial z}\Big|_{\mathbf{n}} \cong \frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j,k}}{\|\mathbf{d}\|}, \quad (7.43)$$

et dans la direction tangentielle à l'arête :

$$\frac{\partial u}{\partial z}\Big|_{\mathbf{e}} \cong \frac{u(\mathbf{x}_{i,j,k}^p) - u(\mathbf{x}_{i,j,k-1})}{\alpha_{i,j,k}^z \Delta z_k}. \quad (7.44)$$

Ensuite, la substitution de (7.44) dans (7.43) donne la discrétisation suivante du gradient extra-diagonal :

$$\frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{\mathbf{n}} \cong \frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j,k}}{\|\mathbf{d}\| \cos \alpha} - \tan \alpha \frac{u(\mathbf{x}_{i,j,k}^p) - u(\mathbf{x}_{i,j,k-1})}{\alpha_{i,j,k}^z \Delta z_k}, \quad (7.45a)$$

qui fait intervenir l'expression du centroïde des faces (7.8) :

$$\|\mathbf{d}\| \cos \alpha = y_{i,j+1,k}^e - y_{i,j,k}^e, \quad \tan \alpha = \frac{z_{i,j+1,j}^e - z_{i,j,k}^e}{y_{i,j+1,j}^e - y_{i,j,k}^e}. \quad (7.45b)$$

Le premier terme de (7.45a) correspond à la contribution orthogonale du gradient (similaire aux formules 2PT (7.41) et (7.42)), tandis que le second terme correspond à une correction non-orthogonale. Ce terme de correction, qui fait intervenir les inconnues supplémentaires $u(\mathbf{x}_{i,j,k}^p)$ et $u(\mathbf{x}_{i,j,k-1})$ aux sommets du maillage, s'annule lorsque les vecteurs \mathbf{d} et $\mathbf{n}_{\mathbf{n}}$ sont colinéaires. Ces inconnues supplémentaires doivent être reconstruites à partir de la solution au centroïde des faces voisines par des formules de reconstruction, qui seront discutées dans la section 8.2.2.

Cette discrétisation des gradients est une technique versatile qui est couramment utilisées pour les méthodes numériques sur maillages non-structurés. Elle est communément appelée “secondary gradients” [99, 77, 55, 101, 109] dans la communauté de la CFD, et “diamond cell method” (DCM) [42, 25, 26] dans la communauté des mathématiques appliquées, car la formule (7.45) peut aussi être obtenue en appliquant le théorème de Green-Gauss (6.15) au volume de contrôle en forme de diamant (en vert sur la figure 7.6) dont les extrémités sont les centroides des faces $\mathbf{x}_{i,j,k}^e$, $\mathbf{x}_{i,j+1,k}^e$ et les sommets $\mathbf{x}_{i,j,k-1}$, $\mathbf{x}_{i,j,k}^p$. Pour cette raison, la variante de la méthode LS-STAG qui utilise la formule (7.45) pour calculer les termes extra-diagonaux sera appelée LS-STAG/DCM.

Discrétisation DCM sur la face solide d’une cut-cell

La technique DCM peut aussi être employée pour discrétiser le gradient de vitesse sur la face solide d’une cut-cell, qui sera utilisé dans la section 7.5.2 pour la discrétisation LS-STAG/DCM des flux diffusifs tangentiels à la paroi.

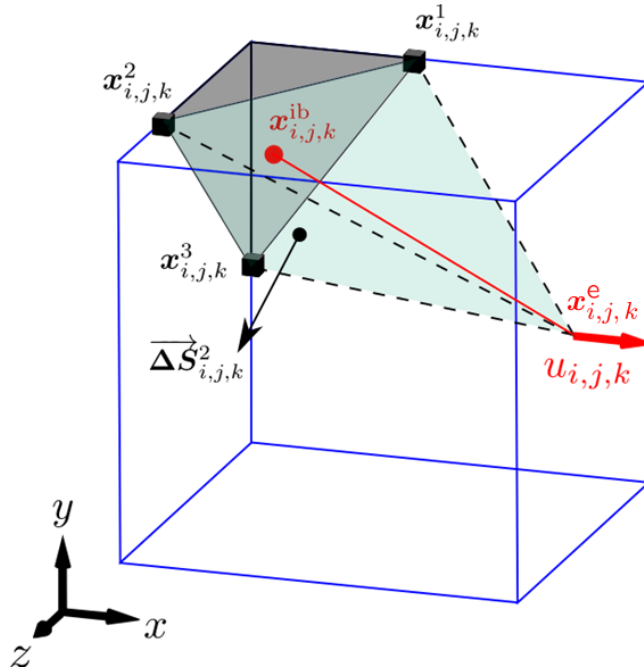


FIGURE 7.7 – Représentation du demi-diamant (en vert) utilisé pour discrétiser le gradient de vitesse sur la face solide de la cut-cell $\Omega_{i,j,k}$. Cette face solide possède $P = 3$ sommets.

Pour obtenir le gradient discret $\nabla u|_{i,j,k}^{ib,w}$ au centroïde $\mathbf{x}_{i,j,k}^{ib}$ de la face solide de la cut-cell représentée sur la figure 7.7, il n’est plus possible d’utiliser le raisonnement 2D utilisé précédemment sur les arêtes fluides. Comme proposé dans [43], nous allons appliquer le théorème de Green-Gauss (6.15) au demi-diamant 3D formé par le centroïde $\mathbf{x}_{i,j,k}^e$ et les sommets $\mathbf{x}_{i,j,k}^p$, $p = 1, \dots, P$, de la face solide $\Gamma_{i,j,k}^{ib}$, ce

qui conduit à :

$$\nabla u|_{i,j,k}^{\text{ib,w}} \cong \frac{1}{3V_D} \left[3u_{i,j,k}^{\text{ib}} \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^{\text{ib}} - u_{i,j,k} \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^{\text{ib}} + \sum_{p=1}^P u(\mathbf{x}_{i,j,k}^p) \left(\Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^p + \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^{p-1} \right) \right], \quad (7.46)$$

où V_D est le volume du demi-diamant, et le vecteur normal surfacique $\Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^p$ de la face triangulaire fluide de sommets $\mathbf{x}_{i,j,k}^e$, $\mathbf{x}_{i,j,k}^p$ et $\mathbf{x}_{i,j,k}^{p+1}$ est donné par :

$$\Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^p = \frac{1}{2} (\mathbf{x}_{i,j,k}^p - \mathbf{x}_{i,j,k}^e) \wedge (\mathbf{x}_{i,j,k}^{p+1} - \mathbf{x}_{i,j,k}^e), \quad (7.47)$$

avec la convention $\mathbf{x}_{i,j,k}^{P+1} = \mathbf{x}_{i,j,k}^1$ et $\Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^0 = \Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^P$. Cette expression ne fait intervenir que l'inconnue $u_{i,j,k}$ et les conditions aux limites aux sommets $\mathbf{x}_{i,j,k}^p$ et, contrairement à la formule DCM (7.45), il n'y a aucune donnée supplémentaire à reconstruire. Finalement, l'expression des gradients extradiagonaux $\partial u / \partial y|_{i,j,k}^{\text{ib,w}}$ et $\partial u / \partial z|_{i,j,k}^{\text{ib,w}}$ s'obtient de (7.46) en explicitant les coordonnées des vecteurs surfaciques dans la base canonique ($\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$).

Précisons que la formule DCM (7.46) est indépendante du nombre des sommets P qui composent la face solide de la cut-cell. Néanmoins, comme discuté dans la section 7.2.2, il est attendu que cette formule perde sa précision au second-ordre lorsque la face solide n'est pas plane, pour $P = 4, 5$ ou 6 . Une amélioration de la précision de la discrétisation, qui serait de considérer une triangulation de la paroi solide et d'appliquer le théorème de Green-Gauss à chaque demi-diamant formé par $\mathbf{x}_{i,j,k}^u$ et les triangles de la face, est laissée dans les perspectives de développement de la méthode LS-STAG.

7.5 Discrétisation des flux diffusifs sur la face solide

Comme discuté dans la section 6.4.3, la discrétisation des flux diffusifs sur la face solide des CVs doit correspondre à la discrétisation des forces hydrodynamiques agissant sur la paroi Γ^{ib} . Pour l'équation de quantité de mouvement horizontale (7.24), il suffit de considérer la discrétisation de la force de traînée (6.46a) dans les cut-cells :

$$F^{x,h} = \sum_{\text{cut-cells } \Omega_{i,j,k}} F_{i,j,k}^{x,h}, \quad (7.48a)$$

avec :

$$F_{i,j,k}^{x,h} = [\Delta S_x]_{i,j,k}^{\text{ib}} (p_{i,j,k} - \eta \dot{\gamma}_{xx}|_{i,j,k}^{\text{ib}}) - \eta [\Delta S_y]_{i,j,k}^{\text{ib}} \dot{\gamma}_{xy}|_{i,j,k}^{\text{ib}} - \eta [\Delta S_z]_{i,j,k}^{\text{ib}} \dot{\gamma}_{xz}|_{i,j,k}^{\text{ib}}, \quad (7.48b)$$

où apparaissent les composantes du maître-couple $\Delta \mathbf{S}_{i,j,k}^{\text{ib}}$ (7.11). En raison de l'arrangement décalé des CVs de vitesse, la paroi solide de la cut-cell $\Omega_{i,j,k}$ se décompose en demi-faces solides appartenant à $\Omega_{i-1,j,k}^u$ et $\Omega_{i,j,k}^u$ (cf. Fig. 7.8) :

$$\Gamma_{i,j,k}^{\text{ib}} = \Gamma_{i-1,j,k}^{u,\text{ib,e}} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib,w}}, \quad (7.49)$$

ce qui indique que la force de traînée $F_{i,j,k}^{x,h}$ est donnée par la somme des flux diffusifs pour $u_{i-1,j,k}$ et $u_{i,j,k}$ sur les demi-faces solides $\Gamma_{i-1,j,k}^{u,\text{ib,e}}$ et $\Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib,w}}$ respectivement.

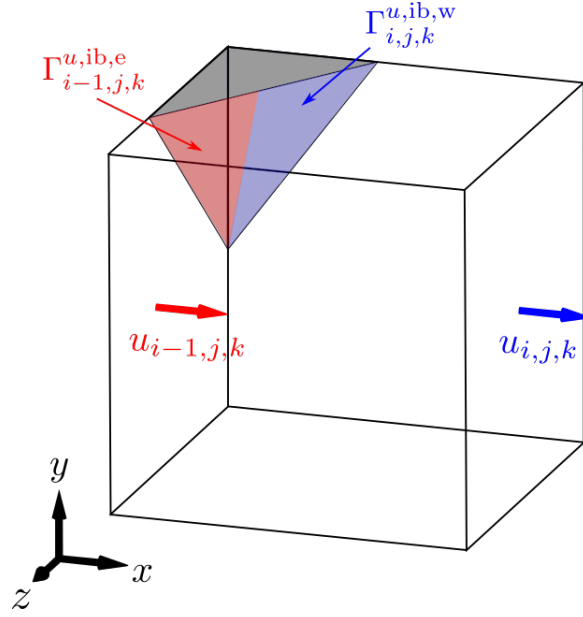


FIGURE 7.8 – Décomposition de la paroi solide $\Gamma_{i,j,k}^{\text{ib}}$ de la cut-cell $\Omega_{i,j,k}$ en une partie appartenant au CV de $u_{i-1,j,k}$ et l'autre appartenant au CV de $u_{i,j,k}$.

La conservation de la contribution normale de la force de traînée (premier terme de (7.48b)) se vérifie *a posteriori* [Th1]. En faisant la somme de la discrétisation du gradient de pression discret (7.33) et du flux diffusif normal (7.35) sur tous les CVs du maillage, les flux sur les faces cartésiennes se simplifient deux à deux et la somme dans les cut-cells se combine comme :

$$\sum_{\text{cut-cells } \Omega_{i,j,k}} (\theta_{i-1,j,k}^u - \theta_{i,j,k}^u) \Delta y_j \Delta z_k \left[p_{i,j,k} - \eta \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j,k} \right]. \quad (7.50)$$

Puisque $[\Delta S_x]_{i,j,k}^{\text{ib}} = (\theta_{i-1,j,k}^u - \theta_{i,j,k}^u) \Delta y_j \Delta z_k$, cette somme correspond à la contribution normale de la force de traînée (7.48) écrite sous forme de Laplace.

Afin d'achever la discrétisation des flux diffusifs dans les cut-cells, il reste uniquement à discrétiser la force de frottement pariétale (2 derniers termes de (7.48b)) et la répartir sur les demi-faces solides $\Gamma_{i-1,j,k}^{u,ib,e}$ et $\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,w}$, afin de définir le flux tangentiel pariétal sur les demi-face solide du CV $\Omega_{i,j,k}^u$ (dernier terme de (7.28)) :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,e} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,ib,w}} \nabla u \cdot \mathbf{n}_\tau \, dS = \int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,e} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,ib,w}} \frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \, dS + \int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,e} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,ib,w}} \frac{\partial u}{\partial z} \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n} \, dS, \quad (7.51)$$

et d'achever la discrétisation des flux diffusifs dans les cut-cells.

Pour la méthode LS-STAG/2PT, la répartition de la force de frottement selon les CVS pour $u_{i-1,j,k}$ et $u_{i,j,k}$, et le calcul des contraintes pariétales $\dot{\gamma}_{xy}|_{i,j,k}^{\text{ib}}$, $\dot{\gamma}_{xz}|_{i,j,k}^{\text{ib}}$ ne pouvait se faire que de manière *ad hoc* pour chacune des 3 cut-cells génériques 2D et 3D-extrudées. Dans la prochaine section, nous allons présenter la discrétisation 2PT et souligner les problèmes qui l'empêchent de s'appliquer aux

cut-cells 3D de forme arbitraire, avant de présenter comment l'outil des schémas diamants (DCM) de la section 7.4.2 permettra de lever cette limitation majeure.

7.5.1 Discrétisation 2PT des contraintes tangentielles à la paroi

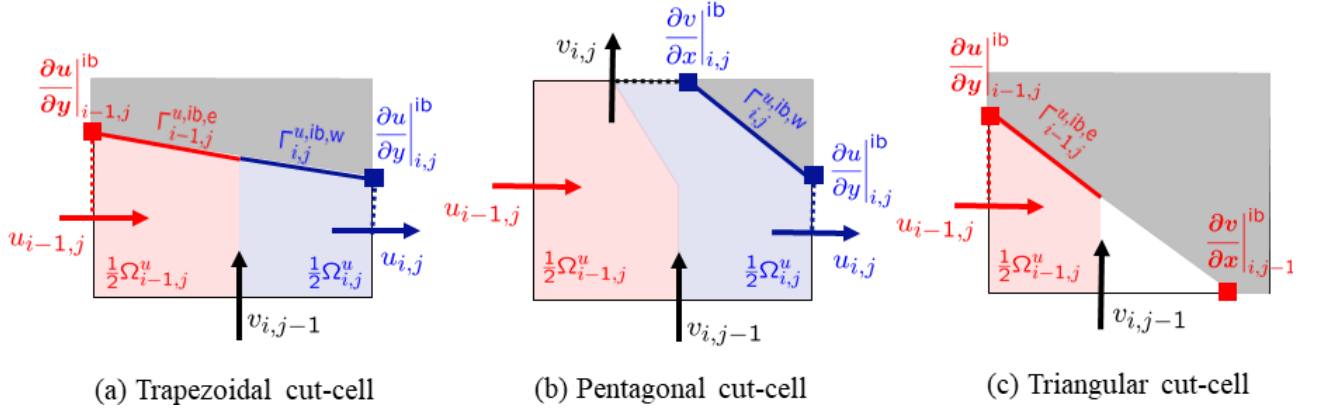


FIGURE 7.9 – Pour chaque type de cut-cells 2D, illustration de la répartition du frottement pariétal entre le CV pour $u_{i-1,j}$ (en rouge) et $u_{i,j}$ (en bleu) pour la méthode LS-STAG/2PT.

La discrétisation 2PT s'explique de manière concise en considérant, pour les 3 types de cut-cell 2D de la figure 7.9, la force de frottement pariétale :

$$F_{i,j}^{x,h} = -\eta[\Delta S_y]_{i,j}^{ib} \hat{\gamma}_{xy}|_{i,j}^{ib}. \quad (7.52)$$

Pour la *cut-cell* trapézoïdale où l'inconnue $v_{i,j}$ est absente, une discrétisation intuitive du cisaillement pariétal $\hat{\gamma}_{xy}|_{i,j}^{ib}$ est donnée par :

$$\hat{\gamma}_{xy}|_{i,j}^{ib} \cong \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u}{\partial y}|_{i-1,j}^{ib} + \frac{\partial v}{\partial x}|_{i,j-1}^{ib} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u}{\partial y}|_{i,j}^{ib} + \frac{\partial v}{\partial x}|_{i,j-1}^{ib} \right], \quad (7.53)$$

où le premier terme entre crochet contribue au flux diffusif sur la paroi $\Gamma_{i-1,j}^{u,ib,e}$ du CV pour $u_{i-1,j}$, et le second terme contribuera au flux sur la paroi $\Gamma_{i,j}^{u,ib,w}$ du CV pour $u_{i,j}$.

Les gradients discrets $\partial u/\partial y|_{i-1,j}^{ib}$ et $\partial u/\partial y|_{i,j}^{ib}$ de (7.53) s'obtiennent aisément à la manière de la *ghost fluid method* (GFM) pour problèmes elliptiques [59], par exemple :

$$\frac{\partial u}{\partial y}|_{i-1,j}^{ib} \cong \frac{u_{ib,w} - u_{i-1,j}}{\frac{1}{2}\alpha_{i-1,j}^y \Delta y_j}, \quad \frac{\partial u}{\partial y}|_{i,j}^{ib} \cong \frac{u_{ib,e} - u_{i,j}}{\frac{1}{2}\alpha_{i,j}^y \Delta y_j}, \quad (7.54)$$

où $u_{ib,w}$ et $u_{ib,e}$ sont données par les conditions aux limites aux sommets *West* et *East* de la cut-cell. Par contre, la discrétisation du terme $\partial v/\partial x|_{i,j-1}^{ib}$ est beaucoup plus délicate, car on ne peut construire de quotient de différences finies aussi intuitif que (7.54). Ils ont été considérés comme nuls pour les simulations 2D de fluides newtoniens ([Th1], [A8-A9]) et viscoplastiques [A10], tandis qu'une formule *ad hoc* basée sur le théorème de Schwarz a été utilisée en géométries 3D extrudées ([Th2],[A12]).

Considérons maintenant la *cut-cell* pentagonale de la figure 7.9(b). Les gradients discrets $\partial u/\partial y|_{i,j}^{\text{ib}}$ et $\partial v/\partial x|_{i,j}^{\text{ib}}$ peuvent également se calculer par une formule GFM, mais on retrouve la difficulté de la *cut-cell* précédente : les termes $\partial u/\partial y|_{i-1,j}^{\text{ib}}$ et $\partial v/\partial x|_{i,j-1}^{\text{ib}}$ ne peuvent se discrétiser de façon intuitive. Ici encore, une méthode *ad hoc* est utilisée dans [Th1], [A8-A10] et consiste à calculer le cisaillement pariétal uniquement avec les termes $\partial u/\partial y|_{i,j}^{\text{ib}}$ et $\partial v/\partial x|_{i,j}^{\text{ib}}$:

$$\dot{\gamma}_{xy}|_{i,j}^{\text{ib}} = \frac{\partial u}{\partial y}|_{i,j}^{\text{ib}} + \frac{\partial v}{\partial x}|_{i,j}^{\text{ib}} \cong \frac{u_{\text{ib,e}} - u_{i,j}}{\frac{1}{2}\alpha_{i,j}^y \Delta y_j} + \frac{v_{\text{ib,w}} - v_{i,j}}{\frac{1}{2}\alpha_{i,j}^x \Delta x_i}, \quad (7.55)$$

ce qui signifie que seuls les flux diffusifs de l'inconnue $u_{i,j}$ contribuent à la force de traînée (7.52).

Enfin, pour la *cut-cell* triangulaire de la figure 7.9(c), où seules les inconnues $u_{i,j-1}$ et $v_{i,j-1}$ sont présentes, la discrétisation GFM du cisaillement pariétal est donné par :

$$\dot{\gamma}_{xy}|_{i,j}^{\text{ib}} = \frac{\partial u}{\partial y}|_{i-1,j}^{\text{ib}} + \frac{\partial v}{\partial x}|_{i,j-1}^{\text{ib}}. \quad (7.56)$$

Néanmoins, [Th1] a défini la surface solide d'intégration $\Gamma_{i-1,j}^{u,\text{ib,e}}$ comme seulement la moitié de $\Gamma_{i,j}^{\text{ib}}$, en raison de la forme intuitée du demi-CV $\Omega_{i-1,j}^u$, ce qui empêche la stricte conservation de la quantité de mouvement dans les *cut-cells* triangulaires.

Ainsi, la méthode LS-STAG/2PT a rencontré 2 difficultés majeures dans la discrétisation de la force de frottement pariétale (7.52) :

- certains gradients pariétaux sont difficiles à discrétiser intuitivement, comme par exemple le terme $\partial v/\partial x|_{i,j-1}^{\text{ib}}$ pour la *cut-cell* trapézoïdale de la figure 7.9(a),
- la répartition du frottement pariétale (7.52) entre le CV des inconnues $u_{i-1,j}$ et $u_{i,j}$ est différente selon le type de *cut-cell* et, dans le cas d'une *cut-cell* triangulaire (Fig. 7.9(c)), la stricte correspondance avec les forces hydrodynamiques n'est pas observée.

Pour ces raisons, la discrétisation des flux tangentiels à la paroi doit se faire au cas par cas, selon la position de la frontière solide dans la *cut-cell*, ce qui empêche la généralisation au nombreux cas de *cut-cells* présentes dans un maillage 3D. Cette restriction importante de la méthode LS-STAG sera levée dans la section suivante, en utilisant l'outil des schémas diamants (DCM) présenté dans la section 7.4.2.

7.5.2 Discrétisation DCM des contraintes tangentielles à la paroi

Le point de départ de la discrétisation LS-STAG/DCM repose sur une réévaluation du frottement pariétal (7.4.2) dans les *cut-cells* 2D, qui s'efforce de conserver la simplicité de la répartition du cisaillement pariétal de la *cut-cell* trapézoïdale selon les inconnues de vitesse présentes. Comme cela est illustré sur la figure 7.10, la discrétisation DCM dans toutes les *cut-cells* repose sur :

- Le calcul des gradients pariétaux s'effectue maintenant avec la formule DCM (7.46) appliquée au centroïde de la face solide, ce qui permet de calculer sans ambiguïté les termes qui impossibles

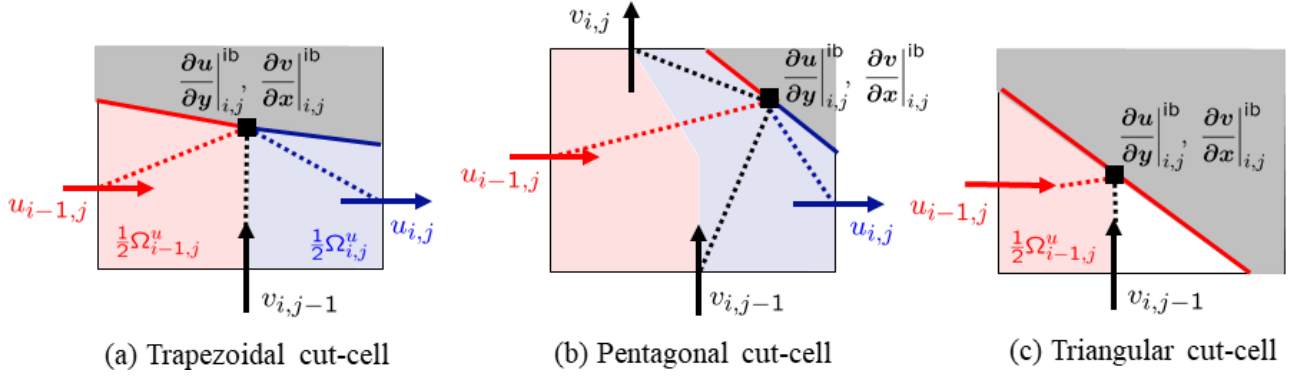


FIGURE 7.10 – Pour chaque type de cut-cells 2D, illustration de la répartition des forces hydrodynamiques entre le CV pour $u_{i-1,j}$ (en rouge) et $u_{i,j}$ (en bleu) pour la méthodes LS-STAG/DCM.

à calculer par l'outil GFM, comme le terme $\partial v / \partial x|_{i,j}^{\text{ib}}$ sur la figure 7.10(a). L'outil DCM est algorithmiquement simple à appliquer, car il n'y a pas besoin d'identifier le sommet où appliquer la condition aux limites, et [Th3] a montré que la formule DCM (7.46) permettait de retrouver la formule GFM (7.54) pour les cut-cells 2D en utilisant la linéarité des conditions aux limites.

- Le frottement pariétal est soit réparti entre les demi-faces du CV des 2 inconnues de vitesse présentes ($u_{i-1,j}$ et $u_{i,j}$ dans la figure 7.10(a) et (b)), soit donnée au CV de la seule inconnue de vitesse présente ($u_{i-1,j}$ dans la figure 7.10(c)).

Ces principes permettent de construire une discrétisation unifiée du cisaillement pariétal pour tous les types de cut-cells, qui ne dépend que de la présence des inconnues $u_{i-1,j}$ (si $\theta_{i-1,j}^u > 0$) et $u_{i,j}$ (si $\theta_{i,j}^u > 0$). De plus, le problème de conservation de la quantité de mouvement de la méthode 2PT est corrigée. De cette manière, pour calculer le frottement pariétal (7.53), que nous réécrivons comme :

$$F_{i,j}^{x,h} = -\eta[\Delta S_y]_{i,j}^{\text{ib}} \left[\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j}^{\text{ib}} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j}^{\text{ib}} \right], \quad (7.57)$$

l'algorithme LS-STAG/DCM pour discrétiser le terme $\partial u / \partial y|_{i,j}^{\text{ib}}$ s'écrit :

- Si $\theta_{i-1,j}^u > 0$ et $\theta_{i,j}^u > 0$:

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j}^{\text{ib}} = \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i-1,j}^{\text{ib}} + \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j}^{\text{ib}}, \quad (7.58)$$

- Si $\theta_{i-1,j}^u = 0$ et $\theta_{i,j}^u > 0$:

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j}^{\text{ib}} = \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j}^{\text{ib}}, \quad (7.59)$$

- Si $\theta_{i-1,j}^u > 0$ et $\theta_{i,j}^u = 0$:

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j}^{\text{ib}} = \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i-1,j}^{\text{ib}}, \quad (7.60)$$

et le terme $\partial v / \partial x|_{i,j}^{\text{ib}}$ est obtenu par un algorithme similaire basé sur la présence de $v_{i,j-1}$ (si $\theta_{i,j-1}^v > 0$) et $v_{i,j}$ (si $\theta_{i,j}^v > 0$) dans la cut-cell.

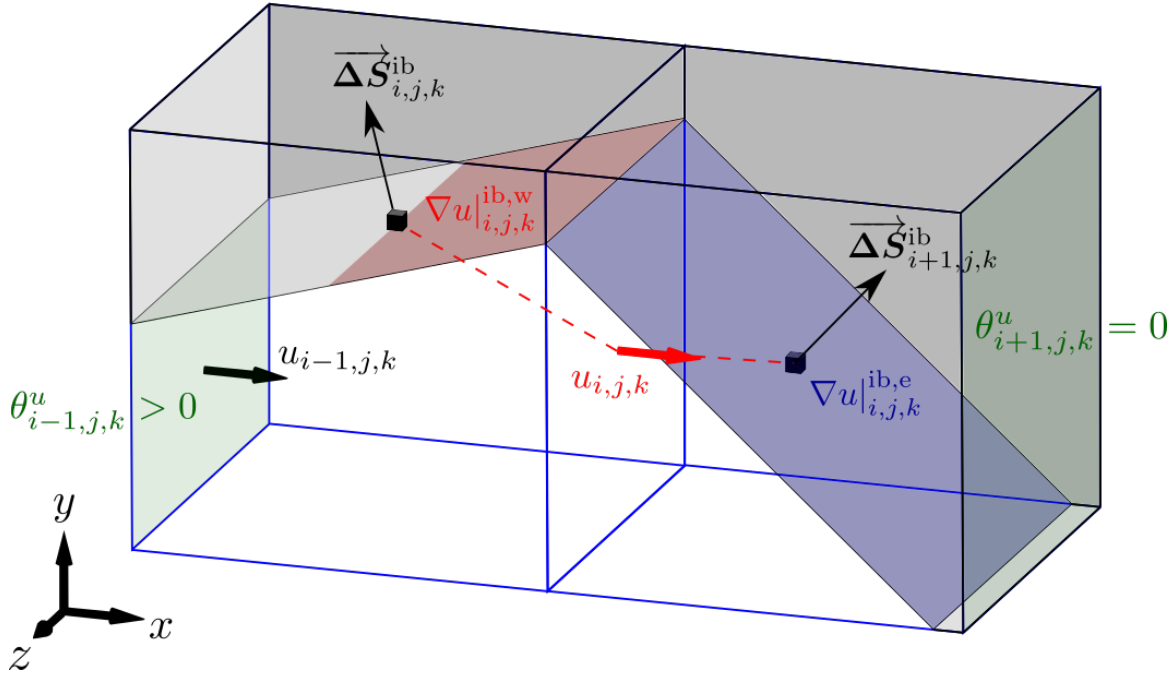


FIGURE 7.11 – Notations utilisées pour la discrétisation des flux diffusifs tangentiels à la paroi pour le CV de $u_{i,j,k}$. La surface colorée en rouge correspond à $\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,w}$, et celle en bleu à $\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,e}$.

Nous pouvons maintenant donner l’algorithme permettant de discrétiser les flux diffusifs pariétaux (7.51) dans un CV totalement 3D, par exemple celui représenté sur la figure 7.11. Puisque l’inconnue $u_{i-1,j,k}$ est présente dans la cut-cell $\Omega_{i,j,k}$, le flux sur la paroi $\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,w}$ est donné par la moitié de la force de traînée dans $\Omega_{i,j,k}$, soit :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,w}} \frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \, dS \cong \frac{[\Delta S_y]_{i,j,k}^{ib}}{2} \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j,k}^{\text{DCM},ib,w}, \quad \int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,w}} \frac{\partial u}{\partial z} \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n} \, dS \cong \frac{[\Delta S_z]_{i,j,k}^{ib}}{2} \left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{i,j,k}^{ib,w}, \quad (7.61)$$

où les composantes tangentielles $\partial u / \partial y|_{i,j,k}^{ib,w}$ et $\partial u / \partial z|_{i,j,k}^{ib,w}$ sont données par la formule DCM (7.46) appliqué au centroïde de la cut-cell $\Omega_{i,j,k}$. En revanche, puisque l’inconnue $u_{i+1,j,k}$ est absente de la cut-cell $\Omega_{i+1,j,k}$, le flux sur la paroi $\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,e}$ est donné par la totalité de la force de traînée dans $\Omega_{i+1,j,k}$, soit :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,e}} \frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \, dS \cong [\Delta S_y]_{i+1,j,k}^{ib} \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j,k}^{\text{DCM},ib,e}, \quad \int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,e}} \frac{\partial u}{\partial z} \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n} \, dS \cong [\Delta S_z]_{i+1,j,k}^{ib} \left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{i,j,k}^{ib,e}. \quad (7.62)$$

En pratique, le test sur la présence des inconnues $u_{i-1,j,k}$ et $u_{i+1,j,k}$ se fait à l’aide des portions fluide de face $\theta_{i-1,j,k}^u$ et $\theta_{i+1,j,k}^u$.

Cette discrétisation “générique” des flux diffusifs tangentiels à la paroi, est particulièrement simple à implémenter dans un code de calcul car elle ne demande pas de connaître la position de la paroi solide dans les cut-cells : seule la présence des inconnues voisines $u_{i-1,j,k}$ et $u_{i+1,j,k}$ est testée. Elle a l’avantage de pouvoir s’appliquer à tous types de cut-cells, 2D, 3D-extrudées ou totalement 3D,

contrairement à la discrétisation 2PT qui fournissait une discrétisation *ad hoc* pour les cut-cells 2D et 3D-extrudées uniquement.

7.6 Discrétisation skew-symmetric des flux convectifs

Les flux convectifs sont discrétisés selon les principes algébriques de la discrétisation (ou *symmetry-preserving*) de Verstappen et Veldman [166] discutée dans la section 6.4. Pour l'équation de quantité de mouvement horizontale (7.24), les flux convectifs dans le CV $\Omega_{i,j,k}^u$ prennent la forme du schéma à 7 points :

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_{i,j,k}^u} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u \, dS &\cong \mathcal{C}[\bar{U}]U \Big|_{i,j,k} \equiv \mathcal{C}^x[\bar{U}]_W(i, j, k) u_{i-1,j,k} + \mathcal{C}^x[\bar{U}]_E(i, j, k) u_{i+1,j,k} \\ &+ \mathcal{C}^x[\bar{U}]_S(i, j, k) u_{i,j-1,k} + \mathcal{C}^x[\bar{U}]_N(i, j, k) u_{i,j+1,k} \\ &+ \mathcal{C}^x[\bar{U}]_B(i, j, k) u_{i,j,k-1} + \mathcal{C}^x[\bar{U}]_T(i, j, k) u_{i,j,k+1} \\ &+ \mathcal{C}^x[\bar{U}]_P(i, j, k) u_{i,j,k} + [S_x^{\text{ib},c}](i, j, k), \end{aligned} \quad (7.63)$$

où les coefficients de la matrice de convection $\mathcal{C}^x[\bar{U}]$ doivent vérifier la condition d'antisymétrie (6.50), soit :

$$\mathcal{C}^x[\bar{U}]_E(i, j, k) = -\mathcal{C}^x[\bar{U}]_W(i+1, j, k), \quad (7.64a)$$

$$\mathcal{C}^x[\bar{U}]_N(i, j, k) = -\mathcal{C}^x[\bar{U}]_S(i, j+1, k), \quad (7.64b)$$

$$\mathcal{C}^x[\bar{U}]_T(i, j, k) = -\mathcal{C}^x[\bar{U}]_B(i, j, k+1) \quad (7.64c)$$

$$\mathcal{C}^x[\bar{U}]_P(i, j, k) = 0, \quad (7.64d)$$

et le terme $[S_x^{\text{ib},c}](i, j, k)$ correspond à la contribution des termes de bord, qui rentrent dans le second membre du système. Afin de respecter ces conditions, les flux convectifs sur les faces du CV sont discrétisés de façon consistante avec l'équation de continuité discrète (7.31) pour les cellules voisines, de façon à retrouver cette équation dans le terme diagonal (7.64d). Comme dans la section 6.4.2, seule l'approximation centrée avec la règle d'interpolation $\frac{1}{2} - \frac{1}{2}$ (6.37) permet de retrouver cette condition. Pour les termes extradiagonaux, les conditions (7.64a)-(7.64c) sont ensuite retrouvées par conservation locale des flux sur les faces fluides.

Considérons en premier le CV cartésien de la figure 7.4, où la discrétisation du flux convectif sur la face Est $\Omega_{i,j,k}^{u,e}$ s'écrit :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x) u \, dS \cong \bar{u}_e u_e. \quad (7.65)$$

Le débit massique \bar{u}_e n'est pas directement discrétisé sur la face $\Gamma_{i,j,k}^{u,e}$, mais relié aux débits massiques (7.32a) comme :

$$\bar{u}_e \cong \frac{1}{2} \bar{u}_{i,j,k} + \frac{1}{2} \bar{u}_{i+1,j,k}. \quad (7.66a)$$

La vitesse caractéristique de la face u_e est interpolée algébriquement comme

$$u_e \cong \frac{1}{2}u_{i,j,k} + \frac{1}{2}u_{i+1,j,k}, \quad (7.66b)$$

de façon que le terme souligné deux fois définit le coefficient Est du flux convectif comme :

$$\mathcal{C}^x[\bar{U}]_E(i, j, k) = \frac{1}{2}\underline{u}_e, \quad (7.67a)$$

et le terme souligné une seule fois contribue au coefficient central $\mathcal{C}^x[\bar{U}]_P(i, j)$. Une discrétisation analogue sur les autres faces élémentaires permet de retrouver dans le coefficient central les expressions de la continuité discrète (7.31) pour $\Omega_{i,j,k}$ et $\Omega_{i+1,j,k}$:

$$\mathcal{C}^x[\bar{U}]_P(i, j, k) = \frac{1}{4}\dot{m}_{i,j,k} + \frac{1}{4}\dot{m}_{i+1,j,k}, \quad (7.67b)$$

et les coefficients extra-diagonaux s'écrivent :

$$\mathcal{C}^x[\bar{U}]_W(i, j, k) = -\frac{1}{4}\bar{u}_{i-1,j,k} - \frac{1}{4}\bar{u}_{i,j,k}, \quad (7.67c)$$

$$\mathcal{C}^x[\bar{U}]_N(i, j, k) = \frac{1}{4}\bar{v}_{i,j,k} + \frac{1}{4}\bar{v}_{i+1,j,k}, \quad \mathcal{C}^x[\bar{U}]_S(i, j, k) = -\frac{1}{4}\bar{v}_{i,j-1,k} - \frac{1}{4}\bar{v}_{i+1,j-1,k}, \quad (7.67d)$$

$$\mathcal{C}^x[\bar{U}]_T(i, j, k) = \frac{1}{4}\bar{w}_{i,j,k} + \frac{1}{4}\bar{w}_{i+1,j,k}, \quad \mathcal{C}^x[\bar{U}]_B(i, j, k) = -\frac{1}{4}\bar{w}_{i,j,k-1} - \frac{1}{4}\bar{w}_{i+1,j,k-1}. \quad (7.67e)$$

Ces coefficients vérifient la condition d'antisymétrie (7.64) puisque le champ de vitesse vérifie l'équation d'incompressibilité discrète (7.31).

Pour le CV formé de demi-cut-cells représenté sur la figure 7.12, la construction de la discrétisation repose sur les mêmes principes que la discrétisation cartésienne. Néanmoins, la présence des faces solides nous entraîne à introduire les conditions de bord dans les formules cartésiennes (7.66), afin de retrouver la force d'inertie totale (6.45b) sur la paroi solide, et introduire le débit massique $\bar{U}_{i,j,k}^{\text{ib}}$ (7.32b) dans le coefficient central $\mathcal{C}^x[\bar{U}]_P(i, j, k)$. Pour la méthode LS-STAG/2PT [Th1],[Th2], ces modifications étaient introduites de façon *ad hoc* pour chacun des 3 types de cut-cells 2D et 3D-extrudées, et ne s'appliquait pas aux cut-cells "totalement" 3D. Nous présentons dans cette section la discrétisation proposée dans [Th3], qui repose sur un simple test de la présence des vitesses voisines et qui, comme la discrétisation DCM des flux diffusifs, s'applique à des cut-cells de forme arbitraire.

Cet algorithme est présenté pour le CV représenté sur la figure 7.12, et comme pour les flux diffusifs, une discrétisation distincte est effectuée pour les contributions normales (sur les faces $\Gamma_{i,j,k}^{u,e} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,w}$), tangentielles (sur $\Gamma_{i,j,k}^{u,n} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,s} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,t} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,b}$) et pariétales (sur $\Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib},e} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib},w}$) du flux convectif.

Sur la paroi $\Gamma_{i,j,k}^{u,e}$ de la figure 7.12(a), la discrétisation des flux convectifs normaux s'écrit :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x) u \, dS \cong \left(\frac{1}{2}\bar{u}_{i,j,k} + \frac{1}{2}\bar{u}_{i+1,j,k} \right) u_e, \quad (7.68)$$

et la vitesse caractéristique u_e est définie selon la présence de l'inconnue de vitesse $u_{i+1,j,k}$ à l'Est :

$$u_e \cong \begin{cases} \frac{1}{2}\underline{u}_{i,j,k} + \frac{1}{2}\underline{u}_{i+1,j,k} & \text{si } \theta_{i+1,j,k}^u > 0, \\ \frac{1}{2}\underline{u}_{i,j,k} + \frac{1}{2}\underline{u}_{i+1,j,k}^{\text{ib}} & \text{si } \theta_{i+1,j,k}^u = 0. \end{cases} \quad (7.69)$$

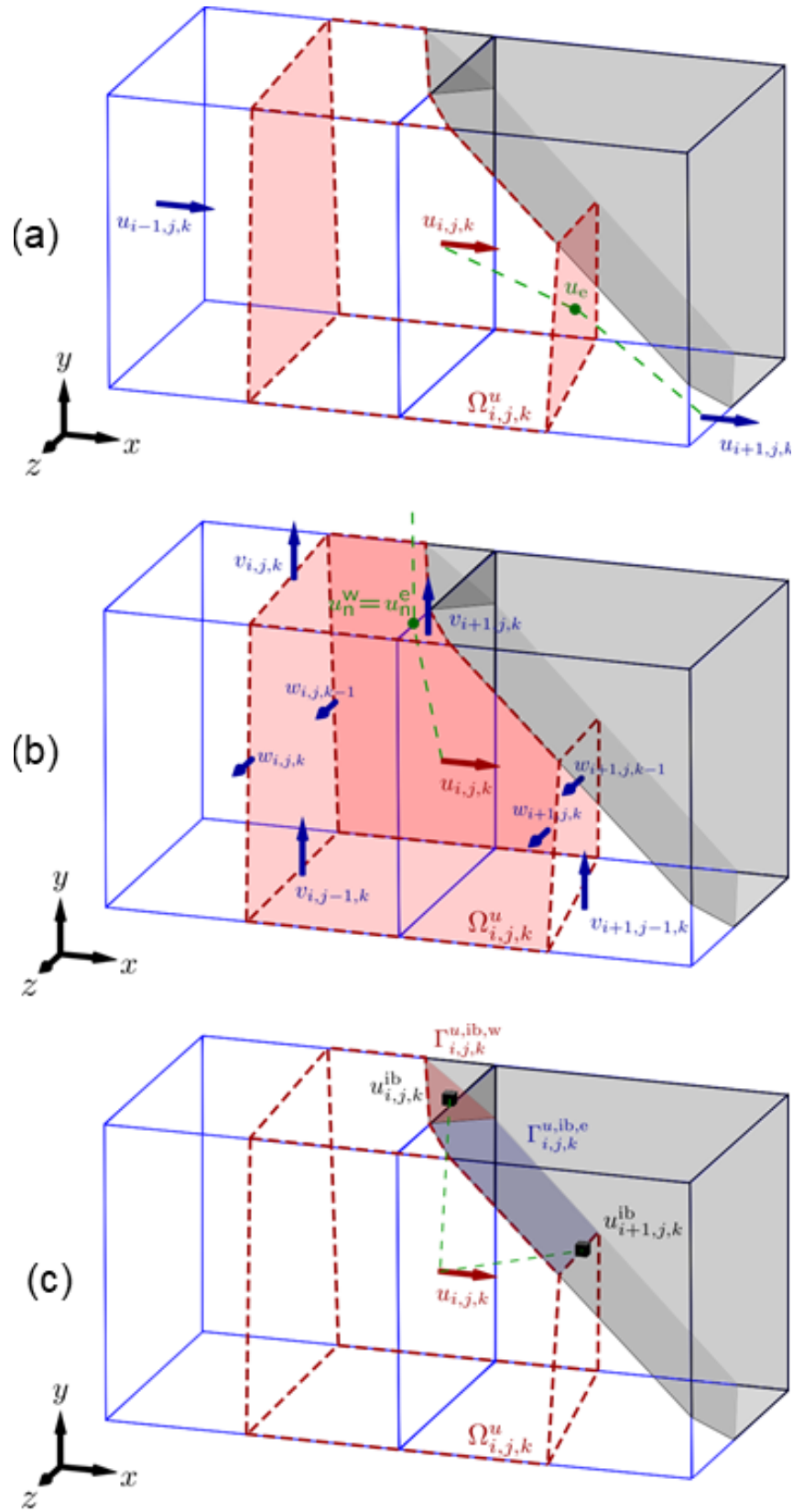


FIGURE 7.12 – Notations utilisées pour la discrétisation de (a) : le flux convectif normal sur $\Gamma_{i,j,k}^{u,e}$; (b) : le flux convectif tangentiel sur $\Gamma_{i,j,k}^{u,n}$; (c) : le flux convectif pariétal sur $\Gamma_{i,j,k}^{u,ib,e} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,ib,w}$.

Comme cela est montré sur la figure 7.12(a), ces interpolations nécessitent pas que les données de vitesse soient alignées sur le maillage, mais sont construites algébriquement pour vérifier les conditions d'antisymétrie (7.64). De cette façon, le terme souligné une fois contribue au coefficient central $\mathcal{C}^x[\bar{U}]_P(i, j, k)$, celui souligné 2 fois définit le coefficient Est $\mathcal{C}^x[\bar{U}]_E(i, j, k)$, et le terme souligné 3 fois contribue au terme source $[S_x^{\text{ib,c}}](i, j, k)$.

Considérons maintenant les flux convectifs tangentiels, par exemple le flux sur la paroi $\Gamma_{i,j,k}^{u,n}$ de la figure 7.12(b). Puisque la face $\Gamma_{i,j,k}^{u,n}$ appartient aux faces Nord de $\Omega_{i,j,k}$ et $\Omega_{i+1,j,k}$, le flux discret introduit les vitesses caractéristiques u_n^w et u_n^e sur chacune des faces :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,n}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_y) u \, dS \cong \frac{1}{2} \bar{v}_{i,j,k} u_n^w + \frac{1}{2} \bar{v}_{i+1,j,k} u_n^e. \quad (7.70)$$

La discrétisation est achevée en distinguant les cas où la face séparant les inconnues $u_{i,j+1,k}$ et $u_{i,j+1,k}$ est située dans le domaine fluide. Comme dans la section 7.4, ce test est effectué sur la portion fluide $\alpha_{i,j,k}^z$ de l'arête qui sépare les vitesses voisines. Dans le cas représenté sur la figure 7.12(b) où $\alpha_{i,j,k}^z > 0$, la vitesse $u_{i,j+1,k}$ peut être utilisée pour définir les vitesses caractéristiques :

$$u_n^e = u_n^w \cong \frac{1}{2} \underline{u_{i,j,k}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{u_{i,j+1,k}}}, \quad (7.71a)$$

où le terme souligné 1 fois contribue au terme central, et ici le terme souligné 2 fois définit le coefficient Nord. Dans le cas $\alpha_{i,j,k}^z = 0$, les vitesses caractéristiques u_n^w et u_n^e utilisent respectivement la condition aux limites sur la face solide des cut-cells $\Omega_{i,j,k}$ et $\Omega_{i-1,j,k}$:

$$u_n^w = \frac{1}{2} \underline{u_{i,j,k}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{u_{i,j,k}^{\text{ib}}}}, \quad u_n^e = \frac{1}{2} \underline{u_{i,j,k}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{u_{i+1,j,k}^{\text{ib}}}}, \quad (7.71b)$$

tel que le terme souligné une fois contribue au coefficient central $\mathcal{C}^x[\bar{U}]_P(i, j, k)$ et le terme souligné 3 fois contribue au terme source $[S_x^{\text{ib,c}}](i, j, k)$.

Comme pour les flux diffusifs (section 7.5), la discrétisation des flux convectifs pariétaux est séparé en une contribution sur $\Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib,w}}$ (appartenant à la cut-cell $\Omega_{i,j,k}$) et sur $\Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib,e}}$ (appartenant à la cut-cell $\Omega_{i+1,j,k}$) :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib}}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u \, dS = \int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib,e}}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u \, dS + \int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib,w}}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u \, dS. \quad (7.72)$$

La discrétisation de ces 2 termes doit s'effectuer de manière à retrouver sur la paroi solide des cut-cells la contribution des forces d'inertie à la quantité de mouvement totale (6.45b), soit :

$$\sum_{\text{cut-cells } \Omega_{i,j,k}} \int_{\Gamma_{i,j,k}^{\text{ib}}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u \, dS. \quad (7.73)$$

Considérons la cut-cell $\Omega_{i+1,j,k}$ de la figure 7.12(a), où les vitesses $u_{i,j,k}$ et $u_{i+1,j,k}$ sont toutes deux présentes. Dans ce cas, le flux convectif sur $\Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib,e}}$ qui s'écrit :

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib,e}}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u \, dS \cong \frac{1}{2} \bar{U}_{i+1,j,k}^{\text{ib}} \left(\frac{1}{2} \underline{u_{i,j,k}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{u_{i+1,j,k}^{\text{ib}}}} \right), \quad (7.74)$$

contribue pour moitié au bilan des forces d'inertie (7.73) dans la cut-cell $\Omega_{i+1,j,k}$, l'autre moitié étant donnée par le flux convectif $\int_{\Gamma_{i+1,j,k}^{u,\text{ib},w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \, dS$ du CV de $u_{i+1,j,k}$. Si l'inconnue $u_{i+1,j,k}$ est absente de la cut-cell, Eq. (7.74) doit être modifiée de façon à contribuer entièrement au bilan des forces d'inertie dans $\Omega_{i+1,j,k}$:

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib},e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \, u \, dS \cong \frac{1}{2} \bar{U}_{i+1,j,k}^{\text{ib}} \left(\frac{1}{2} u_{i,j,k} + \frac{1}{2} \underline{\underline{u_{i+1,j,k}^{\text{ib}}}} \right) + \frac{1}{2} \bar{U}_{i+1,j,k}^{\text{ib}} \underline{\underline{u_{i+1,j,k}^{\text{ib}}}}. \quad (7.75)$$

En pratique, la présence de $u_{i+1,j,k}$ est testée à l'aide de la fraction fluide de face $\theta_{i+1,j,k}^u$, comme pour les flux diffusifs pariétaux de la section 7.5.2). La discrétisation du flux convectif sur $\Gamma_{i,j,k}^{u,\text{ib},w}$ s'effectue avec un raisonnement identique, en testant la présence de $u_{i-1,j,k}$ dans le maillage.

Comme pour les flux diffusifs tangentiels, cette discrétisation est simple à implémenter dans un code de calcul car elle repose sur un test sur la présence des inconnues voisines $u_{i-1,j,k}$ et $u_{i+1,j,k}$, et s'applique à des cut-cells 3D de forme arbitraire. Brice Portelenelle a vérifié *a posteriori* dans sa thèse [Th3] que la discrétisation dans les cut-cells vérifiait les conditions d'antisymétrie (7.64).

7.7 Intégration en temps et implémentation informatique

L'intégration en temps des équations de Navier-Stokes semi-discrètes (6.47) est réalisée par le schéma à pas fractionnaires basé sur le schéma d'intégration implicite-explicite AB/BDF2 que j'ai employé depuis mon doctorat (voir par exemple [A1], [A4-5]). Dans le schéma AB/BDF2, le terme diffusif est pris en compte implicitement par la formule multi-niveaux de *Backward Differentiation Formula* (BDF) [124] afin d'éviter un pas de temps trop restrictif, tandis que les termes convectifs sont pris en compte explicitement par un schéma d'Adams/Bashforth (AB), de façon que la stabilité soit gouvernée par une condition de type CFL. L'intérêt de l'intégration en temps BDF pour traiter la diffusion est qu'elles sont L-stables [12] et, contrairement aux autres schémas populaires en CFD comme les schémas *implicit midpoint* ou Crank-Nicolson, elles sont particulièrement robustes pour la résolution de problèmes raides [154].

La première étape du schéma à pas fractionnaires AB/BDF2 consiste à prédire la vitesse au temps $t^{n+1} = (n+1)\Delta t$ (notée \tilde{U}) en résolvant les équations :

$$\rho \mathcal{M} \frac{3\tilde{U} - 4U^n + U^{n-1}}{2\Delta t} + 2\rho \mathcal{C}[\bar{U}^n]U^n - \mathcal{C}[\bar{U}^{n-1}]U^{n-1} - \mathcal{D}^T P^n - \eta \mathcal{K} \tilde{U} = 0. \quad (7.76)$$

La seconde étape, dite de correction, corrige \tilde{U} de façon que la vitesse vérifie l'équation de continuité (6.47a) :

$$\frac{3}{2} \rho \mathcal{M} \frac{U^{n+1} - \tilde{U}}{\Delta t} - \mathcal{D}^T (P^{n+1} - P^n) = 0, \quad (7.77a)$$

$$\mathcal{D} U^{n+1} + \bar{U}^{\text{b},n+1} = 0. \quad (7.77b)$$

Les tests numériques réalisés dans [A5] montre que le schéma (7.76)-(7.77) est précis en $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ pour la vitesse ainsi que la pression. Plus précisément, les simulations instationnaires de la méthode LS-

STAG sont réalisées avec ce schéma, tandis que les simulation stationnaires sont obtenues avec une version au premier ordre en temps, basée sur des schémas d’Euler.

L’étape de projection (7.77) conduit à la résolution d’une équation de Poisson discrète pour le potentiel de pression $\Phi = 2\Delta t(P^{n+1} - P^n)/3\rho$:

$$\mathcal{A}\Phi = \mathcal{D}\tilde{U} + \bar{U}^{b,n+1} \quad \text{avec } \mathcal{A} \equiv -\mathcal{D}\mathcal{M}^{-1}\mathcal{D}^T, \quad (7.78)$$

qui prends la forme d’un schéma à 7 points (5 points en 2D). La résolution de cette équation est la partie la plus coûteuse de l’algorithme en terme de ressources informatiques. Par contre, l’étape de prédiction (7.76) est résolue en quelques itérations d’un solveur itératif, car elle correspond à la résolution d’une équation discrète de type Helmholtz [A4] dont la diagonale est dominante.

Pour la méthode LS-STAG/2PT pour géométries 2D, les simulations 2D [Th1] ont été réalisées avec le solveur multigrille/BiCGSTAB de Van Kan *et al.* [161], initialement développé pour des discrétisations sur maillages structurés, sans qu’il ait été nécessaire de le modifier pour tenir compte de la présence de la frontière immergée. Il a été notamment observé que les simulations LS-STAG étaient effectuées sans dégradation significative de la performance du solveur par rapport aux simulations cartésiennes.

A partir de la thèse de F. Nikfarjam [Th2], le code LS-STAG a été développé en langage *FORTRAN 90* dans un environnement MPI parallélisé afin de pouvoir réaliser des simulations 3D. La parallélisation du code est obtenue en effectuant une décomposition cartésienne du domaine de calcul. Comme illustré sur la figure 7.13, les sous-domaines de la décomposition du domaine sont identifiés par les indices (I, J, K) . Chaque sous-domaine est entouré d’une couche de cellules tampon permettant de calculer les flux discrets à leur interface. A l’issue de chaque étape clé du schéma aux pas fractionnaires (Fig. 7.14), les valeurs dans les cellules tampons sont mises à jour à partir des données des sous-domaines voisins $(I \pm 1, J \pm 1, K \pm 1)$ en utilisant la routine MPI d’échange de messages `MPI_SENDRECV`. Pour chaque étape, la résolution itérative des systèmes linéaires est réalisée avec la librairie `HYPRE`¹ [53] de solveurs multigrilles et de Krylov parallélisés. L’algorithme de résolution parallèle présenté dans la figure 7.14 est similaire à celui d’une méthode cartésienne, ce qui montre que la discrétisation dans les cut-cells n’introduit pas de difficultés supplémentaires liées à la parallélisation.

Le code de calcul a été porté sur le supercalculateur parallèle IJL²-LEMTA de l’Université de Lorraine. La plupart des simulations 3D ont été réalisées sur des nœuds à 16 processeurs et 64 Go de mémoire RAM, utilisant des Intel Xeon E5-2660 cadencés à 2.20 GHz. Initialement développé pour la méthode LS-STAG/2PT pour cut-cells 3D-extrudées, ce code de calcul a été ensuite utilisé par B. Portelenelle [Th3] pour implémenter la discrétisation LS-STAG/DCM pour cut-cells totalement 3D, sans qu’il soit nécessaire de modifier son architecture parallèle. Des comparaisons sur les temps de restitution du code pour les variantes LS-STAG/2PT et DCM seront présentées dans la section 8.5.

1. HYPRE : High Performance Preconditioners.
 2. IJL : Institut Jean Lamour.

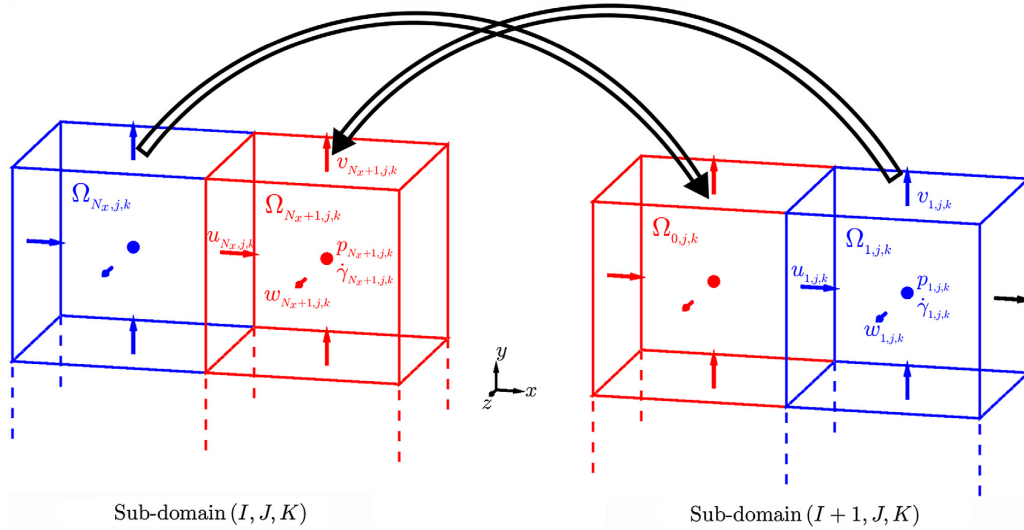


FIGURE 7.13 – Echange d’informations entre deux sous-domaines adjacents (I, J, K) et $(I + 1, J, K)$. Les données dans les cellules $\Omega_{N_x, j, k}$ et $\Omega_{1, j, k}$ (en bleu) sont dupliquées dans les cellules tampons $\Omega_{N_x+1, j, k}$ et $\Omega_{0, j, k}$ (en rouge).

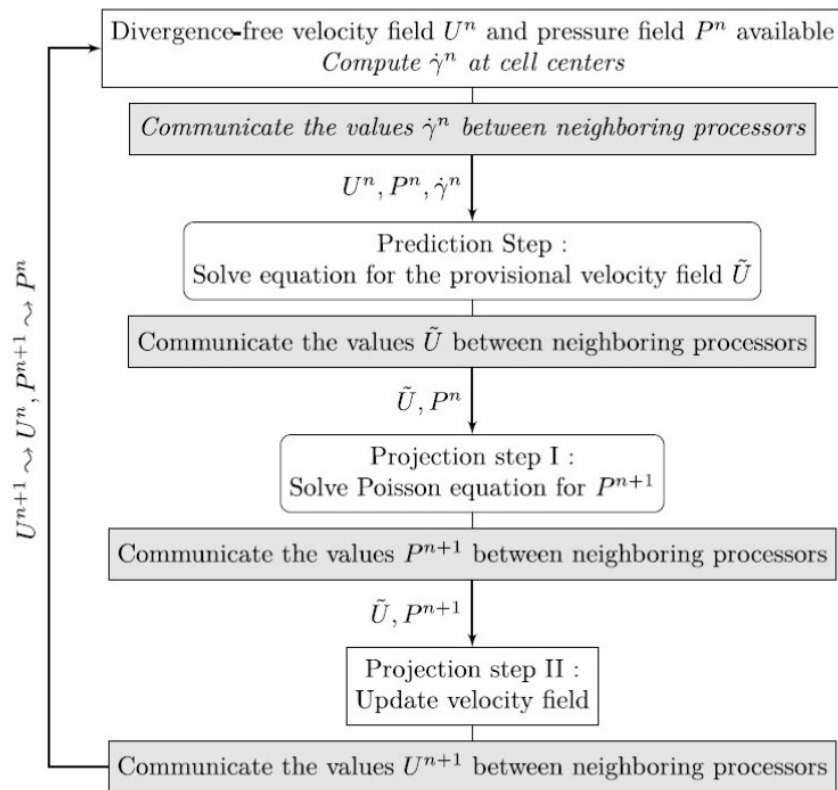


FIGURE 7.14 – Algorithme de parallélisation du schéma au pas fractionnaire (7.77)-(7.78). Les étapes des boîtes grisées correspondent aux commandes d’échange de données MPI. Les étapes en italiques sont uniquement nécessaires pour la simulation d’écoulements pseudoplastiques.

Chapitre 8

Applications de la méthode LS-STAG

8.1 Introduction au chapitre

Le chapitre précédent a présenté la discrétisation des équations de Navier-Stokes par la méthode LS-STAG. Cette présentation était effectuée de façon unifiée et non-chronologique pour les variantes 2PT et DCM, et nous rappelons que la variante 2PT s'appliquait aux géométries 2D et 3D-extrudées uniquement. Pour ces géométries, nous allons rappeler les améliorations essentielles qu'apporte la variante DCM :

- Pour les cut-cells 2D, la méthode LS-STAG/DCM n'apporte que des modifications marginales à la variante 2PT : l'outil DCM permet une répartition systématique des surfaces solides dans les volumes de contrôle afin de strictement conserver la quantité de mouvement (section 7.5), et il permet de calculer aisément les gradients de vitesse tangentiels qui apparaissent dans le post-traitement de quantités telles que le frottement à la paroi. La discrétisation des autres termes des équations de Navier-Stokes, y compris le flux diffusif sur les faces fluides des cut-cells, reste inchangée par rapport à la variante 2PT.
- Pour les cut-cells 3D-extrudées, les modifications du calcul du flux diffusif qu'apporte la méthode LS-STAG/DCM sont plus profondes : les gradients tangentiels $\partial w/\partial x$ et $\partial w/\partial y$ de la composante de vitesse w dans la direction extrudée, qui possèdent une contribution non-orthogonale sur les faces fluides des cut-cells, sont maintenant discrétisés par l'outil DCM.

Nous allons présenter les gains significatifs de précision qu'apporte l'outil DCM pour les géométries 2D et 3D extrudées, en considérant d'abord la solution exacte de Taylor-Couette, pour laquelle seront introduites les différentes techniques de reconstruction aux sommets de la formule DCM (7.45a). Nous considérerons ensuite un cas-test plus exigeant de convection naturelle 2D qui permet de clairement discriminer les différentes reconstructions aux sommets, et enfin un écoulement en géométries 3D-extrudées où le manque de précision de la variante 2PT était particulièrement flagrant, tandis que la variante DCM permet d'obtenir des résultats aussi précis qu'un code commercial *body fitted*.

Tous ces cas-tests avaient été considérés dans [Th1]-[Th3] pour valider les différentes étapes de la

discrétisation newtonienne. En outre, nous présenterons l'extension de la méthode LS-STAG/2PT aux écoulements non-newtoniens dans des géométries 2D. Pour les fluides viscoélastiques, nous avons été amené à développer une discrétisation compatible de la vitesse-pression-tenseur élastique, qui utilise notamment des volumes de contrôles décalés pour les contraintes élastiques normales et tangentielles. Afin d'obtenir une discrétisation unifiée pour les fluides non-newtoniens, les techniques développées pour la discrétisation de la viscoélasticité seront employés pour calculer le taux de cisaillement des modèles pour fluides pseudo-plastiques. Il est à préciser que la variante DCM n'a pas à ce jour été implémentée pour ce type d'écoulements. Enfin, nous présenterons des simulations d'écoulements totalement 3D issus de [Th3], où seule la variante DCM permet de traiter systématiquement les nombreux cas de cut-cells présentes dans le maillage.

8.2 Précision spatiale 2D des méthodes LS-STAG/2PT et DCM : écoulement dans une cellule de Taylor-Couette cylindrique

8.2.1 Description de la configuration et paramètres numériques

Depuis la thèse de Y. Cheny [Th1], la précision des différentes variantes de la méthode LS-STAG sont évalués sur la configuration classique d'un réacteur de Taylor-Couette, dans un régime où les équations de la chaleur (pour la température T) et de Navier-Stokes admettent une solution orthoradiale.

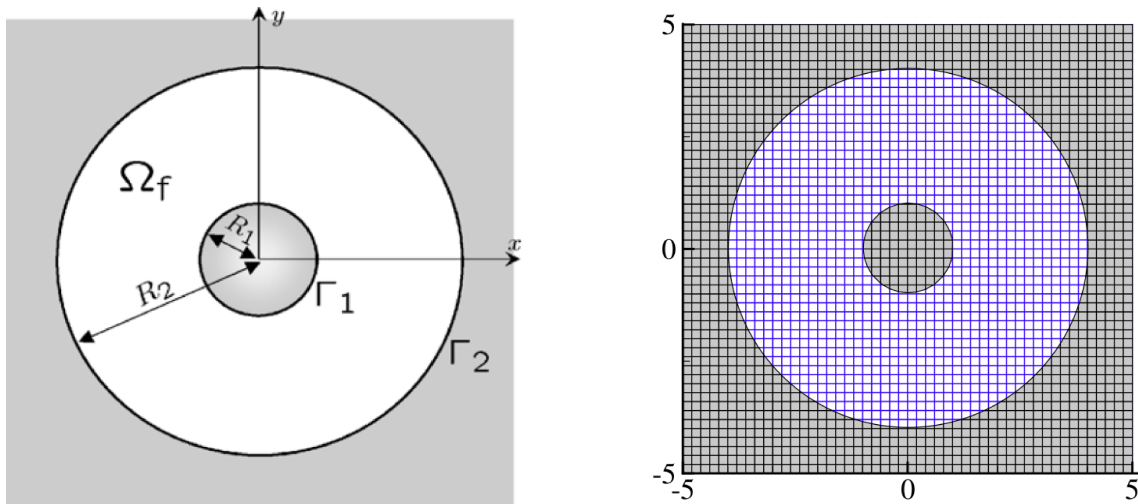


FIGURE 8.1 – A gauche : géométrie de la cellule de Taylor-Couette, où le domaine de calcul Ω_f est compris entre les cylindres concentriques Γ_1 de rayon R_1 et Γ_2 de rayon $R_2 = 4R_1$. A droite : maillage M_1 avec $N = 50$ cellules carrées dans les deux directions x et y .

Le domaine de calcul, représenté sur la figure 8.1 (gauche), et dont la fonction level-set est donnée par (7.4), est discrétisé par des cellules carrées de taille h . Les caractéristiques des maillages utilisés sont présentées dans le tableau 8.1, et le maillage le plus grossier M_1 est représenté sur la figure 8.1 (à

droite). Le centre des cylindres est choisi légèrement excentré avec $(x_c, y_c) = (0.013, 0.023)$ pour briser la symétrie du maillage, et ainsi éviter des cas particuliers de superconvergence de la solution.

Maillage	$N_x \times N_y$	Nombre de cellules	Cellules cartésiennes	Cut-cells
M_1	50×50	2500	1078 (81.8%)	240 (18.2%)
M_2	100×100	10000	4512 (90.4%)	480 (9.6%)
M_3	150×150	22500	10298 (93.5%)	720 (6.5%)
M_4	300×300	90000	41811 (96.7%)	1440 (3.3%)

TABLE 8.1 – Propriétés des maillages utilisés pour la configuration de Taylor-Couette. Les pourcentages sont calculés par rapport au nombre total de cellules fluides.

Les solutions numériques stationnaires sont obtenues après intégration en temps des équations, et l'état stationnaire est supposé obtenu lorsque la condition :

$$\frac{\max_{\text{CVs } \Omega_{i,j}} |\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n|}{\max_{\text{CVs } \Omega_{i,j}} |\phi_{i,j}^{n+1}|} \leq \epsilon, \quad (8.1)$$

est vérifiée pour le seuil $\epsilon = 10^{-7}$, avec $\phi = T$ (pour l'équation de température) et $\phi = u$ et v (pour les équations de Navier-Stokes). La précision spatiale est évaluée à partir de l'erreur maximale normalisée L_∞ sur toutes les cellules du maillages (cartésiennes et cut-cells), définie par :

$$E_h^\infty(\phi) = \frac{\max_{\text{CVs } \Omega_{i,j}} |\phi_{i,j} - \phi_{i,j}^{\text{ex}}|}{\max_{\text{CVs } \Omega_{i,j}} |\phi_{i,j}^{\text{ex}}|}, \quad (8.2)$$

qui est mesurée au centre des cellules (pour la température T) ou au centre des faces (pour la vitesse). Dans tous les résultats numériques présentés dans cette partie, on observe que les erreurs maximales sont obtenues dans les cut-cells.

8.2.2 Solution de conduction pure

Pour valider la discrétisation DCM des flux diffusifs présentée dans la section 7.4, B. Portele-nelle [Th3] a considéré la discrétisation de l'équation de température par une méthode centrée en cellules. La discrétisation des flux diffusifs sur la paroi Est $\Gamma_{i,j}^e$ de la figure 8.2, qui reprends la configuration dans la coupe du maillage 3D de la figure 7.6(bas), est donnée par :

$$F_e^d = \int_{\Gamma_{i,j}^e} \nabla T \cdot \mathbf{n} \, dS \cong \theta_{i,j}^u \Delta y_j \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_e, \quad (8.3)$$

où la discrétisation du gradient normal à la face est donné par une formule analogue à (7.45) :

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_e \cong \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{x_{i+1,j}^G - x_{i,j}^G} - \tan \alpha \frac{T_N - T_S}{\alpha_{i,j}^x \Delta y_j}, \quad \tan \alpha = \frac{y_{i+1,j}^G - y_{i,j}^G}{x_{i+1,j}^G - x_{i,j}^G}. \quad (8.4)$$

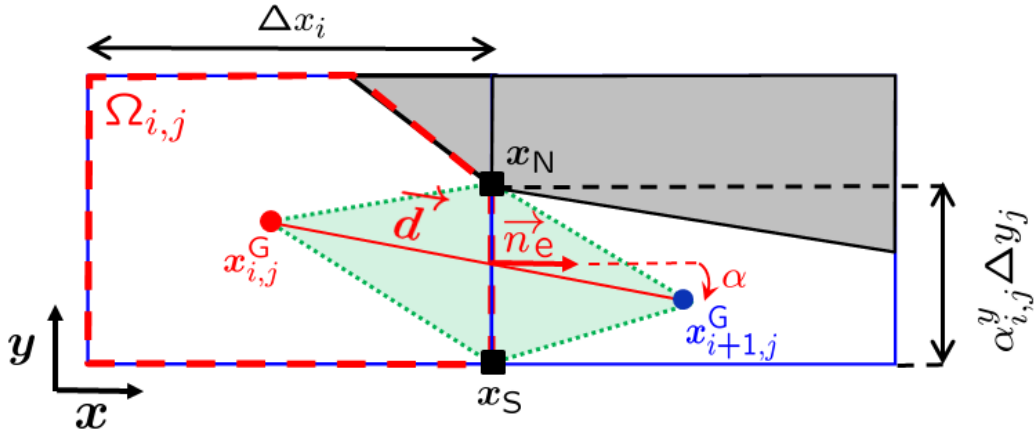


FIGURE 8.2 – Maillage 2D centré en cellules pour discrétiser l'équation de température. L'inconnue de température $T_{i,j}$ est positionnée au centroïde $\mathbf{x}_{i,j}^G$ de la cellule $\Omega_{i,j}$.

Dans le cas de conditions de Dirichlet, la valeur de la température au sommet \mathbf{x}_N est donnée par les conditions aux limites, tandis que sa valeur au sommet intérieur \mathbf{x}_S doit être reconstruite à partir des inconnues environnantes :

$$T_s \cong \sum_{(i,j) \in N_b(\mathbf{x}_S)} \omega_{i,j}(\mathbf{x}_S) T_{i,j}, \quad (8.5)$$

où $N_b(\mathbf{x}_S)$ désigne les indices des 4 cellules voisines du sommet \mathbf{x}_S , et les poids $\omega_{i,j}(\mathbf{x}_S)$ dépendent de la méthode de reconstruction utilisée. Comme nous le verrons par la suite, la précision de la méthode de reconstruction a un impact majeur sur la précision de la discrétisation LS-STAG/DCM.

Reconstruction de la solution aux sommets du maillage

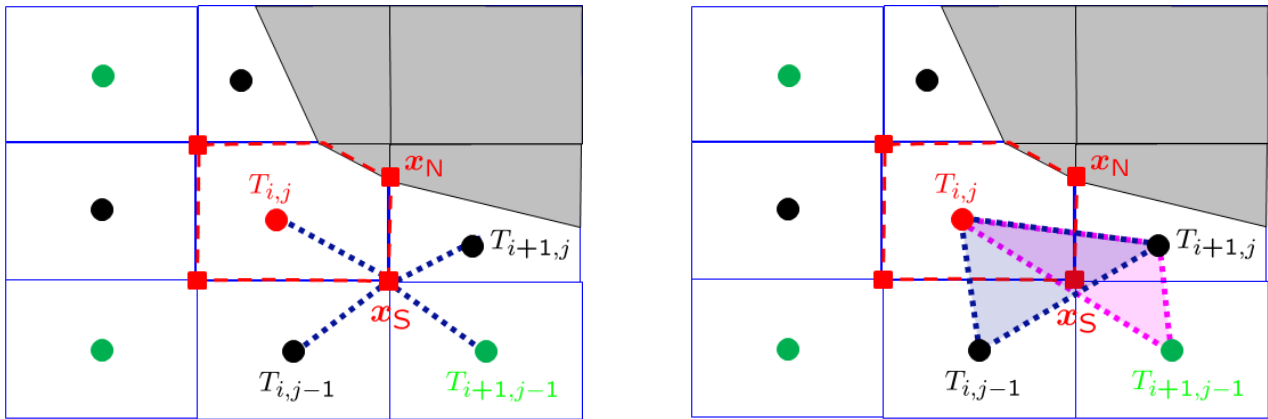


FIGURE 8.3 – A gauche : Reconstruction de la solution au sommet \mathbf{x}_S par méthode des distances inverses. A droite : le triangle utilisé pour l'interpolation barycentrique est le moins aplati (triangle de sommets $(\mathbf{x}_{i,j}^G, \mathbf{x}_{i,j-1}^G, \mathbf{x}_{i+1,j}^G)$, en bleu).

De nombreux problèmes scientifiques nécessitent la reconstruction d'une solution à partir de données dispersées (« *scattered data* »), comme par exemple le traitement d'images [7], la reconstruction de surfaces [35], l'interaction fluide-structure [91], ou encore l'estimation de paramètres [75]. Des revues sur la reconstruction de données dispersées ont été réalisées par Franke [57], Wendland [170] et Hormann [76]; ce dernier énonce trois relations pertinentes que doivent vérifier les poids de la reconstruction (8.5). Les deux premières relations traduisent l'exactitude de la reconstruction pour les fonctions constantes et linéaires respectivement :

$$\sum_{(i,j) \in N_b(\mathbf{x}_S)} \omega_{i,j}(\mathbf{x}_S) = 1, \quad (8.6a)$$

$$\sum_{(i,j) \in N_b(\mathbf{x}_S)} (\mathbf{x}_{i,j} - \mathbf{x}_S) \omega_{i,j}(\mathbf{x}_S) = \mathbf{0}, \quad (8.6b)$$

tandis que la troisième, appelée propriété de Lagrange :

$$\sum_{(i,j) \in N_b(\mathbf{x}_S)} \omega_{i,j}(\mathbf{x}_{k,l}) = \delta_{(i,j),(k,l)}, \quad (k,l) \in N_b(\mathbf{x}_S), \quad (8.7)$$

est vérifiée lorsque la reconstruction est une interpolation, *i.e.* la formule donne la valeur exacte lorsqu'elle est appliquée aux sommets $\mathbf{x}_{i,j}$. La reconstruction dont les poids vérifient la relation (8.6a) est précise à l'ordre 1 au moins, et elle est d'ordre 2 s'ils vérifient en plus la relation (8.6b).

Historiquement, la première méthode de reconstruction employée dans le cadre de la discrétisation DCM est basée sur la méthode des moindres carrés, qui recherche une fonction affine minimisant la somme quadratique des erreurs entre les valeurs prises par la fonction et les données utilisées. Cette méthode est très utilisée dans la communauté de la mécanique des fluides numérique; Martinelli & Jameson [99] et Jacon & Knight [77] l'utilisent notamment pour le calcul des flux diffusifs des équations de Navier-Stokes compressibles sur grilles non structurées. Dans la communauté des mathématiques appliquées, Coudière *et al.* [42] et Bertolazzi & Manzini [26] utilisent cette reconstruction pour l'approximation volumes-finis de problèmes de diffusion. La définition des poids de moindres carrés est donnée par exemple dans [99] ou [Th3], et on peut facilement montrer qu'ils vérifient les relations (8.6a) et (8.6b). Néanmoins, les résultats de [Th3] et [A13] ont montrés que la reconstruction par moindres carrés peut donner des poids négatifs dans les cut-cells de très petit volume, ce qui entraîne une perte de précision très significative de la méthode LS-STAG/DCM (*cf.* section 8.4).

Bertolazzi & Manzini [26] ont aussi proposé d'utiliser une interpolation basée sur la distance inverse aux sommets (fig. 8.3 (gauche)), appelée « méthode de Shepard » [146] dans les sciences de l'information géographique, dont les poids sont définis par :

$$\omega_{i,j} = \frac{\|\mathbf{x}_{i,j}^G - \mathbf{x}_S\|^{-p}}{\sum_{(i,j) \in N_b(\mathbf{x}_S)} \|\mathbf{x}_{i,j}^G - \mathbf{x}_S\|^{-p}}, \quad (8.8)$$

où $p \geq 1$ est une exposant donné ($p = 1$ correspond à la distance euclidienne). Cette reconstruction est seulement au premier ordre car elle ne vérifie généralement que la condition (8.6a), mais Bertolazzi

& Manzini [26] ont proposé un algorithme pour modifier les poids de façon à vérifier aussi la condition (8.6b). Cet algorithme, qui est décrit dans [Th3], a néanmoins le désavantage de ne pas générer un jeu de poids unique et possède une implémentation pratique malaisée.

Pour cette raison, B. Portelenelle [Th3] a considéré une interpolation barycentrique dans le “meilleur” triangle formé par les 4 centroïdes voisins. Dans la configuration représentée sur la figure 8.3 (droite), seuls 2 triangles parmi les 4 possibles contiennent le point \mathbf{x}_S et donnent des poids positifs ; on sélectionne alors le triangle le moins aplati, dont l’angle minimal est le plus proche de celui d’un triangle équilatéral. Cette méthode de reconstruction est d’ordre 2 par construction, car les poids sont obtenus par la résolution du système linéaire formé par les conditions (8.6a) et (8.6b), et ils vérifient de plus la propriété de Lagrange (8.7).

L’utilisation de la discrétisation DCM avec reconstruction aux sommets a pour conséquence d’élargir le stencil du système linéaire de diffusion au voisinage des cut-cells. Tandis que la méthode 2PT appliquée aux 4 faces de la cut-cell $\Omega_{i,j}$ engendrait un stencil à 5 points (centroïdes en noir dans la figure 8.3), la reconstruction aux sommets de la méthode DCM étend le stencil aux 9 centroïdes environnants (centroïdes en vert dans la figure 8.3). Dans le code LS-STAG, ce stencil élargi est pris en compte par l’interface semi-structurée du solveur HYPRE (*cf.* section 7.7).

Résultats numériques

La précision des méthodes LS-STAG/2PT et DCM est comparée pour l’équation de la chaleur dans un régime de convection pure, où la distribution radiale de température dans le réacteur de Taylor-Couette est donnée par :

$$T^{\text{ex}}(r) = \varphi R_1 \ln(r/R_2) + T_2, \quad \varphi = \frac{T_1 - T_2}{R_1 \ln(R_1/R_2)}, \quad (8.9)$$

qui vérifie les conditions de Dirichlet $T(r = R_1) = T_1$ et $T(r = R_2) = T_2$. Les différentes reconstructions aux sommets de la méthode DCM sont labellisées LS-STAG/DCM-xxx de la façon suivante :

- ID1 : reconstruction d’ordre 1 avec poids par distance inverse (8.8) et $p = 2$,
- ID2 : reconstruction d’ordre 2 avec poids par distances inverses et $p = 2$, obtenue par l’algorithme discuté dans [26],
- LSQ : reconstruction d’ordre 2 avec poids par moindres carrés,
- TRI : reconstruction d’ordre 2 par interpolation barycentrique basée sur une triangulation.

La figure 8.4 présente les résultats obtenus avec la méthode LS-STAG/2PT et les différentes variantes de la méthode DCM. La méthode LS-STAG/2PT donne clairement les résultats les moins précis, qui observent un ordre de convergence seulement linéaire. Les erreurs données par toutes les variantes de reconstruction aux sommets de la méthode LS-STAG/DCM sont inférieures de plusieurs décades, ce qui met clairement en évidence l’intérêt de cette discrétisation. Notons cependant que les erreurs de la variante ID1 saturent sur les niveaux de grille les plus fins et tendent vers l’ordre 1, ce qui est causé par la faible précision de la méthode de reconstruction. Toutes les autres reconstructions

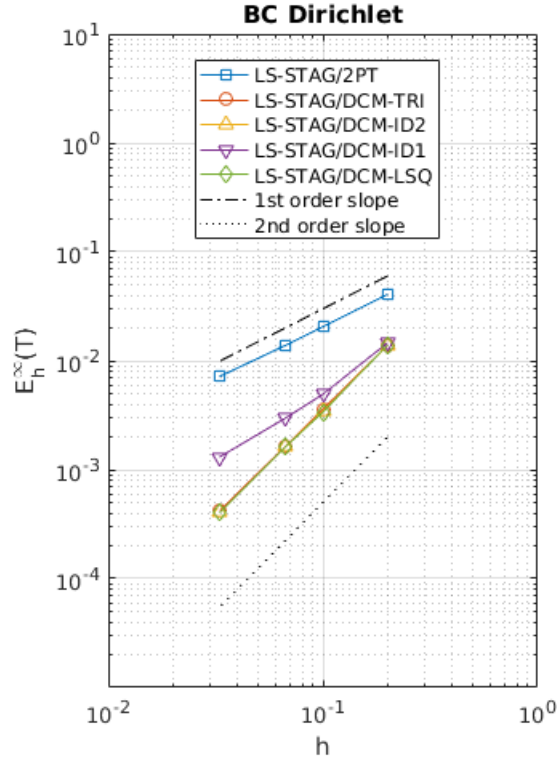


FIGURE 8.4 – Norme L_∞ de l’erreur sur la température (8.2) en fonction du pas de discrétisation $h = 10R_1/N$ pour la configuration de Taylor-Couette. Les droites de pente 1 et 2 sont représentées sur le graphique.

(ID2, LSQ, DCM-TRI) présentent une convergence au second ordre, avec des résultats similaires pour ce cas-test simple. On présentera dans la section 8.4 une configuration plus exigeante qui permettra de mieux évaluer la précision et la robustesse des différentes méthodes d’interpolation.

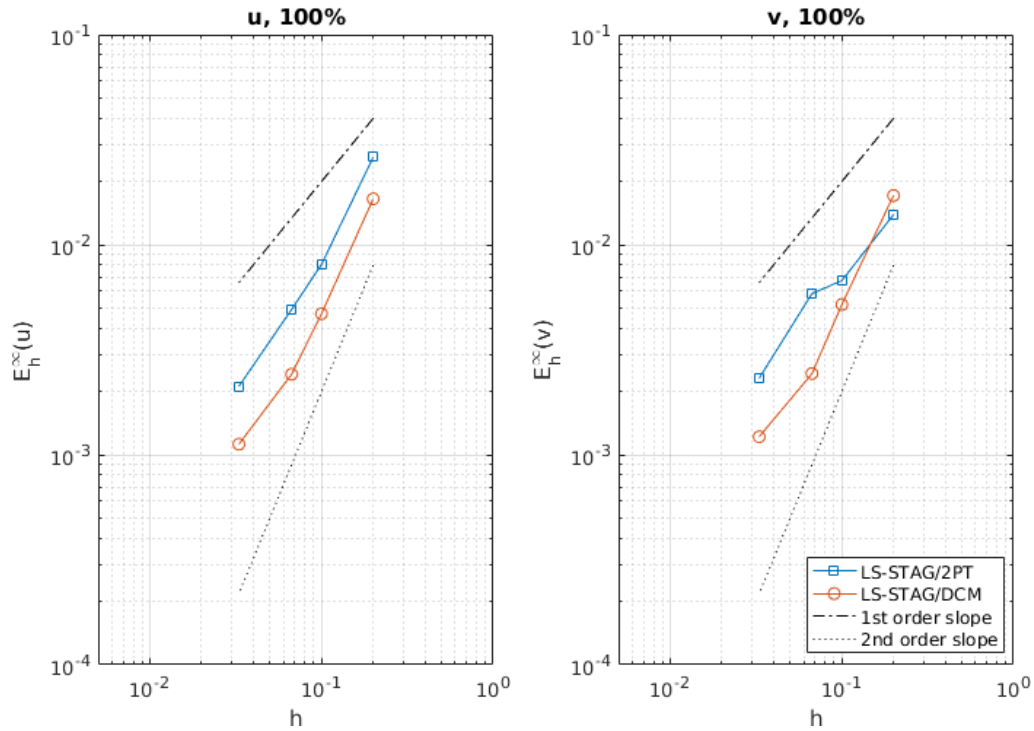
Il est à noter que les références [Th3] et [A13] présentent aussi des résultats obtenus pour des conditions aux limites de Neumann, où la valeur de T_N dans (8.4) doit être interpolée à partir du flux à la paroi φ et des inconnues voisines. Les résultats numériques sont similaires à ceux montrés ici pour les conditions de Dirichlet et ne sont pas reproduits ici.

8.2.3 Solution de Navier-Stokes

Les variantes LS-STAG/2PT et DCM sont maintenant évaluées pour une solution de Navier-Stokes dans le cas où le cylindre intérieur du réacteur de Taylor-Couette est mis en mouvement avec la vitesse angulaire ω . En dessous du seuil de l’instabilité primaire, la solution est purement orthoradiale [Th1] :

$$u_{\text{ex}}(x, y) = -K \left[\frac{R_2^2}{r^2} - 1 \right] (y - y_c), \quad v_{\text{ex}}(x, y) = K \left[\frac{R_2^2}{r^2} - 1 \right] (x - x_c), \quad K = \frac{\omega R_1^2}{R_2^2 - R_1^2}. \quad (8.10)$$

La figure 8.5 présente les résultats obtenus pour chaque composante de vitesse. Toutes les variantes de la méthode LS-STAG/DCM donnent des erreurs plus faibles que la méthode 2PT, et entraînent


 FIGURE 8.5 – Norme L_∞ de l'erreur sur u et v en fonction du pas h de maillage.

également moins d'accidents de convergence : l'ordre de convergence des variantes ID2, LSQ, et-TRI est égal à 2 sur les trois premiers niveaux de grille, et légèrement inférieur si l'on considère en outre le quatrième. Ces résultats illustrent le fait que la méthode LS-STAG/DCM qui, comme rappelé en début de chapitre, n'apporte en 2D que des améliorations minimales à la méthode 2PT, permet d'obtenir des résultats sensiblement meilleurs que la méthode 2PT. Pour des géométries 3D-extrudées, les résultats de la section 8.5 montreront que la variante DCM apportera une amélioration très significative de la précision spatiale de la méthode LS-STAG.

8.3 Simulation d'écoulements non-newtoniens

Dans cette partie, nous allons décrire l'extension de la méthode LS-STAG aux écoulements non-newtoniens où, pour les fluides pseudo-plastiques, le tenseur des contraintes est donné explicitement par le modèle newtonien généralisé (6.8) et, pour les fluides viscoélastiques, il est donné par la résolution de la loi constitutive générale (6.12), (6.13). Cette équation de nature hyperbolique (et non-linéaire dans le cas du modèle de Giesekus) est couplée aux équations de Navier-Stokes, ce qui donne lieu à la résolution de 3 équations scalaires supplémentaires en 2D (5 en 3D) pour chaque composante du tenseur des contraintes élastique :

$$\boldsymbol{\tau}_e = \begin{pmatrix} \tau_e^{xx} & \tau_e^{xy} \\ \tau_e^{xy} & \tau_e^{yy} \end{pmatrix}. \quad (8.11)$$

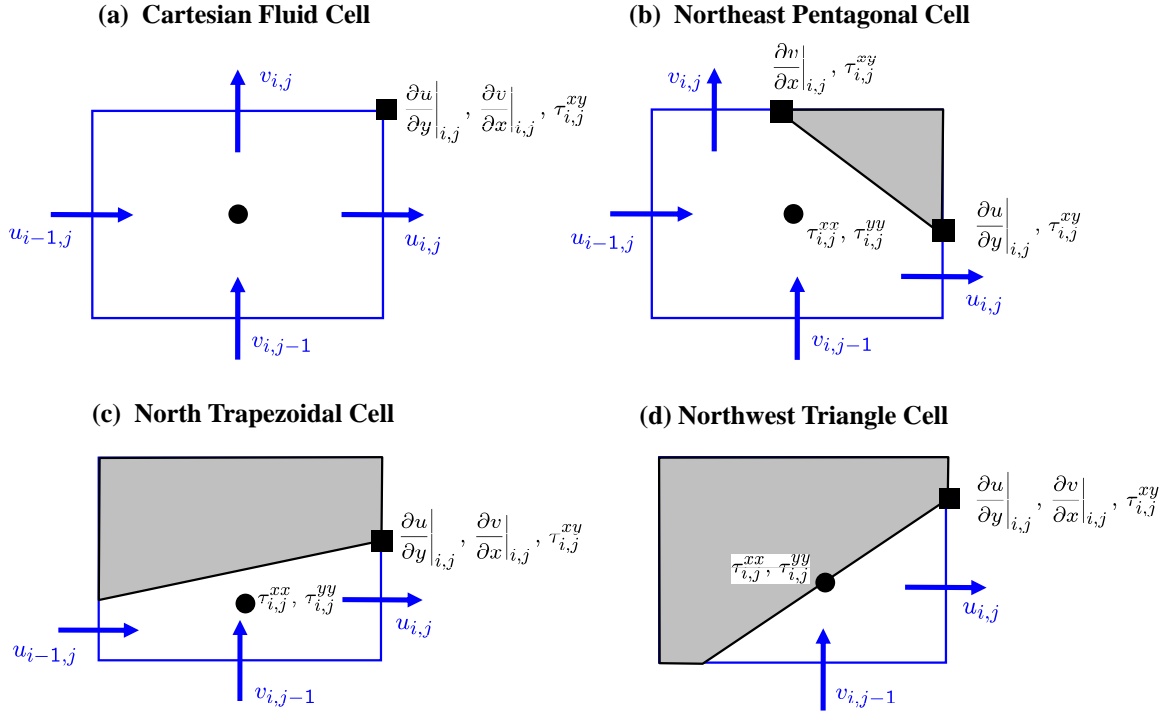


FIGURE 8.6 – Positionnement décalé des inconnues de vitesse, pression, contraintes normales et tangentielles dans une cellule cartésienne et les 3 cut-cells génériques 2D.

Il est à préciser que la discrétisation pour fluides viscoélastiques a uniquement été réalisée pour les cut-cells 2D dans [Th1], [A11]. Les fluides pseudo-plastiques ont été considérés dans [A10] en 2D, puis étendu dans [Th2], [A12] aux cut-cells 3D extrudées. La discrétisation des gradients de vitesse s'effectue avec les formules à 2 points de la méthode LS-STAG/2PT.

Le point de départ de la discrétisation pour fluides non-newtoniens est le positionnement des contraintes normales $\tau_{i,j}^{xx}$, $\tau_{i,j}^{yy}$ et tangentielles $\tau_{i,j}^{xy}$ dans les cellules $\Omega_{i,j}$. Pour la cellule cartésienne de la figure 8.6(a), les contraintes normales sont positionnées au centre de la cellule et la contrainte tangentielle est placée à son sommet supérieur droit. Ce positionnement est motivé par l'approximation à 2 points (7.2) du gradient de vitesse et, dans les 3 cut-cells génériques 2D, conduit à l'arrangement représenté sur la figure 8.6(b)-(d). Dans le cas de cut-cells pentagonales (Fig. 8.6(b)), nous avons vu dans la section 7.5 que les cisaillements newtoniens $\partial u/\partial y|_{i,j}$ et $\partial v/\partial x|_{i,j}$ sont calculés à des sommets différents par la méthode 2PT. Pour cette raison, nous supposons que le cisaillement non-newtonien $\tau_{i,j}^{xy}$ prend la même valeur aux 2 sommets d'une cut-cell pentagonale. Le positionnement exact des contraintes normales à l'intérieur des cut-cells n'a pas besoin d'être précisé car, comme mentionné dans la section 7.3.2, elles y prennent des valeurs constantes.

Pour un fluide viscoélastique, ce positionnement décalé des inconnues de vitesse-pression-contraintes élastiques a de nombreux points communs avec la méthode d'éléments finis de Saramito [141], qui utilise un élément fini mixte de type Raviart-Thomas où la pression et les contraintes élastiques normales sont approchés par des polynômes par morceaux constants dans chaque cellule, et le cisaillement est

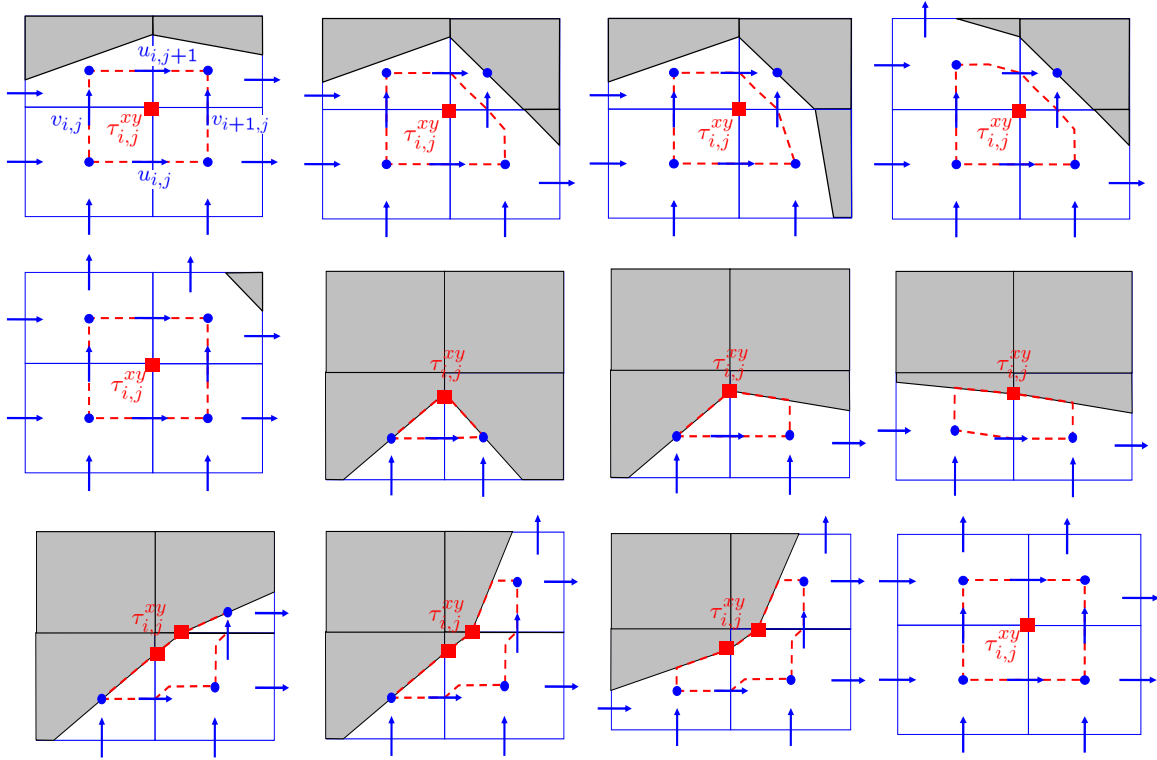


FIGURE 8.7 – Représentation des volumes de contrôle $\tilde{\Omega}_{i,j}$ pour la contrainte élastique tangentielle $\tau_{i,j}^{xy}$ au voisinage de cut-cells 2D.

discrétisé avec des polynômes linéaires dont les degrés de libertés sont situés aux sommets. Cet arrangement a la propriété d'assurer une meilleure stabilité spatiale que l'arrangement collocalisé au centre des cellules lorsque le taux d'élasticité de l'écoulement est grand [45]. Néanmoins, l'arrangement décalé introduit des volumes de contrôle distincts pour chaque équation de transport normale et tangentielle, comme représenté sur la figure 8.7 pour le cisaillement élastique, qui nécessitent de construire des formules de quadratures/interpolation pour discrétiser le terme volumique de ces équations. Ces formules seront développées à partir de la conservation globale de l'invariant primaire $\int_{\Omega_f} \tau_e dV$.

La discrétisation de fluides pseudo-plastiques s'appuie grandement sur les techniques développées pour les fluides newtoniens et viscoélastiques. Les difficultés supplémentaires sont liées à la discrétisation du flux diffusif des équations de Navier-Stokes, où la simplification apportée par la forme de Laplace (6.20) ne peut s'appliquer. Pour calculer la viscosité non-newtonienne $\eta(\dot{\gamma})$ dans les CVs de vitesse, il sera nécessaire de calculer le taux de cisaillement (6.9) :

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2 \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]^2 + \left[\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right]^2 + 2 \left[\frac{\partial v}{\partial y} \right]^2}, \quad (8.12)$$

au centroïde et aux sommets des cut-cells. En raison de l'arrangement décalés des contraintes normales et tangentielles, les interpolations développées pour les fluides viscoélastiques seront employées.

8.3.1 Discrétisation pour fluides viscoélastiques

La formulation intégrale de la loi constitutive générale (6.13) est donnée pour chaque composante du tenseur des contraintes élastique :

$$\lambda \left[\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \tau \, dV + \int_{\Gamma} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \tau \, dS \right] = S, \quad (8.13)$$

où $\tau = \tau_e^{xx}$, τ_e^{yy} ou τ_e^{xy} . Le terme volumique de chaque équation de transport s'écrit respectivement comme :

$$S_e^{xx} = \int_{\Omega} \left[-\tau_e^{xx} + 2\lambda \left(\tau_e^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + 2\eta_e \frac{\partial u}{\partial x} - \lambda\alpha \left((\tau_e^{xx})^2 + (\tau_e^{xy})^2 \right) \right] dV, \quad (8.14a)$$

$$S_e^{yy} = \int_{\Omega} \left[-\tau_e^{yy} + 2\lambda \left(\tau_e^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_e^{xy} \frac{\partial v}{\partial x} \right) + 2\eta_e \frac{\partial v}{\partial y} - \lambda\alpha \left((\tau_e^{xy})^2 + (\tau_e^{yy})^2 \right) \right] dV, \quad (8.14b)$$

$$S_e^{xy} = \int_{\Omega} \left[-\tau_e^{xy} + \lambda \left(\tau_e^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_e^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \eta_e \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) - \lambda\alpha \left(\tau_e^{xx} \tau_e^{xy} + \tau_e^{xx} \tau_e^{yy} \right) \right] dV. \quad (8.14c)$$

Les premières simulations d'écoulements viscoélastiques ont montré qu'il était extrêmement difficile d'obtenir des solutions numériques stables lorsque le taux d'élasticité de l'écoulement devenait grand [44]. Ce taux d'élasticité est quantifié par le nombre de Weissenberg [27, 116] :

$$\text{We} = \frac{\lambda U}{L}, \quad (8.15)$$

où λ représente le temps de relaxation du fluide, U et L sont les grandeurs de référence de l'écoulement. La perte de convergence de la solution numérique est en grande partie liée aux oscillations parasites du tenseur élastique de l'arrangement collocalisé, qui est un phénomène similaire aux oscillations de pression "en damier" de la discrétisation newtonienne. Pour une méthode d'éléments finis, la discrétisation vitesse-pressure-tenseur élastique doit vérifier une condition de compatibilité de type Ladyzhenskaja-Babuska-Brezzi (LBB) [14]. Pour des discrétisation volumes-finies ou différences-finies, l'arrangement décalé de la figure 8.6(a) vérifie la condition LBB, bien que de nombreux auteurs [45, 127, 142, 126] proposent un traitement *ad hoc* pour éviter de positionner le cisaillement élastique sur la paroi solide du domaine, et en particulier à ses singularités géométriques. En contraste, la discrétisation LS-STAG dans les cut-cells (Fig. 8.6(b)-(d)) considère le cisaillement sur la face solide des cut-cells, de façon que la méthode cartésienne soit retrouvée lorsque la paroi solide devient alignée avec la face des cut-cells.

Le CV pour l'équation de transport de la contrainte normale τ_e^{xx} est la cut-cell $\Omega_{i,j}$, où le terme volumique (8.14a) s'écrit :

$$\begin{aligned} S_{i,j}^{xx} = & \underbrace{- \int_{\Omega_{i,j}} \tau_e^{xx} \, dV}_{\textcircled{1}} + 2\lambda \underbrace{\int_{\Omega_{i,j}} \tau_e^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} \, dV}_{\textcircled{2}} + 2\lambda \underbrace{\int_{\Omega_{i,j}} \tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \, dV}_{\textcircled{3}} \\ & + 2 \underbrace{\int_{\Omega_{i,j}} \eta_e \frac{\partial u}{\partial x} \, dV}_{\textcircled{4}} - \lambda\alpha \underbrace{\int_{\Omega_{i,j}} (\tau_e^{xx})^2 + (\tau_e^{xy})^2 \, dV}_{\textcircled{5}}. \end{aligned} \quad (8.16)$$

Les intégrales ①, ② et ④ font uniquement intervenir les contraintes normales qui sont constantes dans une cut-cell. Elles sont aisément discrétisées par quadrature du point milieu : par exemple, l'approximation du terme ② s'écrit simplement :

$$\int_{\Omega_{i,j}} \tau_e^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} dV \simeq \tau_{i,j}^{xx} \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} V_{i,j}, \quad (8.17)$$

où la contrainte normale newtonienne est donnée par (7.37). Des quadratures similaires sont valables pour les termes ①, ④ et la dérivée temporelle $\frac{d}{dt} \int_{\Omega_{i,j}} \tau_e^{xx} dV$.

La discrétisation du terme ③ est totalement différente puisque chaque terme de l'intégrale sont des contraintes tangentielles positionnées aux sommets de la cut-cell, dont le nombre varie selon son type. La discrétisation s'effectue en 2 étapes. Dans une première étape, la quadrature du point milieu donne :

$$\int_{\Omega_{i,j}} \tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} dV \cong \left[\tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right]_{i,j}^c V_{i,j}, \quad (8.18)$$

où $\left[\tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right]_{i,j}^c$ représente la valeur moyenne de l'intégrand dans la cut-cell $\Omega_{i,j}$, qui est calculée de manière différente selon le type de la cellule. Dans le cas des cellules cartésiennes, pentagonales et trapézoïdales de la figure 8.6, la valeur moyenne est définie par :

$$\left[\tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right]_{i,j}^c = \frac{1}{4} \tau_{i,j}^{xy} \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j} + \frac{1}{4} \tau_{i-1,j}^{xy} \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i-1,j} + \frac{1}{4} \tau_{i-1,j-1}^{xy} \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i-1,j-1} + \frac{1}{4} \tau_{i,j-1}^{xy} \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j-1}, \quad (8.19a)$$

et pour la cellule triangulaire une moyenne à trois points est utilisée :

$$\left[\tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right]_{i,j}^c = \frac{1}{3} \tau_{i,j}^{xy} \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j} + \frac{1}{3} \tau_{i-1,j-1}^{xy} \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i-1,j-1} + \frac{1}{3} \tau_{i,j-1}^{xy} \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j-1}. \quad (8.19b)$$

Dans ces formules, le cisaillement newtonien $\partial u / \partial y|_{i,j}$ est calculé avec les formules 2PT (7.41) ou GFM (7.54), selon sa position sur le maillage. La discrétisation du terme quadratique ⑤ utilise le même type d'interpolations.

Le terme convectif $\int_{\Gamma_{i,j}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \tau_e^{xx} dS$ de l'équation de transport (8.13) est discrétisée dans les cut-cells en suivant le principe de la méthode *skew symmetric* de la section 7.6. En raison de la nature hyperbolique de la lois constitutive, l'interpolation centrée est remplacée par une approximation *upwind* pour définir la vitesse caractéristique aux faces. L'approximation *upwind* a la propriété de donner une approximation monotone du terme convectif mais sa précision, au premier ordre, a une nature particulièrement diffusive lorsque la direction principale de l'écoulement n'est pas orienté avec les directions principales du maillage cartésien. Une perspective de développement futur serait d'implémenter des schémas dissipatifs d'ordre supérieur, utilisant des extrapolations MUSCL [65] ou basés sur le résidu [88].

En résumé, la semi-discrétisation de l'équation de transport pour τ_e^{xx} s'écrit :

$$\lambda \left(\mathcal{M}_e^{xx} \frac{dT_e^{xx}}{dt} + C_e^{xx} [\bar{U}] T_e^{xx} \right) = -\mathcal{M}_e^{xx} T_e^{xx} + S_e^{xx} [T, U], \quad (8.20)$$

où T_e^{xx} est le vecteur contenant les inconnues $\tau_{i,j}^{xx}$ du maillage, \mathcal{M}_e^{xx} est la matrice de masse diagonale dont les coefficients sont données par le volume $V_{i,j}$ des cut-cells, la matrice $\mathcal{C}_e^{xx}[\bar{U}]$ contient la discrétisation du terme convectif, $\mathcal{M}_e^{xx}T_e^{xx}$ correspond au terme ① du second-membre (8.16), et $S_e^{xx}[T, U]$ contient les termes quadratiques restants. La discrétisation de l'équation de transport pour la contrainte normale τ_e^{yy} s'effectue dans le même volume de contrôle $\Omega_{i,j}$, et conduit à une équation semi-discrète similaire.

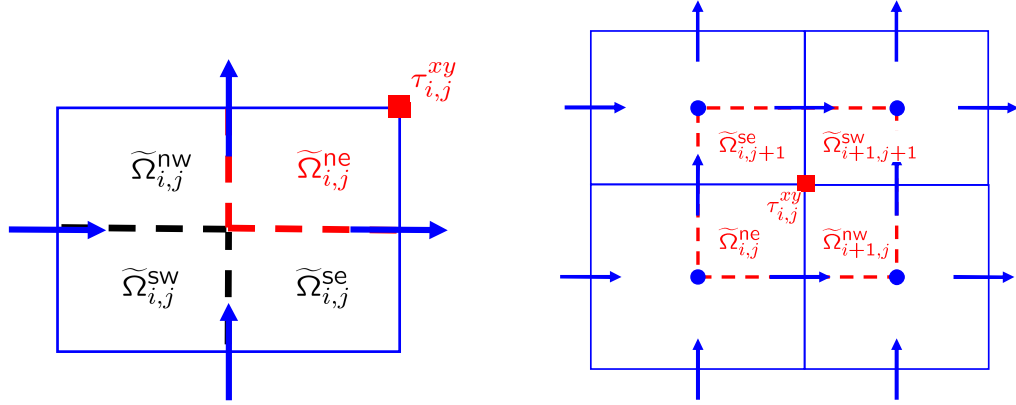


FIGURE 8.8 – A gauche : décomposition de la cellule cartésienne $\Omega_{i,j}$ en 4 quarts de cellules. A droite : volume de contrôle $\tilde{\Omega}_{i,j}$ résultant de cette décomposition.

La semi-discrétisation de l'équation pour la contrainte de cisaillement τ_e^{xy} est effectuée dans le volume de contrôle $\tilde{\Omega}_{i,j}$ centré sur les sommets du maillage, de volume $\tilde{V}_{i,j}$, qui est représenté sur la figure 8.7 pour des exemples de cut-cells 2D. Le CV $\tilde{\Omega}_{i,j}$ est constitué de 4 parties au plus des cellules fluides environnantes qui, comme les CVs décalés de vitesse de la section 7.2.4, ne peut être représenté précisément dans les cut-cells. Pour contourner ce problème, la discrétisation est réalisée indépendamment dans chaque quart de cut-cell de façon à respecter la conservation globale de l'invariant primaire $\int_{\Omega_f} \tau_e^{xy} dV$ sur les cellules fluides du maillage :

$$\int_{\Omega_f} \tau_e^{xy} dV \cong \sum_{\text{Fluid cells } \Omega_{i,j}} V_{i,j} [\tau_e^{xy}]_{i,j}^c = \mathbf{1}^T \mathcal{M}_e^{xy} T^{xy}, \quad (8.21)$$

où la valeur moyenne du cisaillement élastique $[\tau_e^{xy}]_{i,j}^c$ est donné par (8.19).

La conservation discrète de cet invariant va permettre de construire le volume $\tilde{V}_{i,j}$ à partir de la décomposition des cellules fluides :

$$\Omega_{i,j} = \tilde{\Omega}_{i,j}^{ne} \cup \tilde{\Omega}_{i,j}^{nw} \cup \tilde{\Omega}_{i,j}^{sw} \cup \tilde{\Omega}_{i,j}^{se}, \quad (8.22)$$

où chaque quart de cellules est noté avec des notations géographiques. Cette décomposition est représentée sur la figure 8.8 (gauche) pour une cellule cartésienne, et sur la figure 8.9 pour les 3 cut-cells génériques. Certains quarts de cellule peuvent être vides, tel que $\tilde{\Omega}_{i,j}^{nw}$ pour la cut-cell triangulaire de la figure 8.9(c). Ensuite, le CV $\tilde{\Omega}_{i,j}$ est construit à partir des 4 quarts de cellules voisines comme :

$$\tilde{\Omega}_{i,j} = \tilde{\Omega}_{i,j}^{ne} \cup \tilde{\Omega}_{i+1,j}^{nw} \cup \tilde{\Omega}_{i+1,j+1}^{sw} \cup \tilde{\Omega}_{i,j+1}^{se}, \quad (8.23)$$

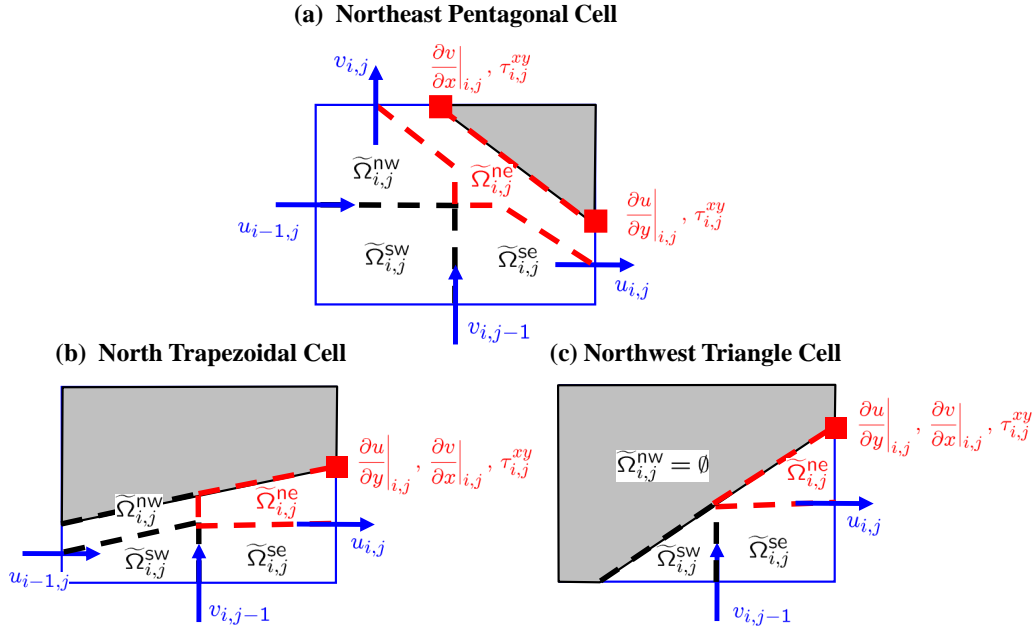


FIGURE 8.9 – Décomposition des 3 cut-cells génériques de la figure 8.6 en 4 quartiles.

et l'aire $\tilde{V}_{i,j}$ du CV est donné par :

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{i,j} &= \text{Area}(\tilde{\Omega}_{i,j}^{\text{ne}}) + \text{Area}(\tilde{\Omega}_{i+1,j}^{\text{nw}}) + \text{Area}(\tilde{\Omega}_{i+1,j+1}^{\text{sw}}) + \text{Area}(\tilde{\Omega}_{i,j+1}^{\text{se}}), \\ &= \alpha_{i,j} V_{i,j} + \alpha_{i+1,j} V_{i+1,j} + \alpha_{i,j+1} V_{i,j+1} + \alpha_{i+1,j+1} V_{i+1,j+1}. \end{aligned} \quad (8.24)$$

Après avoir introduit cette définition de $\tilde{V}_{i,j}$ dans le second-membre de (8.21), les poids sont identifiés comme :

$$\alpha_{i,j} = \begin{cases} 0 & \text{pour une cellule } \Omega_{i,j} \text{ solide,} \\ 1/3 & \text{pour une cellule } \Omega_{i,j} \text{ triangulaire,} \\ 1/4 & \text{pour tout autre type de cellule.} \end{cases} \quad (8.25)$$

Ces poids retrouvent le cas cartésien $\alpha_{i,j} = 1/4$ de la figure 8.8, et elle a l'avantage de définir le volume de $\tilde{\Omega}_{i,j}$ près des cut-cells sans connaître explicitement la forme du CV.

En outre, ces poids vont permettre de construire des formules de quadrature pour le second-membre de l'équation de transport pour $\tau_{i,j}^{xy}$. Par exemple, le second terme de (8.14c) est approché par la quadrature du point milieu :

$$\int_{\tilde{\Omega}_{i,j}} \tau_e^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} dV \cong [\tau_e^{xx}]_{i,j}^s \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} \tilde{V}_{i,j}, \quad (8.26)$$

où la contrainte élastique normale est interpolée au sommet du maillage par la moyenne volumique :

$$[\tau_e^{xx}]_{i,j}^s = \left(\alpha_{i,j} V_{i,j} \tau_{i,j}^{xx} + \alpha_{i+1,j} V_{i+1,j} \tau_{i+1,j}^{xx} + \alpha_{i,j+1} V_{i,j+1} \tau_{i,j+1}^{xx} + \alpha_{i+1,j+1} V_{i+1,j+1} \tau_{i+1,j+1}^{xx} \right) / \tilde{V}_{i,j}. \quad (8.27)$$

Les autres termes du second-membre sont discrétisés de façon similaire.

La simulation d'écoulements viscoélastiques est réalisée en couplant la loi constitutive semi-discrète pour chaque composante du tenseur $T_e = (T_{xx,e}, T_{xy,e}, T_{yy,e})$ aux équations de Navier-Stokes :

$$\mathcal{D}U = 0, \quad (8.28a)$$

$$\rho \frac{d}{dt}(\mathcal{M}U) + \rho \mathcal{C}[\bar{U}]U + \mathcal{G}P - \eta_s \mathcal{K}U = \mathcal{D}T_e. \quad (8.28b)$$

Pour les écoulements stationnaires que nous avons réalisés, seule une intégration en temps au premier ordre a été employée. A partir de la solution (U^n, P^n) et $T_e^n = (T_{xx,e}^n, T_{xy,e}^n, T_{yy,e}^n)$ au temps $t_n = n\Delta t$, la vitesse solénoïdale U^{n+1} et la pression associée P^{n+1} sont calculés à partir du schéma aux pas fractionnaires de la section 7.7, en prenant le terme source viscoélastique $\mathcal{D}T_e$ de façon explicite. Les contraintes élastiques sont ensuite calculées avec une modification du schéma d'Euler :

$$\lambda \mathcal{M}_e \frac{T_e^{n+1} - T_e^n}{\Delta t} + \lambda \mathcal{C}_e[U^{n+1}]T_e^n = -\mathcal{M}_e T_e^{n+1} + S_e[T_e^{\text{upd}}, U^{n+1}]. \quad (8.29)$$

Ces équations sont résolues séquentiellement pour $T_{xx,e}^{n+1}$, $T_{yy,e}^{n+1}$ puis $T_{xy,e}^{n+1}$. De façon à augmenter la nature implicite de l'avancée en temps, chaque équation est résolue en utilisant le dernier itéré des contraintes élastiques, *i.e.* $T_e^{\text{upd}} = (T_{xx,e}^{n+1}, T_{xy,e}^n, T_{yy,e}^n)$ pour l'équation de $T_{xx,e}^{n+1}$, $T_e^{\text{upd}} = (T_{xx,e}^{n+1}, T_{xy,e}^n, T_{yy,e}^{n+1})$ pour $T_{yy,e}^{n+1}$, et $T_e^{\text{upd}} = (T_{xx,e}^{n+1}, T_{xy,e}^{n+1}, T_{yy,e}^{n+1})$ pour $T_{xy,e}^{n+1}$. Pour le cas de la loi de Giesekus, le terme quadratique $\mathbf{D} : \mathbf{D}$ est pris en compte de façon implicite, et l'équation non-linéaire dans chaque cellule est résolue par itérations de Picard.

8.3.2 Discrétisation pour fluides pseudo-plastiques

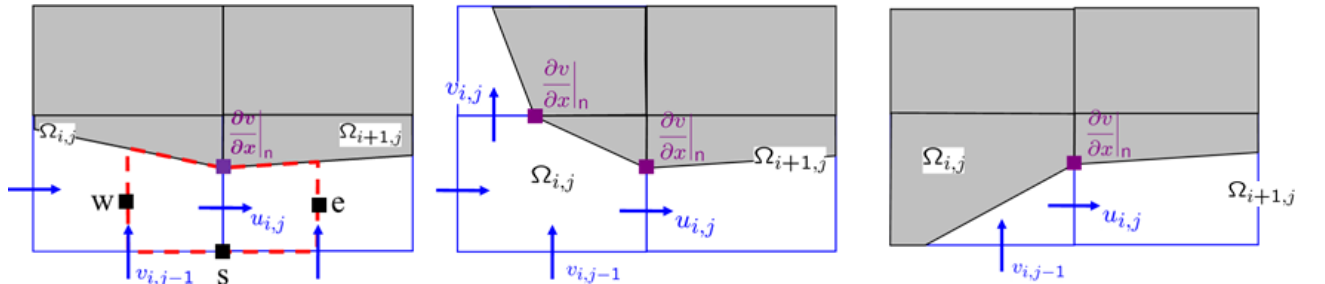


FIGURE 8.10 – Illustration du calcul du flux diffusif lorsque le CV pour $u_{i,j}$ est formé d'une cut-cell trapézoïdale $\Omega_{i+1,j}$, et lorsque la cut-cell $\Omega_{i,j}$ est : (a) trapézoïdale, (b) : pentagonale, et (c) : triangulaire.

Lorsque le tenseur des contraintes est donné explicitement par le modèle newtonien généralisé $\boldsymbol{\tau} = \eta(\dot{\boldsymbol{\gamma}})\dot{\boldsymbol{\gamma}}$, il suffit simplement d'adapter la discrétisation LS-STAG/2PT des flux diffusifs au cas où la viscosité dépend localement du gradient de vitesse. Néanmoins, si une avancée en temps totalement implicite des flux diffusifs était utilisée, la forme "complète" des équations de Navier-Stokes (6.18) entraînerait un couplage des composantes de l'équation de quantité de mouvement. Pour cette raison, le flux diffusif $\mathbf{F}^d = (F_u^d, F_v^d) = \int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} dV$ de (6.18) est décomposé en une partie "implicite" et

“explicite”, qui s’écrit dans la direction x :

$$F_u^d = F_u^{d,\text{impl}} + F_u^{d,\text{expl}}, \quad (8.30a)$$

avec

$$F_u^{d,\text{impl}} = \int_{\Gamma} \eta(\dot{\gamma}) \left[\frac{\partial u}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial u}{\partial y} \vec{e}_y \right] \cdot d\vec{S}, \quad (8.30b)$$

$$F_u^{d,\text{expl}} = \int_{\Gamma} \eta(\dot{\gamma}) \left[\frac{\partial u}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial v}{\partial x} \vec{e}_y \right] \cdot d\vec{S}. \quad (8.30c)$$

Le flux $F_u^{d,\text{expl}}$ est pris en compte explicitement dans l’étape de prédiction (7.76) du schéma aux pas fractionnaires, ce qui permet de résoudre indépendamment les systèmes linéaires pour $u_{i,j}^{n+1}$ et $v_{i,j}^{n+1}$.

La discrétisation spatiale est illustrée en considérant le CV pour $u_{i,j}$ représenté sur la figure 8.10(a), dans lequel la partie “explicite” du flux s’écrit :

$$\begin{aligned} F_u^{d,\text{expl}} \cong & \theta_{i,j}^u \Delta y_j \left[\eta(\dot{\gamma}|_e) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} - \eta(\dot{\gamma}|_w) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i-1,j} \right] \\ & + \eta(\dot{\gamma}|_n) \Delta x^{\text{ib},n} \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_n - \eta(\dot{\gamma}|_s) \frac{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}{2} \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j-1}, \end{aligned} \quad (8.31)$$

où les gradients de vitesse sont calculés avec les formules 2PT. Ce flux discret fait apparaître le taux de cisaillement (8.12) sur les quatre faces du CV, qui doit être calculé à l’aide des interpolations aux centroides $[\cdot]_{i,j}^c$ (8.19) et aux sommets $[\cdot]_{i,j}^s$ (8.27) développées pour les écoulements viscoélastiques. Par exemple, le taux de cisaillement sur le sommet ‘n’ de la paroi solide s’écrit :

$$\dot{\gamma}|_n \cong \sqrt{2 \left(\left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_{i,j}^s \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j}^{\text{ib}} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j}^{\text{ib}} \right)^2 + 2 \left(\left[\frac{\partial v}{\partial y} \right]_{i,j}^s \right)^2}, \quad (8.32)$$

où la difficulté restante est liée au calcul du cisaillement pariétal par la méthode 2PT. Le traitement *ad hoc* était discuté dans la section 7.4.1, et nous le résumons ici pour les CVS de la figure 8.10, qui reprends toutes les différentes combinaisons possibles de moitiés de cut-cells en 2D. Dans tous les cas, le gradient discret $\partial u / \partial y|_{i,j}^{\text{ib}}$ est donné par la formule GFM (7.54), et le terme $\partial v / \partial x|_{i,j}^{\text{ib}}$ doit être défini selon le type de cut-cells qui composent le CV. Pour le CV de la figure 8.10(a), où les cut-cells $\Omega_{i,j}$ et $\Omega_{i+1,j}$ sont toutes deux trapézoïdales, le gradient discret $\partial v / \partial x|_{i,j}^{\text{ib}}$ est mis à zéro. Ce terme est aussi annulé lorsque $\Omega_{i,j}$ est triangulaire (Fig. 8.10(c)). Enfin, lorsque $\Omega_{i,j}$ est pentagonale (Fig. 8.10(b)), il est calculé par la formule GFM (7.55) à l’aide de l’inconnue $v_{i,j}$.

Les limites de la discrétisation 2PT pour fluides pseudo-plastiques sont apparues lorsque elle a été étendue aux géométries 3D-extrudées (Fig. 8.11) dans la thèse de F. Nikfarjam [Th2]. Le traitement au cas par des nombreux gradients pariétaux qui interviennent dans les flux diffusifs “explicites” pour chaque composante de vitesse a été remplacé par un traitement plus systématique reposant sur le théorème de Schwartz. Nous nous référons à [Th2] ou [A12] pour les détails de cette discrétisation. Néanmoins, la précision qui était mesurée dans les cut-cells 3D-extrudées était seulement du premier

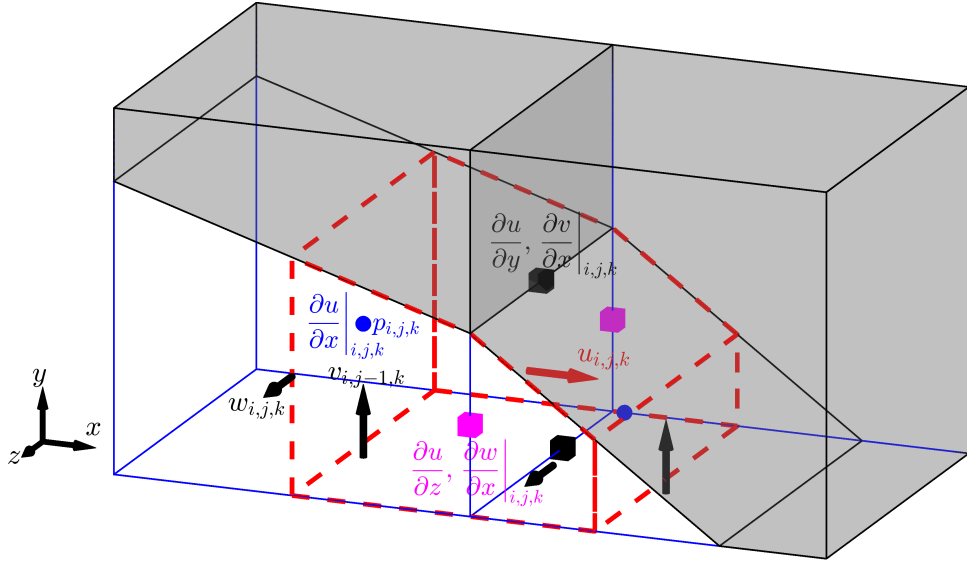


FIGURE 8.11 – CV pour la discrétisation des flux diffusifs pseudo-plastiques dans une géométrie 3D-extrudée.

ordre, bien inférieure à la précision quasilineaire observée par [A10] pour les géométries 2D. Une perspective prometteuse serait d'appliquer la discrétisation DCM aux fluides pseudo-plastiques, où la formule (7.46) permettrait notamment de calculer aisément les flux diffusifs “explicités” pariétaux, pour toutes cut-cells 2D ou 3D.

8.3.3 Exemples de simulations numériques

Cette section présente les simulations de fluides non-newtoniens réalisés avec la méthode LS-STAG/2PT dans [A11] pour les fluides viscoélastiques, et dans [A10] et [A12] pour les fluides pseudoplastiques en 2D et 3D-extrudées respectivement. Ces articles sont reproduits dans la dernière partie du document.

Simulation d'écoulements viscoélastiques

La simulation de fluides viscoélastiques a été réalisée dans les conduites planes à contraction de rapport 4 : 1 représentées sur la figure 8.12. Lorsque le taux d'élasticité est grand, le rétrécissement brutal du canal entraîne une forte augmentation des contraintes élongationnelles à l'aval de la singularité, qui posent aussi bien des problèmes à la modélisation des fluides “réels” par les différents lois rhéologiques du tableau 6.1, que des problèmes de convergence de leur résolution numérique. La contraction à coin arrondi de la figure 8.12 (gauche) est une configuration répandue pour tester la validité des méthodes numériques pour fluides viscoélastiques [100, 2, 1]. Ensuite, nous avons appliqué le code LS-STAG à une configuration d'intérêt pratique, en simulant l'écoulement de polymères dans la conduite à contraction abrupte pour laquelle [133] a reporté des mesures expérimentales. Nous présentons ici uniquement les résultat obtenus pour la contraction à coin arrondi avec le modèle d'Oldroyd-B,

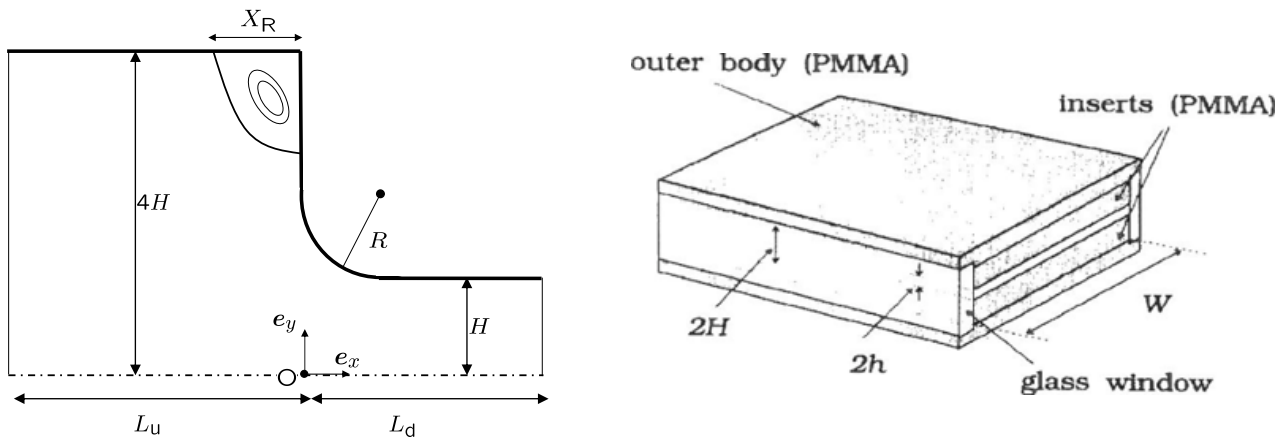


FIGURE 8.12 – Géométries pour l'écoulement de fluides viscoélastiques (en raison de la symétrie de la solution, le domaine de calcul ne prend en compte que la moitié des conduites). A gauche : contraction à coin arrondi. A droite : contraction à coin abrupt étudiée expérimentalement dans [133].

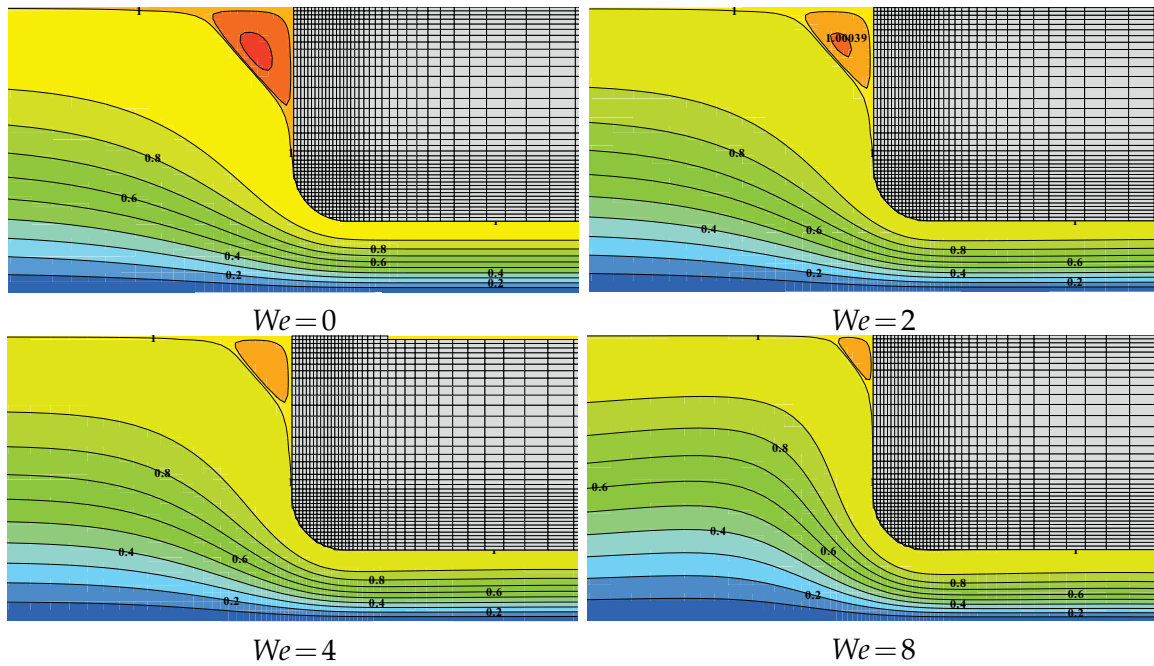


FIGURE 8.13 – Lignes de courant pour des valeurs croissantes du nombre de Weissenberg, sur le niveau de maillage m2 (3000 cellules).

Auteurs	LS-STAG	Matallah <i>et al.</i> [100]	Aboubacar <i>et al.</i> [1]
Maillage	m2	m2	m3
$\overline{\Delta x}/H$	$6.5 \cdot 10^{-3}$	$1.7 \cdot 10^{-2}$	$9.7 \cdot 10^{-3}$
We_{crit}	8	6	4.4

TABLE 8.2 – Comparaison du nombre de Weissenberg critique obtenu pour l'écoulement dans la contraction plane à coin arrondi.

qui illustre les défis numériques que pose la simulation de fluides viscoélastiques, et nous nous référons à [A11] pour les résultats obtenus pour la contraction à coin abrupte.

Toutes les simulations numériques d'écoulements de fluides viscoélastiques sont confrontées au problème du *haut nombre de Weissenberg* (HWNP) [116, 168, 54] : sur un maillage donné, une perte de convergence est observée lorsque le taux d'élasticité mesuré par le nombre de Weissenberg (8.15) augmente, et au dessus d'une valeur critique We_{crit} aucune solution stable ne peut être obtenue. Ce phénomène est illustré sur la figure 8.13, qui présente pour un taux d'élasticité croissant les simulations LS-STAG réalisées sur le niveau de maillage m2 comportant 3000 cellules. On observe une forte augmentation des contraintes élastiques lorsque We augmente jusqu'à ce que, lorsque sa valeur dépasse $We_{crit} = 8$, le tenseur élastique perde sa positivité dans les cellules voisines du coin arrondi, entraînant une perte de convergence de l'algorithme de résolution. On observe aussi le paradoxe que We_{crit} diminue avec le raffinement du maillage : sur un niveau de maillage plus fin (m3, 7000 cellules), la valeur maximale de We_{crit} atteinte était seulement égale à 4. Le phénomène du HWNP est fortement dépendant de la méthode numérique utilisée [14, 100, 6], comme le montre le tableau 8.2. La méthode LS-STAG atteint néanmoins une valeur de We_{crit} supérieure aux précédentes études numériques par éléments finis [100] et éléments finis/volumes finis hybrides [1], pour une densité de maillage équivalente. Une manière prometteuse d'améliorer la stabilité des simulations à haut nombre de Weissenberg serait de considérer une intégration en temps qui préserverait la positivité du tenseur élastique, comme la formulation utilisant des logarithmiques matriciels développé dans [54], où l'utilisation de schémas pour systèmes différentiels de Riccati proposée par [48].

Simulation d'écoulements pseudo-plastiques

Les simulations d'écoulements pseudo-plastiques ont été motivées par les études expérimentales de la thèse de C. Rigal [135], qui ont été menées dans l'équipe "hydrodynamique et rhéologie" du LEMTA. Dans cette thèse, une base de données expérimentale a été développée pour les écoulements dans les dispositifs représentés sur la figure 8.14 : une cellule de Couette excentrée à grand entrefer (à gauche), et dans une conduite cylindrique à élargissement brusque (à droite). Les mesures de vélocimétrie ont été réalisées par métrologie PIV pour la cellule de Couette, et sur la plateforme IRM de la faculté des sciences de Nancy pour la conduite cylindrique. Plusieurs types de fluides ont été considérés : de l'Emkarox (comportement newtonien) et diverses solutions aqueuses de xanthane (comportement rhéofluidifiant). Les propriétés rhéologiques des solutions de xanthane ont été caractérisées dans la thèse [135], et sont modélisées par la loi rhéologique de Cross (6.11) dans les simulations LS-STAG.

Au dessus d'une valeur critique de l'excentricité des cylindres, l'écoulement dans la cellule de Couette est caractérisé par la présence d'une large zone de recirculation (figure 8.15). Rigal [135] a observé que le vortex se déplaçait linéairement dans le sens de l'écoulement pour un fluide newtonien mais que, pour les solutions de xanthane, la taille et la position du vortex exhibaient une dépendance non-monotone à la vitesse de rotation et l'indice de rhéofluidification. Motivé par ces observations expérimentales, près de 200 simulations LS-STAG ont été réalisées pour les différentes concentrations de

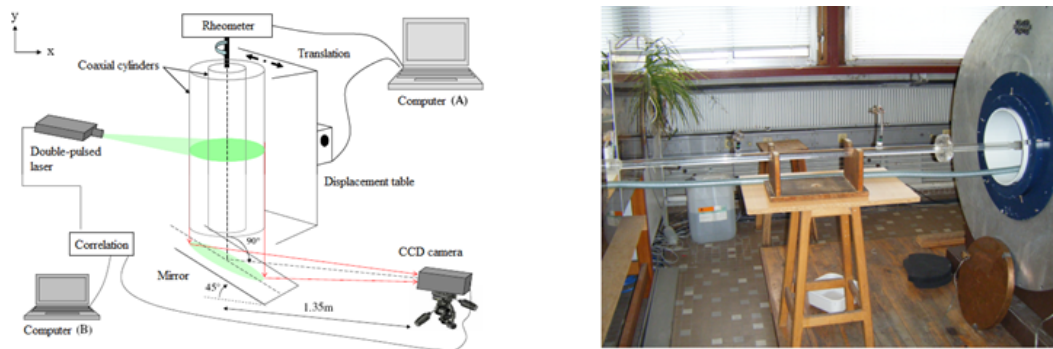


FIGURE 8.14 – Dispositifs expérimentaux de Rigal [135] pour l'écoulement de fluides pseudo-plastiques.

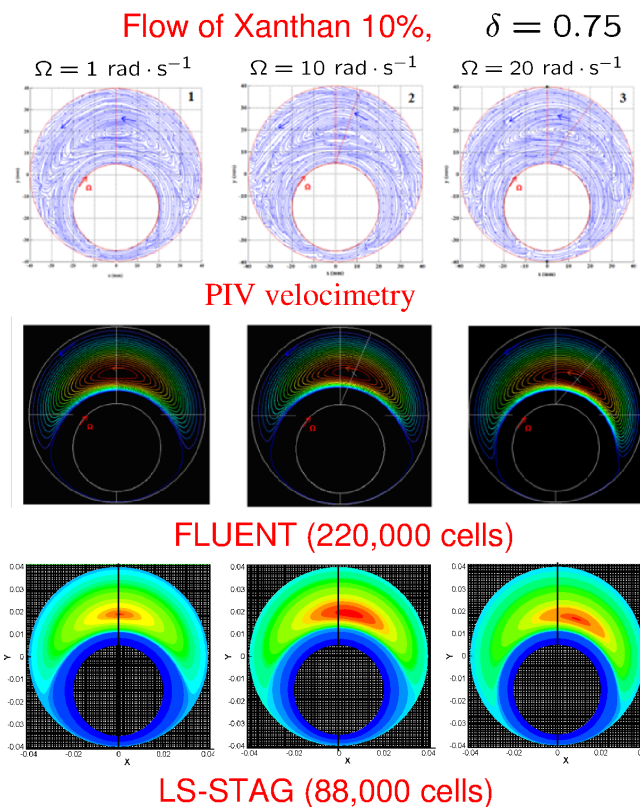


FIGURE 8.15 – Ecoulement de xanthane dans un réacteur de Couette excentré : comparaisons entre mesures PIV [135], simulations FLUENT[®] et LS-STAG.

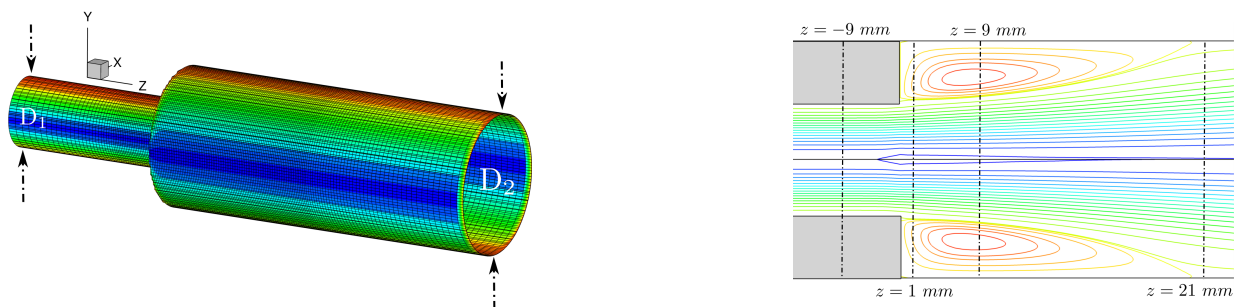


FIGURE 8.16 – Géométrie et lignes de courant dans le plan de symétrie pour la simulation de l'écoulement de xanthane dans une conduite à élargissement brusque.

xanthane, en faisant varier la vitesse de rotation et l'excentricité des cylindres. Notre étude paramétrique a permis de complètement caractériser la structure de la zone de recirculation (seuil d'instabilité, taille et position du centre du vortex), et de la relier aux propriétés globales de l'écoulement, telle que l'index de rhéofluidification, le nombre de Reynolds généralisé et le couple des forces appliquées sur les parois du cylindre. Nous nous référons à l'article [A10] pour les détails de cette étude.

Enfin le code LS-STAG/2PT pour géométries 3D-extrudées a été appliqué à l'écoulement de xanthane dans la conduite cylindrique de la figure 8.16, pour un nombre de Reynolds généralisé compris entre 9 et 217. Pour les différents fluides considérés (Emkarox et xanthane à 0.1% et 0.3%), les prédictions de la zone de recirculation en aval de l'élargissement ont donné un excellent accord avec les mesures IRM de Rigal [135]. De plus, la taille du vortex mesuré par LS-STAG a donné de bons accords avec la formule empirique de [112], qui est valable pour différents index de rhéofluidification et rapports d'expansion. Ces résultats ont été publiés dans l'article [A12].

8.4 Convection naturelle autour d'un cylindre chauffé

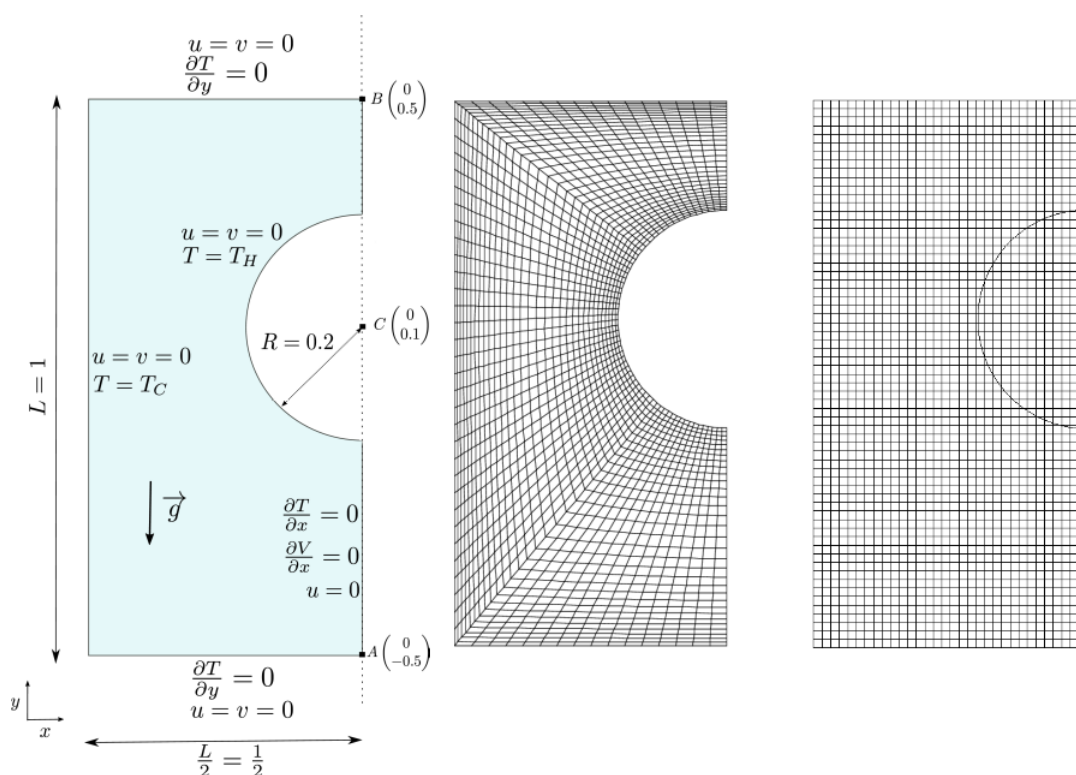


FIGURE 8.17 – Domaine de calcul pour le cas-test de convection naturelle (en raison de la symétrie de la solution, le domaine de calcul ne prend en compte que la moitié de la cavité) et maillages curviligne et de cut-cells les plus grossier (32×64 cellules) utilisés pour les simulations FLUENT[®] et LS-STAG.

Dans les références [Th3] et [A13], un écoulement de convection naturelle 2D (Equation de température couplée aux équations de Navier-Stokes dans l'approximation de Boussinesq) a été considéré :

la configuration du cylindre chauffé placé à l'intérieur d'une cavité carrée représenté sur la figure 8.17, qui est un cas-test proposé par Demirdžić *et al* [46] pour fournir des résultats numériques de référence sur maillages curvilignes *body fitted*. L'objectif était de considérer une quantité sensible de la discrétisation comme le flux de chaleur sur la frontière immergée, où se développe la couche limite thermique, afin d'évaluer le calcul des gradients discrets sur la face solide des cut-cells par les différentes reconstructions aux sommets de la section 8.2.2.

Les simulations LS-STAG/2PT et DCM sont réalisées sur une série de maillages de cut-cells M1-M5, dont le plus grossier est représenté sur la figure 8.17 (droite) et le plus fin possède 512×1024 cellules cartésiennes. En outre, des simulations sur maillages curvilignes de haute qualité ont été réalisées avec le logiciel FLUENT[®] (figure 8.17 (milieu)), afin de comparer les résultats LS-STAG avec une méthode de volumes-finis classique.

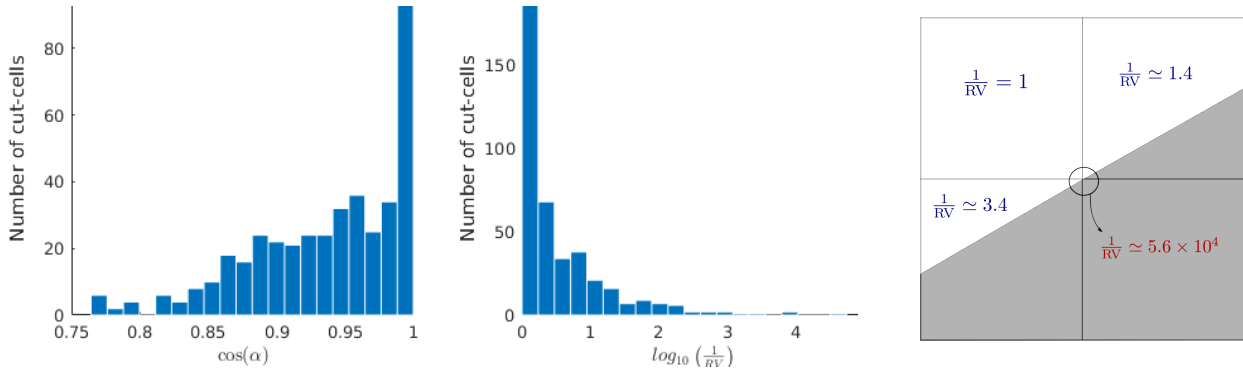


FIGURE 8.18 – Histogramme des cut-cells selon les indicateurs $OQ_{i,j}$ (gauche) et $RV_{i,j}$ (droite) du maillage M4. À droite : vue du maillage au voisinage de la cut-cell dont la valeur de $RV_{i,j}$ est minimale.

Il est pertinent d'inspecter la qualité des maillages dans la partie du domaine proche du cylindre, en définissant 2 métriques permettant de la quantifier. Nous nous attendons à ce que le calcul du gradient de température sur la frontière immergée soit fortement dépendante de la qualité des cut-cells, car la composante non-orthogonale de la discrétisation DCM (8.4) augmente avec l'angle α . Pour cette raison, nous définissons la métrique $OQ_{i,j}$ comme la valeur minimale prise par $\cos \alpha$ sur toutes les faces d'une cut-cell, soit :

$$OQ_{i,j} = \min_{\text{faces } f \text{ de } \Omega_{i,j}} \cos \alpha_f. \quad (8.33)$$

Une autre métrique pertinente est la *smoothness* du maillage, définie comme le rapport entre le volume de la cut-cell $\Omega_{i,j}$ et ses voisins :

$$RV_{i,j} = \min_{(k,l) \in N_b} \frac{V_{i,j}}{V_{k,l}}. \quad (8.34)$$

Ces 2 métriques prennent des valeurs comprises entre 0 et 1, telle que $OQ_{i,j}$ et $RV_{i,j} = 1$ correspondent à une cellule d'un maillage cartésien uniforme, et une valeur proche de zéro correspond à une cut-cell de mauvaise qualité, par exemple de volume faible par rapport aux cellules cartésiennes voisines.

La figure 8.18 présente ces 2 métriques pour le maillage M4. Premièrement, on peut observer qu'aucune cut-cell ne possède une non-orthogonalité très élevée, car la valeur minimale de $RV_{i,j}$

est $\sqrt{2}/2 \simeq 0.74$ pour une cellule carrée [**Th3**]. La qualité orthogonale des maillages curvilignes de FLUENT[®] est néanmoins supérieure, avec $OQ_{i,j} \simeq 0.95$ près du cylindre chauffé. Par contre l'indicateur de ratio de volumes montre une caractéristique importante des maillages de cut-cells : un petit nombre de cellules possède une très faible valeur de $RV_{i,j}$, ce qui indique de grands changements de volume : 5% des cut-cells du maillage M4 sont telles que $1/RV_{i,j} > 100$. En comparaison, la valeur maximale de $1/RV_{i,j}$ est seulement de 1.25 pour les maillages curvilignes. Comme le montre la figure 8.18 (droite), une cut-cell de faible $RV_{i,j}$ correspond à une très petite cut-cell triangulaire qui est entourée d'une cellule cartésienne et de grandes cellules pentagonales ou trapézoïdales. Nous avons observé que la valeur prise par $RV_{i,j}$ diminue en raffinant le maillage, créant de plus en plus de très petites cut-cells. Ainsi, la métrique $RV_{i,j}$ est un bon indicateur de la présence du *small cut-cell problem* discuté dans la section 6.3.2, qui perturbe la stabilité et la précision de la plupart des méthodes de cut-cells [175, 85, 147].

Pour évaluer l'influence de la qualité des cut-cells sur la précision des différentes variantes de la méthode LS-STAG, nous étudions la distribution du flux de chaleur sur la frontière immergée. La figure 8.19 (gauche) présente les différents profils obtenus sur le maillage M_4 , le profil de référence obtenu par FLUENT[®] sur le maillage le plus fin, ainsi que les valeurs obtenues par Demirdžić *et al* [46]. Notez que les profils LS-STAG sont colorés selon les valeurs que prend l'indicateur $RV_{i,j}$ (8.34) dans chaque cut-cell. Premièrement on peut observer que le profil donné par la méthode LS-STAG/2PT présente de larges oscillations point à point. L'amplitude de ces oscillations est directement corrélée à la valeur de $RV_{i,j}$, ce qui montre la grande sensibilité de l'approximation à 2 points à la qualité des cut-cells. L'utilisation de la discrétisation DCM permet de diminuer considérablement l'amplitude des oscillations. Les profils donnés par les reconstructions ID1 et LSQ présentent néanmoins quelques oscillations dans les cut-cells à faible RV , ce qui indique un manque de précision dans les petites cut-cells. Bien que la reconstruction LSQ soit formellement au second-ordre, [**Th3**] a observé qu'elle engendrait des poids négatifs dans les petites cut-cells, ce qui indique une perte de convexité de cette reconstruction. En revanche, les profils obtenus avec les autres méthodes d'ordre 2 (DCM-ID2 et DCM-TRI) sont virtuellement exempts d'oscillations, et coïncident parfaitement avec les résultats de référence. La figure 8.19 (droite) présentent l'erreur locale dans chaque cut-cell en fonction du ratio de volume $RV_{i,j}$. Pour les discrétisations 2PT, DCM-ID1 et DCM-LSQ, les erreurs augmentent de façon exponentielle avec $1/RV_{i,j}$, ce qui montre clairement que la petite taille des cut-cells est la cause des erreurs de discrétisations. Par contre, il est remarquable que pour les discrétisations les plus précises (DCM-ID2 et DCM-TRI), les erreurs sont virtuellement indépendantes de la valeur de $RV_{i,j}$. Ces résultats illustrent la robustesse de ces interpolations, qui donnent des résultats précis quelque soit la taille et la forme des cut-cells.

En conclusion, ces simulations ont montré que des résultats précis et robustes sont obtenus avec la variante DCM de la méthode LS-STAG. L'indicateur $RV_{i,j}$ s'est révélé précieux pour détecter les très petites cut-cells, et dans ces cellules la qualité des résultats est fortement dépendante de la reconstruction aux sommets qui est utilisée. Une précision médiocre est obtenue avec la reconstruction

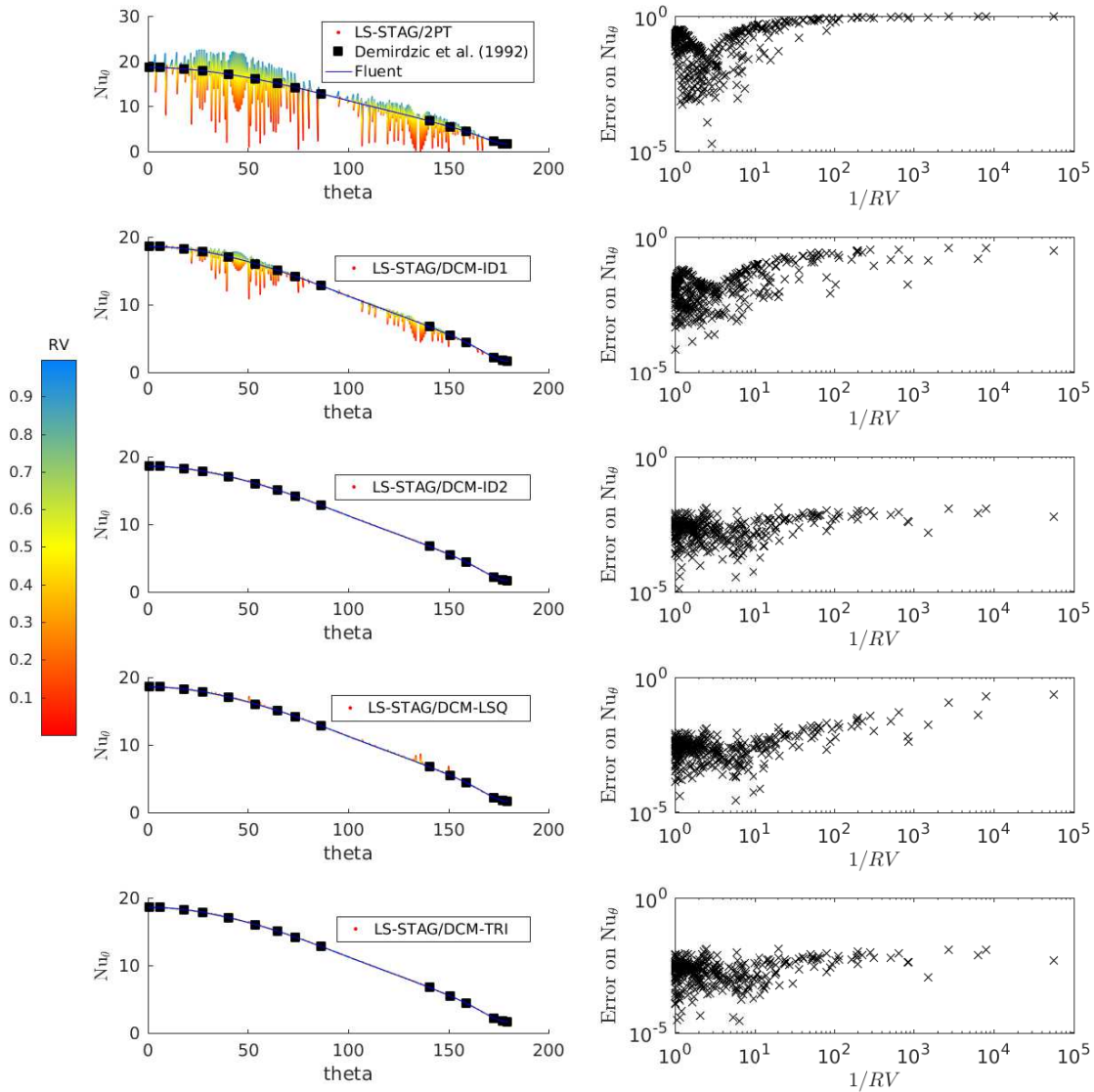


FIGURE 8.19 – A gauche, de haut en bas : profil du nombre de Nusselt le long du demi-cylindre chauffé pour les différentes variantes de la méthode LS-STAG, et comparaison avec la simulation FLUENT[®] et les résultats de référence de Demirdžić *et al* [46]. Les profils sont colorés en fonction de l'indicateur $RV_{i,j}$ (8.34) des cut-cells. A droite : erreurs locale en fonction de l'indicateur $RV_{i,j}$ de la cut-cell, en prenant pour référence le profil donné par FLUENT[®] sur le maillage le plus fin.

au premier ordre ID1, où on observe que l'erreur sur le nombre de Nusselt local croît inversement avec la taille de la cut-cell. Des résultats analogues sont obtenus avec la reconstruction aux moindres carrés LSQ, qui est formellement au second ordre, mais a le désavantage de donner des poids de reconstruction négatifs dans les petites cut-cells [Th3]. Les reconstructions au second-ordre ID2 et TRI se sont montrées de loin les plus précises, et leur robustesse est illustrée par le fait que l'erreur de discrétisation est pratiquement indépendante de la valeur de $RV_{i,j}$. En raison de la plus grande simplicité algorithmique de l'interpolation par triangulation, la variante DCM-TRI de la méthode

LS-STAG est retenue pour les simulations tridimensionnelles des sections suivantes.

8.5 Écoulement autour d'un cylindre dans une conduite de section carrée

En s'appuyant sur un cas-test bien documenté en géométrie extrudée [143], F. Nikfarjam a effectué dans sa thèse [Th2] une comparaison approfondie des performances de la méthode LS-STAG/2PT et d'un solveur commercial non-structuré (Ansys FLUENT[®]) afin de répondre à deux questions cruciales concernant la simulation numérique des écoulements en géométries complexes, et qui à notre connaissance ont rarement été abordées dans la littérature : quelle est la précision d'une méthode IBM/cut-cell comparée à celle d'une méthode volumes finis sur grille ajustée à la frontière (*body-fitted*) ? Les ressources informatiques (taille mémoire, temps de calcul) que nécessite une méthode IBM/cut-cell sont-elles comparables à celles d'une méthode *body-fitted* ?

Dans cet objectif, une série de simulations a été conduite avec le code LS-STAG et avec le code commercial FLUENT[®] (V14.57) sur le cas-test de référence 3D-3Z initialement proposé par Schäfer *et al.* [143] qui consiste en un écoulement laminaire autour d'un cylindre dans une conduite de section carrée. Pour cette configuration, Bayraktar *et al.* [20] ont réalisé une comparaison approfondie des performances de trois solveurs non-structurés (OpenFOAM, Ansys-CFX et FEATFLOW) sur une série de grilles curvilignes et ont fourni de nombreux résultats en régimes stationnaire et instationnaire. Enfin, Bayraktar [19] a communiqué des résultats de grande précision obtenus par le solveur FEATFLOW sur l'évolution temporelle des forces de trainée et de portance, qui ont permis de comparer finement les performances des solveurs LS-STAG/2PT et FLUENT[®].

L'étude de [Th2] (reprise dans la publication [A12]) avait en particulier montré que les résultats de la méthode 2PT, bien que satisfaisants, n'exhibaient pas une convergence spatiale aussi monotone que celle de FLUENT[®]. Cette perte de précision avait été attribuée à l'imprécision du calcul 2PT des flux diffusifs tangentiels dans les cut-cells. Dans sa thèse [Th3] et [A13], B. Portelenelle a repris ces calculs avec la méthode LS-STAG/DCM afin de démontrer qu'elle pouvait donner des résultats compétitifs, aussi bien sur le plan de la précision spatiale que des ressources informatiques consommées, par rapport à ceux d'une méthode *body-fitted* telle que FLUENT[®].

8.5.1 Description de la configuration et paramètres numériques

La figure 8.20 présente le domaine de calcul défini dans [143, 20], où un cylindre de diamètre D est placé perpendiculairement à la direction de l'écoulement dans une conduite de section carrée. Des conditions de non-glissement sont imposées sur les parois de la conduite, tandis qu'à l'entrée un profil de vitesse instationnaire de période T est imposé, engendrant un écoulement périodique en temps où le nombre de Reynolds varie entre 0 et 100.

Les simulations numériques FLUENT[®] ont été effectuées avec le solveur incompressible (*pressure-based*) et une discrétisation spatiale d'ordre 2 : le schéma QUICK pour la convection, une interpolation

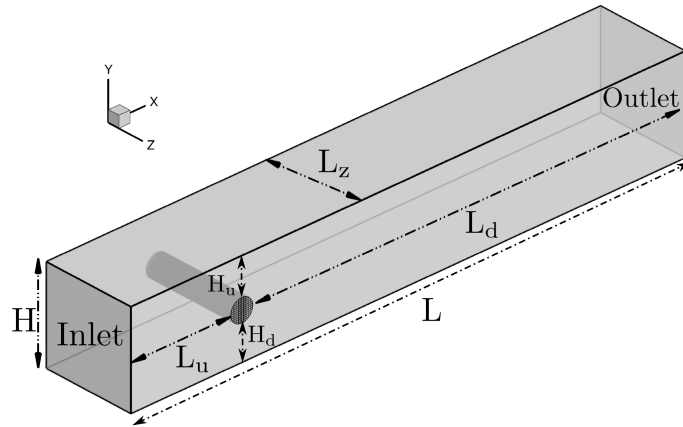


FIGURE 8.20 – Domaine de calcul pour l'écoulement autour d'un cylindre de diamètre D dans une conduite de section carrée.

aux sommets par la formule de Green-Gauss pour le calcul des gradients, et PRESTO! pour l'interpolation de pression [9]. Le schéma en temps implicite du second ordre (BDF2) a été choisi. Pour le couplage vitesse-pression, deux variantes de l'algorithme PISO ont été considérées : la variante itérative (standard, notée STRD) et la variante non-itérative (NITA). La première variante effectuée à chaque pas de temps plusieurs itérations pour résoudre les équations couplées de vitesse et de pression, tandis que la seconde ne résout l'équation de Poisson pour la pression qu'une seule fois. La variante NITA est donc plus économe en temps de calcul que la variante STRD, au détriment de la stabilité de l'intégration en temps BDF2, qui doit vérifier une condition de stabilité de type CFL. En ce sens, PISO/NITA est l'algorithme de résolution de FLUENT[®] (V14.57) qui se rapproche le plus du schéma en temps AB/BDF2 (7.76)-(7.77) de la méthode LS-STAG. Tous les autres paramètres numériques de FLUENT[®] sont laissés à leur valeur par défaut. Les simulations FLUENT[®] et LS-STAG ont été effectuées sur le supercalculateur parallèle IJL-LEMMA de l'Université de Lorraine, sur des nœuds à 16 processeurs et 64 Go de mémoire RAM, utilisant des Intel Xeon E5-2660 cadencés à 2.20 GHz.

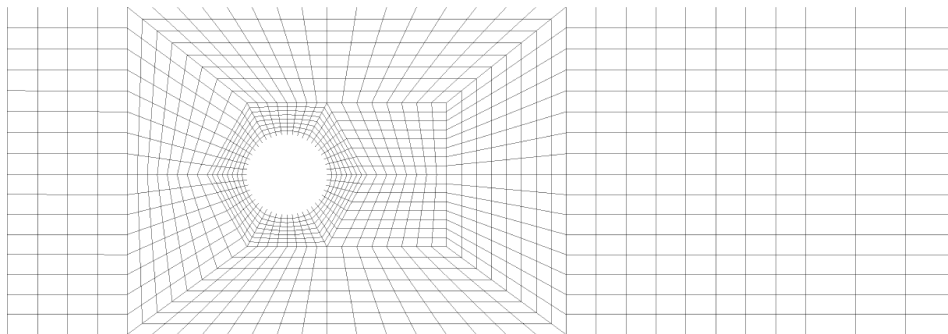


FIGURE 8.21 – Vue dans la direction de l'écoulement du maillage curviligne $L2$ de FLUENT[®].

Les maillages utilisés par FLUENT[®] sont les mêmes que ceux proposés dans [20], et la figure 8.21 représente la coupe dans le plan xy du maillage le plus grossier, nommé $L2$. La partie du maillage

proche de la surface du cylindre a été raffinée avec des cellules hexaédriques quasi-uniformes de taille $\Delta_2/D \simeq 0.31$ basée sur la diagonale principale. Le maillage 3D est alors obtenu par extrusion selon l'axe z avec une distribution uniforme de cellules. Les maillages plus fins L3 et L4 ont des cellules de tailles respectivement de $\Delta_2/2D$ et de $\Delta_2/4D$ pour un nombre total de cellules fluides respectivement de 393216 et 3145728.

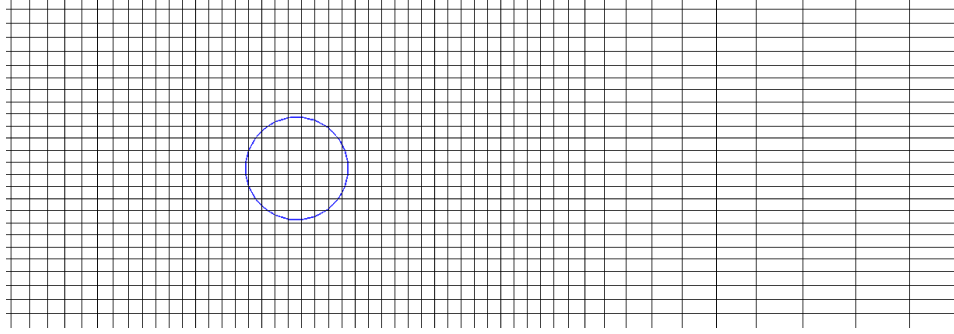


FIGURE 8.22 – Vue dans la direction de l'écoulement du maillage $M2$ de la méthode LS-STAG.

Maillage	$\Delta t U_{ref}/D$	$N_x \times N_y \times N_z$	Cell. fluides cartés.	Cut-cells	$h_x/D \times h_y/D$
$M2$	0.016	$83 \times 38 \times 16$	49136 (97.4%)	576 (1.1%)	0.118×0.105
$M3$	0.008	$159 \times 77 \times 32$	391776 (97.6%)	2368 (0.6%)	0.060×0.051
$M4$	0.004	$317 \times 153 \times 64$	3104064 (97.8%)	9088 (0.3%)	0.030×0.026

TABLE 8.3 – Propriétés des différents maillages et pas de temps utilisés par le code LS-STAG.

Les maillages M2-M4 de la méthode LS-STAG ont été construits dans [Th2] de manière à être les plus proches possibles de L2-L4. Bien que les grilles cartésiennes offrent moins de flexibilité sur le plan du raffinement local des géométries complexes, le nombre total de cellules fluides et la résolution à proximité de la frontière sont choisis de façon à être proches de L2-L4. La vue dans le plan xy du maillage le plus grossier M2 est donnée dans la figure 8.22. Pour M2, le bloc autour du cylindre est obtenu en définissant un maillage rectangulaire de $L_x/D \times L_y/D = 4.0 \times 2.0$ avec des cellules uniformes de taille $h_x/D \times h_y/D = 0.118 \times 0.105$, tandis qu'en amont et en aval du cylindre la taille des cellules est plus importante. Dans la direction en z , une distribution uniforme de cellules de taille $\Delta z/D = 0.256$ est utilisée. Le maillage 3D correspondant à M2 a donc 49136 cellules fluides et des cellules de taille 0.30 près de la surface du cylindre, ce qui est très proche du maillage L2 de FLUENT[®]. Le tableau 8.3 résume les caractéristiques géométriques des différents maillages utilisés pour LS-STAG, ainsi que les pas de temps utilisés pour les simulations.

8.5.2 Résultats et discussion

Les comparaisons reportées dans [Th2] et [Th3] ont essentiellement porté sur les coefficients de traînée C_D et de portance C_L du cylindre, qui évoluent dans le temps avec la période de la vi-

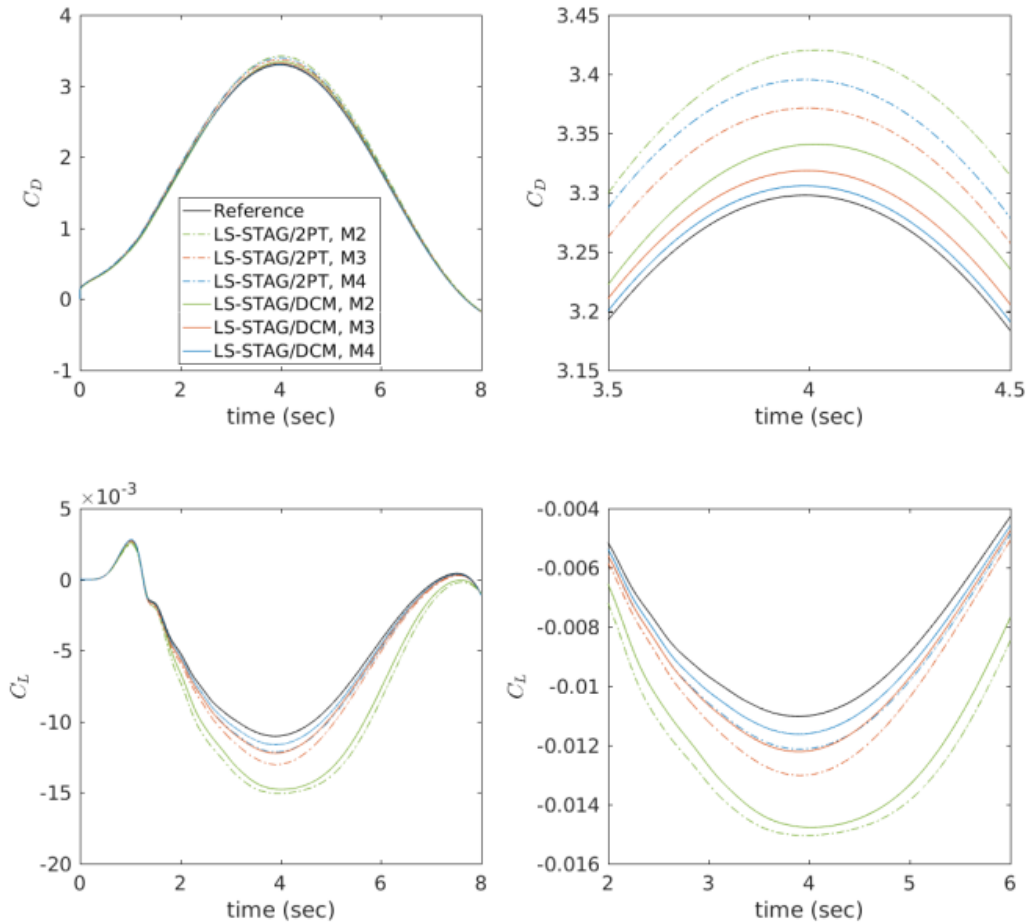


FIGURE 8.23 – Evolution temporelle des coefficients de force pour les variantes 2PT et DCM de la méthode LS-STAG, ainsi que le résultat de référence [19]. A gauche : sur une demi période d’écoulement ; à droite : zoom autour de $t = 4$ s.

tesse d’entrée. Ces coefficients sont calculés à partir de la résultante des forces de traînée (6.46a) et de portance (6.46b) calculée dans les cut-cells autour du cylindre. Une comparaison qualitative des variantes LS-STAG/2PT et DCM est donnée dans la figure 8.23, qui compare sur une demi-période temporelle l’évolution des coefficients C_D et C_L obtenus sur les différents maillages avec les résultats de référence [19]. Clairement, la variante DCM donne une précision supérieure sur chaque niveau de maillage, notamment après $t \simeq 3$ s où les signaux sont soumis à de fortes variations. On remarque aussi que la variante 2PT ne donne pas une convergence monotone sur le coefficient C_D : le signal obtenu sur le maillage $M3$ est plus proche de la référence que celui obtenu sur $M4$.

Une comparaison quantitative des résultats donnés par les codes FLUENT[®] et LS-STAG est donnée dans le tableau 8.4. Ce tableau présente les indicateurs proposés par [20], soit les erreurs relatives sur les extrema des coefficients de force, ainsi que la norme L_2 de ces coefficients calculée à chaque pas de temps. Remarquons en premier que la méthode LS-STAG/2PT exhibe une convergence monotone uniquement sur le coefficient de portance C_L , et donne sur chaque maillage des résultats bien inférieurs

à ceux de FLUENT[®]. La discrétisation DCM apporte une très significative amélioration de la précision des résultats LS-STAG, qui permet d'obtenir une convergence monotone pour tous les coefficients reportés dans le tableau. Les résultats de LS-STAG/DCM ont une précision largement équivalente à ceux de FLUENT[®] sur les deux maillages les plus fins, notamment sur l'indicateur le plus discriminant portant sur l'erreur L_2 des coefficients de force.

Solveur	Maillage	% Erreur			% L_2 Erreur	
		$C_{D_{\max}}$	$C_{L_{\max}}$	$C_{L_{\min}}$	C_D	C_L
LS-STAG/2PT	M2	3.72	11.05	36.61	3.74	48.06
	M3	2.23	2.96	18.07	2.42	16.94
	M4	2.96	0.49	10.02	3.05	10.22
LS-STAG/DCM	M2	1.31	6.99	34	1.48	41.91
	M3	0.63	0.72	10.78	0.65	10.06
	M4	0.24	0.06	5.42	0.22	5.46
FLUENT [®]	L2	2.35	4.40	16.29	2.11	17.03
	L3	0.96	2.16	10.96	0.81	10.01
	L4	0.25	0.08	2.89	0.21	2.67

TABLE 8.4 – Erreurs relatives sur les coefficients de force sur une demi-période de l'écoulement, mesurées par rapport à la solution de référence [19].

Le tableau 8.5 présente le coût en temps de restitution et en occupation mémoire pour les simulations LS-STAG et FLUENT[®]. Notons que les simulations FLUENT[®] avec l'algorithme itératif PISO/STRD sont extrêmement coûteuses en ressources informatiques (plus de 20 fois supérieures aux coûts des simulations avec les 2 variantes de LS-STAG) et n'ont pu être menées à bien sur le maillage le plus fin. En comparaison de simulations FLUENT[®] avec l'algorithme NITA, les 2 variantes LS-STAG sont significativement plus rapides (environ 3 à 4 fois plus rapides que FLUENT[®]), et nécessitent une occupation mémoire 3 à 4 fois plus faible. Ce tableau montre aussi que LS-STAG/DCM ne nécessite que 10% de temps CPU supplémentaire par rapport à LS-STAG/2PT. Cette augmentation modérée du temps de calcul est notamment due à l'algorithme de reconstruction aux sommets et la nécessité d'utiliser un *stencil* élargi pour la résolution des systèmes linéaires par le solveur multigrille HYPRE. Sur le plan de l'occupation mémoire, le surcoût de la méthode DCM est totalement marginal, et ne représente qu'une fraction de la taille mémoire nécessaire pour stocker les nombreux tableaux tridimensionnels que nécessite le schéma à 3 niveaux AB/BDF2 et les tableaux intermédiaires du solveur HYPRE.

Précisons enfin que le coût CPU des simulations LS-STAG dépend fortement du solveur multigrille qui est utilisé. En effet, le solveur HYPRE, initialement développé pour des maillages *body-fitted* structurés et non structurés, est utilisé dans le code LS-STAG en "boîte noire" dans le code LS-STAG pour résoudre les systèmes linéaires issus du schéma de projection décrit dans la section 7.7, et en particulier l'équation de Poisson pour la pression. Or, la résolution de cette équation est connue pour

être la partie la plus coûteuse d'un solveur incompressible : nous avons estimé que la résolution des systèmes linéaires par HYPRE pouvait prendre 60% du temps total d'une simulation. Une réduction significative du coût d'une simulation pourrait être obtenue si le code LS-STAG utilisait des méthodes multigrilles spécifiquement conçues pour la résolution de problèmes elliptiques issus de discrétisation de cut-cells.

Maillage	np	Temps de simulation (min)				Mémoire utilisée (mb)			
		LS-STAG		FLUENT [®]		LS-STAG		FLUENT [®]	
		2PT	DCM	STRD	NITA	2PT	DCM	STRD	NITA
M2/L2	2	15	17	363	55	90	88	406	400
M3/L3	4	125	138	2943	488	418	416	1368	1388
M4/L4	4	2013	2241	-	7841	2470	2422	-	7927

TABLE 8.5 – Coûts en temps de calcul et en mémoire des simulations LS-STAG et FLUENT[®] mesurés sur np processeurs du supercalculateur parallèle IJL-LEMMA pour l'écoulement instationnaire autour du cylindre.

Les résultats de cette partie montrent l'amélioration significative de précision qu'apporte la technique DCM à la méthode LS-STAG, qui représente maintenant une alternative compétitive, aussi bien en terme de précision que de ressources informatiques, aux méthodes traditionnelles avec maillages ajustés à la frontière. Nous allons maintenant donner un exemple d'application de la méthode LS-STAG/DCM aux écoulements en géométries "totalement" 3D, pour lesquelles la méthode 2PT ne peut être appliquée.

8.6 Ecoulement autour d'une sphère

Afin d'évaluer la précision de la méthode LS-STAG/DCM pour des cut-cells totalement 3D, [Th3] a considéré l'écoulement autour d'une sphère dans un domaine non confiné. Cet écoulement canonique possède une variété de régime selon la valeur du nombre de Reynolds [150, 80] : il est laminaire et stationnaire jusqu'à $Re \simeq 270$, puis perd son indépendance temporelle et exhibe un régime chaotique à partir de $Re \simeq 800$, et transitionne ensuite vers un régime pleinement turbulent.

[Th3] a notamment présenté des simulations LS-STAG pour les régimes $Re = 100$ et 300 , qui sont bien documentés dans la littérature [79, 150]. En outre, des simulations ont été réalisées dans le cas où la sphère était soumise à une rotation longitudinale [84], afin de valider l'implémentation des conditions aux limites non-homogènes dans les cut-cells 3D. Enfin, des résultats préliminaires de DNS ont été présentés pour le régime faiblement turbulent à $Re = 1000$, qui a précédemment étudié dans [150] par méthode d'éléments spectraux et dans [103] par méthode de vortex.

Pour ces différents régimes, les simulations LS-STAG ont été réalisées dans le domaine de calcul représenté sur la figure 8.24. Une longueur de $L_x = 15D$ est utilisée dans la direction de l'écoulement, ce qui correspond à la taille minimale considérée dans les études précédentes [79, 150, 84, 174, 103]. En

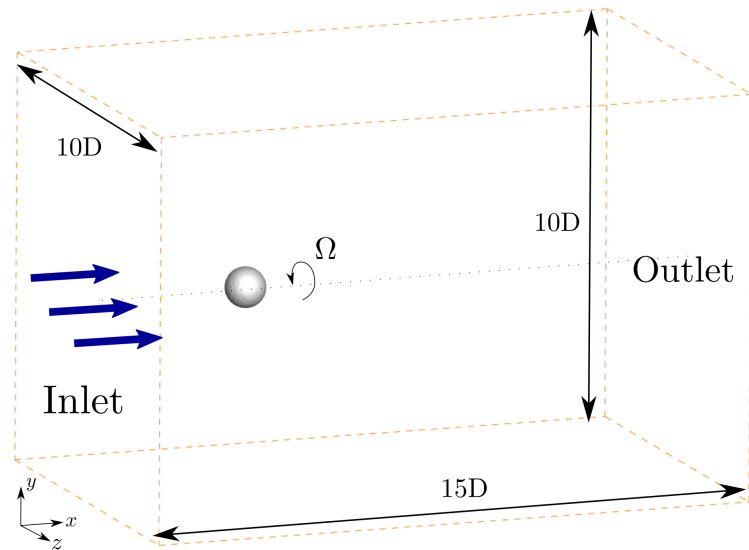


FIGURE 8.24 – Domaine de calcul pour l'écoulement autour d'une sphère de diamètre D . Le centre de la sphère est situé à la distance $4D$ de l'inlet. La sphère est mise en mouvement autour de l'axe x avec la vitesse angulaire Ω , ce qui donne un vitesse de rotation adimensionnée $\omega = \Omega D/2U_\infty$.

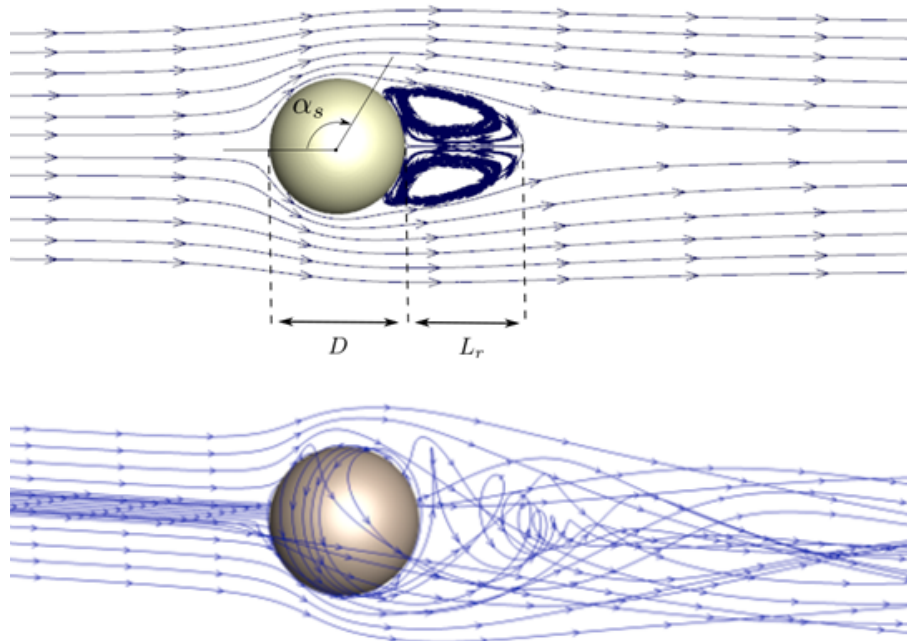


FIGURE 8.25 – Lignes de courant de l'écoulement à $Re = 100$ pour une sphère sans rotation (haut), et en rotation longitudinale pour $\omega = 1$ (bas).

comparaison, Tomboulides & Orszag [150] ont choisi $L_x = 30D$ pour leurs simulations à $Re = 1000$; Johnson & Patel [79] ont choisi $L_x = 15D$ pour leurs simulations à $Re = 100$ et 300 . Ces deux études ont été réalisées dans un domaine de calcul sphérique comportant respectivement 1M et 0.4M de

cellules. Pour leurs simulations autour d'une sphère en rotation à $Re = 100$ et 300 , Kim & Choi [84] ont choisi $L_x = 30D$ pour un domaine de calcul parallélépipédique comportant 2M de cellules.

Les simulations LS-STAG ont été réalisées sur une série de maillages M_1 - M_3 allant de 61000 à près de 400000 cellules fluides, de taille $h \simeq 0.02D$ près de la sphère pour le maillage le plus fin. Bien que cette résolution de proche paroi soit en accord avec la littérature, le nombre total de cellules pour l'écoulement turbulent à $Re = 1000$ est bien inférieur à celui considéré par Tomboulides & Orszag [150] (1M de cellules) et l'étude récente de Mimeau *et al.* [103] par méthode de vortex pénalisée (268M de cellules). La taille modeste du domaine de calcul et des maillages LS-STAG a été choisie de façon à pouvoir mener à bien les nombreuses simulations réalisées aux différents régimes et vitesses de rotation considérés.

	C_D	α_s	L_r/D
LS-STAG M_1	1.116	130.6°	0.89
LS-STAG M_2	1.109	126.4°	0.88
LS-STAG M_3	1.096	126.7°	0.88
FLUENT [®] M_3	1.100	131°	0.87
Johnson & Patel [79]	1.089	127°	0.89
Tomboulides & Orszag [150]	-	126°	0.87
Fornberg [56]	1.085	-	-
Yang [174]	1.095	-	-
Kim & Choi [84]	1.087	128.7°	0.87

TABLE 8.6 – Comparaison des différents résultats obtenus par LS-STAG, FLUENT[®] et la littérature, pour l'écoulement autour d'une sphère fixe à $Re = 100$.

Dans ce document, nous présenterons essentiellement les résultats obtenus à $Re = 100$ pour une sphère fixe et mise en rotation avec la vitesse angulaire adimensionnée ω . En absence de rotation, l'écoulement est stationnaire et caractérisé par un sillage de forme axisymétrique à l'aval de la sphère (Fig. 8.25 (haut)). Le tableau 8.6 compare les résultats LS-STAG et ceux de la littérature pour les grandeurs caractéristiques de la zone recirculation, tel que le coefficient de traînée C_D , l'angle de séparation α_s de la couche limite, ainsi que la longueur L_r du bulbe. Ce tableau présente aussi les résultats FLUENT[®] obtenus par [Th3] pour un domaine de calcul et une taille de maillage similaire à LS-STAG. Sur les 2 maillages les plus fins, les résultats LS-STAG sont en excellent accord avec les valeurs de référence, et de précision supérieure aux simulations FLUENT[®]. Nous observons néanmoins que les simulations LS-STAG et FLUENT[®] surestiment légèrement la valeur de C_D , ce qui est certainement causé par l'effet de blocage induit par la taille réduite du domaine de calcul.

Lorsque la sphère est mise en rotation avec $\omega \in [0, 1]$, les simulations de Kim & Choi [84] par méthode IBM ont montré que l'écoulement restait stationnaire et axisymétrique, mais que la zone de recirculation possédait une structure plus complexe (Fig. 8.24 (bas)). La figure 8.26 compare les résultats des simulations LS-STAG sur le maillage le plus fin avec ceux de Kim & Choi [84]. L'évolution

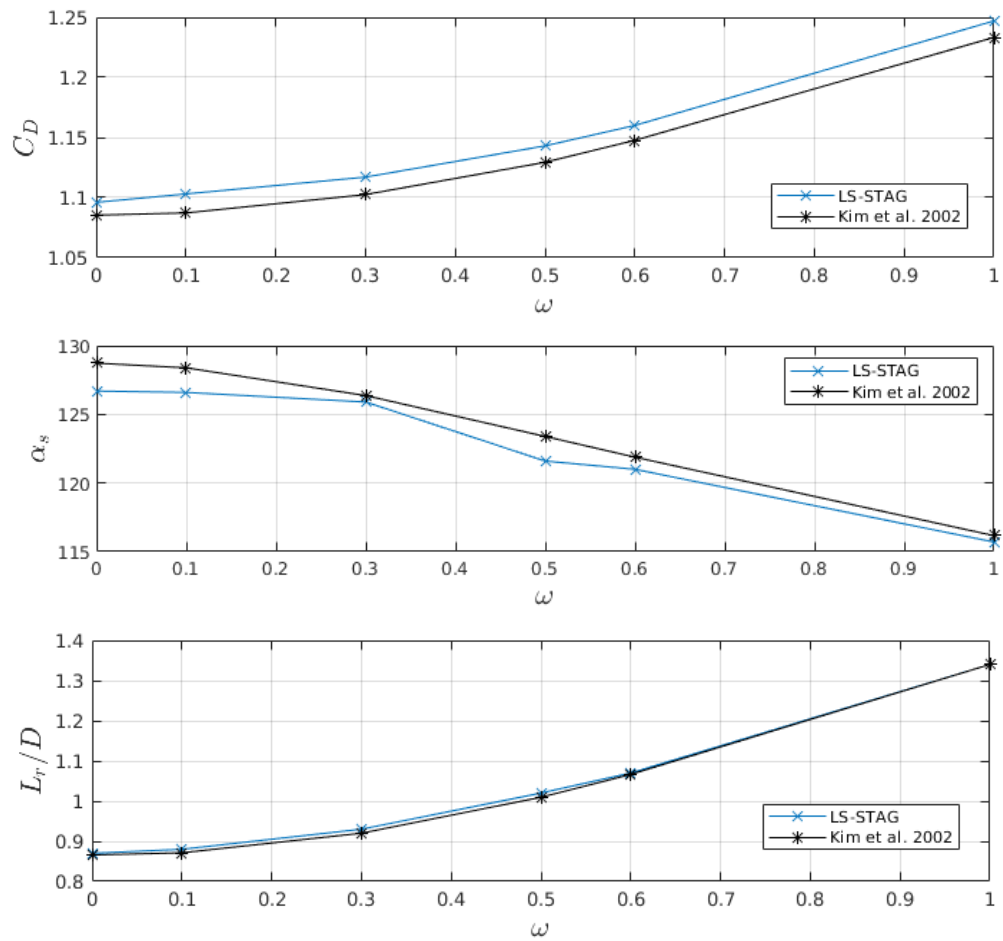


FIGURE 8.26 – Coefficient C_D (haut), angle de séparation α_s (milieu) et longueur de recirculation L_r (bas) obtenus pour $Re = 100$ et $\omega \in [0, 1]$.

de ces quantités en fonction de la vitesse de rotation est semblable à [84], et le faible écart observé sur les valeurs de C_D et α_s est du même ordre que celui observé pour une sphère fixe. Ces simulations, ainsi que celles présentées dans [Th3] pour l'écoulement périodique en temps, ont notamment permis de valider l'implémentation des conditions aux limites non-homogènes dans les flux convectifs et diffusifs de la méthode LS-STAG/DCM.

Finalement, nous présentons sur la figure 8.27 les résultats préliminaires obtenus pour la DNS de l'écoulement turbulent à $Re = 1000$ pour une sphère fixe. La prédiction du coefficient de traînée moyenné dans le temps est en excellent accord avec les études numériques les plus récentes [174, 103]. Le profil de vitesse moyen montre que la taille de la zone de recirculation est $L_r/D \simeq 2.7$, en accord avec les précédentes études expérimentales [171] et numériques [150]. La simulation LS-STAG sur-prédit néanmoins l'amplitude de la dépression de vitesse dans le sillage, ce qui indiquerait un manque de résolution spatiale dans cette région, avant de recoller aux valeurs de référence en aval de la sphère. Il est à préciser que la taille du domaine de calcul LS-STAG limite le tracé du profil à $x \in [0, 12D]$, tandis que les résultats de [171, 150] s'étendent jusqu'à $x = 25D$. L'évolution du profil de vitesse en aval de la sphère montre que la taille du domaine est insuffisante pour ce régime d'écoulement. Ces constatations motivent la mise en œuvre d'une simulation LS-STAG sur un domaine de calcul plus étendu, et une résolution spatiale supérieure dans la zone de recirculation.

	$\overline{C_D}$
LS-STAG	0.484
Tomboulides & Orszag [150]	-
Fornberg [56]	0.319
Yang [174]	0.46
Mimeau <i>et al.</i> [103]	0.485

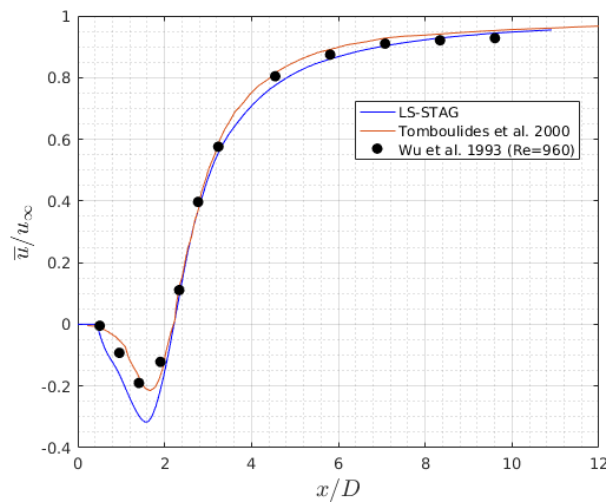


FIGURE 8.27 – DNS de l'écoulement à $Re = 1000$. A gauche : Coefficient de traînée moyenné dans le temps. A droite : profil de vitesse moyen sur l'axe horizontal à l'aval de la sphère.

Chapitre 9

Conclusion générale et projet de recherche

9.1 Introduction au chapitre

Les développements présentés dans les chapitres précédents ont permis de construire une méthode algorithmiquement efficace pour les écoulements de fluides newtoniens incompressibles en géométries “totalement” 3D. La variante DCM de la méthode LS-STAG propose un cadre de discrétisation solide qui permet de poursuivre la modélisation des écoulements de fluides visqueux. La première partie de ce chapitre présente quelques pistes de développements pour les fluides incompressibles.

Dans une seconde partie, je présenterai un projet de recherche portant sur la simulation numérique des interactions rayonnement-turbulence dans les chambres de combustion prémélangées. Ce projet a pour objet de coupler les prédictions de deux codes de calculs développés au LEMTA : le code radiatif RAD3D [13, 152] développé par F. Asllanaj, CR au LEMTA, et le code LS-STAG pour la partie CFD, dans l’objectif de les appliquer à la simulation de la combustion des carburants alternatifs. Ce projet est soutenu par l’allocation d’une bourse doctorale de l’ED SIMPPE à la rentrée 2021-22. Pour mener à bien cette étude, il sera nécessaire d’étendre le code LS-STAG à la simulation d’écoulements compressibles, sur laquelle nous présenterons quelques perspectives.

9.2 Perspectives sur la méthode LS-STAG

- **Amélioration de la formule DCM pour les cut-cells 3D à face non-planes :**

Dans le chapitre 7.2.2, nous avons vu que la face solide $\Gamma_{i,j,k}^{\text{ib}}$ n’était pas totalement plan pour les cut-cell 3D dont le nombre de sommets $\Gamma_{i,j,k}^{\text{ib}}$ est compris entre $P = 4$ et 6 (*cf.* Fig. 6.13). En conséquence, il était attendu que la formule DCM (7.46) sur la face solide perde sa précision au second-ordre pour les simulations 3D présentées dans la section 8.6. B. Portelenelle [Th3] a observé que dans une cellule de Couette sphérique, où les équations de Stokes possèdent une

solution analytique [98], l'ordre de précision était seulement linéaire dans les cut-cells, et proche du second ordre dans les cellules cartésiennes, alors que le second ordre était globalement atteint pour la solution de Hagen-Poiseuille dans une conduite cylindrique. Ainsi, pour une géométrie "totalement" 3D, l'ordre de précision de la méthode LS-STAG/DCM est inférieur à celui observé en géométrie 3D-extrudée.

Une amélioration de la précision dans les cut-cells serait de considérer une triangulation de la face solide pour $P = 4, 5$ et 6 , qui est de forme polygonale convexe, par des algorithmes de type *ear clipping*¹ [113, 151]. Il conviendrait aussi d'améliorer la précision du calcul (7.18) du volume de la cut-cell, en considérant les formules pour cellules polyédriques établies dans [30, 169]. L'application de la formule DCM (7.46) à chaque triangle conserverait sa précision au second ordre, puisque chaque face serait plane, et n'occasionnerait que des modifications mineures du terme diagonal et le second-membre du système linéaire à résoudre.

- **Simulations 3D avec la méthode LS-STAG/DCM :**

La section 8.6 portant sur l'écoulement autour de la sphère a montré que la méthode LS-STAG/DCM pouvait s'appliquer avec succès aux écoulements "totalement" 3D, et le cas de la sphère en rotation a permis de valider l'implémentation des conditions aux limites non-homogènes dans les cut-cells. Néanmoins cette étude nécessite d'être approfondie pour deux raisons. Premièrement, la simulation du régime turbulent à $Re=1000$ a montré une insuffisance de la résolution spatiale à l'aval de la sphère, et une taille trop réduite du domaine de calcul. De plus, il serait intéressant d'évaluer le gain de précision qu'apporterait le calcul DCM sur une triangulation de la face solide des cut-cells, dans le régime turbulent mais aussi dans le régime stationnaire à $Re=100$. Pour ce régime, [Th3] avait comparé les profils du coefficient de pression et de frottement sur la médiane de la sphère avec les résultats de [79] (pour la pression uniquement) et des simulations FLUENT. Les profils des simulations LS-STAG ont notamment montré la présence d'oscillations du coefficient de frottement et de valeurs "aberrantes" (*outliers*) du coefficient de pression, ces dernières apparaissant dans les cut-cells de faible volume, comme pour le cas-test 2D de convection naturelle (section 8.4). Cette étude doit être complétée par une comparaison fine des 2 variantes du gradient DCM sur la face solide des cut-cells, en construisant un indicateur qui permettrait d'évaluer la non-planéité des faces solides, par exemple en construisant un coefficient d'ajustement qui quantifierait la déviation des sommets de la face par rapport à un plan moyen.

- **Application de la variante DCM aux écoulements de fluides pseudo-plastiques :**

Dans la section 8.3.2, l'application de la méthode LS-STAG/2PT aux fluides pseudo-plastiques a mis en évidence la difficulté du calcul du taux de cisaillement dans les cut-cells. Ce calcul mets

1. La triangulation d'un polygone de P sommets comporte $P - 2$ triangles. Le nombre de triangulations possibles est donné par le nombre de Catalan C_{P-2} , ce qui donne respectivement 2,5 et 14 triangulations possibles pour $P = 4, 5$ et 6 . Les algorithmes de triangulation optimale [151] permettent de trouver la "meilleure" triangulation possible selon une fonction objectif donnée, comme l'angle maximum des triangles ou la somme de la longueur des arêtes.

notamment en jeu les interpolations (8.19) et (8.27) pour reconstruire le taux de cisaillement aux centroides et aux sommets, et nécessite de calculer les gradients de vitesse pariétaux, pour lesquels les insuffisances du calcul *ad hoc* de la variante 2PT étaient pleinement révélées. En conséquence, la précision des simulations de fluides pseudo-plastiques était inférieure à celle des simulations newtoniennes, notamment dans les cut-cells ([Th2], [A12]). La variante DCM permettrait un calcul plus précis de ces gradients de vitesse, et d'étendre la discrétisation aux cut-cells "totalemt" 3D. Il resterait aussi à évaluer la pertinence de remplacer l'interpolation aux sommets (8.27) par l'interpolation barycentrique de la variante DCM.

- **Schémas en temps préservant l'énergie cinétique totale :**

La méthode LS-STAG a été construite de façon à préserver les invariants globaux des équations de Navier-Stokes semi-discrètes (*cf.* Section 6.4.3), où l'influence de la discrétisation temporelle était négligée. Le schéma de projection semi-implicite AB/BDF2 (7.76)-(7.77) préserve l'invariant linéaire de quantité de mouvement [137], comme la plupart des intégrations en temps utilisées en CFD. Par contre seule une classe restreinte de schémas comme certains types de schémas de Runge-Kutta (RK), nécessairement implicites, permettent de conserver les invariants quadratiques telle que l'énergie cinétique totale [138]

Pour les schémas RK implicites, Sanderse [140] et Coppola *et al.* [41] énoncent les conditions que doivent vérifier leurs coefficients. Un exemple important est représenté par le schéma RK implicite du point milieu (*implicit midpoint*), qui est précis au second-ordre. Une généralisation du schéma *implicit midpoint* est représentée par la classe de schémas RK basés sur la quadrature de Gauss [12], qui atteignent un ordre supérieur à 2 en ajoutant des étapes intermédiaires entre les 2 niveaux du schéma. Le schéma *implicit midpoint* a notamment été utilisé par [66] pour la simulation directe de l'écoulement turbulent dans un canal plan, et il a permis d'obtenir des résultats physiquement corrects pour des pas de temps significativement supérieurs que les simulations de référence.

Néanmoins, plusieurs raisons entravent l'utilisation pratique des schémas RK de Gauss dans les simulations de CFD. La première raison est due à leur caractère totalement implicite, qui nécessite de coûteux algorithmes itératifs pour systèmes non-linéaires. Le coût des simulations est amplifié pour les schémas RK d'ordre supérieur, car toutes les étapes intermédiaires du schéma doivent être résolues simultanément. Afin de réduire le coût des simulations, il est possible d'extrapoler linéairement le terme convectif [21] afin de ne résoudre que des systèmes linéaires. où d'utiliser des schémas RK explicites dits pseudo-symplectiques [32], dont l'erreur sur la conservation de l'énergie cinétique est d'un ordre supérieur à l'erreur de troncature du schéma.

De plus les schémas RK de Gauss ne sont pas L-stable [12] et ne conviennent donc pas pour traiter le terme de diffusion des équations de Navier-Stokes, car ils peuvent engendrer des oscillations numériques [154]. Pour cette raison, Sanderse [140] a développé des schémas RK additifs, où le terme convectif est traité par un schéma RK conservant l'énergie cinétique, tandis que le terme diffusif est traité par un schéma RK L-stable. Néanmoins, le coût de la résolution simultanée des

différentes étapes rends difficile l'utilisation pratique de ces schémas en CFD.

A la lumière de ce bref état de l'art, il apparaît qu'il serait intéressant de développer une intégration en temps pour la méthode LS-STAG qui observe les propriétés :

- Le nombre d'étapes (et donc l'ordre de précision) est limité à 2, de façon à réduire le coût numérique du schéma,
- le terme convectif est traité par un schéma RK qui conserve l'énergie cinétique totale, de type *implicit midpoint* extrapolé linéairement [21] ou pseudo-symplectique [32], afin d'éviter de résoudre des systèmes non-linéaires,
- Le terme diffusif est traité par un schéma implicite L-stable, pour éviter les problèmes de stabilité liés aux petites cut-cells.

Dans cette perspective, il conviendrait de modifier le traitement de la diffusion par le schéma BDF2 qui, bien que L-stable, est difficile à combiner avec un schéma RK en raison des 3 niveaux de temps qu'il utilise. Une possibilité serait d'utiliser le schéma TR-BDF2 [18] qui, en combinant le schéma *trapezoidal rule* (*i.e.*, Crank-Nicolson) pour avancer la solution au même temps intermédiaire que le schéma *implicit midpoint*, suivi par une avancée avec le schéma BDF2 jusqu'au temps final, transforme le schéma BDF2 en schéma à 2 niveaux tout en préservant ses propriétés de stabilité et de précision [47].

9.3 Projet de recherche : Modélisation numérique des interactions rayonnement-turbulence. Application à la combustion des nouveaux carburants

9.3.1 Enjeu sociétal

Environ 85% de la conversion de l'énergie primaire mondiale provient des systèmes de combustion qui sont responsables des émissions de polluants (CO, CO₂, NO_x, suie). Les industries, les bâtiments et le transport, notamment routier sont les secteurs les plus concernés. Le développement des énergies alternatives et la réduction des émissions de polluants sont devenus une des préoccupations majeures de notre siècle, afin de diminuer les risques associés à la pollution de l'air et au réchauffement climatique. L'un des enjeux actuels est de développer des moyens alternatifs de production de l'énergie, qui mettent en jeu une combustion propre, efficace et économique en utilisant de nouveaux carburants, moins émetteurs de polluants (biocarburants, GPL, gaz naturel, biogaz, H₂, ammoniac, ...).

9.3.2 Présentation générale

La combustion des nouveaux carburants est un domaine de recherche en plein essor [134]. La combustion turbulente implique des interactions complexes entre la dynamique des fluides, les transferts de chaleur et les réactions chimiques [129]. Il s'agit de résoudre les équations de l'aérothermochimie qui

modélisent l'écoulement d'un fluide (gaz, liquide) dans une chambre de combustion dans lequel plusieurs espèces sont transportées et réagissent ensemble en dégageant de la chaleur. Dans la littérature, la compréhension de la combustion demeure encore incomplète en raison de la complexité de chacun des processus et de leurs interactions. L'effet de ces interactions peut devenir très important pour les systèmes de combustion pratiques tels que les moteurs ou chambres de combustion prémélangée. Sans une compréhension fine et globale des phénomènes physiques, il restera difficile de développer une alternative compétitive aux systèmes de combustion conventionnels, aussi bien sur le plan du rendement des nouveaux carburants que de la maîtrise des émissions de polluants.

La simulation numérique de la combustion turbulente connaît ces derniers années un nouvel essor avec la LES. Cette approche permet de simuler avec fidélité les écoulements réactifs turbulents, conduisant à une meilleure compréhension des phénomènes physiques contrôlant la flamme dans une chambre de combustion. D'importantes avancées ont été effectuées dans ce domaine et les simulations réalisées dans des configurations industrielles reproduisent de bonnes tendances. Par contre, le rayonnement thermique est souvent traité avec des modèles simplifiés [105, 39], malgré son importance dans les processus physiques. Près des parois, le transfert de chaleur de la flamme est entraîné par convection, mais également par le rayonnement des gaz chauds au sein de la chambre de combustion. Le rayonnement joue également un rôle clé lors des phases transitoires comme l'allumage ou l'extinction de la flamme. De plus, dès que des suies sont produites, le rayonnement devient un processus important pour la structure de flamme. Enfin, les émissions de polluants sont très sensibles à la température qui, elle-même, est influencée par le rayonnement [130, 105, 39, 34]. Il est donc important de prendre en compte avec précision les échanges radiatifs pour renforcer le caractère prédictif des simulations de la combustion turbulente, avec pour objectif de les appliquer aux carburants alternatifs.

Ce projet porte sur le développement et l'application de méthodes numériques performantes pour étudier finement les interactions rayonnement-turbulence. L'objectif, au niveau des applications, vise à quantifier les émissions de polluants générés par les nouveaux carburants et à améliorer l'efficacité de la combustion pour la rendre plus propre. Les simulations seront réalisées à l'aide de deux codes de calcul 3D développés depuis plusieurs années au LEMTA : le code LS-STAG pour la CFD et RAD3D [13, 152] pour le rayonnement. RAD3D est basée sur une méthode aux volumes finis modifiés, méthode reconnue comme étant prometteuse pour simuler le rayonnement thermique dans les écoulements turbulents [39]. RAD3D possède, en particulier, une grande flexibilité géométrique qui permettra un couplage aisé avec le code LS-STAG. Quelques modules seront à développer pour chacun de deux codes :

- Extension du code LS-STAG aux écoulements compressibles et turbulents. Les équations de Navier-Stokes compressibles seront résolues par une approche de type *pressure-based*, permettant de capturer efficacement les régimes d'écoulement très contrastés qui sont présents dans les applications de combustion turbulente, depuis le régime quasi-incompressible caractéristique des problèmes de combustion subsonique, jusqu'aux régimes de déflagration où le champ acoustique joue un rôle important. Les premières tentatives d'étendre la méthode MAC pour écoulements incompressibles, sur laquelle repose le code LS-STAG, remontent à la méthode ICE de Harlow

& Amsden [68, 69] à la fin des années 60. Les méthodes *pressure-based* ont connue ces dernières années de nouveaux développements pour des applications de combustion et de risques nucléaires (codes de calcul CALIF³S – P²REMICS [31, 117], GASFLOW-MPI [172]). Des perspectives sur l’application de ces méthodes dites “*for all speed flows*” ou “*Mach uniform*” dans le contexte de la discrétisation LS-STAG sont données dans la section suivante.

- Traitement de la turbulence sera par une approche LES, où l’interaction des termes sources chimique et radiatif avec la turbulence sera traitée par des méthodes de fonction de densité de probabilité (PDF) [105, 39].
- Implémentation dans RAD3D d’un modèle spectral de rayonnement de gaz basé sur la méthode FSK¹. C’est la méthode qui propose actuellement le meilleur compromis entre précision et temps de calcul [105].

Dans un premier temps, on envisage d’implémenter un modèle de chimie cinétique réduite pour les nouveaux carburants [134]. Les simulations seront effectuées sur une configuration de flamme de laboratoire, avant de considérer des configurations d’intérêt industriel.

9.3.3 Extension de la méthode LS-STAG aux écoulements compressibles

Les méthodes numériques traditionnelles pour les écoulements compressibles sont dites *density based* [74], car elles considèrent la masse volumique comme variable primitive de l’équation de continuité, puis extraient la pression de l’équation d’état. Ces méthodes qui utilisent principalement un arrangement collocalisé des variables, des discrétisations décentrées pour capturer les chocs et des schémas explicites en temps, ont été originellement développée pour des problèmes d’aérodynamique externe où les variations de masse volumique sont dues aux effets de compressibilité. Lorsqu’elles sont appliquée à des écoulements à faible nombre de Mach, la masse volumique perd sa dépendance à la pression, et les méthodes *density based* voient leurs performances se dégrader sur le plan de la stabilité que de la précision, à moins que des techniques de préconditionnement ne soient utilisées [64]. Une façon de contourner le problème serait d’utiliser la formulation à faible de nombre de Mach des équations de Navier-Stokes [94], où les variations de masse volumique sont uniquement dues aux effets de dilatabilité. Dans cette formulation, les ondes acoustiques sont éliminées de façon que la stabilité des simulations explicites soit uniquement dicté par une condition CFL sur la vitesse matérielle de l’écoulement. Les équations à faible nombre de Mach sont essentiellement discrétisées par les méthodes *pressure based* initialement développées pour les écoulements incompressibles [3], où la pression est traitée comme une variable primitive. L’approximation à faible nombre de Mach a néanmoins un champ d’applications limité aux problèmes où les effets acoustiques peuvent être négligées [129], et en particulier ne peuvent s’appliquer à la simulation des instabilités acoustiques où les équations compressibles doivent être utilisées.

Les premières applications d’une méthode de correction de pression aux équations de Navier-Stokes

1. FSK : *Full-spectrum correlated k-distribution method*.

compressibles remontent à la méthode ICE de Harlow & Amsden [68, 69] à la fin des années 60, et connaissent ces dernières années de nouveaux développements pour des applications de combustion et de risques nucléaires (codes de calcul CALIF³S – P²REMICS [31, 117], GASFLOW-MPI [172]). Ces méthodes sont particulièrement pertinentes pour être implémentées dans le code LS-STAG car elles sont principalement basées sur l’arrangement décalé MAC, et l’équation de conservation de la masse est résolue par des algorithmes de correction de pression, de type itératif (comme l’algorithme SIMPLE [118]) ou prédictor-correcteur (comme le schéma de projection AB/BDF2 (7.76)-(7.77)). Dans une série d’articles récents [73, 72, 62], Herbin et ses collaborateurs ont analysé les méthodes de correction de pression qui sont implémentées dans le code CALIF³S – P²REMICS [31, 117]. L’approximation spatiale est basée sur l’arrangement MAC ou des éléments finis mixtes. L’un des avantages de ces schémas semi-implicites est de reposer sur un algorithme de résolution de type prédictor-correcteur, où l’étape de correction de pression résulte du couplage de l’équation de continuité et de l’énergie interne. Cette étape peut être reformulée comme une équation non-linéaire pour la pression [149] qui, lorsque le nombre de Mach tends vers zéro, dégénère vers l’équation de Poisson classique (7.78) des écoulements incompressibles. Le succès de l’extension de la discrétisation LS-STAG aux écoulements compressibles reposera aussi sur l’extension de la discrétisation *skew symmetric* dans les cellules cartésiennes et les cut-cells. Cela devra être accompli en suivant les travaux de van’t Hof & Veldman [162] et Rozema *et al.* [139] portant respectivement sur la discrétisation spatiale des équations de Saint-Venant et de Navier-Stokes sur l’arrangement MAC, qui a la propriété de préserver discrètement le bilan d’énergie totale du système d’équations continues.

Troisième partie

Sélection d'articles sur la méthode
LS-STAG

Chapitre 10

Articles sur la méthode LS-STAG/2PT

10.1 La méthode LS-STAG/2PT pour fluides newtoniens 2D

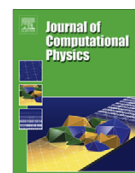
Journal of Computational Physics 229 (2010) 1043–1076



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Computational Physics

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jcp



The LS-STAG method: A new immersed boundary/level-set method for the computation of incompressible viscous flows in complex moving geometries with good conservation properties

Yoann Cheny, Olivier Botella*

LEMNA, Nancy-University, CNRS, 2, Avenue de la Forêt de Haye, B.P. 160, 54504 Vandœuvre-lès-Nancy, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 10 June 2008

Received in revised form 5 October 2009

Accepted 6 October 2009

Available online 14 October 2009

Keywords:

Incompressible viscous flows

Complex geometries

Immersed boundary methods

Cut-cell methods

Finite volume methods

ABSTRACT

This paper concerns the development of a new Cartesian grid/immersed boundary (IB) method for the computation of incompressible viscous flows in two-dimensional irregular geometries. In IB methods, the computational grid is not aligned with the irregular boundary, and of utmost importance for accuracy and stability is the discretization in cells which are cut by the boundary, the so-called “cut-cells”. In this paper, we present a new IB method, called the LS-STAG method, which is based on the MAC method for staggered Cartesian grids and where the irregular boundary is sharply represented by its level-set function. This implicit representation of the immersed boundary enables us to calculate efficiently the geometry parameters of the cut-cells. We have achieved a novel discretization of the fluxes in the cut-cells by enforcing the strict conservation of total mass, momentum and kinetic energy at the discrete level. Our discretization in the cut-cells is consistent with the MAC discretization used in Cartesian fluid cells, and has the ability to preserve the five-point Cartesian structure of the stencil, resulting in a highly computationally efficient method. The accuracy and robustness of our method is assessed on canonical flows at low to moderate Reynolds number: Taylor–Couette flow, flows past a circular cylinder, including the case where the cylinder has forced oscillatory rotations. Finally, we will extend the LS-STAG method to the handling of moving immersed boundaries and present some results for the transversely oscillating cylinder flow in a free-stream.

© 2009 Elsevier Inc. All rights reserved.

1. Introduction

Much attention has recently been devoted to the extension of Cartesian grid flow solvers to complex geometries by immersed boundary (IB) methods (see [28,39] for recent reviews). In these methods, the irregular boundary is not aligned with the computational grid, and the treatment of the *cut-cells*, cells of irregular shape which are formed by the intersection of the Cartesian cells by the immersed boundary, remains an important issue. Indeed, the discretization in these cut-cells should be designed such that: (a) the global stability and accuracy of the original Cartesian method are not severely diminished and (b) the high computational efficiency of the structured solver is preserved.

Two major classes of IB methods can be distinguished on the basis of their treatment of cut-cells. Classical IB methods such as the *momentum forcing method* introduced by Mohd-Yusof and co-workers [41,14], use a finite-volume/difference structured solver in Cartesian cells away from the irregular boundary, and discard the discretization of flow equations in

* Corresponding author.

E-mail address: Olivier.Botella@ensem.inpl-nancy.fr (O. Botella).

the cut-cells. Instead, special interpolations are used for setting the value of the dependent variables in the latter cells. Thus, strict conservation of quantities such as mass, momentum or kinetic energy is not observed near the irregular boundary. The most severe manifestations of these shortcomings is the occurrence of non-divergence free velocities or unphysical oscillations of the pressure in the vicinity of the immersed boundary [43,30]. Numerous revisions of these interpolations are still proposed for improving the accuracy and consistency of this class of IB methods [30,3,49,43].

A second class of IB methods (also called *cut-cell methods* or simply *Cartesian grid methods*, see [66,59,61,32,12,9,40]) aims for actually discretizing the flow equations in cut-cells. The discretization in the cut-cells is usually performed by *ad hoc* treatments which have more in common with the techniques used on curvilinear or unstructured body-conformal grids than Cartesian techniques. Most notable is the cell merging technique used by Ye et al. [66] and Chung [9] that merges a cut-cell with a neighboring Cartesian cell to form a new polygonal cell with more than four neighbors. The discretization stencil in this newly formed cell loses thus the five-point structure (in 2D) of Cartesian methods. Such treatments of the cut-cells generate a non-negligible bookkeeping to discretize the flow equations and actually solve them, and it is difficult to evaluate the impact of these treatments on the computational cost of the flow simulations.

The purpose of this article is to present a new IB method for incompressible viscous flows which takes the best aspects of both classes of IB methods. This method, called the LS-STAG method, is based on the *symmetry preserving* finite-volume method by Verstappen and Veldman [63], which has the ability to preserve on non-uniform staggered Cartesian grids the conservation properties (for total mass, momentum and kinetic energy) of the original MAC method [24]. The LS-STAG method has the following distinctive features:

- A sharp representation of the immersed boundary is obtained by using a signed distance function (*i.e.* the level-set function [46,47]) for its implicit representation. Level-set methods were devised by Osher and Sethian [48] for the solution of computational physics problems involving dynamic interfaces. So far for incompressible flows, the main application areas of level-set methods have been the computation of two-phase flows [56]. In the present paper, the level-set function enables us to easily compute all relevant geometry parameters of the computational cells, reducing thus the bookkeeping associated to the handling of complex geometries.
- In contrast to classical IB methods, flow variables are actually computed in the cut-cells, and not interpolated. Furthermore, the LS-STAG method has the ability to discretize the fluxes in Cartesian and cut-cells in a *consistent and unified fashion*: there is no need for deriving an *ad hoc* treatment for the cut-cells, which would be totally disconnected from the basic MAC discretization used in the Cartesian cells.
- For building our discretization, we have required the strict conservation of global quantities such as total mass, momentum and kinetic energy in the whole fluid domain, which are crucial properties for obtaining physically realistic numerical solutions [1,42,63]. To achieve these preservation properties up to the cut-cells, we had to precisely take into account the terms acting on the immersed boundary in the global conservation equations, at both continuous and discrete levels. As a result, the convective, pressure and viscous fluxes have been unambiguously determined by these requirements, and the boundary conditions at the immersed boundary have been incorporated into these fluxes with a consistent manner.
- From the algorithmic point of view, one of the main consequences is that the LS-STAG discretization preserves the five-point structure of the original Cartesian method. This property allowed the use of an efficient black box multigrid solver for structured grids [62], where no *ad hoc* modifications had to be undertaken for taking account of the immersed boundary.

We also mention that a first attempt at constructing an energy-conserving IB method from the ideas of Verstappen and Veldman can be found in [12]. In this paper however most of the computational aspects of the method has been skipped: it appears that computation of the geometry parameters of the cut-cells, shape of the velocity control volumes, imposition of the boundary conditions at the IB surface and computation of the diffusive terms are different than in the LS-STAG method.

The paper is organized as follows. In Section 2, we recall the notations and salient properties of the staggered Cartesian mesh, and then we present the LS-STAG mesh, its extension for the handling of immersed boundaries. Section 3 presents the LS-STAG discretization in the case the immersed boundary is steady. First, we will recall the global conservation laws for total mass, momentum and kinetic energy that will be used for deriving the LS-STAG method. Then, we will present the discretization of the continuity equation, which is valid in both cut-cells and Cartesian cells. As a matter of fact, we shall observe that the consistency of the discrete continuity equation is a crucial point for building an energy and momentum preserving method for incompressible flows. In the next subsections, we will impose kinetic energy conservation upon our numerical scheme for completely characterizing the discrete pressure and convective fluxes in the cut-cells, and total momentum conservation for the determination of the viscous fluxes. We mention that the discretization of the viscous fluxes has been by far the most intricate part of the LS-STAG discretization in the cut-cells. Section 4 is devoted to numerical tests on canonical flows at low to moderate Reynolds number for assessing the accuracy and robustness of the LS-STAG method. Comparisons with an unstructured solver in terms of CPU time and accuracy will be given. Finally, we will present some results for one of the most appealing features of IB methods: the ability to compute flows with immersed moving boundaries on fixed cartesian grids, without the need for domain remeshing at each time step.

2. Preliminaries and description of the LS-STAG mesh

Let Ω be a rectangular computational domain and Γ its surface. The governing equations are the incompressible Navier–Stokes equations in integral form. In the following, we will consider the finite-volume discretization of the continuity equation:

$$\int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = 0, \tag{1}$$

where $\mathbf{v} = (u, v)$ is the velocity, and the momentum equations in the x and y directions, respectively:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u dV + \int_{\Gamma} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u dS + \int_{\Gamma} p \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Gamma} \nu \nabla u \cdot \mathbf{n} dS = 0, \tag{2a}$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} v dV + \int_{\Gamma} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) v dS + \int_{\Gamma} p \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Gamma} \nu \nabla v \cdot \mathbf{n} dS = 0, \tag{2b}$$

where p is the pressure and ν is the kinematic viscosity.

2.1. The staggered MAC mesh for Cartesian geometries

The Cartesian method on which our IB method is based is the second-order finite-volume discretization of Verstappen and Veldman [63], which has the ability to preserve on non-uniform Cartesian cells the conservation properties (for total mass, momentum and kinetic energy) of the original MAC method on a uniform staggered grid [24]. The staggered arrangement of the unknowns in a Cartesian cell is represented in Fig. 1. The rectangular computational Ω is partitioned into Cartesian cells $\Omega_{i,j} =]x_{i-1}, x_i[\times]y_{j-1}, y_j[$, whose volume is $V_{ij} = \Delta x_i \Delta y_j$ and center is $\mathbf{x}_{ij}^c = (x_i^c, y_j^c)$. The surface Γ_{ij} of cell Ω_{ij} is subdivided into four elementary plane faces as:

$$\Gamma_{ij} = \Gamma_{ij}^e \cup \Gamma_{ij}^w \cup \Gamma_{ij}^n \cup \Gamma_{ij}^s, \tag{3}$$

by using the usual compass notations (e.g. [17]). Cell Ω_{ij} is used as a control volume for discretizing the continuity equation (1), whereas the staggered cell $\Omega_{ij}^u =]x_i^c, x_{i+1}^c[\times]y_{j-1}, y_j[$ is the control volume for the x -momentum equation (2a). For subdividing the surface Γ_{ij}^u of this control volume, we first decompose the north and south faces of Ω_{ij} as $\Gamma_{ij}^n = \Gamma_{ij}^{n,w} \cup \Gamma_{ij}^{n,e}$ and $\Gamma_{ij}^s = \Gamma_{ij}^{s,w} \cup \Gamma_{ij}^{s,e}$, respectively, and then write:

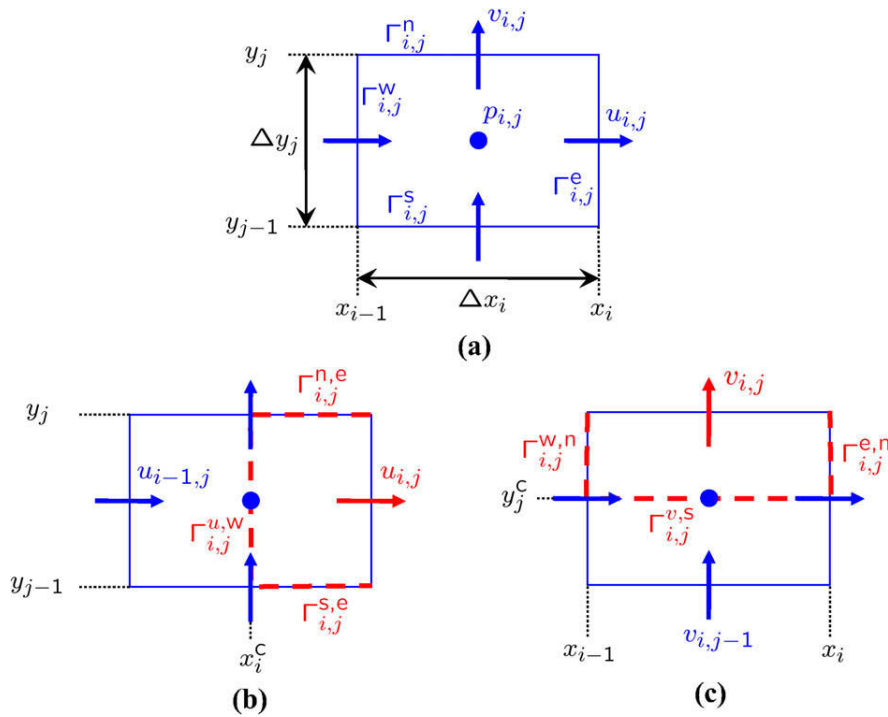


Fig. 1. Staggered arrangement of the variables for (a) a Cartesian cell Ω_{ij} , and representation of control volumes for (b) u_{ij} and (c) v_{ij} . The control volumes $\Omega_{ij}^u \in \Omega_{ij} \cup \Omega_{i+1,j}$ and $\Omega_{ij}^v \in \Omega_{ij} \cup \Omega_{i,j+1}$ are to be completed with their complementary part in $\Omega_{i+1,j}$ and $\Omega_{i,j+1}$, respectively.

$$\Gamma_{ij}^u = \Gamma_{ij}^{u,w} \cup \Gamma_{ij}^{u,e} \cup \left(\Gamma_{ij}^{s,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{s,w} \right) \cup \left(\Gamma_{ij}^{n,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{n,w} \right). \tag{4}$$

An analogous decomposition holds for the faces of the control volume Ω_{ij}^v , which is used for discretizing the y -momentum equation (2b). These notations will be useful for describing the LS-STAG mesh.

2.2. The LS-STAG mesh for immersed geometries

We consider now an irregular solid domain Ω^{ib} which is embedded in the computational domain Ω , such that $\Omega^f = \Omega \setminus \Omega^{ib}$ represents the fluid domain where the Navier–Stokes equations are to be discretized. To keep track of the irregular boundary Γ^{ib} , we employ a signed distance function $\phi(\mathbf{x})$ (i.e. the level-set function [46,47]) such that $\phi(\mathbf{x})$ is negative in the fluid region Ω^f , $\phi(\mathbf{x})$ is positive in the solid region Ω^{ib} , and such that the boundary Γ^{ib} corresponds to the zero level-set of this function, i.e.:

$$\phi(\mathbf{x}) \equiv \begin{cases} -\Delta, & \mathbf{x} \in \Omega^f, \\ 0, & \mathbf{x} \in \Gamma^{ib}, \\ +\Delta, & \mathbf{x} \in \Omega^{ib}, \end{cases} \tag{5}$$

where Δ represents the distance between \mathbf{x} and the nearest point on the immersed boundary.

This leads to the modification of the MAC mesh that is described in Fig. 2, and that will be subsequently referred to as the LS-STAG mesh. In each cut-cell Ω_{ij} , the immersed boundary is represented by a line segment whose extremities are defined by linear interpolation of the variable ϕ_{ij} , which takes the value of the level-set function $\phi(x_i, y_j)$ at the upper right corner of the cell. We use notations similar to the Cartesian method for the faces of the cut-cells. For example in Fig. 2, the faces of the trapezoidal cut-cell Ω_{ij} are denoted:

$$\Gamma_{ij} = \Gamma_{ij}^w \cup \Gamma_{ij}^e \cup \Gamma_{ij}^s \cup \Gamma_{ij}^{ib}, \tag{6}$$

where Γ_{ij}^{ib} represents the solid north face of the cut-cell. As it will be justified later, the velocity unknowns are exactly located in the middle of the fluid part of the faces. In Fig. 2, the discrete pressure p_{ij} is located at the intersection of the velocity locations. This location is used for visualization purpose only, and will never be used in the discretization. In effect, we will find out in Section 3.3 that the discrete pressure is piecewise constant in each cut-cell, as in some mixed finite element methods (e.g. [50]), and thus does not need to be precisely located in the cut-cells.

As observed in Fig. 2, there are three basic types of cut-cells: *trapezoidal cells* such as Ω_{ij} or $\Omega_{i+1,j}$, *triangular cells* (i.e. $\Omega_{i-1,j+1}$) and *pentagonal cells* (i.e. $\Omega_{i-1,j}$). The discretization of the momentum equations will be performed in the staggered control volumes Ω_{ij}^u and Ω_{ij}^v , whose shape has to be adapted to each type of cut-cells. For example in Fig. 2, the faces of the control volume Ω_{ij}^u read:

$$\Gamma_{ij}^u = \Gamma_{ij}^{u,w} \cup \Gamma_{ij}^{u,e} \cup \left(\Gamma_{ij}^{s,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{s,w} \right) \cup \left(\Gamma_{ij}^{ib,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{ib,w} \right), \tag{7}$$

where the solid faces $\Gamma_{ij}^{ib,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{ib,w}$ are formed with two halves of the solid face of the neighboring trapezoidal cut-cells $\Gamma_{ij}^{ib,e} \subset \Gamma_{ij}^{ib}$ and $\Gamma_{i+1,j}^{ib,w} \subset \Gamma_{i+1,j}^{ib}$. For the other type of cut-cells, these control volumes will be constructed from the six halves of generic control volumes that we represent in Fig. 3. In this figure, the irregular shape of the staggered control volumes is given for representation purpose only, and their geometric parameters, such as their actual volume or shape of the vertical

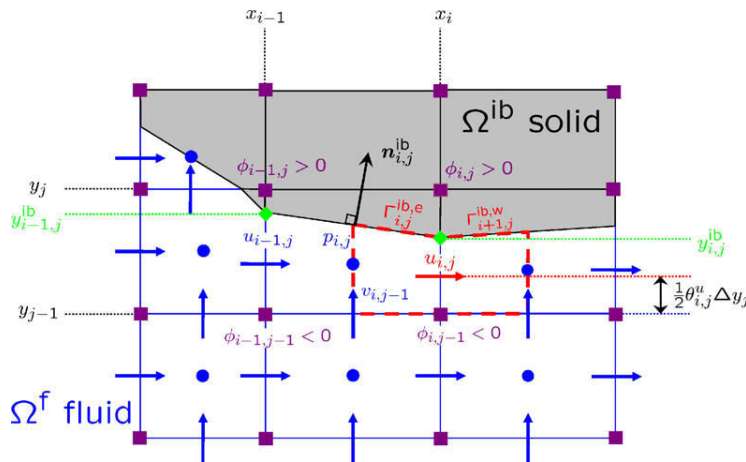


Fig. 2. Staggered arrangement of the variables near the trapezoidal cut-cell Ω_{ij} on the LS-STAG mesh.

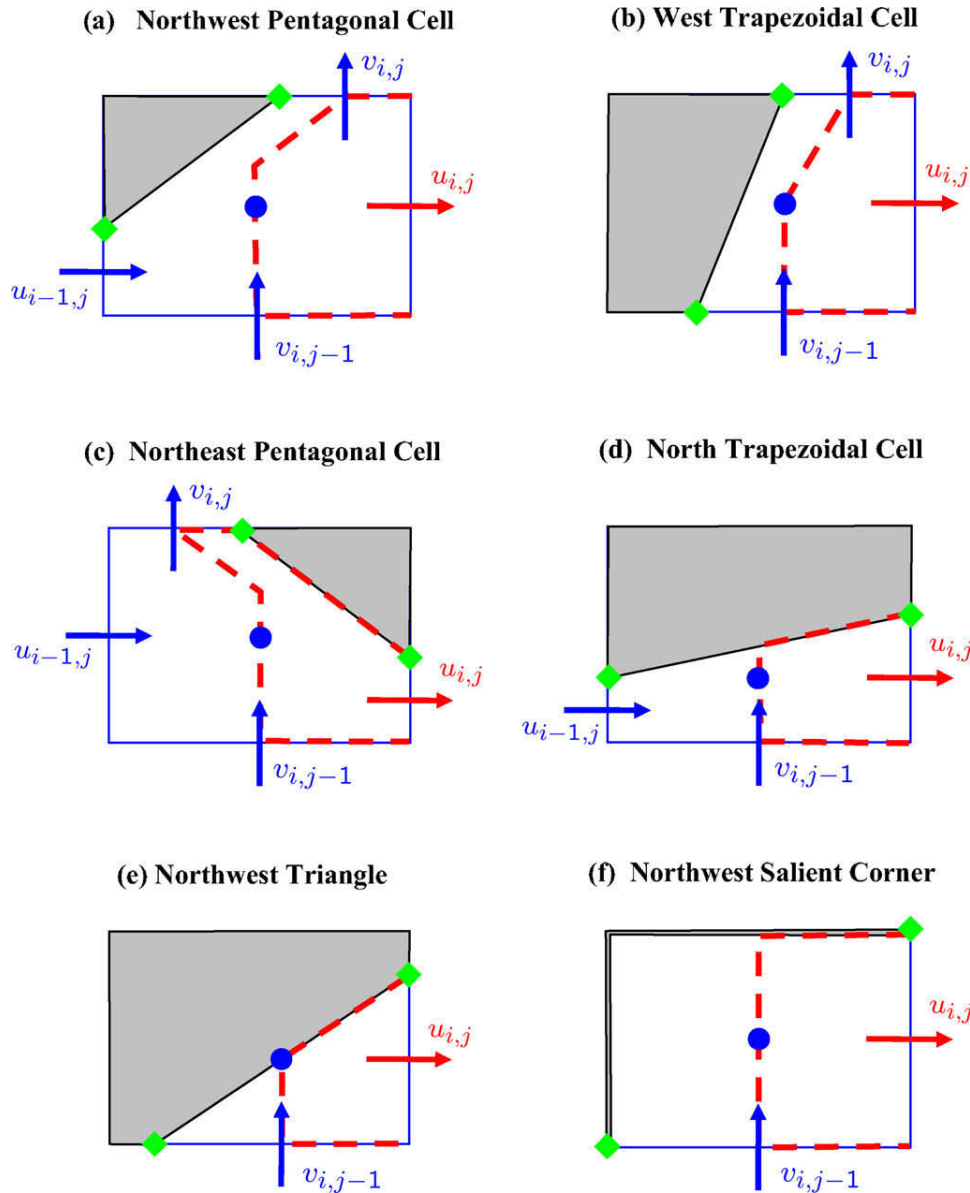


Fig. 3. Basic types of half control volume for the velocity unknown u_{ij} inside the cut-cell Ω_{ij} . The diamonds (◆) denote the locations of the discretization of the velocity boundary conditions. Note that the re-entrant corner of a Cartesian mesh is a particular case of pentagonal cell (c) when $\phi_{ij} = 0$, and that Case (f) (which corresponds to $\phi_{i-1,j-1} = \phi_{i-1,j} = \phi_{i,j} = 0$ and $\phi_{i,j-1} < 0$) corresponds to the particular case of a salient corner. Only the definition of the cell volume distinguishes the latter cell from the limiting case of triangle (e) defined by $\phi_{i-1,j-1} = \phi_{i,j} = 0$, $\phi_{i-1,j} > 0$ and $\phi_{i,j-1} < 0$.

faces $\Gamma_{ij}^{u,w}$ and $\Gamma_{ij}^{u,e}$ are never used by the LS-STAG discretization: instead, we will employ arguments based on the strict conservation of global quantities of the flow, such as conservation of total mass and kinetic energy for discretizing the momentum equations in the cut-cells. For complexness, we present in Fig. 4 all the possible combinations of the half control volumes of Fig. 3 for forming the control volume Ω_{ij}^u . It is important to mention that the LS-STAG discretization does not need to be individually adapted to each of the cases depicted in this figure. Instead, the discretization will be built for the half control volumes of Fig. 3, such that any combination yields a consistent discretization of the momentum equations with the aforementioned global conservation properties.

However, the LS-STAG method relies on a sharp representation of the geometry of the cut-cells Ω_{ij} . In this respect, the level-set function will prove to be a very efficient tool for calculating the geometric parameters of a cut-cell, such as its volume or the projected areas of its faces. A quantity that will be extensively used for calculating these parameters is the fluid portion of the faces of cell Ω_{ij} . For example in Fig. 2, by using one-dimensional linear interpolation of $\phi(x_i, y)$ in $[y_{j-1}, y_j]$, we calculate the length $y_{ij}^b - y_{j-1}$ of the portion of face Γ_{ij}^e that belongs to the fluid domain as:

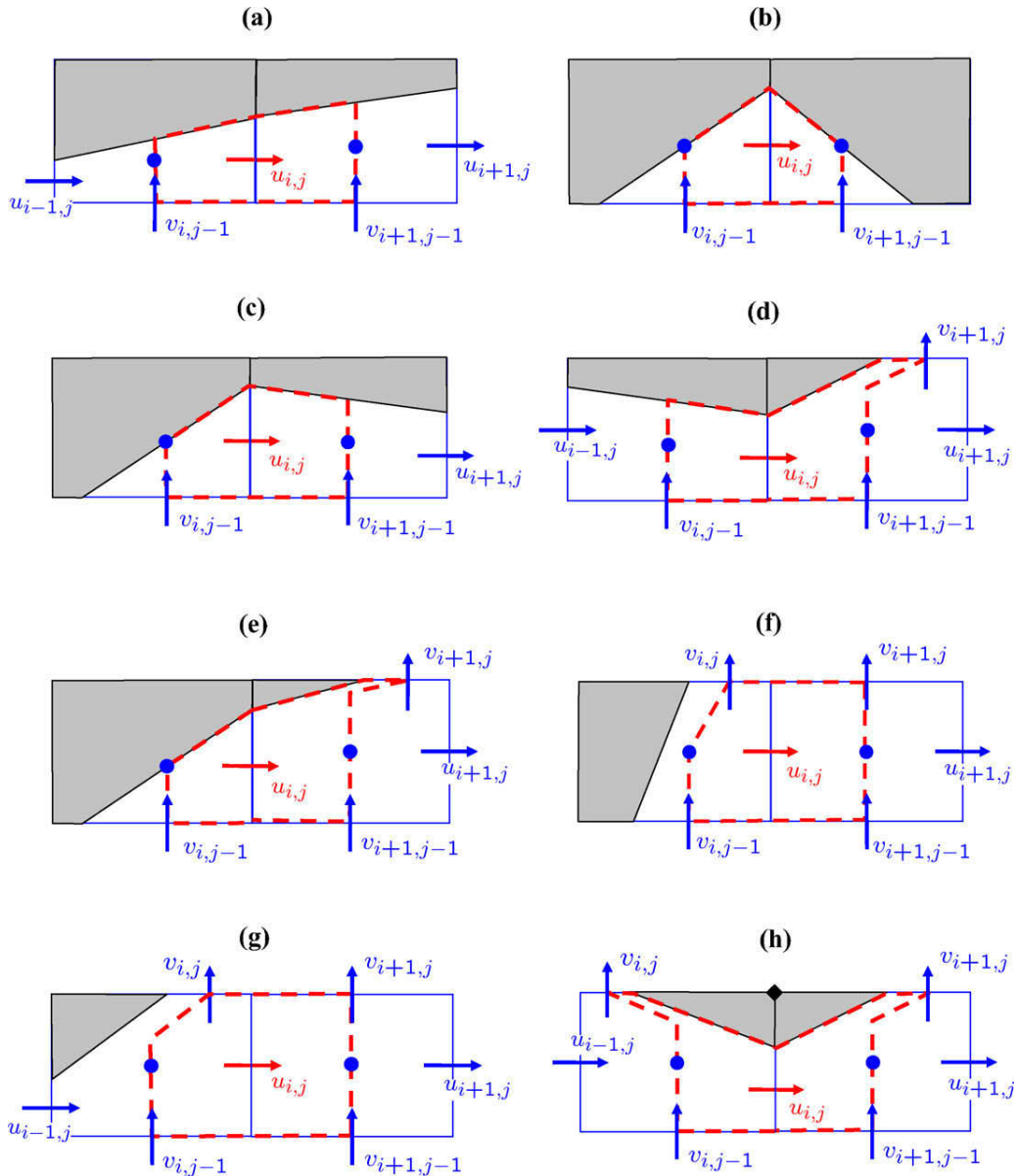


Fig. 4. All possible combinations of the half control volumes of Fig. 3 for forming the control volume Ω_{ij}^u . Case (h) has to be excluded from the actual flow computations since it would give rise to a non-unique definition of the differential quotient $\partial v/\partial x|_{ij}$, which is stored at the upper right corner of cut-cell Ω_{ij} . This case corresponds to an oscillation of the level-set ($\phi_{i-1,j} < 0$, $\phi_{ij} > 0$ and $\phi_{i+1,j} < 0$). It can be easily filtered prior to the flow computation by setting $\phi_{ij} = \frac{1}{2}(\phi_{i-1,j} + \phi_{i+1,j})$. This particular case happens very scarcely in the meshes we actually use, since it would correspond to a mesh that is too coarse when compared to the local curvature of the immersed boundary (see [47, Section 1.4]).

$$y_{ij}^{\text{ib}} - y_{j-1} = \theta_{ij}^u \Delta y_j, \quad \text{with } \theta_{ij}^u = \frac{\phi_{i,j-1}}{\phi_{i,j-1} - \phi_{ij}} \text{ since } \phi(x_i, y_{ij}^{\text{ib}}) = 0.$$

The scalar quantities θ_{ij}^u and θ_{ij}^v , which take values in $[0, 1]$, will subsequently be called the *cell-face fraction ratios*. They represent the fluid portion of the east and north faces Γ_{ij}^e and Γ_{ij}^n , respectively. They will be extensively used for detecting if the discrete velocities u_{ij} and v_{ij} belong to the fluid domain, and for discretizing the surface and volume integrals in the Navier–Stokes equations (1) and (2). The cell-face fraction ratios also appear in the analytic expression of the volume V_{ij} of cut-cell Ω_{ij} , which is given in Table 1 for the three basic types of cut-cells. We note that V_{ij} correspond to the VOF function which is used for the simulation of multiphase flows, e.g. [53].

Table 1

Analytical formula of the volume for the basic cut-cells of Fig. 3. The volumes of the other cut-cells can be easily deduced from the ones displayed.

Type of cut-cell	Volume
(c) Northeast pentagonal cell	$V_{ij} = \left[\theta_{ij}^v + \frac{1}{2} (1 + \theta_{ij}^u) (1 - \theta_{ij}^v) \right] \Delta x_i \Delta y_j$
(d) North trapezoidal cell	$V_{ij} = \frac{1}{2} (\theta_{ij}^u + \theta_{i-1,j}^u) \Delta x_i \Delta y_j$
(e) Northwest triangle	$V_{ij} = \frac{1}{2} \theta_{ij}^u \theta_{ij-1}^v \Delta x_i \Delta y_j$
(f) Northwest salient corner	$V_{ij} = \Delta x_i \Delta y_j$

3. The LS-STAG discretization for stationary immersed geometries

3.1. Global conservation laws for viscous incompressible flows

As early as the 1950s, it was recognized that for physically realistic integration of dynamical systems such as the fluid dynamics equations, linear and quadratic invariants of the continuous equations should be conserved by the numerical scheme [1,34]. For the incompressible Navier–Stokes equations (1) and (2), these flow invariants are the total mass in the whole fluid domain $\int_{\Omega^f} \nabla \cdot \mathbf{v} dV$, total momentum $\mathbf{P}(t) = \int_{\Omega^f} \mathbf{v} dV$ and, in the case of vanishing viscosity, total kinetic energy $E_c(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega^f} |\mathbf{v}|^2 dV$.

Conservation equation for total mass and momentum are obtained by a straightforward integration of the Navier–Stokes equations in the whole fluid domain Ω^f . After integrating by parts of the volume integrals, one gets:

$$\int_{\Gamma^{ib}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = 0, \tag{8a}$$

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = - \int_{\Gamma^{ib}} \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS - \mathbf{F}, \tag{8b}$$

where $\mathbf{F} = (F_x, F_y)$ represents the hydrodynamic force acting on the immersed boundary, such that:

$$F_x = \int_{\Gamma^{ib}} \left[p - v \frac{\partial u}{\partial x} \right] \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Gamma^{ib}} v \frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} dS, \tag{9a}$$

$$F_y = - \int_{\Gamma^{ib}} v \frac{\partial v}{\partial x} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} dS + \int_{\Gamma^{ib}} \left[p - v \frac{\partial v}{\partial y} \right] \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} dS. \tag{9b}$$

At the discrete level, total mass is trivially conserved on the MAC mesh because of the staggering of the velocities, and so it will be on the LS-STAG mesh. On non-staggered grids however, we mention that the discrete equivalent of (8a) is not verified, and the mass dissipation of non-staggered methods remains an issue [55,64]. At the discrete level, total momentum is conserved by any numerical method if the momentum equation is written in its conservative form and if the property of local conservation of the numerical fluxes at cell faces holds. If the issue of the implementation of boundary conditions is to be included in the analysis, we may consider that total momentum is conserved if the RHS of the discrete counterpart of (8b) is consistent with the computation of the hydrodynamic force that acts on the solid boundary. This issue is mostly pertinent for non-body conforming methods such as IB methods.

For incompressible flows, the conservation of kinetic energy is a consequence of the Navier–Stokes equations, and the equation for $E_c(t)$ is obtained by multiplying the momentum equation with \mathbf{v} and integrating in the whole fluid domain. After integration by parts of the volume integrals, this conservation equation reads:

$$\frac{dE_c}{dt} = \int_{\Omega^f} \left[\left(\frac{|\mathbf{v}|^2}{2} + p \right) \nabla \cdot \mathbf{v} - v |\nabla \mathbf{v}|^2 \right] dV - \int_{\Gamma^{ib}} \left(\frac{|\mathbf{v}|^2}{2} + p - v \nabla \mathbf{v} \right) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS. \tag{10}$$

Thanks to the continuity equation, the only term remaining in the volume integral involves the viscous stresses, and expresses the loss of energy by viscous dissipation. The non-vanishing terms in the surface integrals show that the pressure and convective terms only influence the kinetic energy budget by their action at the immersed boundary. On uniform Cartesian grids, it is well known the original MAC method with central differencing of the convective term is *energy preserving*, i.e. the discrete kinetic energy budget of the scheme mimics (10). However, for more general type of meshes the construction of energy preserving methods is not a trivial task. In [42], Morinishi et al. have extended this property to higher-order finite-difference discretizations on uniform Cartesian grids. More recently, Verstappen and Veldman [63] constructed an energy preserving finite-volume method on non-uniform grids by observing that the discrete kinetic budget mimics (10) if the convective and viscous terms are discretized with skew-symmetric and symmetric positive-definite operators, respectively. In the next sections, we will use similar arguments for building an energy (and momentum) preserving discretization on the LS-STAG mesh. We mention that for constructing this discretization up to the cut-cells, we had to precisely take into account the boundary integrals in (8b), (9) and (10). To our knowledge, these boundary terms have always been neglected in previous studies, with the exception of the recent work by Jameson [29].

In the following, we will focus on semi-discrete conservation properties only, *i.e.* we will ignore issues related to the violation of these properties by the time-stepping scheme, as the other studies cited in this paragraph do. However, we mention that quadratic invariants such as the total kinetic energy can be totally conserved in an unsteady computation if implicit Runge–Kutta (IRK) schemes at Gaussian points are used, of which the well known midpoint rule is a particular case [2]. Nevertheless, several issues arise when IRK schemes are applied to the incompressible Navier–Stokes equations: the implicit nature of the convective discretization, the loss of accuracy which is observed on the computed pressure, and the fact that they are not stiffly accurate which hampers their stability properties. Thus, the design of a practical and energy conservative time-stepping method for incompressible viscous flows is left for future work.

3.2. Discretization of the continuity equation

As in the Cartesian method of Ref. [63], the starting point of the LS-STAG discretization concerns the mass conservation law (1) in cell Ω_{ij} . For any fluid cell (cut-cell or Cartesian), we denote its faces as $\Gamma_{ij} = \Gamma_{ij}^w \cup \Gamma_{ij}^e \cup \Gamma_{ij}^s \cup \Gamma_{ij}^n \cup \Gamma_{ij}^{ib}$, and decompose the continuity equation as the net mass flux through each of these faces:

$$\dot{m}^{ij} \equiv -\bar{u}_{i-1,j} + \bar{u}_{i,j} - \bar{v}_{i,j-1} + \bar{v}_{i,j} + \bar{U}_{ij}^{ib} = 0. \quad (11)$$

In this equation, $\bar{U}_{ij}^{ib} \equiv \int_{\Gamma_{ij}^{ib}} \mathbf{v}^{ib} \cdot \mathbf{n}_{ij}^{ib} dS$ denotes the mass flux through the solid part of the cell boundary, where \mathbf{v}^{ib} is the velocity datum prescribed at the IB boundary. This boundary mass flux may be non-zero for non-homogeneous boundary conditions only. The mass flow through the fluid part of the faces is denoted with a bar: for example, the flow through face Γ_{ij}^e of Fig. 2 is:

$$\bar{u}_{i,j} \equiv \int_{\Gamma_{ij}^e} \mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x dS = \int_{y_{j-1}}^{y_j^{ib}} u(x_i, y) dy. \quad (12)$$

In order to easily discretize this integral, we first locate the discrete unknown u_{ij} in the middle of the fluid part of the face as:

$$u_{ij} \equiv u\left(x_i, y_{j-1} + \frac{1}{2} \theta_{ij}^u \Delta y_j\right). \quad (13)$$

Then, by using midpoint quadrature, we obtain:

$$\bar{u}_{i,j} \cong \theta_{ij}^u \Delta y_j u_{ij}, \quad (14)$$

and following analogous discretizations for the other faces, the discrete continuity equation reads:

$$\dot{m}^{ij} \equiv \Delta y_j \left(\theta_{ij}^u u_{ij} - \theta_{i-1,j}^u u_{i-1,j} \right) + \Delta x_i \left(\theta_{ij}^v v_{ij} - \theta_{i,j-1}^v v_{i,j-1} \right) + \bar{U}_{ij}^{ib} = 0. \quad (15)$$

We now turn to the discretization of the boundary term as:

$$\bar{U}_{ij}^{ib} \cong u_{ij}^{ib} [n_x \Delta S]_{ij}^{ib} + v_{ij}^{ib} [n_y \Delta S]_{ij}^{ib}, \quad (16)$$

where $[n_x \Delta S]_{ij}^{ib}$ and $[n_y \Delta S]_{ij}^{ib}$ are the projected areas of the solid face of the cut-cell in the horizontal and vertical directions, respectively, and velocity $\mathbf{v}_{ij}^{ib} = (u_{ij}^{ib}, v_{ij}^{ib})$ represents an approximation of the velocity on the solid boundary Γ_{ij}^{ib} of the cut-cell. This last term is calculated with the trapezoidal rule, for example in Fig. 2:

$$\mathbf{v}_{ij}^{ib} = \frac{1}{2} \mathbf{v}^{ib}(x_i, y_{ij}^{ib}) + \frac{1}{2} \mathbf{v}^{ib}(x_{i-1}, y_{i-1,j}^{ib}),$$

where the velocity boundary condition $\mathbf{v}^{ib}(x, y)$ is discretized at the extremities of line segment Γ_{ij}^{ib} in the cut-cell. The projected areas are readily calculated from the cell-face fraction ratios as:

$$[n_x \Delta S]_{ij}^{ib} = (\theta_{i-1,j}^u - \theta_{ij}^u) \Delta y_j, \quad [n_y \Delta S]_{ij}^{ib} = (\theta_{i,j-1}^v - \theta_{ij}^v) \Delta x_i. \quad (17)$$

We mention that this discretization of the continuity equation is valid for any type of cut-cells, and in the particular case of a Cartesian fluid cell (such as the cell-face fraction ratios are equal to 0 or 1 only), Eq. (15) reduces to the discrete continuity equation of the original MAC method.

In the following, it will be useful to write the discrete continuity equation in its matrix form:

$$\mathcal{D}U + \bar{U}^{ib} = 0, \quad (18)$$

where each line (i, j) of this system corresponds to Eq. (15) written in cell Ω_{ij} , and the vectors U and \bar{U}^{ib} contains the velocity unknowns (u_{ij}, v_{ij}) and the discretization of the boundary terms, respectively.

3.2.1. Discrete conservation of total mass

Now we are able to show that this discretization of the continuity equation conserves total mass in the most general case of the LS-STAG method: *i.e.* when the IB boundary has the time-dependent motion of a rigid body:

$$\boldsymbol{v}^{\text{ib}}(\boldsymbol{x}, t) = \mathbf{V}^{\text{ib}}(t) + \boldsymbol{\Omega}^{\text{ib}}(t) \times \mathbf{O}\boldsymbol{x}, \quad (19)$$

where \mathbf{O} is a reference point of the immersed solid Ω^{s} , vectors $\mathbf{V}^{\text{ib}}(t)$ and $\boldsymbol{\Omega}^{\text{ib}}(t)$ are given translation and angular velocities. We also have to make two assumptions on the computational domain. The first one expresses that the immersed boundary Γ^{ib} is a closed surface, i.e.:

$$\int_{\Gamma^{\text{ib}}} \boldsymbol{n}^{\text{ib}} \, dS = \sum_{\text{Cut-cells}\Omega_{ij}} \int_{\Gamma_{ij}^{\text{ib}}} \boldsymbol{n}_{ij}^{\text{ib}} \, dS = \mathbf{0}, \quad (20a)$$

and the second one states that the fluid domain is not dilatible:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega^{\text{f}}} dV = \sum_{\text{Cut-cells}\Omega_{ij}} \int_{\Gamma_{ij}^{\text{ib}}} \boldsymbol{v}^{\text{ib}}(\boldsymbol{x}, t) \cdot \boldsymbol{n}_{ij}^{\text{ib}} \, dS = 0. \quad (20b)$$

In these equations the integrand is linear in space since $\boldsymbol{v}^{\text{ib}}(\boldsymbol{x}, t)$ is given by (19), so midpoint and trapezoidal rules give exact quadrature:

$$\sum_{\text{Cut-cells}\Omega_{ij}} [\boldsymbol{n}\Delta\mathbf{S}]_{ij}^{\text{ib}} = \mathbf{0}, \quad (21a)$$

$$\sum_{\text{Cut-cells}\Omega_{ij}} \boldsymbol{\Omega}^{\text{ib}}(t) \times \frac{\mathbf{O}\boldsymbol{a}_{ij}^{\text{ib}} + \mathbf{O}\boldsymbol{b}_{ij}^{\text{ib}}}{2} \cdot [\boldsymbol{n}\Delta\mathbf{S}]_{ij}^{\text{ib}} = 0, \quad (21b)$$

where $\boldsymbol{a}_{ij}^{\text{ib}}$ and $\boldsymbol{b}_{ij}^{\text{ib}}$ denote the extremities of line segment Γ_{ij}^{ib} in a cut-cell.

The discrete counterpart of the conservation of total mass (8a) amounts to summing the discrete continuity equation (11) in all fluid cells. In matrix form it reads:

$$\mathbb{1}^{\text{T}} \mathcal{D}U + \mathbb{1}^{\text{T}} \bar{U}^{\text{ib}} = 0, \quad (22)$$

where $\mathbb{1}$ is the constant vector. For proving this identity, we first simplify its left-hand-side by using the local conservativity of the mass fluxes at fluid faces, such that only the fluxes \bar{U}_{ij}^{ib} at the IB boundary remains:

$$\mathbb{1}^{\text{T}} \mathcal{D}U + \mathbb{1}^{\text{T}} \bar{U}^{\text{ib}} = \mathbb{1}^{\text{T}} \bar{U}^{\text{ib}}.$$

Then, after integrating the velocity datum (19) with the trapezoidal rule one finally obtains:

$$\mathbb{1}^{\text{T}} \mathcal{D}U + \mathbb{1}^{\text{T}} \bar{U}^{\text{ib}} = \sum_{\text{Cut-cells}\Omega_{ij}} \mathbf{V}^{\text{ib}}(t) \cdot [\boldsymbol{n}\Delta\mathbf{S}]_{ij}^{\text{ib}} + \boldsymbol{\Omega}^{\text{ib}}(t) \times \frac{\mathbf{O}\boldsymbol{a}_{ij}^{\text{ib}} + \mathbf{O}\boldsymbol{b}_{ij}^{\text{ib}}}{2} \cdot [\boldsymbol{n}\Delta\mathbf{S}]_{ij}^{\text{ib}} = 0,$$

thanks to identities (21a) and (21b). Thus, total mass is trivially conserved by the LS-STAG method. In the following, we will see that the other global conservation properties of Section 3.1 will not be as easily satisfied. Instead, we will have to impose some constraints on the discretization of the momentum equation such that total momentum and kinetic energy be discretely conserved.

3.3. Momentum equation I: energy preserving discretization

Now, we turn to the discretization of the momentum equation (2), whose semi-discrete matrix representation reads:

$$\frac{d}{dt} (\mathcal{M}U) + C[\bar{U}]U + \mathcal{G}P - \nu \mathcal{K}U + S^{\text{ib,c}} - \nu S^{\text{ib,v}} = 0, \quad (23)$$

where the diagonal mass matrix \mathcal{M} is built from the volume of the fluid cells, matrix $C[\bar{U}]$ represents the discretization of the convective fluxes, \mathcal{G} is the discrete pressure gradient, \mathcal{K} represents the diffusive term, $S^{\text{ib,c}}$ and $S^{\text{ib,v}}$ are source terms arising from the boundary conditions of the convective and viscous terms, respectively. These different terms will now be constructed such that total momentum and kinetic energy are discretely conserved.

We consider first the conservation of the kinetic energy $E_c(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega^{\text{f}}} |\boldsymbol{v}|^2 \, dV$, that we discretize with the trapezoidal rule in each fluid cell Ω_{ij} :

$$E_c(t) \cong E_c^{\text{h}}(t) = \frac{1}{2} U^{\text{T}} \mathcal{M}U + \frac{1}{2} U^{\text{ib,T}} \mathcal{M}^{\text{ib}} U^{\text{ib}}, \quad (24)$$

where \mathcal{M} is the diagonal mass matrix that appears in the discrete momentum equation (23), and $U^{\text{ib,T}} \mathcal{M}^{\text{ib}} U^{\text{ib}}$ is the contribution of the boundary conditions, which are assumed to be steady. For each line (i, j) of the discrete system (23), the trapezoidal rule gives the value of the diagonal coefficient of the mass matrix in the horizontal and vertical directions:

$$[\mathcal{M}^{\text{h}}]_{\text{p}}(i, j) = \frac{1}{2} V_{ij} + \frac{1}{2} V_{i+1, j}, \quad [\mathcal{M}^{\text{v}}]_{\text{p}}(i, j) = \frac{1}{2} V_{ij} + \frac{1}{2} V_{i, j+1}, \quad (25)$$

where the subscript P refers to the main diagonal elements in the usual compass notation (e.g. [17]). These expressions show that, in the cut-cells at least, the mass matrix for u_{ij} and v_{ij} is not constructed from the actual areas of Ω_{ij}^u and Ω_{ij}^v .

The conservation equation for $E_c^h(t)$ is obtained after time-differentiation of (24), then by using the discrete momentum equation (23), we finally obtain:

$$\frac{dE_c^h}{dt} = -U^T \frac{C[\bar{U}]^T + C[\bar{U}]}{2} U - P^T \mathcal{G}^T U - U^T \frac{V(\mathcal{K}^T + \mathcal{K})}{2} U - U^T (S^{\text{ib},c} - vS^{\text{ib},v}). \quad (26)$$

In order to obtain an expression similar to (10), the viscous term $-U^T(\mathcal{K}^T + \mathcal{K})U$ should mimic the viscous dissipation of the kinetic energy budget, and thus should always be strictly negative. This feature is obtained as soon as the matrix $\mathcal{K}^T + \mathcal{K}$ is positive definite. For a finite-volume method, this is obtained as soon as the discrete diffusive flux is stable and consistent [13]. Note that the symmetry of \mathcal{K} is not required. If, in addition, we impose that the discretization of the convective terms leads to a skew-symmetric matrix:

$$C[\bar{U}] = -C[\bar{U}]^T, \quad (27)$$

and that, as in the finite element method, the pressure gradient be dual to the divergence operator (see Eq. (18)):

$$\mathcal{G} = -\mathcal{D}^T, \quad (28)$$

we finally observe that the boundary terms only affects the kinetic energy budget when the viscosity vanishes:

$$\frac{dE_c^h}{dt} = -P^T \bar{U}^{\text{ib}} - U^T S^{\text{ib},c}. \quad (29)$$

3.3.1. Discretization of the pressure gradient

In the above equation, the term $P^T \bar{U}^{\text{ib}}$ represents the discretization of the pressure term $\int_{\Gamma^{\text{ib}}} p \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS$ in Eq. (10), and condition (28) allows us to completely determine the discrete pressure gradient in control volumes Ω_{ij}^u and Ω_{ij}^v from the discrete divergence operator (15):

$$\int_{\Gamma_{ij}^u} p \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} dS \cong [\mathcal{G}^x P]_{ij} = \theta_{ij}^u \Delta y_j (p_{i+1,j} - p_{ij}), \quad (30a)$$

$$\int_{\Gamma_{ij}^v} p \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} dS \cong [\mathcal{G}^y P]_{ij} = \theta_{ij}^v \Delta x_i (p_{i,j+1} - p_{ij}). \quad (30b)$$

These formulae are valid for any type of fluid cells, and in the particular case of Cartesian fluid cells (such that the cell-face fraction ratios are equal to 1), one recovers the finite-difference gradient of the MAC method:

$$[\mathcal{G}^x P]_{ij} = \frac{p_{i+1,j} - p_{ij}}{\frac{1}{2} \Delta x_{i+1} + \frac{1}{2} \Delta x_i} [\mathcal{M}^x]_p(i,j),$$

where $[\mathcal{M}^x]_p(i,j) = (\frac{1}{2} \Delta x_{i+1} + \frac{1}{2} \Delta x_i) \Delta y_j$ for the Cartesian control volume Ω_{ij}^u .

In the cut-cells however, it is not possible to interpret formulas (30) as finite-difference quotients for p_{ij} located at the centroids of the cut-cells. Instead, the LS-STAG discretization has much in common with the P1 nonconforming/P0 finite element method, where the pressure is approximated with a piecewise constant polynomial with degrees of freedom at the elements centroid [50]. As a consequence, p_{ij} is a valid approximation of the pressure *anywhere* inside cut-cell Ω_{ij} , even on its solid face. Note that an equivalence of this assumption in a Cartesian mesh is that the pressure gradient is zero at solid boundaries. In the next Section, we shall observe that the normal viscous stresses are discretized similarly.

3.3.2. Skew-symmetric discretization of the convective fluxes

For the x-momentum equation (2a), the skew-symmetry property (27) of $C[\bar{U}]$ imposes upon the discretization of the convective term, that we write in a Cartesian control volume away from the immersed boundary as the following five-point scheme:

$$\int_{\Gamma_{ij}^u} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u dS \cong C[\bar{U}]_W(i,j) u_{i-1,j} + C[\bar{U}]_E(i,j) u_{i+1,j} + C[\bar{U}]_P(i,j) u_{ij} + C[\bar{U}]_S(i,j) u_{i,j-1} + C[\bar{U}]_N(i,j) u_{i,j+1}, \quad (31)$$

must verify the following conditions:

$$C[\bar{U}]_P(i,j) = 0, \quad (32a)$$

$$C[\bar{U}]_E(i,j) = -C[\bar{U}]_W(i+1,j), \quad (32b)$$

$$C[\bar{U}]_N(i,j) = -C[\bar{U}]_S(i,j+1). \quad (32c)$$

The central discretization of the MAC method trivially verifies these conditions on uniform meshes. Other popular discretization, such as discretizations of upwind type, are known to violate this condition, resulting in adding artificial vis-

cosity to the scheme. Recently, Verstappen and Veldman [63] have proposed a skew-symmetric discretization, also coined *symmetry preserving*, which enforces conditions (32c) on non-uniform Cartesian meshes. This discretization will be the building block of the LS-STAG discretization of the convective term in the cut-cells. For the Cartesian control volume Ω_{ij}^u of Fig. 1, the skew-symmetric discretization consists in writing the convective term as the net flux through its four elementary faces:

$$\int_{\Gamma_{ij}^u} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u dS = - \int_{\Gamma_{ij}^{u,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x) u dy + \int_{\Gamma_{ij}^{u,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x) u dy - \int_{\Gamma_{ij}^{s,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{s,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_y) u dx + \int_{\Gamma_{ij}^{n,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{n,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_y) u dx, \quad (33)$$

Each of these terms are discretized with the help of the discrete mass fluxes (14), for example for the east face:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{u,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x) u dy \cong \frac{\bar{u}_{ij} + \bar{u}_{i+1,j}}{2} u_e, \quad (34)$$

where u_e is a characteristic value of u on $\Gamma_{ij}^{u,e}$, which has to be obtained by interpolation of the discrete velocity unknowns. As observed by Verstappen and Veldman, the only possible way to verify the skew-symmetric conditions (32c) is to use central interpolation with equal weighting:

$$u_e = \frac{u_{ij} + u_{i+1,j}}{2}. \quad (35)$$

Analogous interpolations are obtained on the other faces, for example on the south face:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{s,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{s,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_y) u dx \cong \frac{\bar{v}_{ij-1}}{2} u_s + \frac{\bar{v}_{i+1,j-1}}{2} u_s, \quad (36)$$

with $u_s = (u_{ij-1} + u_{ij})/2$. Now, by using the property of local conservativity of the fluxes through fluid faces:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{u,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x) u dy = \int_{\Gamma_{i-1,j}^{u,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x) u dy, \quad \int_{\Gamma_{ij}^{u,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x) u dy = \int_{\Gamma_{i+1,j}^{u,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x) u dy, \quad (37)$$

one gets, after identification with (31), the following coefficients of the discretization:

$$C[\bar{U}]_p(i,j) = \frac{1}{4} \bar{m}^{ij} + \frac{1}{4} \bar{m}^{i+1,j}, \quad (38a)$$

$$C[\bar{U}]_w(i,j) = -\frac{1}{4} \bar{u}_{i-1,j} - \frac{1}{4} \bar{u}_{ij}, \quad C[\bar{U}]_e(i,j) = \frac{1}{4} \bar{u}_{ij} + \frac{1}{4} \bar{u}_{i+1,j}, \quad (38b)$$

$$C[\bar{U}]_s(i,j) = -\frac{1}{4} \bar{v}_{ij-1} - \frac{1}{4} \bar{v}_{i+1,j-1}, \quad C[\bar{U}]_n(i,j) = \frac{1}{4} \bar{v}_{ij} + \frac{1}{4} \bar{v}_{i+1,j}, \quad (38c)$$

which verifies the antisymmetry conditions (32c) when the discrete continuity equation is verified in Ω_{ij} and $\Omega_{i+1,j}$. Any type of interpolation other than (35), for example an upwind discretization, would violate these conditions.

In the cut-cells, the skew-symmetric discretization given by (31) and (38c) must be modified in order to take into account the boundary conditions on the immersed boundary. This discretization would prove to be more complicated to build than for the pressure gradient, because we could not obtain a unique formula which would be valid for any type of cut-cells: instead, the discretization should be constructed in each of the half generic control volumes of Fig. 3 such as the skew-symmetry condition (27) be verified for any combinations of these half control volumes.

Let us consider the case of the control volume Ω_{ij}^u of Fig. 2, whose north solid boundary $\Gamma_{ij}^{ib,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{ib,w}$ is built from two halves of trapezoidal cut-cells. For this control volume, the discretization of the convective term must take the form:

$$\int_{\Gamma_{ij}^u} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u dS \cong C[\bar{U}]_w(i,j) u_{i-1,j} + C[\bar{U}]_e(i,j) u_{i+1,j} + C[\bar{U}]_p(i,j) u_{ij} + C[\bar{U}]_s(i,j) u_{ij-1} + S_{ij}^{ib,c}, \quad (39)$$

where $C[\bar{U}]_n(i,j)$ is discarded since the velocity unknown $u_{i+1,j}$ does not exist in the fluid domain. The skew-symmetry condition (27) reads for this control volume:

$$C[\bar{U}]_p(i,j) = 0, \quad C[\bar{U}]_e(i,j) = -C[\bar{U}]_w(i+1,j). \quad (40)$$

The discretization that verifies these conditions is obtained by decomposing the boundary of the control volume as in Eq. (7), and writing the convective term as the net flux through each of these faces:

$$\int_{\Gamma_{ij}^u} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u dS = - \int_{\Gamma_{ij}^{u,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x) u dy + \int_{\Gamma_{ij}^{u,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x) u dy - \int_{\Gamma_{ij}^{s,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{s,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_y) u dx + \int_{\Gamma_{ij}^{ib,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{ib,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}^{ib}) u dS. \quad (41)$$

The fluxes through each of the fluid faces are given by Eqs. (34), (36) and (37), whereas the fluxes through each half of solid face $\Gamma_{ij}^{ib,e}$ and $\Gamma_{i+1,j}^{ib,w}$ are discretized separately as:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{ib,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{ij}^{ib}) u \, dS \cong \frac{\overline{U}_{ij}^{ib}}{2} \left(\frac{1}{2} \underline{u_{ij}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{u(x_i, y_{ij}^{ib})}} \right), \tag{42a}$$

$$\int_{\Gamma_{i+1,j}^{ib,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{i+1,j}^{ib}) u \, dS \cong \frac{\overline{U}_{i+1,j}^{ib}}{2} \left(\frac{1}{2} \underline{u_{ij}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{u(x_i, y_{ij}^{ib})}} \right). \tag{42b}$$

In these expressions, the terms underlined once contribute to the diagonal coefficient $C[\overline{U}]_p(i,j)u_{ij}$, in order to recover the expression of the discrete continuity in Ω_{ij} and $\Omega_{i+1,j}$, whereas the terms which are twice underlined contribute to the source term $S_{ij}^{ib,c}$. As a result, the discretization of the convective term in this control volume is also given by (38c), with the exception that:

$$C[\overline{U}]_N(i,j) = 0, \quad S_{ij}^{ib,c} = \frac{1}{2} \left(\frac{\overline{U}_{ij}^{ib}}{2} + \frac{\overline{U}_{i+1,j}^{ib}}{2} \right) u(x_i, y_{ij}^{ib}). \tag{43}$$

The antisymmetry conditions (40) is thus verified, and we may consider that the source term $S_{ij}^{ib,c}u_{ij}$ that arises in the kinetic energy budget (29) corresponds to a discrete approximation of the term $\int_{\Gamma^{ib}} |\mathbf{v}|^2 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} / 2 \, dS$ written on the solid boundary $\Gamma_{ij}^{ib,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{ib,w}$ of the control volume.

For the other types of half control volumes depicted in Fig. 3, the skew-symmetric discretization is given in Appendix A. This discretization is built such that the skew-symmetry condition (27) is verified for any combinations of these half control volumes.

3.4. Momentum equation II: Discretization of the viscous fluxes based on the conservation of total momentum

For the x-momentum equation (2a), the viscous terms written in control volume Ω_{ij}^u reads:

$$\int_{\Gamma_{ij}^u} \nabla u \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_{\Gamma_{ij}^u} \frac{\partial u}{\partial x} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \, dS + \int_{\Gamma_{ij}^u} \frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \, dS. \tag{44}$$

We aim to discretizing these terms in the cut-cells such that the simplicity of the five-point structure of the MAC method be preserved. We have found that the discretization of the viscous fluxes is much more intricate than for the convective fluxes. As a matter of fact, we will need to impose the conservation of total momentum (8b) at the discrete level for completely characterizing these terms: this is equivalent to stating that the discretization of the viscous fluxes in the cut-cell be consistent with the discretization of the hydrodynamic forces (9) acting on the immersed boundary.

First and foremost, we had to make a distinction between the discretization of the normal stress fluxes, e.g. $\int_{\Gamma_{ij}^u} \frac{\partial u}{\partial x} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \, dS$ and the shear stress fluxes, e.g. $\int_{\Gamma_{ij}^u} \frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \, dS$. This distinction is also observed in Cartesian fluid cells since, due to the staggering of the velocity unknowns on the MAC mesh, the normal stresses:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{ij} = \frac{u_{ij} - u_{i-1,j}}{\Delta x_i}, \quad \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{ij} = \frac{v_{ij} - v_{i,j-1}}{\Delta y_j}, \tag{45}$$

are naturally located at the center of cell Ω_{ij} , while the shear stresses:

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{ij} = \frac{u_{i,j+1} - u_{ij}}{\frac{1}{2}\Delta y_{j+1} + \frac{1}{2}\Delta y_j}, \quad \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{ij} = \frac{v_{i+1,j} - v_{ij}}{\frac{1}{2}\Delta x_{i+1} + \frac{1}{2}\Delta x_i}, \tag{46}$$

are located at its upper right corner (see Fig. 5).

On the LS-STAG mesh, it is very natural to locate the shear stresses at the vertices of the cut-cells as shown on Fig. 6. Note that for the case of pentagonal cells, $\partial u / \partial y|_{ij}$ and $\partial v / \partial x|_{ij}$ are computed at distinct vertices.

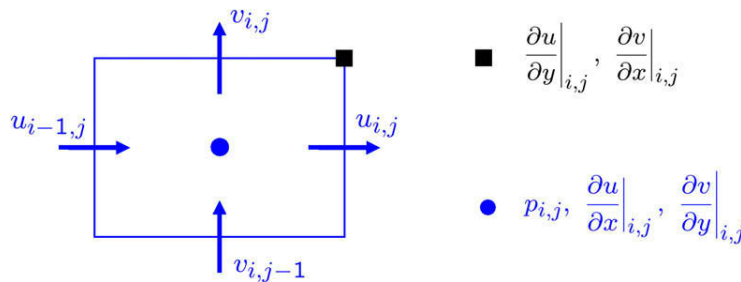


Fig. 5. Location of the pressure and viscous stresses in Cartesian cell Ω_{ij} .

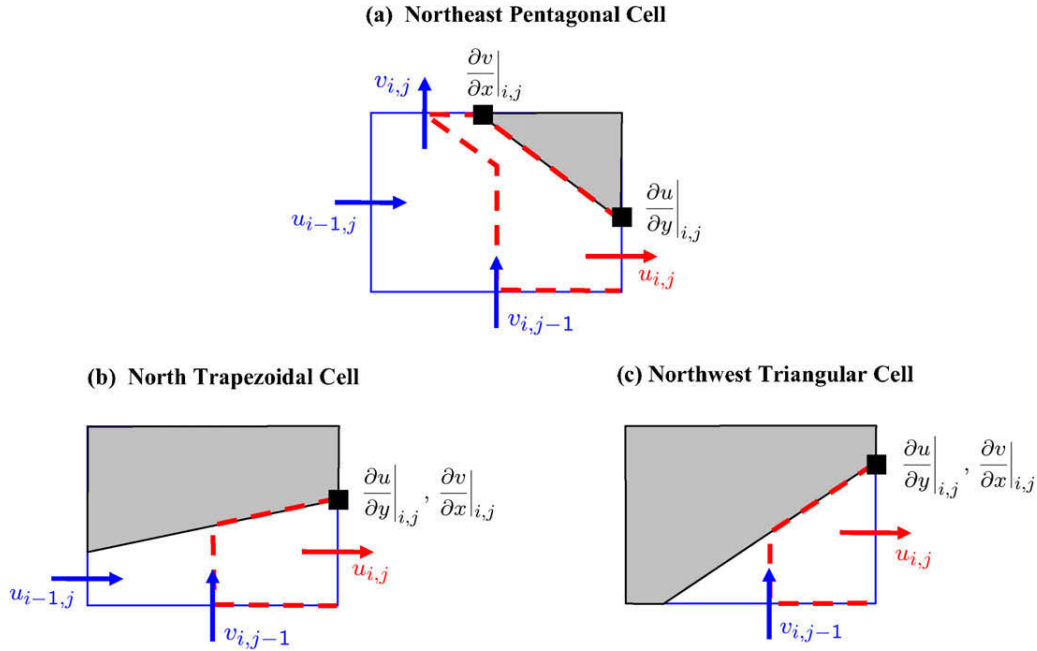


Fig. 6. Location of the shear stresses in the three generic cut-cells Ω_{ij} . The location on the other cut-cells of Fig. 3 can be easily deduced from this figure.

For the normal stresses in contrast, we consider that these terms have a physical origin (diagonal part of the Cauchy stress tensor) and a mathematical regularity similar to the pressure. In consequence, their treatment should be consistent with the pressure discretization discussed in the previous section: we assume that the normal stresses $\partial u / \partial x|_{ij}$ and $\partial v / \partial y|_{ij}$ take constant values in cut-cell Ω_{ij} , and do not need to be precisely located inside the cut-cell.

As a conclusion to this paragraph, we mention that the LS-STAG discretization of the viscous stresses has much in common with the finite element method for viscoelastic flows of Saramito [52], where the normal stresses are discretized with piecewise constant polynomials with a degree of freedom at the elements centroid, while the shear stresses are discretized with a linear continuous polynomial with degrees of freedom at the elements vertices.

3.4.1. Discretization of the normal stress fluxes

We now turn to the discretization of the normal stress flux $\int_{\Gamma_{ij}^u} \partial u / \partial x \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} dS$ in the cut-cells. For this term, a geometric-based formula would consist in writing this term as the net flux through the east $\Gamma_{ij}^{u,e}$ and west $\Gamma_{ij}^{u,w}$ faces, and then discretize each of these terms with a differential quotient, for example in Fig. 6(a) and (b):

$$\int_{\Gamma_{ij}^{u,w}} \frac{\partial u}{\partial x} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} dS \simeq \Delta y_{ij}^{u,w} \frac{u_{ij} - u_{i-1j}}{\Delta x_i}, \quad (47)$$

where the area $\Delta y_{ij}^{u,w}$ is yet to be defined. All our efforts in this direction gave disappointing results in terms of numerical accuracy. The reason is that the LS-STAG mesh is not admissible in the sense of Eymard et al. [13] for the normal stresses in the cut-cells: the line joining the location of u_{i-1j} and u_{ij} is not orthogonal to the face $\Gamma_{ij}^{u,w}$ in the trapezoidal cell of Fig. 6(b). This feature is also observed for pentagonal cut-cells (see Fig. 6(a)), and has the consequence to render approximation (47) non-consistent and thus to yield large numerical errors.

In order to improve the consistency of this term, we use the fact that the discrete normal stresses should be consistent with the discrete pressure, as argued above, and thus the normal stress flux shall be discretized with an expression similar to the pressure gradient (30a):

$$\int_{\Gamma_{ij}^{u,w}} \frac{\partial u}{\partial x} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} dS \simeq \theta_{ij}^u \Delta y_j \left(\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1j} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{ij} \right). \quad (48)$$

The discretization has to be completed with a differential quotient for $\partial u / \partial x|_{ij}$. This quotient is constructed by requiring that Green's theorem:

$$\int_{\Omega_{ij}} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) dV = \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS, \quad (49)$$

be valid at the discrete level in a cut-cell, since it is trivially verified by the MAC method in a Cartesian cell. After a straightforward discretization of the integrals and comparison with the continuity equation (15), one gets:

$$\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{ij} \cong \frac{\theta_{ij}^u u_{ij} - \theta_{i-1,j}^u u_{i-1,j} + (\theta_{i-1,j}^u - \theta_{ij}^u) u_{ij}^{ib}}{V_{ij}/\Delta y_j}, \quad (50a)$$

and an analogous expression holds for $\partial v/\partial y|_{ij}$:

$$\frac{\partial v}{\partial y}\Big|_{ij} \cong \frac{\theta_{ij}^v v_{ij} - \theta_{i,j-1}^v v_{i,j-1} + (\theta_{i,j-1}^v - \theta_{ij}^v) v_{ij}^{ib}}{V_{ij}/\Delta x_i}. \quad (50b)$$

These expressions are valid for any type of cut-cells, with the boundary conditions naturally imbedded. These formulae reduce to the standard finite-difference quotients for a Cartesian fluid cell (see e.g. (45)).

3.4.2. A first discretization of the shear stress fluxes

In contrast, the discretization of the shear stress flux $\int_{\Gamma_{ij}^u} \partial u/\partial y \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} dS$ may seem simpler because the LS-STAG mesh is admissible for this term (see Fig. 2). The shear stress term can thus be written as the net flux through the north and south faces, for example far from the immersed boundary:

$$\int_{\Gamma_{ij}^u} \frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\Gamma_{ij}^{n,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{n,w}} \frac{\partial u}{\partial y} dx - \int_{\Gamma_{ij}^{s,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{s,w}} \frac{\partial u}{\partial y} dx. \quad (51)$$

Application of the midpoint rule gives for the north face for example:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{n,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{n,w}} \frac{\partial u}{\partial y} dx \cong (\Delta x_{ij}^{n,e} + \Delta x_{i+1,j}^{n,w}) \frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{ij}, \quad (52)$$

where for the purpose of local conservation of the fluxes, the areas $\Delta x_{ij}^{n,e}$ and $\Delta x_{i+1,j}^{n,w}$ represent only the fluid part of the faces, i.e.:

$$\Delta x_{ij}^{n,e} = \frac{1}{2} \theta_{ij}^u \Delta x_i, \quad \Delta x_{i+1,j}^{n,w} = \frac{1}{2} \theta_{i+1,j}^u \Delta x_{i+1}. \quad (53)$$

The quotient $\partial u/\partial y|_{ij}$, located at the upper right corner of cell Ω_{ij} (see Fig. 5), is computed by differentiating the interpolation polynomial of $u(x_i, \cdot)$ in the vertical direction:

$$\frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{ij} = \frac{u_{ij+1} - u_{ij}}{\frac{1}{2} \theta_{ij+1}^u \Delta y_{j+1} + \frac{1}{2} \theta_{ij}^u \Delta y_j}. \quad (54)$$

This finite-difference quotient is much similar to the usual one (Eq. (46)). Formulae (52)–(54) are valid if u_{ij+1} is present in the fluid domain, i.e. if $\theta_{ij+1}^u > 0$: this is the case of the Cartesian cell of Fig. 1(b), and the cut-cells in Fig. 3(a) and (b).

In the case where the north face is solid and thus u_{ij+1} does not exist (case where $\theta_{ij+1}^u = 0$, for the cut-cells of Fig. 3(c)–(f)), these formulae have to be modified for taking into account the boundary conditions in the fashion of the *ghost fluid method* for elliptic equations [18]. For example, on the north face:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{ib,e} \cup \Gamma_{i+1,j}^{ib,w}} \frac{\partial u}{\partial y} dx \cong (\Delta x_{ij}^{ib,e} + \Delta x_{i+1,j}^{ib,w}) \frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{ij}, \quad (55)$$

with the one-sided differential quotient:

$$\frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{ij} = \frac{u(x_i, y_{ij}^{ib}) - u_{ij}}{\frac{1}{2} \theta_{ij}^u \Delta y_j}. \quad (56)$$

Note that in (55) the integration areas $\Delta x_{ij}^{ib,e}$ and $\Delta x_{i+1,j}^{ib,w}$ on the solid face are yet to be defined.

For completeness, we mention that the discretization of the viscous term has a five-point structure, and in the case where $\theta_{ij+1}^u = 0$, it has a form analogous to (39):

$$\int_{\Gamma_{ij}^u} \nabla u \cdot \mathbf{n} dS \cong \mathcal{K}_W(i,j) u_{i-1,j} + \mathcal{K}_E(i,j) u_{i+1,j} + \mathcal{K}_P(i,j) u_{ij} + \mathcal{K}_S(i,j) u_{i,j-1} + S_{ij}^{ib,v}, \quad (57)$$

with:

$$\mathcal{K}_W(i,j) = \frac{\theta_{ij}^u \Delta y_j \theta_{i-1,j}^u}{V_{ij}/\Delta y_j}, \quad \mathcal{K}_E(i,j) = \frac{\theta_{ij}^u \Delta y_j \theta_{i+1,j}^u}{V_{i+1,j}/\Delta y_j}, \quad (58a)$$

$$\mathcal{K}_S(i,j) = \frac{\theta_{ij}^v \Delta x_i + \theta_{i+1,j}^v \Delta x_{i+1}}{\theta_{ij}^u \Delta y_j + \theta_{i+1,j}^u \Delta y_{j-1}}, \quad (58b)$$

$$\mathcal{K}_P(i,j) = -\frac{(\theta_{ij}^u)^2 \Delta y_j}{V_{ij}/\Delta y_j} - \frac{(\theta_{i+1,j}^u)^2 \Delta y_j}{V_{i+1,j}/\Delta y_j} - \mathcal{K}_S(i,j) - \frac{\Delta x_{ij}^{ib,e} + \Delta x_{i+1,j}^{ib,w}}{\frac{1}{2} \theta_{ij}^u \Delta y_j}, \quad (58c)$$

$$S_{ij}^{ib,v} = \theta_{ij}^u \Delta y_j \left[\frac{(\theta_{ij}^u - \theta_{i+1,j}^u)}{V_{i+1,j}/\Delta y_j} u_{i+1,j}^{ib} - \frac{(\theta_{i-1,j}^u - \theta_{ij}^u)}{V_{ij}/\Delta y_j} u_{ij}^{ib} \right] + \frac{\Delta x_{ij}^{ib,e} + \Delta x_{i+1,j}^{ib,w}}{\frac{1}{2} \theta_{ij}^u \Delta y_j} u(x_i, y_{ij}^{ib}). \quad (58d)$$

We observe that the discretization is symmetric (i.e. $\mathcal{K}_W(i+1,j) = \mathcal{K}_E(i,j)$), as it is the case for the MAC method.

For completing our discretization of the viscous terms, we have to define the values of the integration areas $\Delta x_{ij}^{ib,e}$ and $\Delta x_{i+1,j}^{ib,w}$ for the shear stress flux at the boundary (55). These values will be determined independently for each type of cut-cells in Fig. 6, by requiring that the shear stress fluxes at the immersed boundary correspond to the discretization of the shear part of the hydrodynamic forces (9). This is equivalent to requiring that total momentum be discretely conserved on the LS-STAG mesh.

3.4.3. Discrete conservation of total momentum and computation of hydrodynamic forces

As done in Section 3.3 for the kinetic energy, the total momentum $\mathbf{P}(t) = \int_{\Omega} \mathbf{v} dV$ is discretized with the trapezoidal rule to give:

$$\mathbf{P}(t) \cong P^h(t) = \mathbb{1}^T \mathcal{M} U + \mathbb{1}^T \mathcal{M}^{ib} U^{ib}, \quad (59)$$

where $\mathbb{1}$ is the constant vector. The conservation equation for $P^h(t)$ is obtained by multiplication of the semi-discrete scheme (23) with vector $\mathbb{1}$:

$$\frac{dP^h}{dt} = -[\mathbb{1}^T \mathcal{C}[\bar{U}]U + \mathbb{1}^T S^{ib,c}] - [\mathbb{1}^T \mathcal{G}P - \mathbb{1}^T \mathbf{v}(\mathcal{K}U + S^{ib,v})]. \quad (60)$$

This expression is the semi-discrete version of Eq. (8b): the quadratic terms in the RHS correspond to the summation of the convective, pressure and viscous fluxes from all control volumes. Since the property of local conservativity of the fluxes holds at fluid faces, all terms cancel out except those appearing at solid boundary faces of the cut-cells. These remaining terms should correspond to the forces that act on the immersed boundary.

Most relevant to our discussion is the discretization of the viscous fluxes, and thus we will focus on the viscous force: the LS-STAG method we be qualified to be *momentum conserving* if the non-zero terms in sum $[\mathbb{1}^T \mathcal{G}P - \mathbb{1}^T \mathbf{v}(\mathcal{K}U + S^{ib,v})]$ correspond to the discretization of the hydrodynamic force (9). This discretization is obtained by approximating the surface integrals in (9b) and (9a), respectively, as:

$$F_x^h = \sum_{\text{Cut-cells} \Omega_{i,j}} [n_x \Delta S]_{ij}^{ib} \left(p_{ij} - v \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{ij} \right) - v \text{Quad}_{ij}^{ib} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \right), \quad (61a)$$

$$F_y^h = \sum_{\text{Cut-cells} \Omega_{i,j}} -v \text{Quad}_{ij}^{ib} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \right) + [n_y \Delta S]_{ij}^{ib} \left(p_{ij} - v \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{ij} \right). \quad (61b)$$

In these equations, the quadrature of the pressure and normal stress term has been performed by observing that these terms are constant in the cut-cells and using the midpoint rule; as a result the same formula is valid for all types of cut-cells. In contrast, the quadrature of the shear stresses (denoted Quad_{ij}^{ib}) has to be adapted to each type of cut-cells. This quadrature, based on the location of the shear stresses in Fig. 6 and the trapezoidal rule, is fully described in Appendix B. For our discussion, it is relevant to note that the portion of drag and lift acting on the solid part of the trapezoidal cut-cell of Fig. 6(b) is, respectively:

$$F_x^h \Big|_{ij} = (\theta_{i-1,j}^u - \theta_{ij}^u) \Delta y_j \left[p_{ij} - v \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{ij} \right] - \frac{v \Delta x_i}{2} \left[\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i-1,j} + \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{ij} \right], \quad (62a)$$

$$F_y^h \Big|_{ij} = -\frac{v (\theta_{i-1,j}^u - \theta_{ij}^u) \Delta y_j}{2} \left[\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i-1,j} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{ij} \right] + \Delta x_i \left[p_{ij} - v \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{ij} \right]. \quad (62b)$$

Now, let us examine closely the viscous part of the global momentum equation (60), whose contribution in the x direction that reads:

$$[\mathbb{1}^T G P - \mathbb{1}^T v(\mathcal{K}U + S^{ib,v})]_x = \sum_{CVs \Omega_{ij}^u} \int_{r_{ij}^u} \left[p - v \frac{\partial u}{\partial x} \right] \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} dS - \int_{r_{ij}^u} v \frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} dS, \quad (63)$$

should correspond to the drag force F_x^h given by (61a). The easiest part to inspect is the contribution of the normal stresses, since a unique formula (Eqs. (30) and (50)) is valid for these terms in all computational cells:

$$\sum_{CVs \Omega_{ij}^u} \theta_{ij}^u \Delta y_j \left(p_{i+1,j} - p_{i,j} - v \left[\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1,j} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} \right] \right).$$

After reindexation for making appear a sum on the computational cells, we observe that pressure and normal stresses cancel out in fluid cells such that $\theta_{ij}^u = \theta_{i-1,j}^u = 1$, and only the following terms in the cut-cells do remain:

$$\sum_{\text{Cut-cells } \Omega_{ij}} \left(\theta_{i-1,j}^u - \theta_{i,j}^u \right) \Delta y_j \left(p_{i,j} - v \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} \right).$$

This sum is exactly the contribution of the normal stresses to the discrete drag force (61a). A similar inspection holds for the lift component (61b), ensuring thus that the normal stress contribution to the total momentum budget is recovered.

For the shear stress contribution, the fluxes at all fluid faces cancel out and only fluxes at the immersed boundary remains in sum (63), their exact expression depending on the type of cut-cell. On the solid part $r_{ij}^{ib,w} \cup r_{ij}^{ib,e}$ of cut-cell Ω_{ij} in Fig. 2, we use Eq. (55) for writing the shear stress contribution as:

$$-v \left[\Delta x_{ij}^{ib,w} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i-1,j} + \Delta x_{ij}^{ib,e} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} \right].$$

After comparison with the drag force (62a), we are able to unambiguously determine the integration areas of the shear stress as:

$$\Delta x_{ij}^{ib,w} = \Delta x_{ij}^{ib,e} = \frac{1}{2} \Delta x_i. \quad (64)$$

A similar inspection for the other type of cut-cells gives the values reported in Table 2 for the shear stress flux $\int_{r_{ij}^{ib,e} \cup r_{i+1,j}^{ib,w}} \partial u / \partial y dx$. Similar values can be deduced for the shear stress flux in the y-momentum equation $\int_{r_{ij}^{ib,n} \cup r_{i+1,j}^{ib,s}} \partial v / \partial x dy$. This will finish the description of what will be subsequently be called the “original” LS-STAG discretization of the viscous stress.

3.4.4. A “complete” discretization of the shear stresses based on the strict conservation of total momentum

However, if we further investigate the correspondence between the shear stress fluxes at the immersed boundary in the momentum equation and the discrete shear force (61), one may notice slight discrepancies. For example in the trapezoidal cut-cell of Fig. 6(b), the shear stress fluxes at the immersed boundary that appear in the momentum equation for u_{ij} and v_{ij-1} are, respectively:

$$-\frac{v \Delta x_i}{2} \left[\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i-1,j} + \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} \right] \quad \text{and} \quad 0. \quad (65)$$

If we compare these terms with the shear force in (62a) and (62b), we observe that the following part is missing from the momentum equation for v_{ij-1} :

$$-\frac{v \left(\theta_{i-1,j}^u - \theta_{i,j}^u \right) \Delta y_j}{2} \left[\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i-1,j} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} \right]. \quad (66)$$

Note that the contribution of this term to the global lift force should be small, since it vanishes when the solid face is horizontal ($\theta_{i-1,j}^u = \theta_{i,j}^u$). Nevertheless, the “original” LS-STAG method does not completely conserve the global momentum. The

Table 2

Integration areas for the shear stress flux (55) on the solid part of the cut-cell of Fig. 6. The integration areas for the other cut-cells of Fig. 3 can be easily deduced from the ones displayed.

Type of cut-cell	$\Delta x_{ij}^{ib,w}$	$\Delta x_{ij}^{ib,e}$
(a) Northeast pentagonal cell	0	$(1 - \theta_{ij}^v) \Delta x_i$
(b) North trapezoidal cell	$\frac{1}{2} \Delta x_i$	$\frac{1}{2} \Delta x_i$
(c) Northwest triangular cell	$\frac{1}{2} \theta_{i,j-1}^v \Delta x_i$	$\frac{1}{2} \theta_{i,j-1}^v \Delta x_i$

reason is that for building this discretization we have assumed that the shear stress discretization yields a five-point stencil, and thus the contribution of terms $\partial v / \partial x|_{i-1,j}$ and $\partial v / \partial x|_{i,j}$ should be ignored in the stencil for $v_{i,j-1}$.

An alternate version of the LS-STAG method would be to retain terms such as (66) in the discretization. The difficulty is now to compute the new terms that appear in the discrete momentum equations. For example, the term $\partial v / \partial x|_{i,j}$ in Fig. 6(b) may only be computed if we know the type of the neighboring cut-cell $\Omega_{i+1,j}$. If $\Omega_{i+1,j}$ is pentagonal, as in Fig. 4(d), then the shear stress can be computed with the one-sided formula:

$$\frac{\partial v}{\partial x}|_{i,j} = \frac{v_{i+1,j} - v(x_{i,j}^{\text{ib}}, y_j)}{\frac{1}{2} \theta_{i+1,j}^v \Delta x_{i+1}}. \quad (67)$$

The only other possibility is that $\Omega_{i+1,j}$ be a pentagonal cell, as in Fig. 4(a). In this case, we cannot use formula (67). Instead, we simply set $\partial v / \partial x|_{i,j} = 0$, as it is verified when the solid face is horizontal.

This alternate version, the we will subsequently call the “complete” LS-STAG method, has the ability to be strictly momentum conserving. However, compared to the “original” LS-STAG method, the presence of the supplementary shear stress terms on the solid boundary severely complicates the coding of the method, and it also enlarges the size of the stencil. In the computations presented in the next section, these terms will be handled with an explicit time-stepping. These computations will also prove that the “complete” LS-STAG method shows only a marginal improvement over the “original” method, and we recommend thus the latter method.

3.5. Time stepping method and solution of the linear systems

The time integration of the differential algebraic system (18) and (23) is performed with a semi-implicit projection method based on the Adams–Bashforth/second-order backward differentiation formula (AB/BDF 2) scheme. This projection scheme is defined by the following two steps:

$$\mathcal{M} \frac{3\tilde{U} - 4U^n + U^{n-1}}{2\Delta t} + 2\mathcal{C}[\bar{U}^n]U^n - \mathcal{C}[\bar{U}^{n-1}]U^{n-1} - \mathcal{D}^T P^n - \nu \mathcal{K} \tilde{U} = 0, \quad (68)$$

where \tilde{U} is a prediction of the velocity at time $t_{n+1} = (n+1)\Delta t$, then:

$$\frac{3}{2} \mathcal{M} \frac{U^{n+1} - \tilde{U}}{\Delta t} - \mathcal{D}^T (P^{n+1} - P^n) = 0, \quad (69a)$$

$$\mathcal{D}U^{n+1} + \bar{U}^{\text{ib},n+1} = 0. \quad (69b)$$

Numerical tests in [6] shows that this scheme is $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ accurate for both velocity and pressure.

The projection step (69) leads to solving following Poisson equation for the pressure potential $\Phi = 2\Delta t(P^{n+1} - P^n)/3$:

$$\mathcal{A}\Phi = \mathcal{D}\tilde{U} + \bar{U}^{\text{ib},n+1}, \quad \mathcal{A} \equiv -\mathcal{D}\mathcal{M}^{-1}\mathcal{D}^T, \quad (70)$$

which is a symmetric linear system whose five-point stencil reads:

$$A_E(i,j) = \frac{(\theta_{i,j}^u \Delta y_j)^2}{\frac{1}{2}V_{i,j} + \frac{1}{2}V_{i+1,j}}, \quad A_W(i,j) = A_E(i-1,j), \quad (71a)$$

$$A_N(i,j) = \frac{(\theta_{i,j}^v \Delta x_i)^2}{\frac{1}{2}V_{i,j} + \frac{1}{2}V_{i,j+1}}, \quad A_S(i,j) = A_N(i,j-1), \quad (71b)$$

$$A_P(i,j) = -A_E(i,j) - A_W(i,j) - A_N(i,j) - A_S(i,j). \quad (71c)$$

In the case of a Cartesian fluid cell, the usual pressure equation of the MAC method is recovered. We mention that the pressure equation (70) is valid in the whole computational domain, fluid or solid cells alike, and in the latter cells the linear system reads:

$$0 \times \Phi_{i,j} = 0, \quad (72)$$

which is a consequence of the fact that the pressure is defined up to an additive constant. In order to alleviate this indeterminacy in actual computations, we add to the diagonal coefficient $A_P(i,j)$ a small real constant δ whose magnitude has the order of the machine roundoff, and we solve (70) in the whole computational domain with a standard solver for elliptic equations on Cartesian grids. In the computations we present next, we have used the black-box multigrid/BiCGSTAB solver of van Kan et al. [62]. No modifications of the solver had to be undertaken for taking the immersed boundary into account, since we did not observe a significant loss in the performance of the solver when compared to Cartesian computations. For the simulations presented in the following sections, the pressure equation was typically solved in 2–3 iterations with this solver.

The prediction step (68) amounts to solving a Helmholtz equation for \tilde{U} , which is performed by the same black-box multigrid/BiCGSTAB solver. This linear system is easier to solve than the pressure equation since its diagonal dominance increases with the Reynolds number.

4. Numerical results

4.1. Taylor–Couette flow

First, the spatial accuracy of the LS-STAG method is assessed on the Taylor–Couette flow between two concentric circular cylinders, as described in Fig. 7(left). The flow dynamics is governed by the Taylor number Ta , which is the ratio between the centrifugal force and the viscous force:

$$Ta = \frac{\omega^2 \left(\frac{R_1+R_2}{2}\right) (R_2 - R_1)^3}{\nu^2}. \tag{73}$$

Below the stability threshold $Ta_c = 1712$ [23], the steady stable solution is purely orthoradial, such that its Cartesian components read for $r = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2} \in [R_1, R_2]$:

$$u_{ex}(x, y) = -K \left(\frac{R_2^2}{r^2} - 1\right) (y - y_c), \tag{74a}$$

$$v_{ex}(x, y) = K \left(\frac{R_2^2}{r^2} - 1\right) (x - x_c), \tag{74b}$$

$$p_{ex}(x, y) = K^2 \left(\frac{r^2}{2} - \frac{R_2^4}{2r^2} - R_2^2 \log r^2\right), \tag{74c}$$

where $K = \frac{\omega R_1^2}{R_2^2 - R_1^2}$.

In order to build the level-set function $\phi(x, y)$ that represents the fluid domain Ω_f , we have used the *Constructive Solid Geometry* (CSG) method for constructing complex domains out of basic geometries such as circles, hyperplanes and spheres, which are sufficiently simple for having an analytical expression for their level-set function [25,47]. The boolean CSG operations on basic geometries such as intersection, union or complementary part can then be expressed as algebraic operations on their level-set functions [47]. For example, let Ω_1 and Ω_2 be the inner region of cylinders Γ_1 and Γ_2 , whose level-set function is, respectively:

$$\phi_1(x, y) = R_1 - r, \tag{75a}$$

$$\phi_2(x, y) = R_2 - r. \tag{75b}$$

Then, the fluid domain of the Taylor–Couette geometry can be constructed as $\Omega_f = \Omega_2 \setminus \Omega_1$, and its level-set function is simply $\phi(x, y) = \max(\phi_2(x, y), -\phi_1(x, y))$.

The computational domain is a square of side length $10R_1$, covered with a uniform mesh of N square computational cells of size h in each direction (see Fig. 7(right)). The center of the concentric cylinders is set at $x_c = 0.013$, $y_c = 0.023$ slightly off the center of the computational domain, such as it never corresponds to a corner or centroid of a computational cell. Thus, the numerical error we measure are free of any superconvergence effects, since the natural symmetries of the meshes and

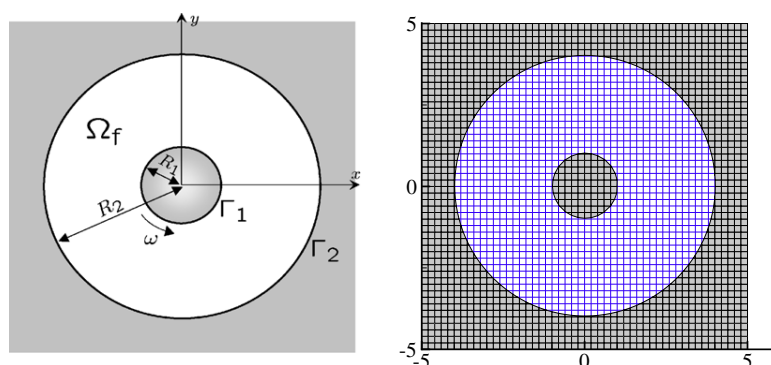


Fig. 7. Geometry and computational domain for the Taylor–Couette flow. At left, the fluid domain Ω_f is confined between two concentric cylinders Γ_1 and Γ_2 of center (x_c, y_c) , radius R_1 and $R_2 = 4R_1$, respectively, where only the inner cylinder Γ_1 moves with the angular velocity ω . At right, the LS-STAG mesh for $R_1 = 1$ and $N = 50$ cells in each direction.

the computational solution are broken. For the flow at $Ta = 1000$, we have compared the results of the two variants of the LS-STAG method (original and complete, see Section 3.4) with the so-called *staircase* method, which corresponds to a stepwise approximation of complex geometries with Cartesian cells. This last method is easily obtained from our numerical code by imposing the cell-face fraction ratios to be equal to 1 in the cut-cells, while the discretization in the Cartesian cells is unchanged. We will see that even though the cut-cells represent only a small fraction of the computational cells, these modifications will greatly affect the numerical solution in the whole fluid domain.

For the streamwise velocity u , we have measured the L_∞ spatial error up to the cut-cells, i.e.:

$$E_h(u) = \max_{CVs \Omega_{ij}^u} \left| u_{ij} - u_{ex} \left(x_i, y_j + \frac{1}{2} \theta_{ij}^u \Delta y_j \right) \right|, \quad (76)$$

whereas for the pressure, due to the indefinite location of the pressure in the cut-cells, we have reported the L_∞ error in the Cartesian cells only. Fig. 8(left) shows the error for the velocity measured on 90% of the fluid cells away from the immersed boundaries. The two LS-STAG variants shows a similar second-order accuracy, much better than the first-order accuracy of the staircase method. When the error of the LS-STAG method is measured on the whole computational domain (Fig. 8(right)), the L_∞ error is slightly higher, showing that maximal error occurs in the vicinity of the cut-cells, and the order of accuracy drops to being superlinear only. This is certainly an effect of the piecewise constant approximation of the normal stresses and the pressure in the cut-cells. A similar trend is observed for the L_∞ error of the pressure displayed in Fig. 9. Fig. 10 shows the pointwise error at mesh points along the horizontal radius, for $x \in [R_1, R_2]$. Firstly, we observe that the crude treatment of the immersed boundaries for the staircase method pollutes the solution in the whole fluid domain, whereas for the LS-STAG methods the largest errors stay confined to the vicinity of the immersed boundaries, and most notably to the inner moving cylinder Γ_1 . Secondly, we observe that the complete variant of the LS-STAG method (which conserves global momentum) gives only a marginal improvement in terms of pointwise accuracy.

4.2. Flow past a circular cylinder

The robustness of the LS-STAG method and its ability to compute unsteady flows at higher Reynolds number is now evaluated on the flow past a circular cylinder in a free-stream. The Reynolds number Re is based on the free-stream velocity U_∞ and the diameter D of the domain. The flow configuration is described in Fig. 11(left). In all our simulations, the upstream boundary is set at the distance $X_u = 8D$ from the obstacle, the outflow boundary at distance $X_d = 15D$, and the blockage ratio D/A is equal to $1/12$. Our previous studies [7,8] have shown that this computational domain was sufficiently wide for obtaining results that are independent of the domain size. In order to make a grid refinement study, we used a sequence of non-uniform meshes whose salient properties are summarized in Table 3. All meshes use a similar block uniform grid of cell size h/D in the vicinity of the cylinder, as shown in Fig. 11(right). Our simulations with mesh M4 were found to give accurate results for the range of Reynolds number [40 – 1000] we considered. The other meshes range from very coarse (mesh M1 with only 12 cut-cells around the immersed boundary, which is used for the steady flow at $Re = 40$) to extremely fine (mesh M5 with more than 400 cut-cells). This last mesh is mainly used for validating the results obtained on coarser meshes. Table 3 also reports the proportion of the various type of computational cells (solid, Cartesian or cut-cells) found in these meshes. We observe that the proportion of solid cells is very low and diminishes as the meshes gets bigger. Thus, the additional CPU and memory costs that their treatment entails is negligible compared to a body-fitted method. In the meshes we used for the

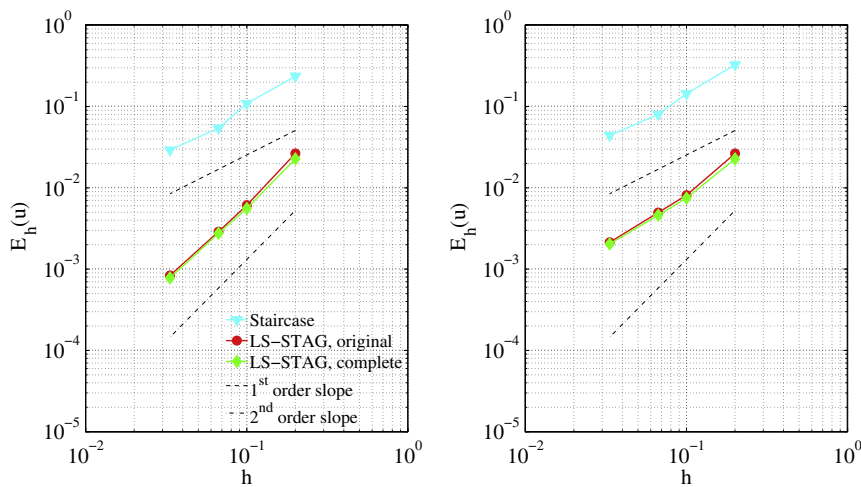


Fig. 8. L_∞ norm of the error for the streamwise velocity u versus grid size $h = \frac{10R_1}{N}$. At left: on 90% of the fluid domain; at right: on the whole fluid domain.

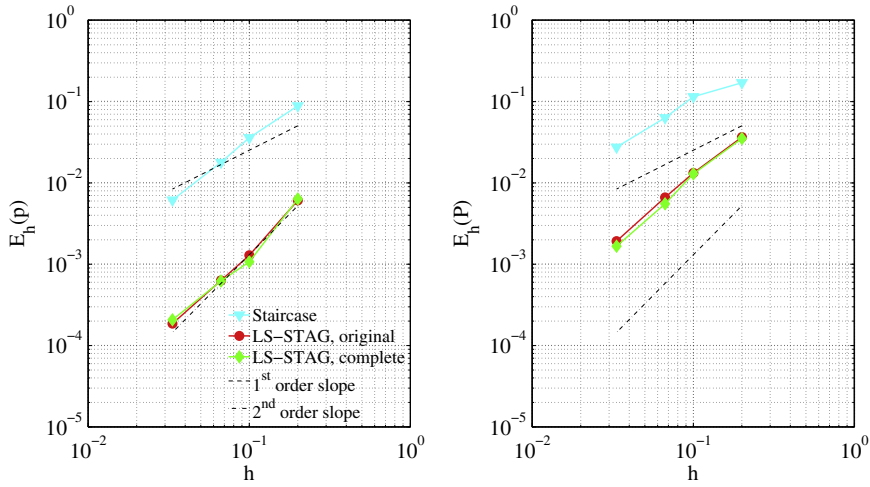


Fig. 9. L_∞ norm of the error for pressure p versus grid size $h = \frac{1064}{N}$. At left: on 65% of the fluid domain; at right on 90% of fluid domain.

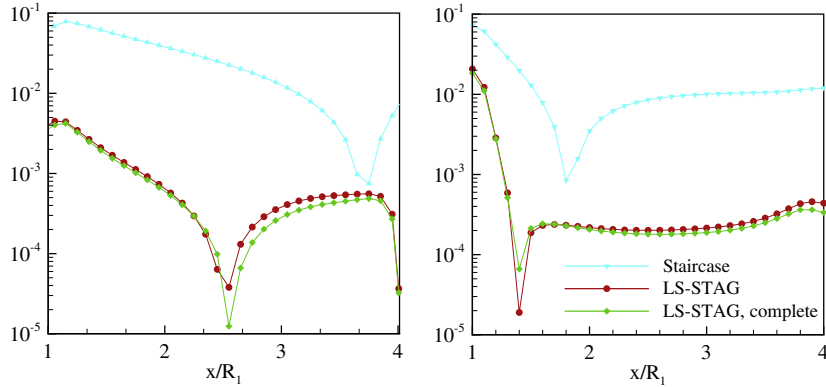


Fig. 10. Pointwise error profiles along the horizontal axis $y = 0.023$ for the v velocity (left) and the pressure (right).

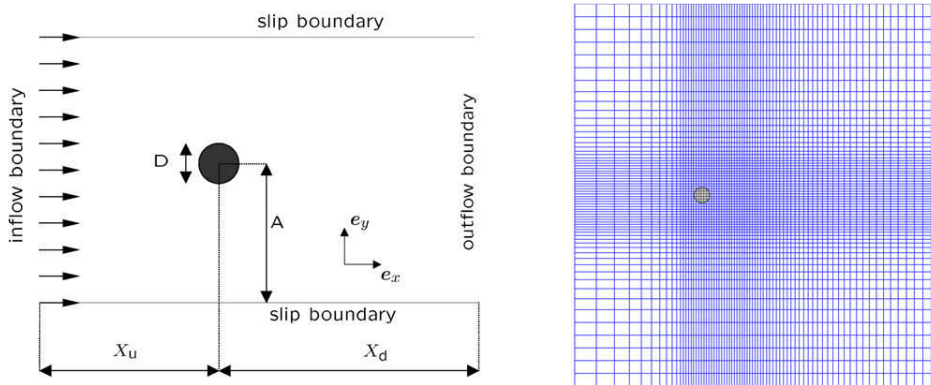


Fig. 11. Computational domain and grid for the flow past a circular cylinder.

Taylor–Couette flow, the proportion of cut-cells was similar, while the proportion of solid cells was around 50% whatever the size of the mesh. At last, Table 4 shows that the cut-cells almost have an equal proportion of triangular, trapezoidal and pentagonal cells: thus, an accurate discretization should be performed for all cells in Fig. 3.

Table 3

Salient properties of the meshes used for the circular cylinder flow. The percentage of the various type of cells with respect to their total number is given in brackets. The values of the time step are valid for all computations of Sections 4.2 and 4.3.

Mesh	$N_x \times N_y$	h/D	$\Delta t U_\infty / D$	Type of cells			
				Number of cells	Cartesian cells	Solid cells	Cut-cells
M1	36×34	0.32	10^{-2}	1224	1208 (98.7%)	4 (0.3%)	12 (1.0%)
M2	74×65	0.16	10^{-2}	4810	4767 (99.1%)	19 (0.4%)	24 (0.5%)
M3	150×130	0.08	10^{-2}	19,500	19,350 (99.2%)	100 (0.5%)	50 (0.3%)
M4	300×260	0.04	10^{-2a}	78,000	77,460 (99.3%)	440 (0.6%)	100 (0.1%)
M5	550×350	0.01	2×10^{-3b}	192,500	184,452 (95.8%)	7644 (4.0%)	404 (0.2%)

^a $\Delta t = 5 \times 10^{-3} D / U_\infty$ for the computations at $Re = 1000$.

^b $\Delta t = 10^{-3} D / U_\infty$ during the initial transients ($t U_\infty / D \in [0, 1]$) for the computations at $Re = 1000$.

Table 4

Inventory of the three basic types of cut-cells found in the Taylor–Couette (T-C) and circular cylinder (C-C) meshes, and their percentage with respect to the total number of cut-cells.

Simulation	Total number of cut-cells	Type cut-cells		
		Triangular cells	Trapezoidal cells	Pentagonal cells
T-C, $N = 100$	400	116 (29.0%)	168 (42.0%)	116 (29.0%)
T-C, $N = 300$	1192	344 (28.9%)	504 (42.3%)	344 (28.9%)
C-C, M2	24	4 (16.7%)	12 (50.0%)	8 (33.3%)
C-C, M4	100	28 (28.0%)	40 (40.0%)	32 (32.0%)

For comparing our results on the circular cylinder flow, we have selected well-established numerical investigations conducted with boundary-fitted [27,5,26], IB [35] and cut-cell methods [40]. Experimental results are taken from the monograph by Zdravkovich [67]. Following the derivation of the CFL condition on unstructured mesh in [4], the CFL number in fluid cell Ω_{ij} is:

$$CFL_{ij} = \left[(\bar{u}_{ij})^+ + (-\bar{u}_{i-1j})^+ + (\bar{v}_{ij})^+ + (-\bar{v}_{ij-1})^+ + (\bar{U}_{ij}^b)^+ \right] \frac{\Delta t}{V_{ij}}, \quad (77)$$

where $(\cdot)^+ = \max(\cdot, 0)$. This condition reduces to the conventional CFL condition in Cartesian fluid cells. For the values of the time step given in Table 3, all computations were performed with a maximal value of CFL equal to 0.5. We have observed that this value is not obtained in a cut-cell, but rather in a Cartesian cell away from the wake region. This shows that the occurrence of small cut-cells in the mesh does not hamper the stability properties of our semi-implicit time-stepping.

First, we performed a grid convergence study of the various methods (staircase, LS-STAG and LS-STAG complete) for the steady flow at $Re = 40$. For both variants of the LS-STAG method, the forces were computed with the same quadrature (Eq. (61)). Fig. 12 shows the spatial convergence of the drag coefficient $C_D = F_x / \frac{1}{2} \rho U_\infty^2$ and the length of the recirculation bubble L_w / D . The staircase method gives very inaccurate results on the coarser meshes (no recirculation zone is observed on mesh M1), whereas the LS-STAG methods gives acceptable results for all meshes. As shown in Table 5, the results of both LS-STAG methods compare well with established results from the literature (which are typically in the range [1.50 – 1.54]) and, once again, the difference between the two variants is undistinguishable. From now on, we will only report computations performed with the original LS-STAG method.

Unsteady flows at $Re = 100, 200$ and 1000 have been computed on the M4 and M5 meshes. For breaking the symmetry of the flow and efficiently triggering the vortex shedding, we use as initial condition a discontinuous flow field equal to U_∞ in the upper half of the domain, and 0 in the lower half. The flow reaches an asymptotically periodic state at $t = 50D / U_\infty$, then we start computing the force coefficients at each time step until $t = 350D / U_\infty$. The Strouhal number St is computed as the first harmonic of the power spectrum of the lift coefficient, with a frequency resolution of $\pm 1.67 \times 10^{-3}$ since the length of the time signal is equal to 300 units. Tables 6 and 7 give salient results computed with the LS-STAG and staircase method. On the M4 mesh for $Re = 100$ and 200 and on the M5 mesh for $Re = 1000$, the LS-STAG method gives excellent agreement with the published results. It is also quite remarkable to observe that the staircase method gives marginally acceptable results, even for $Re = 1000$. This is certainly due to the fact that the staircase method inherits the conservation and stability properties of the LS-STAG method, and only the treatment of the immersed boundary differs.

4.3. Flow past a circular cylinder with forced oscillatory rotations

For assessing the validity of our treatment of non-homogeneous boundary conditions, we have compute the flow past a circular cylinder with forced rotary oscillations given by the angular velocity:

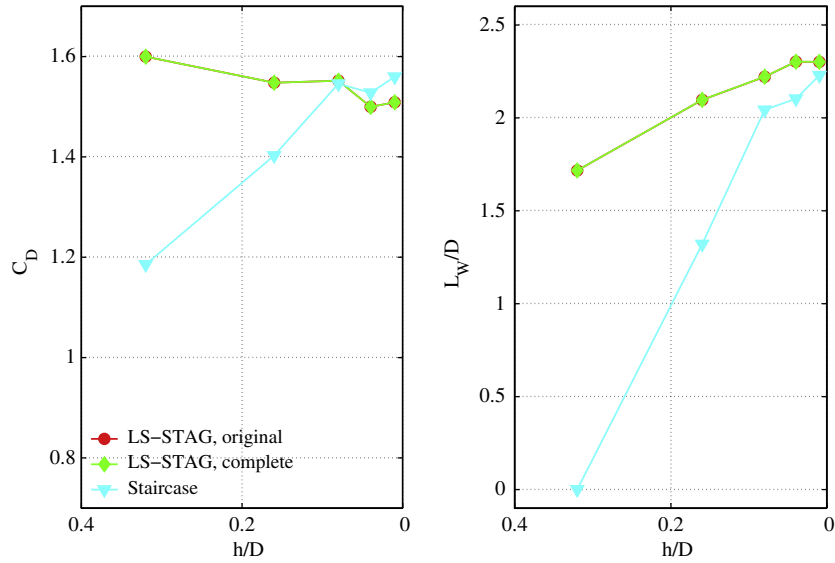


Fig. 12. Drag coefficient and recirculation bubble length for the steady flow at $Re = 40$ computed with the various meshes of Table 3.

Table 5

Results for the flow at $Re = 40$ obtained on the two finest meshes and comparison with established results from the literature.

	L_w/D	C_D
M4, original	2.300	1.500
M4, complete	2.300	1.500
M4, staircase	2.101	1.527
M5, original	2.299	1.508
M5, complete	2.299	1.508
M5, staircase	2.226	1.559
Experiments [67]	–	1.48–1.70
Bergmann et al. [5]	2.26	1.682
Henderson [27]	–	1.545
He et al. [26]	–	1.505
Linnick and Fasel [35]	2.23	1.54
Mittal et al. [40]	–	1.53

Table 6

Comparison of time averaged drag coefficient \bar{C}_D and corresponding oscillation amplitude $\pm\Delta C_D$ with established results from the literature.

Re	100	200	1000
M4	1.322 ± 0.009	1.332 ± 0.044	1.493 ± 0.227
M5	1.317 ± 0.009	1.327 ± 0.045	1.530 ± 0.229
M4, staircase	1.323 ± 0.009	1.346 ± 0.044	1.610 ± 0.198
Experiments [67]	1.21–1.41	–	–
Bergmann et al. [5]	1.410	1.390	1.505
Henderson [27]	1.350	1.341	1.509
He et al. [26]	1.353	1.356	1.519
Linnick and Fasel [35]	1.34 ± 0.009	1.34 ± 0.044	–
Mittal et al. [40]	1.35	–	1.45

$$\omega(t) = \omega_0 \sin\left(2\pi S_e t \frac{U_\infty}{D}\right), \quad (78)$$

where the two forcing parameters are the amplitude ω_0 of the angular velocity and the forcing Strouhal number S_{rme} . This forcing has been introduced by Tokumaru and Dimotakis [58], who observed experimentally for the flow at $Re = 15,000$ a drag reduction as high as 80% for certain values of these forcing parameters. In the computational studies of Refs. [26,5], these two parameters have been used as control parameters for drag minimisation in the 2D laminar regime. For the flow

Table 7
Comparison of Strouhal number St with established results from the literature.

Re	100	200	1000
M4	0.170	0.200	0.247
M5	0.170	0.200	0.241
M4, staircase	0.177	0.207	0.251
Experiments [67]	0.16–0.17	–	–
Bergmann et al. [5]	0.166	0.199	0.235
Henderson [27]	0.164	0.197	0.237
He et al. [26]	0.167	0.198	0.239

at $Re = 200$ and $Re = 1000$, the optimal control of the Navier–Stokes equations by He et al. [26] yielded a drag reduction of about 30% and 60%, respectively, compared to the unforced flow ($\omega_0 = 0, S_e = 0$). More recently, Bergmann et al. [5] used a less computationally demanding control algorithm, which employed a reduced-order model of the Navier–Stokes equations, and also observed a 30% drag reduction at $Re = 200$ for slightly differently forcing parameters ($(\omega_0 = 8.50, S_e = 0.74)$ instead of $(\omega_0 = 6.0, S_e = 0.74)$ found by He et al. [26]).

We have undertaken the computation of the forced flow at $Re = 200$ and $Re = 1000$ for these various sets of parameters with the LS-STAG and staircase methods. The computational parameters and grids are the same as in the previous Section. For $Re = 200$ first, Fig. 13 compares the time histories of the drag coefficient of the unforced, forced (at the optimal values of Ref. [26]) and basic flow, where the basic flow is the steady, symmetric but unstable flow which generates *a priori* the lowest drag force ($C_D^{\text{basic}} = 0.864$). As in [26,5], we observe that the forced flow observes a locking regime, where the natural shedding frequency is given by the forcing frequency, that greatly reduces the drag force on the cylinder. Table 8 summarizes the drag forces computed at various values of the forcing parameters. This table shows that the LS-STAG method predicts maximal drag reduction for $Re = 200$ at the optimal values of He et al. [26] and, in addition, we mention that an overall excellent agreement is observed with the computations of these authors, for both unforced (Table 6) and forced flows. For future reference, we report in Table 9 the peak value of the lift coefficient for the various flows we have computed. Finally, Fig. 14 displays the vortex shedding observed in the unforced, forced and basic flow at $Re = 1000$. The characteristic vortex shed-

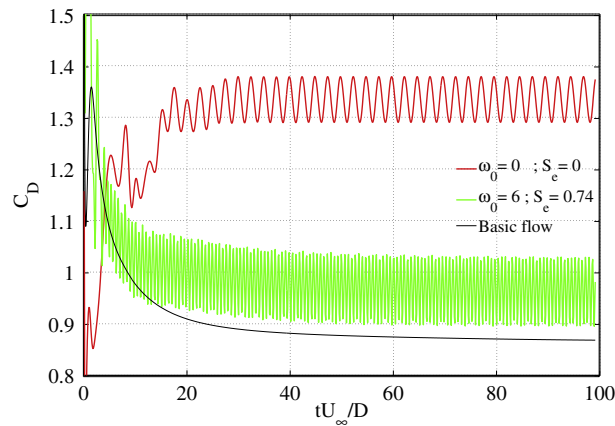


Fig. 13. Time evolution of the drag coefficient at $Re = 200$ in the unforced ($\omega_0 = 0, S_e = 0$) case, forced ($\omega_0 = 6.0, S_e = 0.74$) case, and for the steady unstable basic flow. These computations have been performed with the LS-STAG method on the M4 mesh.

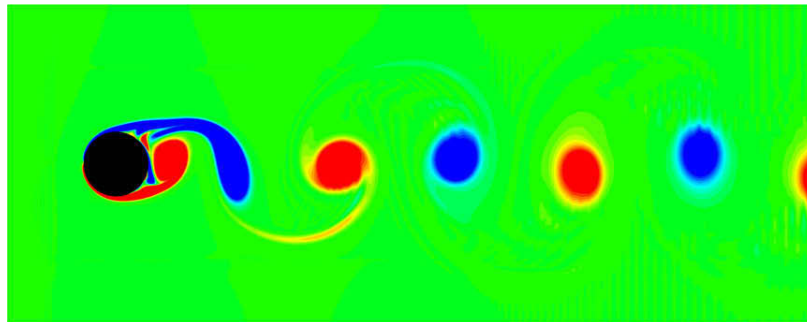
Table 8
Drag force $\bar{C}_D^{\text{forc}} \pm \Delta C_D^{\text{forc}}$ and relative mean drag reduction $(\bar{C}_D^{\text{forc}} - \bar{C}_D^{\text{unforc}}) / \bar{C}_D^{\text{unforc}}$ (in brackets) for the forced flows at $Re = 200$ and 1000. The corresponding drag coefficient of the unforced flow $\bar{C}_D^{\text{unforc}}$ has been taken from Table 6.

Re	200		1000
	$(\omega_0; S_e)$		$(5.5; 0.625)$
M4			
M5			
M4, staircase			
Bergmann et al. [5]			
He et al. [26]			

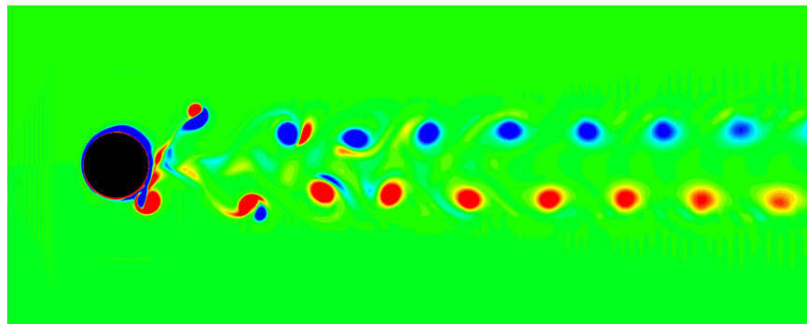
Table 9

Peak value of the lift coefficient C_L^{\max} for unforced and forced flows at various Reynolds number.

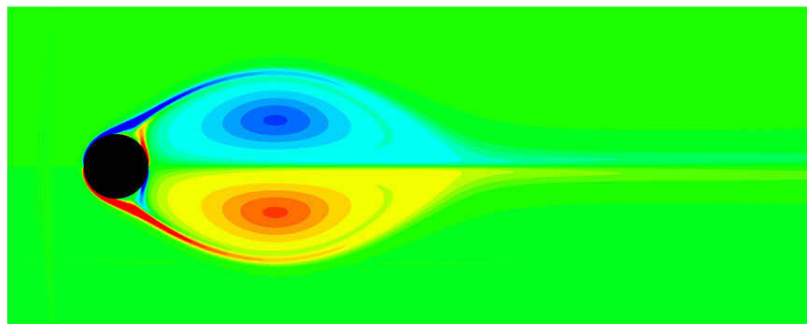
Re	100	200		1000		
	$(\omega_0; S_e)$	$(0; 0)$	$(6.0; 0.74)$	$(8.50; 0.74)$	$(0; 0)$	$(5.50; 0.625)$
M4	0.348	0.690	0.358	0.510	1.305	0.054
M5	0.349	0.710	0.337	0.491	1.482	0.103
M4, staircase	0.332	0.669	0.330	0.537	1.332	1.037
Norberg [44]	0.28–0.41	0.56–0.85	–	–	–	–
Linnick and Fasel [35]	0.333	0.70	–	–	–	–



(a) Unforced flow ($\omega_0 = 0, S_e = 0$).



(b) Forced flow ($\omega_0 = 5.5, S_e = 0.625$).



(c) Basic flow.

Fig. 14. Vorticity contours in the wake of the cylinder at $Re = 1000$, computed by the LS-STAG method on the M5 mesh.

ding of the unforced flow has been dramatically altered by the optimal oscillatory rotations, leading to a quasi-symmetric flow pattern which is much different than the unstable steady solution. This last figure shows also that vorticity production is confined to the near vicinity of the cylinder, and further illustrates the high fidelity treatment of the immersed boundary of

the LS-STAG method. The staircase method, on the other hand, gives inaccurate values of the force signals amplitude (see Tables 8 and 9), and its suitability for being the basic solver in an optimal control loop is questionable.

4.4. Application to flows with immersed moving boundaries

In order to show the versatility of the LS-STAG method, we report in this section a first attempt for computing flows with moving immersed boundaries. Indeed, the computation of such flows on fixed Cartesian grids may become a competitive alternative, in terms of CPU time and accuracy, to body-conformal methods that need frequent mesh and solution updates during the flow computation (see the reviews [11,57] and references therein). First, we present the main modifications of the LS-STAG method for handling moving boundaries. Then, we apply the method on a flow with prescribed boundary motion: the transverse oscillation of a cylinder in a free-stream [20,22].

4.4.1. Modifications of the LS-STAG method for immersed moving boundaries

The LS-STAG method for moving boundaries has common ground with the arbitrary Lagrangian–Eulerian (ALE) method widely used by finite-volume methods on body-conformal meshes [11]. The ALE method considers a computational domain that tracks the moving boundary, such that the grid follows the boundary motion in the Lagrangian fashion, while it is held fixed in a Eulerian manner sufficiently far from it. The ALE equations of the flow motion written in the computational domain are similar to the Navier–Stokes equations (1) and (2) except that the convective term now reads:

$$\int_{\Gamma(t)} ([\mathbf{v} - \mathbf{v}^g] \cdot \mathbf{n}) \mathbf{v} dS,$$

where \mathbf{v}^g is the computational domain (or grid) velocity, which is related to the arbitrary motion of the mesh nodes. In a series of papers, Farhat and co-workers [33,21,16,15] have shown that a ALE numerical scheme preserves the accuracy and stability of its fixed grid counterpart if the grid velocity and mesh update procedure are designed such that the so-called *geometric conservation law* (GCL):

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} dV = \int_{\Gamma(t)} \mathbf{v}^g \cdot \mathbf{n} dS, \quad (79)$$

is enforced at the discrete level. This equation is obtained by requiring that a uniform flow is solution to the ALE equations, and states that the change in volume of a cell during a time interval must be equal to the volume that has been swept by the cell boundary.

The enforcement of the GCL is a challenging task when the whole computational grid is deformed by the motion of its boundary. For the LS-STAG method in contrast, this condition is easier to fulfill because only the grid nodes on the solid part $\Gamma_{ij}^{ib}(t)$ of a cut-cell are moving. Thus, the ALE convective flux through the solid faces of control volume $\Omega_{ij}^u(t)$ is:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{ib,e}(t) \cup \Gamma_{i+1j}^{ib,w}(t)} ([\mathbf{v} - \mathbf{v}^g] \cdot \mathbf{n}_{ij}^{ib}) u dS, \quad (80)$$

while the expression on the other faces is unchanged since the normal motion of the fluid cell faces is zero. The discretization of (80) follows the line of the skew-symmetric discretization of Section 3.3 and Appendix A. For example, the equivalent of Eq. (42a) for the half solid face $\Gamma_{ij}^{ib,e}(t)$ of control volume $\Omega_{ij}^u(t)$ in Fig. 2 is:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{ib,e}(t)} ([\mathbf{v} - \mathbf{v}^g] \cdot \mathbf{n}_{ij}^{ib}) u dS \cong \frac{\bar{U}_{ij}^{ib} - \bar{U}_{ij}^g}{2} \left(\frac{1}{2} u_{ij} + \frac{1}{2} u(x_i, y_{ij}^{ib}) \right), \quad (81)$$

where \bar{U}_{ij}^g is the discrete grid flux for cut-cell $\Omega_{ij}(t)$, that will be defined such that a discrete GCL be enforced.

For our computations with moving boundaries, we have considered a first-order variant of the projection scheme (68) and (69), whose prediction step reads:

$$\frac{\mathcal{M}^{n+1} \tilde{U} - \mathcal{M}^n U^n}{\Delta t} + c[\bar{U}^n - \bar{U}^{g,n}] U^n - \nu \kappa^{n+1} \tilde{U} = 0, \quad (82)$$

where the coefficients of the scheme are now time-dependent and have to be computed with the level-set of the immersed boundary at the corresponding time level. The discrete grid flux $\bar{U}^{g,n}$ is then computed by requiring that the constant solution $U = 1$ be a solution to the discrete scheme (82), as it is already observed on fixed grids. In the cut-cells, this requirement leads to:

$$\frac{[\mathcal{M}_p^{x1}]^{n+1}(i,j) - [\mathcal{M}_p^{x1}]^n(i,j)}{\Delta t} - \frac{\bar{U}_{ij}^{g,n} + \bar{U}_{i+1j}^{g,n}}{2} = 0, \quad (83)$$

and, by using the definition (25) of the mass matrix, we completely determine the discrete grid flux for cut-cell Ω_{ij}^{n+1} as:

$$\bar{U}_{ij}^{g,n} = \frac{V_{ij}^{n+1} - V_{ij}^n}{\Delta t}. \tag{84}$$

This relation is the discrete version of the GCL (79) for the implicit Euler scheme (82); the projection step (69) does not alter this condition. At each time cycle, the discrete grid flux $\bar{U}_{ij}^{g,n}$ can be easily computed from the discrete GCL and incorporated to the convective discretization of Appendix A in the fashion of Eq. (81).

Another issue which is mostly relevant to discretizations on fixed Cartesian grid is the occurrence of “freshly cleared” cells, fluid cells which were inside the solid at the previous time step. In these cells, the use of conventional time-stepping is not possible, and several ad hoc procedure are proposed in [60,61,3,9] for approximating the flow variables. In the present paper, if the control volume $\Omega_{ij}^{u,n+1}$ is “freshly cleared” (i.e. $\theta_{ij}^{u,n} = 0$ and $\theta_{ij}^{u,n+1} > 0$), then we simply set the provisional velocity \bar{u}_{ij} equal to the boundary velocity instead of using the prediction step (82), while the projection step is unchanged. Note that this simple procedure does not guaranty the discrete conservation of momentum or kinetic energy. A more accurate procedure, left for future work, would be to use in the freshly cleared cells a fully implicit semi-Lagrangian time-stepping [50].

Nevertheless, we have checked the spatial accuracy of the present implementation of the method by designing a test problem with moving boundaries as done in Refs. [61,65]. We have considered a rigid circular cylinder of diameter D that oscillates horizontally in a square computational domain of dimension $3D \times 3D$ with no-slip walls, such that the prescribed motion of the cylinder center reads:

$$\dot{x}_c(t) = -U_{\max} \sin\left(2\pi \frac{U_{\max}}{D} t\right), \quad \dot{y}_c(t) = 0, \tag{85}$$

$$x_c(0) = \frac{D}{2\pi}, \quad y_c(0) = 0, \tag{86}$$

where U_{\max} is the maximal velocity. Simulations have been performed at $Re = U_{\max}D/\nu = 100$ on four uniform grids: 30×30 , 90×90 , 150×150 and 450×450 , the latter being used as the reference solution. A small time step of $\Delta t = 10^{-4}D/U_{\max}$ has been chosen in order to avoid temporal errors effect. The flow has been simulated for one oscillation period, and the L_∞ norm of the spatial error obtained at the end of the computations is shown in Fig. 15. This figure clearly shows that first-order accuracy is obtained for both component of the velocity. Thus, we observe only a slight decrease in accuracy compared to the case of stationary immersed boundaries, where superlinear convergence in the L_∞ norm was observed (see Fig. 8).

4.4.2. Application: transversely oscillating cylinder in a free-stream

To validate our method we computed the flow past a cylinder undergoing prescribed transverse oscillation in a free-stream. This flow has first been studied experimentally by Gu et al. [20]. Numerical computations have then been carried out by Lu and Dalton [37] and Guilmineau and Queutey [22] with a body-conformal method in the inertial frame of reference. Subsequently, this flow has become a popular benchmark for both IBM [65,31] and cut-cell methods [61,9].

The computational domain and boundary conditions are the same as for the stationary cylinder flow of Section 4.2. The flow parameters match the ones used in the above references. The transverse motion of the cylinder center is given by:

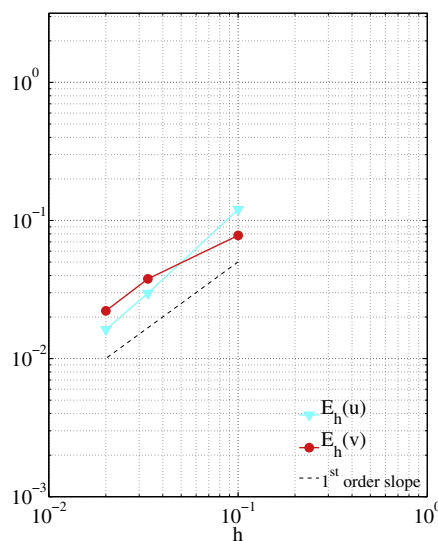


Fig. 15. L_∞ norm of the error for the horizontally oscillating cylinder test problem.

$$y_c(t) = A, \quad t < 10 \frac{D}{U_\infty}, \quad (87a)$$

$$y_c(t) = A \cos \left(2\pi S_e \left[t \frac{U_\infty}{D} - 10 \right] \right), \quad t \geq 10 \frac{D}{U_\infty}, \quad (87b)$$

with the oscillations amplitude $A = 0.2D$ and S_e is the exciting Strouhal number. We considered a series of computations on the M4 mesh (see Table 3) at $Re = 185$, for $A = 0.2D$ and $S_e/S_0 \in [0.8, 1.2]$ where S_0 is the natural frequency of the vortex shedding, which has been computed as $S_0 = 0.201$ with the ER1 time-stepping. The value of the time step is $\Delta t = 5 \times 10^{-3} D/U_\infty$.

When the immersed body is moving, the CFL number (77) has to be corrected with the grid velocity as done in Eq. (81) for the ALE convective fluxes:

$$CFL_{ij} = \left[(\bar{u}_{ij})^+ + (-\bar{u}_{i-1j})^+ + (\bar{v}_{ij})^+ + (-\bar{v}_{ij-1})^+ + (\bar{U}_{ij}^{ib} - \bar{U}_{ij}^g)^+ \right] \frac{\Delta t}{V_{ij}}. \quad (88)$$

In addition, we mention that the fluid velocities in the cut-cells take values close to the velocity of the immersed boundary. Hence, in order to avoid numerical instabilities caused by the motion of the immersed body, a CFL number based on the kinematics of the IB has to be constructed, for example [19]:

$$CFL_{ij}^{ib} = \frac{|u_{ij}^{ib}| \Delta t}{\Delta x_i} + \frac{|v_{ij}^{ib}| \Delta t}{\Delta y_j}. \quad (89)$$

The condition $\max_{ij} CFL_{ij}^{ib} < 1$ ensures that the body never traverses an entire computational cell within one time step. Since the motion of the immersed body is prescribed in the present work, this condition can be verified prior to the computations. We have verified that the kinematics CFL condition based on (89) is always much less restrictive than the fluid dynamics condition (88), and thus does not hamper the stability of the method: for example, for the case $S_e/S_0 = 1.2$ we observed that $\max_{ij} CFL_{ij}^{ib} \simeq 0.04$ while $\max_{ij} CFL_{ij} \simeq 0.3$.

Fig. 16 shows the time evolution of the force coefficients for increasing values of the forcing frequencies. In particular, we observe a frequency “lock on” at all values of the forcing frequencies, and the presence of a higher harmonic when $S_e/S_0 \geq 1$. These results agree very well with previous studies [37,22,65]. To give a more quantitative evaluation of this series of simulations, Fig. 17 shows that the mean force coefficients are in very good agreement with both body-conformal (in the non-inertial frame of the cylinder) [22] and IBM [65] computations. Finally, for the case $S_e/S_0 = 1.2$ that shows the most complex dynamics, Table 10 displays a grid refinement study for the computation of the force coefficients. In order to keep the time

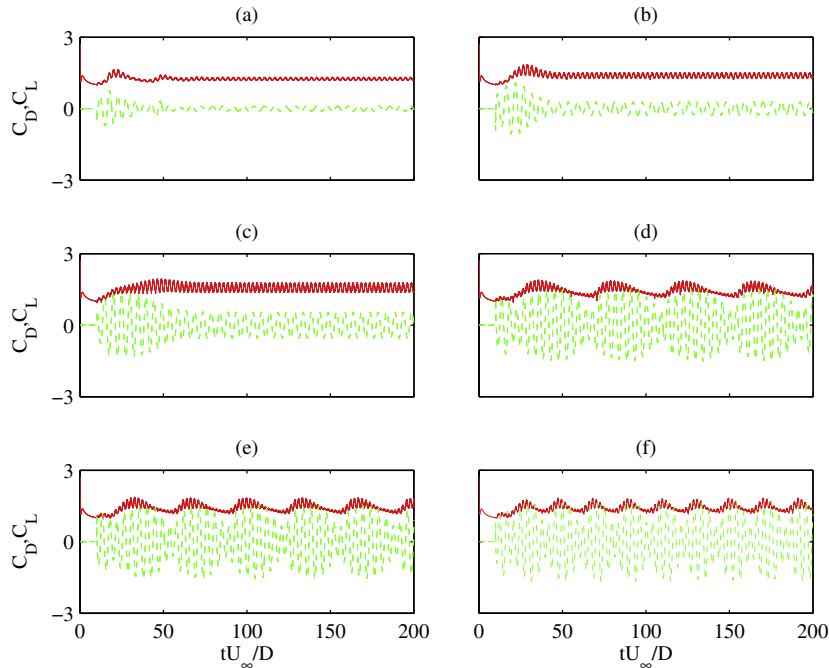


Fig. 16. Time evolution of the force coefficients ($-$ C_D ; $- -$ C_L) for the flow past an oscillating cylinder in a free-stream for S_e/S_0 equals to: (a) 0.8; (b) 0.9; (c) 1.0; (d) 1.1; (e) 1.12; (f) 1.2.

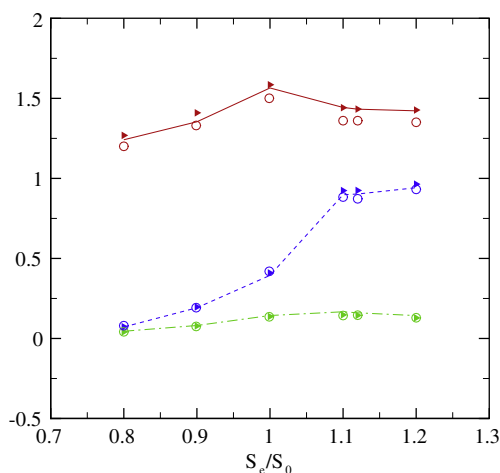


Fig. 17. Time averaged force coefficients for the flow past an oscillating cylinder in a free-stream: \bar{C}_D (solid line), C_D^{rms} (dash-dot line) and C_L^{rms} (dot line). The symbols 'filled right triangle' and 'open circle' represent data obtained by Yang and Balaras [65] and Guilmineau and Queutey [22], respectively.

Table 10

Time averaged force coefficients for the case $S_e/S_0 = 1.2$ obtained on the series of meshes described in Table 3.

	\bar{C}_D	C_D^{rms}	C_L^{rms}
M1	1.309	0.366	0.884
M2	1.202	0.101	0.754
M3	1.386	0.124	0.889
M4	1.422	0.142	0.941
M5	1.387	0.132	0.975
IBM, 800×640 cells, $h = 0.005D$ [65]	1.426	0.128	0.964
O-type curvilinear grid, 180×120 cells, $h = 0.001D$ [22]	1.35	0.129	0.931

discretization error (which is of first-order for moving boundaries problems) comparable for all the meshes, all simulations have been performed with a CFL number equal to 0.3. We observe that on the 2 finest meshes, the discrepancy of the results is inferior to 3% for the mean drag coefficient, and 4% for the root-mean-square lift coefficient. This level of grid sensitivity is comparable to the one observed in [22].

Finally, we have examined the quality of our computations of the local forces on the moving body's surface. In effect, the accuracy and smoothness of their computation is of great importance for the application of the LS-STAG method to fluid-structure interaction problems. Fig. 18 displays the comparison of the local pressure and vorticity distributions with the reference data of Guilmineau and Queutey [22] obtained on a body-fitted grid. As Yang and Balaras [65] observed with their IBM computations, it is the local shear that is the most sensitive to grid resolution, most notably in the vicinity of local extremas. These discrepancies however diminish with mesh refinement, giving a smooth and accurate distribution on the M5 mesh. We also mention the body-fitted grid of Ref. [22] has a local grid spacing normal to the boundary equal to $h = 0.001D$, which is 10 times smaller than the resolution of our finest mesh (M5, see Table 3).

4.5. Evaluation of the computational efficiency of the LS-STAG method

There are essentially two features that make immersed boundary methods potentially more attractive than traditional body fitted methods: the quick design of quality meshes for highly complex geometries [36] and the lower computational cost of the flow simulations. This last feature is well documented for simple geometries, for which Cartesian flow solvers takes only a fraction of the CPU time of the more versatile body fitted solvers [38]. In contrast, the CPU cost of IBM simulations with a Cartesian solver is not so well documented. The additional overhead for handling complex geometries depends greatly on the IBM treatment and the cleverness of the code implementation, and in some cases may take a substantial part of the solution procedure. For the LS-STAG method, we observed that this overhead is associated to the computation of the geometric parameters of the fluid cells when constructing the discrete systems, and to the additional stiffness of the systems caused by the presence of small cut-cells.

This part is devoted to evaluating the current performance of the LS-STAG code used for all the computations presented in this article, and compare them with a widely available commercial code: *FLUENT*. We have chosen a well established benchmark problem: the unsteady flow past a square cylinder at $Re = 100$. For this geometry, both codes are able to use the same

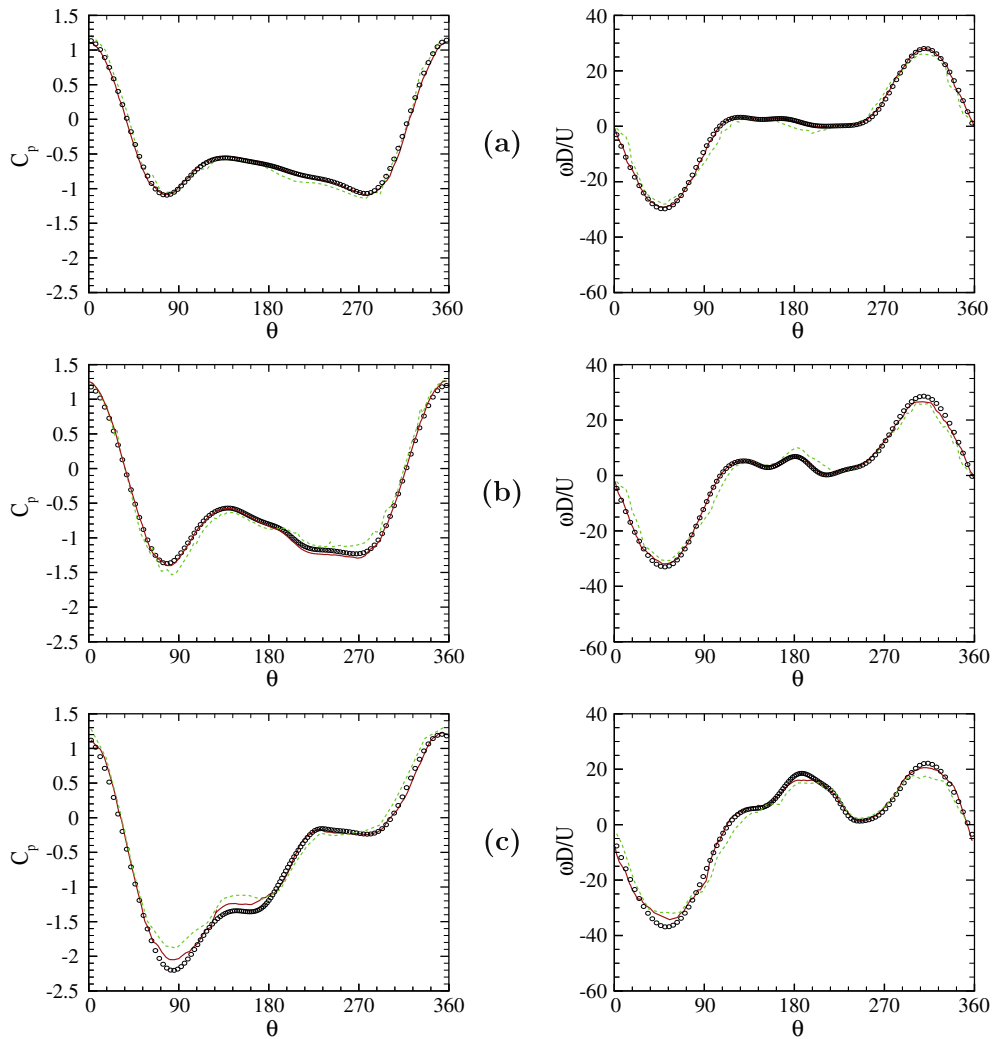


Fig. 18. Distribution of the pressure coefficient and vorticity on the cylinder's surface when it is located at its extreme upper position for S_e/S_0 equals to: (a) 0.8; (b) 1.0; (c) 1.2. The results have been obtained on two meshes: (---) M4 mesh; (—) M5 mesh. The symbols \circ represent reference data obtained on a body fitted grid by Guilmineau and Queutey [22].

computational parameters and boundary-fitted Cartesian mesh (note that in the LS-STAG code the fluid cells adjacent to the cylinder boundary are treated as cut-cells). The computational domain and boundary conditions are the same as the circular cylinder computations of Section 4.2, with $X_u = 8.5D$, $X_d = 20D$ and $D/A = 1/20$. The mesh has 390×170 rectangular cells and its grid refinement near the cylinder body is based on the recommendations of Sohankar et al. [54], in particular $h/D = 3.9 \times 10^{-3}$ near the body. The time step is $\Delta t = 5 \times 10^{-3} D/U_\infty$. The computations have been performed on a *Pentium IV* desktop with a 3 GHz processor and 1 GB of RAM, equipped with the *WINDOWS XP* operating system.

The LS-STAG code is written in *FORTRAN 90/95* and compiled with doubled precision digits with the *INTEL FORTRAN 9.1*. A relevant parameter of the computation is the residual tolerance for the linear systems, which is set at $\epsilon = 10^{-8}$. After the initial transients the linear systems of both the prediction and projection steps are solved in only one iteration.

The commercial code *FLUENT* is an unstructured finite-volume code which uses a collocated arrangement of the flow variables. The 6.0 version in 2D with single precision digits has been employed for the computation. We have used the recommended settings for unsteady laminar flows: second-order segregated *PISO* time advancement, *QUICK* scheme for convective discretization, and the *PRESTO!* method for pressure interpolation at cell faces. All the corresponding computational parameters are set at their default values, except the residual tolerances which are set at $\epsilon = 10^{-4}$ only. For this value, the iterative algorithm takes only one iteration per time step to converge in average, but we could not get a converged solution for a tolerance as low as the one used in the LS-STAG computation.

Table 11

Results for the square cylinder flow at $Re = 100$ and comparison with established results from the literature. The CPU time is measured for the time period $tD/U_\infty \in [0, 50]$.

	St	\bar{C}_D	C_L^{rms}	CPU time (min)
FLUENT, $\epsilon = 10^{-4}$	$0.145 \pm 2.5 \times 10^{-3}$	1.510	0.185	199
LS-STAG, $\epsilon = 10^{-6}$	$0.150 \pm 2.5 \times 10^{-3}$	1.497	0.196	48
Okajima [45]	0.141–0.145	–	–	–
Davis et al. [10]	0.154	1.55	–	–
Sohankar et al. [54]	0.144	1.44	0.141	–
Saha et al. [51]	0.159	1.51	–	–

Salient results of the simulations are presented in Table 11. Both codes give accurate results which show good agreement with the literature. On average, the FLUENT simulation required 1.19 CPU seconds per time step while the LS-STAG simulation took only 0.28 CPU seconds, which makes the latter more than four times faster. Even greater savings can be expected for 3D computations (note that in [38], the Cartesian code MGLET is 10 times faster than the curvilinear code DeFT for turbulent channel flow computations).

5. Concluding remarks and implementation issues

In this paper, we have developed and analyzed a new IB/cut-cell method for incompressible viscous flows. For building the LS-STAG discretization in 2D, the methodology we have followed can be roughly summarized as: enumerating the various types of cut-cells, and then discretizing the fluxes in each cut-cell such that the global conservation properties of the Navier–Stokes equations are satisfied at the discrete level.

If we adopt the terminology used for computational methods for multiphase flows (see e.g. Tezduyar [57]), the LS-STAG method can be viewed as an interface-capturing method for representing the immersed boundary, as opposed to most of the IB methods that uses markers for the immersed boundary and thus belongs to the class of interface-tracking methods. Although each class of methods has its own merits and shortcomings (e.g. for interface-capturing methods, the interface is represented within the resolution of the finite-volume mesh, while for interface-tracking methods a second mesh is needed for “tracking” the interface), the use of the level-function in the LS-STAG method provided an invaluable tool for handling the immersed boundary and computing the geometry parameters of the cut-cells.

As for any interface-tracking or -capturing method, a satisfying implementation of the method in 3D (in terms of computational efficiency, stability and accuracy) is an important issue. To fully evaluate the complexity that the method would take in 3D, one has to understand first the actual algorithmic implantation of the LS-STAG method in 2D, and in particular the construction of the discrete system for the u -momentum equation. Only the “cheap” discretization of the shear stresses will be discussed, since our computations with the “cheap” method showed an accuracy comparable to the “complete” discretization.

The discrete system for the u -momentum equation is typically built in a loop over the control volumes for u_{ij} , for which we determine first the type of the east and west half cut-cells. Depending on their types, the geometry parameters of the cut-cells (cell volume V_{ij} , cell-face fraction ratios θ_{ij}^u , velocity boundary data \mathbf{v}^b , integration areas $\Delta x_{ij}^{b,w}$ and $\Delta x_{ij}^{b,e}$) can then be computed. In the framework of a Fortran code, these computations are efficiently performed inside a case environment. We are then able to compute the various fluxes of the momentum equation: the easiest are the normal stresses and the pressure gradient since a unique formula (Eqs. (50) and (30), respectively) is valid for all cut- and fluid cells. The shear stresses are constructed with a boolean test on the cell-face ratios (see Eqs. (54) or (56) depending on the result of the test). In contrast the convective fluxes of Appendix A have to be constructed inside the case environment, since they are built independently for each type of half cut-cells such as any of their combination gives a skew-symmetric discretization.

For building the case environment, we had to enumerate the admissible types of cut-cells by counting the values that takes the level-set function ϕ_{ij} at the corners of a 2D cell: $2^4 = 16$, from which we have to subtract 2 non-admissible types that correspond to checkerboard oscillations of ϕ_{ij} . Out of these 14 types of admissible cut-cells, we have sorted out six basic types of cut-cells where distinct skew-symmetric discretizations of the convective fluxes had to be constructed: these six basics types are the ones shown in Fig. 3. In addition, we remind that we have shown in Fig. 6 the three basic types where distinct integration areas for the shear stress have been defined.

In 3D, the formulas for the mass matrix, pressure and normal stresses are direct extensions of the 2D case, and only the discretization of the convective and shear stress fluxes has to be constructed for each type of cut-cells. We observe that there is a maximum of 2^8 types of cut-cells, out of which 108 are admissible. For the convective fluxes, we have sorted out 16 distinct cases of cut-cells (instead of 6 in 2D) where the skew-symmetric discretization has to be constructed (see Fig. 19). For building the diffusive fluxes discretization, 7 distinct cases (instead of 3 in 2D) have to be examined. As a conclusion, the number of different cases of cut-cells to be considered is higher than in 2D, but not substantially higher, and the

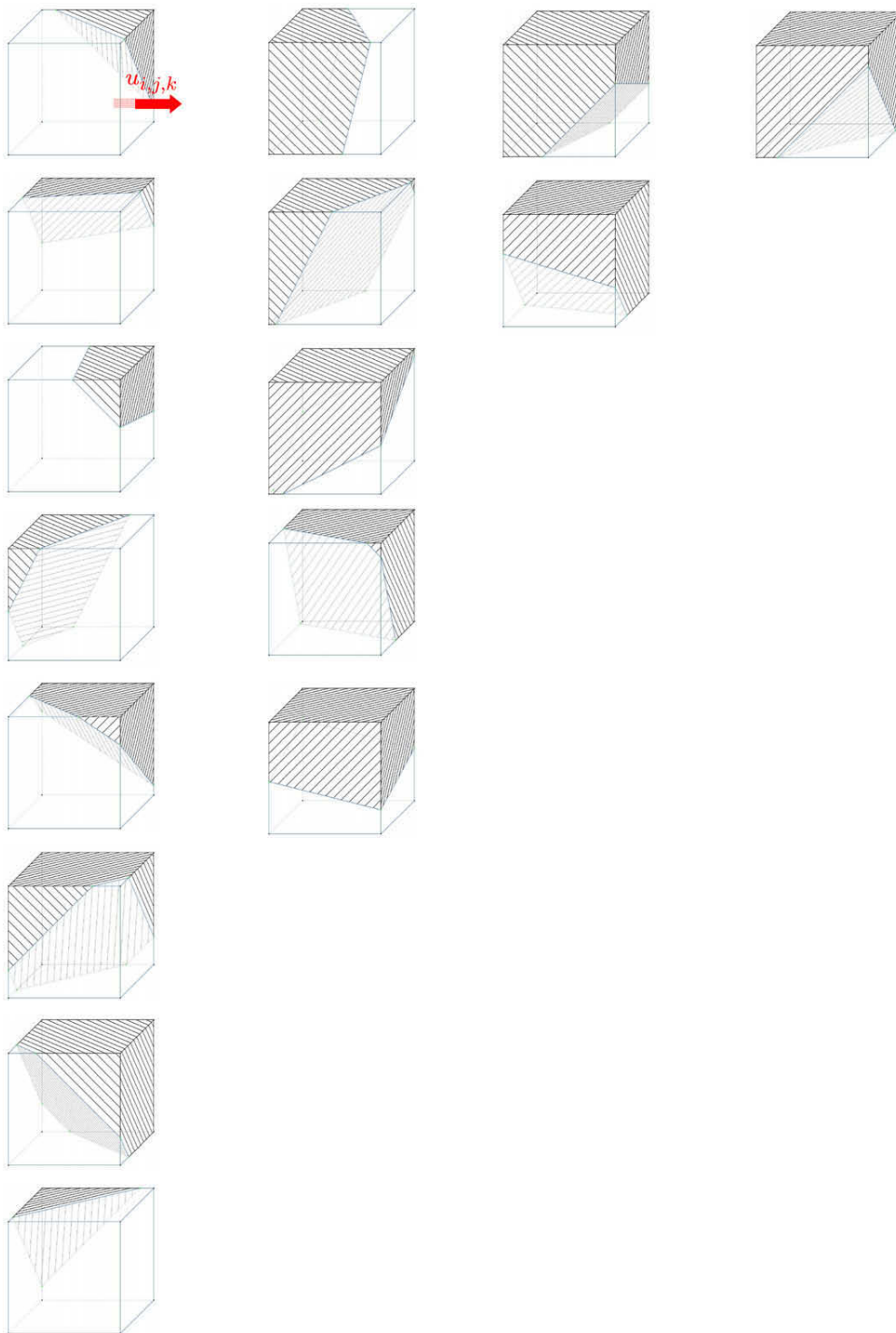


Fig. 19. Basic types of cut-cells for the skew-symmetric discretization of the convective terms for $u_{i,j,k}$. In the first row, we have grouped the cut-cells having 6 velocity unknowns (the maximum possible in 3D), then 5 unknowns, 4 unknowns, and finally 3 unknowns (the minimum).

methodology we have followed in this paper for building the LS-STAG method remains valid in 3D. The results will be reported in a future paper.

Appendix A. Complements on the discretization of the convective terms

In this appendix, we give the discretization of the convective fluxes $\int_{\Gamma_{ij}^u} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})u \, dS$ in the half control volumes of Fig. 3 such that the skew-symmetry condition (27) is verified for any combinations of these half control volumes.

In the case of the northwest pentagonal cell (a) of Fig. 3, the boundary of the half control volume for u_{ij} is decomposed as $\Gamma_{ij}^{u,w} \cup \Gamma_{ij}^{s,e} \cup \Gamma_{ij}^{n,e} \cup \Gamma_{ij}^{ib,e}$, and on each of these faces the skew-symmetric discretization is:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{u,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})u \, dS = -\frac{\bar{u}_{i-1j} + \bar{u}_{ij}}{2} u_w, \tag{A.1a}$$

$$\int_{\Gamma_{ij}^{s,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})u \, dS = -\frac{1}{2} \bar{v}_{ij-1} u_s, \tag{A.1b}$$

$$\int_{\Gamma_{ij}^{n,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})u \, dS = \frac{1}{2} \bar{v}_{ij+1} u_n, \tag{A.1c}$$

$$\int_{\Gamma_{ij}^{ib,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})u \, dS = \frac{1}{2} \bar{U}_{ij}^{ib} \left(\frac{1}{2} u_{ij} + \frac{1}{2} u(x_{ij}^{ib}, y_j) \right), \tag{A.1d}$$

with the following central interpolations:

$$u_w = \frac{u_{i-1j} + u_{ij}}{2}, \quad u_s = \frac{u_{ij-1} + u_{ij}}{2}, \quad u_n = \frac{u_{ij} + u_{ij+1}}{2}. \tag{A.2}$$

For the case of the west trapezoidal cell (b), the boundary is $\Gamma_{ij}^{u,w} \cup \Gamma_{ij}^{s,e} \cup \Gamma_{ij}^{n,e}$, where the discretization on the last two faces is given by (A.1b) and (A.1c), respectively, and:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{u,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})u \, dS = \frac{1}{2} (\bar{U}_{ij}^{ib} - \bar{u}_{ij}) \left(\frac{1}{2} u_{ij} + \frac{1}{2} u_{ij}^{ib} \right). \tag{A.3}$$

For the case of northeast pentagonal cell (c), the boundary is $\Gamma_{ij}^{u,w} \cup \Gamma_{ij}^{s,e} \cup \Gamma_{ij}^{ib,e}$, where the discretization on the first two faces is given by (A.1a) and (A.1b), respectively, and:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{ib,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})u \, dS = \frac{1}{2} (\bar{U}_{ij}^{ib} + \bar{v}_{ij}) \left(\frac{1}{2} u_{ij} + \frac{1}{2} u(x_i, y_{ij}^{ib}) \right). \tag{A.4}$$

For the case of north trapezoidal cell (d), the boundary is $\Gamma_{ij}^{u,w} \cup \Gamma_{ij}^{s,e} \cup \Gamma_{ij}^{ib,e}$, where the discretization on the first two faces is given by (A.1a) and (A.1b), respectively, and:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{ib,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})u \, dS = \frac{1}{2} \bar{U}_{ij}^{ib} \left(\frac{1}{2} u_{ij} + \frac{1}{2} u(x_i, y_{ij}^{ib}) \right). \tag{A.5}$$

For the case of northwest triangular cell (e) and northwest salient corner (f), the boundary is $\Gamma_{ij}^{u,w} \cup \Gamma_{ij}^{s,e} \cup \Gamma_{ij}^{ib,e}$, where the discretization on face $\Gamma_{ij}^{s,e}$ is given by (A.1b), and on the other two faces one has:

$$\int_{\Gamma_{ij}^{u,w}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})u \, dS = \frac{1}{2} (u_{ij}^{ib} [n_x \Delta S]_{ij}^{ib} - \bar{u}_{ij}) \left(\frac{1}{2} u_{ij} + \frac{1}{2} u_{ij}^{ib} \right), \tag{A.6a}$$

$$\int_{\Gamma_{ij}^{ib,e}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})u \, dS = \frac{1}{2} v_{ij}^{ib} [n_y \Delta S]_{ij}^{ib} \left(\frac{1}{2} u_{ij} + \frac{1}{2} u(x_i, y_{ij}^{ib}) \right). \tag{A.6b}$$

Appendix B. Complements on the shear stress force acting on the immersed boundary

In this appendix, we describe for each cut-cell of Fig. 6 the quadrature of the shear stress used for discretizing the hydrodynamic force (61) acting on the immersed boundary. The quadratures used on the cut-cells of Fig. 3 will be easily deduced from the expressions given below.

The quadratures used for the drag (61a) and lift (61b) forces acting on the northeast pentagonal cell (a) of Fig. 6 are, respectively:

$$\text{Quad}_{ij}^{ib} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \right) = [n_y \Delta S]_{ij}^{ib} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{ij}, \tag{B.1a}$$

$$\text{Quad}_{ij}^{ib} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \right) = [n_x \Delta S]_{ij}^{ib} \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{ij}, \tag{B.1b}$$

with $\partial u / \partial y|_{ij}$ given by the one-sided finite-difference formula (56) and analogously:

$$\frac{\partial v}{\partial x}\Big|_{ij} = \frac{v(x_{ij}^{ib}, y_j) - v_{ij}}{\frac{1}{2}\theta_{ij}^v \Delta x_i}. \quad (\text{B.2})$$

The projected areas $[n_x \Delta S]_{ij}^{ib}$ and $[n_y \Delta S]_{ij}^{ib}$ are defined by (17), and for cut-cell (a) their expression reduces to:

$$[n_x \Delta S]_{ij}^{ib} = (1 - \theta_{ij}^u) \Delta y_j, \quad [n_y \Delta S]_{ij}^{ib} = (1 - \theta_{ij}^v) \Delta x_i.$$

For the north trapezoidal cell (b), it is more natural to use a trapezoidal quadrature:

$$\text{Quad}_{ij}^{ib} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \right) = \Delta x_i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{i-1j} + \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{ij} \right), \quad (\text{B.3a})$$

$$\text{Quad}_{ij}^{ib} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \right) = (\theta_{i-1j}^u - \theta_{ij}^u) \Delta y_j \left(\frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial x}\Big|_{i-1j} + \frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial x}\Big|_{ij} \right). \quad (\text{B.3b})$$

For the case of northwest triangular cell (c), one has:

$$\text{Quad}_{ij}^{ib} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \right) = \theta_{ij-1}^v \Delta x_i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{i-1j-1} + \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{ij} \right), \quad (\text{B.4a})$$

$$\text{Quad}_{ij}^{ib} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \right) = -\theta_{ij}^u \Delta y_j \left(\frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial x}\Big|_{i-1j-1} + \frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial x}\Big|_{ij} \right). \quad (\text{B.4b})$$

References

- [1] A. Arakawa, Computational design for long-term numerical integration of the equations of fluid motion: two-dimensional incompressible flow, part I, *J. Comput. Phys.* 1 (1966) 119–143.
- [2] U.M. Ascher, L.R. Petzold, *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations*, SIAM, Philadelphia, 1998.
- [3] E. Balaras, Modeling complex boundaries using an external force field on fixed Cartesian grids in large-eddy simulations, *Comput. Fluid* 33 (2004) 375–404.
- [4] T.J. Barth, D.C. Jespersen, The design and application of upwind schemes on unstructured meshes, *AIAA Paper*, 89-0366, 1989.
- [5] M. Bergmann, L. Cordier, J.P. Brancher, Drag minimization of the cylinder wake by trust-region proper orthogonal decomposition, in: R. King (Ed.), *Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design*, 2007, pp. 309–324.
- [6] O. Botella, On a collocation B-spline method for the solution of the Navier–Stokes equations, *Comput. Fluid* 31 (2002) 397–420.
- [7] O. Botella, Y. Cheny, On the treatment of complex geometries in a Cartesian grid flow solver with the level set method, in: *European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 06*, 2006.
- [8] Y. Cheny, O. Botella, La méthode LS-STAG: une nouvelle approche de type frontière immergée/“Level-Set” pour le calcul d’écoulements visqueux incompressibles en géométries complexes, Grenoble, 27-31 Aout 2007, 18Fme CongrFs Frantais de MTcanique.
- [9] M.-H. Chung, Cartesian cut cell approach for simulating incompressible flows with rigid bodies of arbitrary shape, *Comput. Fluid* 35 (2006) 607–623.
- [10] R.W. Davis, E.F. Moore, L.P. Purtell, A numerical-experimental study of confined flow around rectangular cylinders, *Phys. Fluid* 27 (1) (1984) 46–59.
- [11] J. Donea, A. Huerta, J.-Ph. Ponthot, A. Rodríguez-Ferran, Arbitrary Lagrangian–Eulerian methods, in: E. Stein, R. de Borst, T.J.R. Hughes (Eds.), *Encyclopedia of Computational Mechanics. Fundamentals*, vol. 1, 2004.
- [12] M. Dröge, R. Verstappen, A new symmetry-preserving Cartesian-grid method for computing flow past arbitrarily shaped objects, *Int. J. Numer. Method Fluid* 47 (2005) 979–985.
- [13] R. Eymard, T. Gallouet, R. Herbin, Finite volume methods, in: P. Ciarlet, J.L. Lions (Eds.), *Handbook for Numerical Analysis*, 2000, pp. 715–1022.
- [14] E.A. Fadlun, R. Verzicco, P. Orlandi, J. Mohd-Yusof, Combined immersed-boundary finite-difference methods for three-dimensional complex flow simulations, *J. Comput. Phys.* 161 (2000) 35–60.
- [15] C. Farhat, P. Geuzaine, Design and analysis of robust ALE time-integrators for the solution of unsteady flow problems on moving grids, *Comput. Method Appl. Mech. Eng.* 193 (39–41) (2004) 4073–4095.
- [16] C. Farhat, P. Geuzaine, C. Grandmont, The discrete geometric conservation law and the nonlinear stability of ALE schemes for the solution of flow problems on moving grids, *J. Comput. Phys.* 174 (2) (2001) 669–694.
- [17] J.H. Ferziger, M. Perić, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer, Berlin, 1996.
- [18] F. Gibou, R.P. Fedkiw, Li-Tien Cheng, M. Kang, A second-order-accurate symmetric discretization of the Poisson equation on irregular domains, *J. Comput. Phys.* 176 (2002) 205–227.
- [19] A. Gilmanov, F. Sotiropoulos, A hybrid Cartesian/immersed boundary method for simulating flows with 3D, geometrically complex, moving bodies, *J. Comput. Phys.* 207 (2) (2005) 457–492.
- [20] W. Gu, C. Chyu, D. Rockwell, Timing of vortex formation from an oscillating cylinder, *Phys. Fluid* 6 (11) (1994) 3677–3682.
- [21] H. Guillard, C. Farhat, On the significance of the geometric conservation law for flow computations on moving meshes, *Comput. Method Appl. Mech. Eng.* 190 (11–12) (2000) 1467–1482.
- [22] E. Guilmineau, P. Queutey, A numerical simulation of vortex shedding from an oscillating circular cylinder, *J. Fluid Struct.* 16 (2002) 773–794.
- [23] E. Guyon, J.P. Hulin, L. Petit, *Physical Hydrodynamics*, Oxford University Press, Oxford, 2001.
- [24] F.H. Harlow, J.E. Welch, Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surfaces, *Phys. Fluid* 8 (1965) 2181–2189.
- [25] J.C. Hart, Sphere tracing: a geometric method for the antialiased ray tracing of implicit surfaces, *Visual Comput.* 12 (1996) 527–545.
- [26] J.W. He, R. Glowinski, R. Metcalfe, A. Nordlander, J. PTriaux, Active control and drag optimization for flow past a circular cylinder. Part 1: Oscillatory cylinder rotation, *J. Comput. Phys.* 163 (2000) 87–117.
- [27] R.D. Henderson, Nonlinear dynamics and pattern formation in turbulent wake transition, *J. Fluid Mech.* 352 (1997) 65–112.
- [28] G. Iaccarino, R. Verzicco, Immersed boundary technique for turbulent flow simulations, *Appl. Mech. Rev.* 56 (2003) 331–347.
- [29] A. Jameson, The construction of discretely conservative finite volume schemes that also globally conserve energy or entropy, *J. Sci. Comput.* 34 (2008) 152–187.
- [30] S. Kang, G. Iaccarino, P. Moin, Accurate and efficient immersed-boundary interpolations for viscous flows, in: *Center for Turbulence Research Briefs*, NASA Ames/Stanford University, 2004, pp. 31–43.
- [31] D. Kim, H. Choi, Immersed boundary method for flow around an arbitrarily moving body, *J. Comput. Phys.* 212 (2) (2006) 662–680.

- [32] M.P. Kirkpatrick, S.W. Armfield, J.H. Kent, A representation of curved boundaries for the solution of the Navier–Stokes equations on a staggered three-dimensional Cartesian grid, *J. Comput. Phys.* 184 (1) (2003) 1–36.
- [33] M. Lesoinne, C. Farhat, Geometric conservation laws for flow problems with moving boundaries and deformable meshes, and their impact on aeroelastic computations, *Comput. Method Appl. Mech. Eng.* 134 (1–2) (1996) 71–90.
- [34] D.K. Lilly, Introduction to “Computational design for long-term numerical integration of the equations of fluid motion: two-dimensional incompressible flow, part I”, *J. Comput. Phys.* 135 (1966) 101–102.
- [35] M.N. Linnick, H.F. Fasel, A high order immersed interface method for simulating unsteady incompressible flows on irregular domains, *J. Comput. Phys.* 204 (2005) 157–192.
- [36] R. Löhner, S. Appanaboyina, J.R. Cebal, Comparison of body-fitted, embedded and immersed solutions of low Reynolds-number 3-D incompressible flows, *Int. J. Numer. Method Fluid* 57 (1) (2008) 13–30.
- [37] X. Lu, C. Dalton, Calculation of the timing of vortex formation from an oscillating cylinder, *J. Fluid Struct.* 10 (5) (1996) 527–541.
- [38] M. Manhart, G.B. Deng, T.J. Hüttl, F. Tremblay, A. Segal, R. Friedrich, J. Piquet, P. Wesseling, The minimal turbulent flow unit as test case for three different computer codes, in: E.H. Hrischel (Ed.), *Numerical Flow Simulation I*, Vieweg, Braunschweig, 1998, pp. 365–381.
- [39] R. Mittal, G. Iaccarino, Immersed boundary methods, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 37 (2005) 239–261.
- [40] R. Mittal, H. Dong, M. Bozkurttas, F.M. Najjar, A. Vargas, A.V. Loebbecke, A versatile sharp interface immersed boundary method for incompressible flows with complex boundaries, *J. Comput. Phys.* 227 (2008) 4825–4852.
- [41] J. Mohd-Yusof, Combined immersed boundaries/B-splines methods for simulations of flows in complex geometries, in: *Center for Turbulence Research Briefs*, NASA Ames/Stanford University, 1997.
- [42] Y. Morinishi, T.S. Lund, O.V. Vasilyev, P. Moin, Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flow, *J. Comput. Phys.* 143 (1998) 90–124.
- [43] F. Muldoon, S. Acharya, A divergence-free interpolation scheme for the immersed boundary method, *Int. J. Numer. Method Fluid* 56 (2008) 1845–1884.
- [44] C. Norberg, Fluctuating lift on a circular cylinder: review and new measurements, *J. Fluid Struct.* 17 (2003) 57–96.
- [45] Atsushi Okajima, Strouhal numbers of rectangular cylinders, *J. Fluid Mech.* 123 (1982) 379–398.
- [46] S. Osher, R.P. Fedkiw, Level set methods: an overview and some recent results, *J. Comput. Phys.* 169 (2001) 463–502.
- [47] S. Osher, R.P. Fedkiw, *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*, Springer, New-York, 2003.
- [48] S. Osher, J.A. Sethian, Fronts propagating with curvature dependent speed: algorithms based on Hamilton–Jacobi formulations, *J. Comput. Phys.* 79 (1988) 12–49.
- [49] N. Peller, A. Le Duc, F. Tremblay, M. Manhart, High-order stable interpolations for immersed boundary methods, *Int. J. Numer. Method Fluid* 52 (2006) 1175–1193.
- [50] O. Pironneau, *Finite Element Method for Fluids*, Wiley, 1989.
- [51] A.K. Saha, K. Muralidhar, G. Biswas, Transition and chaos in two-dimensional flow past a square cylinder, *J. Eng. Mech.* 126 (5) (2000) 523–532.
- [52] P. Saramito, Numerical simulation of viscoelastic fluid flows using incompressible finite element method and a θ -method, *Math. Model. Numer. Anal.* 28 (1994) 1–35.
- [53] R. Scardovelli, S. Zaleski, Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 31 (1999) 567–603.
- [54] A. Sohankar, C. Norberg, L. Davidson, Low-Reynolds-number flow around a square cylinder at incidence: study of blockage, onset of vortex shedding and outlet boundary condition, *Int. J. Numer. Method Fluid* 26 (1) (1998) 39–56.
- [55] F. Sotiropoulos, S. Abdallah, The discrete continuity equation in primitive variable solutions of incompressible flow, *J. Comput. Phys.* 95 (1991) 212–227.
- [56] M. Sussman, S. Smereka, S. Osher, A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow, *J. Comput. Phys.* 114 (1994) 146–159.
- [57] T.E. Tezduyar, Finite element methods for fluid dynamics with moving boundaries and interfaces, in: E. Stein, R. de Borst, T.J.R. Hughes (Eds.), *Encyclopedia of Computational Mechanics. Fluids*, vol. 3, 2004.
- [58] P.T. Tokumaru, P.E. Dimotakis, Rotary oscillation control of a cylinder wake, *J. Fluid Mech.* 1224 (1991) 77–90.
- [59] P.G. Tucker, Z. Pan, A Cartesian cut cell method for incompressible viscous flow, *Appl. Math. Model.* 24 (2000) 591–606.
- [60] H.S. Udaykumar, R. Mittal, W. Shyy, Computation of solid–liquid phase fronts in the sharp interface limit on fixed grids, *J. Comput. Phys.* 153 (2) (1999) 535–574.
- [61] H.S. Udaykumar, R. Mittal, P. Rampungoon, A. Khanna, A sharp interface Cartesian grid method for simulating flows with complex moving boundaries, *J. Comput. Phys.* 174 (2001) 345–380.
- [62] J. van Kan, C. Vuik, P. Wesseling, Fast pressure calculation for 2D and 3D time dependent incompressible flow, *Numer. Linear Algebra Appl.* 7 (2000) 429–447.
- [63] R.W.C.P. Verstappen, A.E.P. Veldman, Symmetry-preserving discretization of turbulent flow, *J. Comput. Phys.* 187 (2003) 343–368.
- [64] M.C. Wendl, R.K. Agarwal, Mass conservation and the accuracy of non-staggered grid incompressible flow schemes, in: M.M. Hafez (Ed.), *Numerical Simulations of Incompressible Flows*, World Scientific, Singapore, 2003, pp. 277–287.
- [65] J. Yang, E. Balaras, An embedded-boundary formulation for large-eddy simulation of turbulent flows interacting with moving boundaries, *J. Comput. Phys.* 215 (2006) 12–40.
- [66] T. Ye, R. Mittal, H.S. Udaykumar, W. Shyy, An accurate Cartesian grid method for viscous incompressible flows with complex immersed boundaries, *J. Comput. Phys.* 156 (1999) 209–240.
- [67] M.M. Zdravkovich, *Flow Around Circular Cylinders, Fundamentals*, vol. 1, Oxford University Press, Oxford, 2003.

10.2 La méthode LS-STAG/2PT pour fluides viscoplastiques 2D

Theor. Comput. Fluid Dyn.
DOI 10.1007/s00162-015-0342-0

ORIGINAL ARTICLE

Olivier Botella · Mazigh Ait-Messaoud · Adrien Pertat ·
Yoann Cheny · Claire Rigal

The LS-STAG immersed boundary method for non-Newtonian flows in irregular geometries: flow of shear-thinning liquids between eccentric rotating cylinders

Received: 27 January 2014 / Accepted: 20 January 2015
© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2015

Abstract This paper presents the extension of a well-established immersed boundary/cut-cell method, the LS-STAG method (Cheny and Botella in *J Comput Phys* 229:1043–1076, 2010), to non-Newtonian flow computations in 2D irregular geometries. One of the distinguished features of our IB method is to use level-set techniques in the cut-cells near the irregular boundary, where accurate discretization is of paramount importance for stability and accuracy of the computations. For this purpose, we present here an accurate discretization of the velocity gradients and shear rate in the cut-cells that fits elegantly in the framework of the velocity–pressure–stress staggered arrangement and the special quadratures developed previously for viscoelastic flows. After assessing the accuracy of the discretization on a benchmark solution for power-law fluids, the LS-STAG code is applied to the flow of various shear-thinning xanthan solutions in a wide-gap, non-coaxial, Taylor–Couette reactor for which rheological characterization, experimental flow measurements (PIV) and FLUENT simulations have recently been performed in our group. Our numerical investigation will give new insight on the flow patterns (onset, size and position of the recirculation zone) and will firmly correlate them to global flow properties such as shear-thinning index, generalized Reynolds number and torque ratio at the cylinders.

Keywords Immersed boundary method · Cut-cell method · Incompressible flows · Non-Newtonian fluids · Eccentric Taylor–Couette flow

1 Introduction

This paper is devoted to non-Newtonian fluid flow computations in the framework of immersed boundary (IB)/cut-cell methods [21], which allow the computation of flows in irregular and/or moving geometries on fixed Cartesian meshes, reducing thus the bookkeeping of body-fitted methods. The flow solver is based on the LS-STAG method [8, 9], where the discretization in the cut-cells (i.e., the computational cells which are cut by the irregular boundary) is achieved by requiring that the global conservation properties of the Navier–Stokes equations are satisfied at the discrete level, resulting in a stable and accurate method and, thanks to the level-set representation of the IB boundary, at low computational costs.

In a recent work [6, 7], the LS-STAG method has been extended to viscoelastic flow computations, with the Oldroyd-B constitutive equation as a model. For this purpose, the LS-STAG discretization of the Newtonian stresses has been extended to the transport equation of the elastic stresses, such that the spurious node-to-node oscillations of the stress variables are prevented by using a velocity–pressure–stress ($v - p - \tau$)

Communicated by Tim Phillips.

O. Botella (✉) · M. Ait-Messaoud · A. Pertat · Y. Cheny · C. Rigal
LEMTA, CNRS, Université de Lorraine, 2, avenue de la Forêt de Haye, TSA 60604, 54518 Vandœuvre Cedex, France
Tel.: +33-383595675
E-mail: olivier.botella@univ-lorraine.fr

Published online: 17 February 2015

staggered arrangement. In the context of a finite-volume method, this staggered arrangement introduces distinct control volumes for the constitutive equation of the normal and shear stresses, which led us to develop special quadratures and interpolations for obtaining a globally conservative discretization of the constitutive equation up to the cut-cells.

The purpose of this paper is to incorporate the non-Newtonian (or pseudoplastic) behavior in the numerical model. The crucial part for taking into account shear-thinning or shear-thickening effects is the computation of the shear rate in the vicinity of the immersed boundary. We present in this paper an accurate discretization that fits elegantly in the framework of the $\mathbf{v} - p - \boldsymbol{\tau}$ arrangement and the special quadratures developed previously for viscoelastic flows. The accuracy of the LS-STAG method, and especially the computation of the stresses and non-Newtonian viscosity at the IB where the shear is maximal, is assessed on the exact solution for the Taylor–Couette flow of power-law fluids [18].

Then, the LS-STAG method is applied to the two-dimensional flow of shear-thinning fluids between eccentric rotating cylinders. This problem is a standard benchmark problem for validating numerical codes, since analytical solutions are available for the case of vanishing eccentricity [18], but it also has practical interest to journal bearing problems [22,29], where the lubricants are routinely treated with additives in order to enhance the performance of the process, and thus display shear-thinning and elastic properties [4,33].

Early theoretical work on the flow between eccentric cylinders started with the lubrication theory of Reynolds [23], which assumed small cylinders eccentricity and narrow gap so that inertia can be neglected. Numerical theoretical works have extended the limitations of the lubrication theory; a comprehensive summary can be found in [2] and [11]. Most notably, Wannier [32] obtained analytical solution of the Stokes equations without restriction of the geometry and showed that flow separates if the eccentricity is sufficiently large. Then, the effect of inertia has then been considered by the perturbation analysis of Kamal [19] and Ballal and Rivlin [1], who showed the dependence of the size and position of the recirculation zone on the Reynolds number.

Numerous studies have been devoted to the numerical computation of viscoelastic flows between eccentric rotating cylinders with the aim of studying the performance of lubricants within a journal bearing. An extensive review on the subject is given in [22]. Beris et al. [3] and Huang et al. [17] were the first to report numerical solutions of a Maxwell fluid up to moderate eccentricities. Robert and Walters [25] used the Maxwell model to study the influence of viscoelasticity on load-bearing capacity in the case of small eccentricities. The effects of temperature and pressure on the lubricant's performances have been investigated by Davies and Li [12] with the use of an extended White-Metzner model. This model has subsequently been employed by Gwynllwy and Phillips [16] for dynamically loaded journal bearings, where the axis of the inner cylinder moves in response to the load acting upon it.

One of the characteristic features of the flow between eccentric cylinders with inner cylinder rotation is the appearance of a recirculation zone in the wide-gap region when the cylinder eccentricity reaches a critical value. For creeping flows, the vortex is centered at the symmetry axis and, for Newtonian flows, moves monotonously downstream with respect to the rotation velocity due to inertia effects. This property, which has first been observed analytically in [1,14] for low Reynolds number, has subsequently been confirmed by various numerical studies [10,20,26–28]. For non-Newtonian fluids, a systematic investigation of the secondary flow has been recently performed by Rigal [24], who studied experimentally (PIV 2D) and numerically (FLUENT commercial software) the flow of Emakarox (Newtonian) and xanthan (shear-thinning) solutions at various eccentricities. This study showed a complex behavior of the recirculation zone with respect to the flow parameters, and in some case, the vortex was positioned upstream of the flow. In this paper, we extend this study by performing a parametric investigation of the morphology of recirculation zone with the LS-STAG code, in order to give new insight into its main characteristics (onset, size and position of the recirculation zone) and to firmly correlate them to global flow properties such as shear-thinning index, generalized Reynolds number and torque ratio at the cylinders.

The outline of the paper is the following. In the next section, we briefly present the LS-STAG cut-cell/immersed boundary method and its extension to the accurate calculation of stresses and non-Newtonian viscosity in the cut-cells. Section 3 is devoted to non-Newtonian computations in the experimental Taylor–Couette setup of Rigal [24]. First, an extensive convergence test will be performed for coaxial configuration and power-law fluids for which an analytical solution is available [18]. Further comparison with PIV and FLUENT results for xanthan flows in eccentric configuration will validate our numerical code. Finally, we will present the parametric study of the secondary flow in eccentric configuration conducted with the LS-STAG code.

2 The LS-STAG method for complex fluid flows in irregular geometries

2.1 Basics of the LS-STAG method

We consider the Navier–Stokes equations for an incompressible fluid:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (1a)$$

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

where ρ is the fluid density, $\boldsymbol{\tau}$ is the stress tensor, $\mathbf{v} = (u, v)$ is the velocity vector in 2D, and p is the pressure. In the case of a Newtonian fluid with constant dynamic viscosity η , the stress tensor is simply $\boldsymbol{\tau} = \eta \mathbf{D}$ where $\mathbf{D} = (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)$ the rate-of-strain tensor, so that the diffusive term in the RHS of momentum equation (1a) is simply $-\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v}$ thanks to the divergence theorem and the incompressibility condition (1b). In Refs. [8,9], we have presented the LS-STAG method for incompressible Newtonian fluids. The LS-STAG method is an immersed boundary (IB) method based on the well-known staggered grid finite-volume method for computing flows in the irregular fluid domain $\Omega^f = \Omega \setminus \Omega^{\text{ib}}$, where Ω^{ib} is a solid domain immersed in the rectangular computational domain Ω (see Fig. 1). As shown in this figure, the irregular IB boundary $\Gamma^{\text{ib}} = \partial \Omega^{\text{ib}}$ is implicitly represented by its signed distance function $\phi(x, y)$ (or level-set function, see, e.g., [15] and references therein), which is discretized at the vertices of the rectangular cells. The level-set function is an efficient tool for computing all relevant geometry parameters of the cut-cells (such as their volume, projected areas, boundary conditions,...), reducing thus the bookkeeping associated with the handling of complex geometries. Relevant geometry parameters for fluid cell $\Omega_{i,j}$ are its grid size $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, $\Delta y_j = y_j - y_{j-1}$, its volume $V_{i,j}$ (constructed in Ref. [9] from the values of $\phi_{i,j}$) and the “cell-face fraction ratio” $\theta_{i,j}^u \in [0, 1]$, which represents the fluid fraction of the face of a cut-cell. For example, the fluid fraction of the east face of $\Omega_{i,j}$ in Fig. 1 is defined by linear interpolation of the level-set as:

$$\theta_{i,j}^u \equiv \frac{y_{i,j}^{\text{ib}} - y_{j-1}}{\Delta y_j} = \frac{\phi_{i,j-1}}{\phi_{i,j-1} - \phi_{i,j}} \quad \text{since } \phi(x_i, y_{i,j}^{\text{ib}}) = 0. \quad (2)$$

Figure 2 shows the 4 types of fluid cells that are present in the LS-STAG mesh: a Cartesian fluid cell away from the IB boundary and three generic types of cut-cells (pentagon, trapezoidal and triangle). For each type of cells, the figure displays the half control volumes (CVs) that form the $\Omega_{i,j}^u$ CV for discretizing the momentum Eq. (1a). For building the LS-STAG method in Refs. [9], we have enforced the strict conservation of total

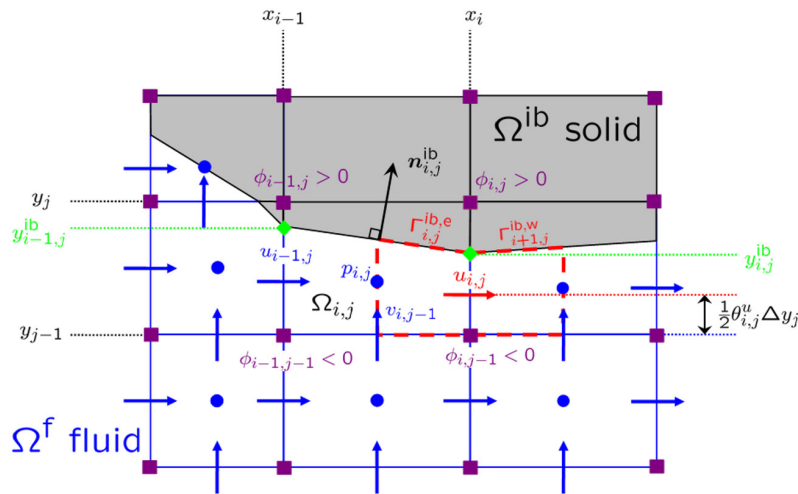


Fig. 1 Staggered arrangement of the variables near the trapezoidal cut-cell $\Omega_{i,j}$ on the LS-STAG mesh. The control volume $\Omega_{i,j}^u$ for $u_{i,j}$ (in red) is constructed from two halves of the cut-cells $\Omega_{i,j}$ and $\Omega_{i+1,j}$. Non-homogeneous boundary conditions for velocity are discretized at the vertices (green filled diamond) of the cut-cells (color figure online)

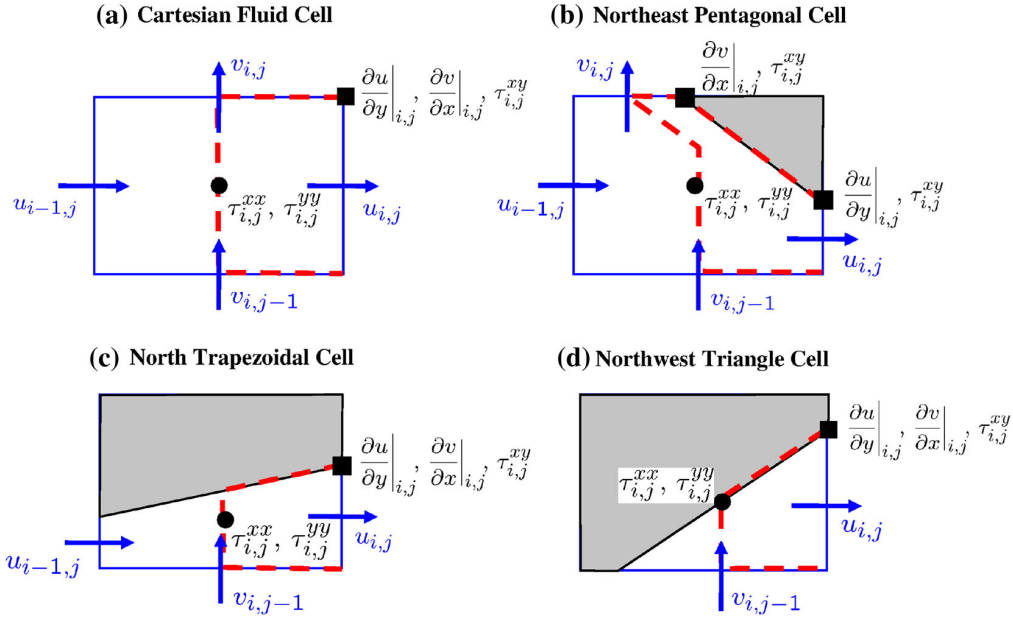


Fig. 2 Sketch of the four generic fluid cells $\Omega_{i,j}$ and location of the normal and shear stresses. Note that for the case of pentagonal cells, the shear stresses $\partial u/\partial y|_{i,j}$ and $\partial v/\partial x|_{i,j}$ are calculated at different vertices of the immersed boundary

mass $\int_{\Omega_f} \nabla \cdot \mathbf{v} \, dV$, total momentum $\mathbf{P}(t) = \rho \int_{\Omega_f} \mathbf{v} \, dV$ and total kinetic energy $E_c(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega_f} |\mathbf{v}|^2 \, dV$ (when viscosity η becomes negligible) in each of the half CVs independently, such that any combination of half CVs yields a consistent discretization with the aforementioned global conservation properties. This results to a discrete pressure gradient that is dual to the divergence matrix, a skew-symmetric operator for the convective terms and a viscous matrix that is positive definite. In the limiting case of meshes with Cartesian cells only (Fig. 2a), the LS-STAG method recovers the case of the well-known MAC discretization for uniform grids and the method of Verstappen and Veldman [30] for non-uniform grids. The LS-STAG method has been validated in [8,9] for canonical Newtonian flows in both fixed and moving geometries.

2.2 Extension of the LS-STAG method to non-Newtonian fluids

We consider now the application of the LS-STAG method to the case of non-Newtonian fluids, where the stress tensor takes the form:

$$\boldsymbol{\tau} = \eta(\dot{\gamma}) \mathbf{D}, \quad (3)$$

and the shear rate $\dot{\gamma}$ is related to the second invariant of the rate-of-strain tensor \mathbf{D} :

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2} \mathbf{D} : \mathbf{D}} = \sqrt{2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right]}. \quad (4)$$

In the following, we will consider two popular models for non-Newtonian viscosity which have similar mathematical form [5]. The simplest is the Ostwald de Waele (or power-law) model:

$$\eta(\dot{\gamma}) = k \dot{\gamma}^{n-1}, \quad (5)$$

where k and n are two empirical curve-fitting parameters, known as the consistency and power-law index, respectively. The consistency index k is a measure of the average viscosity of the fluid, and the power-law index n is a measure of the deviation of the fluid from Newtonian behavior: The case $n = 1$ corresponds to Newtonian fluid, for $n < 1$ the fluid is shear-thinning (or pseudoplastic), and for $n > 1$ the fluid is shear-thickening. The power-law model is widely used in engineering applications and has the property to give analytical solutions of the Navier–Stokes equations for canonical flows [5]. Its main shortcoming is the

The LS-STAG immersed boundary method for non-Newtonian flows

inability to predict the Newtonian plateau that reaches the viscosity at low (where $\eta = \eta_0$) and high (where $\eta = \eta_\infty$) shear rate. These shortcomings are overcome by the Cross model:

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_\infty + \frac{(\eta_0 - \eta_\infty)}{1 + (K\dot{\gamma})^m}, \quad (6)$$

where K and m are two fitting parameters. The Cross parameters can be related to the power-law parameters (5) by observing that $k = \eta_0 K^{-m}$ and $n = 1 - m$ in the limiting case where $\eta_0 \gg \eta_\infty$, $K\dot{\gamma} \gg 1$ and η_∞ small.

For the purpose of time-advancing the Navier–Stokes equations with an implicit–explicit fractional step method, the diffusive flux $\mathbf{F}^d = (F_u^d, F_v^d) = \int_\Omega \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \, dV$ of Eq. (1a) is split into an “implicit” and “explicit part”, such as its components in the x -direction read:

$$F_u^d = F_u^{d,\text{impl}} + F_u^{d,\text{expl}}, \quad (7a)$$

with

$$F_u^{d,\text{impl}} = \int_\Gamma \eta(\dot{\gamma}) \left[\frac{\partial u}{\partial x} \mathbf{e}_x + \frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{e}_y \right] \cdot \mathbf{dS}, \quad (7b)$$

$$F_u^{d,\text{expl}} = \int_\Gamma \eta(\dot{\gamma}) \left[\frac{\partial u}{\partial x} \mathbf{e}_x + \frac{\partial v}{\partial x} \mathbf{e}_y \right] \cdot \mathbf{dS}. \quad (7c)$$

where Γ represents the faces of a CV. With such a decomposition, the computation of the provisional velocities u and v in a fractional step scheme can be totally decoupled. The discretization of these diffusive fluxes follows the lines of the staggered discretization introduced in Ref. [9]: In a Cartesian fluid cell (Fig. 2a), the normal stresses are computed at the center of the cell $\Omega_{i,j}$ and the shear stress $\tau_{i,j}^{xy}$ at its upper right corner. The generalization of this staggering to the cut-cells leads to the positioning shown in Fig. 2b–d, which is also employed for the viscoelastic computations of [6,7]. For non-Newtonian flows, the computation of the “explicit” fluxes and shear rate in the cut-cells leads to terms that are absent from the Newtonian discretization and for which we have to provide an adequate discretization.

The discretization of the diffusive fluxes is best described in the case of the CV for $u_{i,j}$ represented in Fig 3. In this CV, the implicit flux (7b) is discretized as:

$$F_u^{d,\text{impl}} \cong \left[\eta(\dot{\gamma}|_e) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} - \eta(\dot{\gamma}|_w) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i-1,j} \right] \theta_{i,j}^u \Delta y_j + \eta(\dot{\gamma}|_n) \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} \Delta x^{\text{ib},n} - \eta(\dot{\gamma}|_s) \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j-1} \frac{1}{2} (\Delta x_i + \Delta x_{i+1}), \quad (8)$$

where we have used the notations of Fig. 2 for the normal and shear stresses. The finite difference-like quotient for the normal stress is [9]:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} \cong \frac{\theta_{i,j}^u u_{i,j} - \theta_{i-1,j}^u u_{i-1,j} + (\theta_{i-1,j}^u - \theta_{i,j}^u) u_{i,j}^{\text{ib}}}{V_{i,j} / \Delta y_j}. \quad (9)$$

This formula has been obtained thanks to the discretization of the incompressibility condition (1b) and the requirement that the divergence theorem be verified on the LS-STAG mesh; by construction, (9) is valid for any computational cell and includes the non-homogeneous boundary condition $u_{i,j}^{\text{ib}}$ at the IB boundary. The discretization of the shear stress is similar to the ghost fluid method for elliptic equations [15], such as the quotient at location s of Fig. 3 is simply:

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j-1} \cong \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\frac{1}{2} \theta_{i,j}^u \Delta y_j + \frac{1}{2} \theta_{i,j-1}^u \Delta y_{j-1}}, \quad (10a)$$

with $\theta_{i,j-1}^u = 1$ in the special case of Fig. 3, while at location n of the immersed boundary the following one-sided differential quotient is employed:

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} \cong \frac{u(x_i, y_{i,j}^{\text{ib}}) - u_{i,j}}{\frac{1}{2} \theta_{i,j}^u \Delta y_j}. \quad (10b)$$

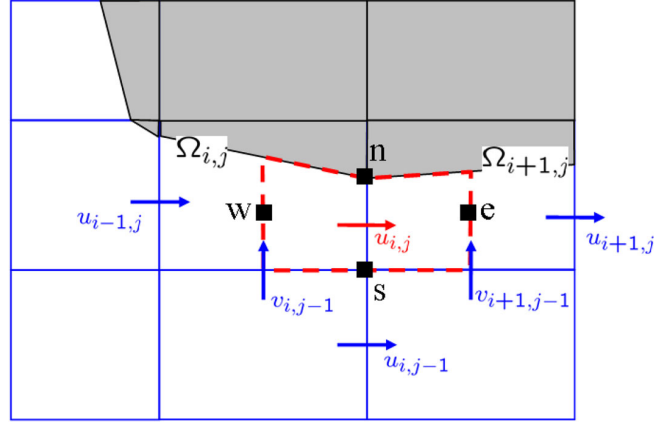


Fig. 3 Relevant notations used for the discretization of non-Newtonian flow equations near the IB boundary. The shear rate is discretized at the center of the faces of $\Omega_{i,j}^u$, denoted with compass notations

We now turn to the “explicit” flux (7c) which is discretized as:

$$F_u^{\text{d,expl}} \cong \left[\eta(\dot{\gamma}|_e) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} - \eta(\dot{\gamma}|_w) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i-1,j} \right] \theta_{i,j}^u \Delta y_j + \eta(\dot{\gamma}|_n) \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_n \Delta x^{\text{ib},n} - \eta(\dot{\gamma}|_s) \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j-1} \frac{1}{2} (\Delta x_i + \Delta x_{i+1}). \quad (11)$$

Similar to the discretization of the “implicit” flux, the normal stresses are approximated by (9) and the shear stress at location s is analogous to (10a):

$$\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j-1} \cong \frac{v_{i+1,j-1} - v_{i,j-1}}{\frac{1}{2} \theta_{i,j-1}^v \Delta x_i + \frac{1}{2} \theta_{i+1,j-1}^v \Delta x_{i+1}}. \quad (12)$$

In contrast, the shear stress term $\partial v / \partial x|_n$ at the IB boundary was absent from the Newtonian discretization, and since the directional derivative is not normal to the immersed boundary, there is no straightforward one-sided formula as in (10b). To approximate this term, we introduce a discretization of $\partial v / \partial x|_n$, which depends on the type of the cut-cells $\Omega_{i,j}$ and $\Omega_{i+1,j}$ of which n is a vertex. The discretization is summarized in the case of Fig. 2 where $\Omega_{i,j+1}$ is a trapezoidal cell and $\Omega_{i,j}$ is one of the three generic cut-cells of Fig. 3. In the case where $\Omega_{i,j}$ is a pentagonal cell (Fig. 2b), the discretization is:

$$\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_n \cong \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{v(x_{i,j}^{\text{ib}}, y_j) - v_{i,j}}{\frac{1}{2} \theta_{i,j}^v \Delta x_i}, \quad (13)$$

since the shear stress is assumed to have equal values at both IB vertices for pentagonal cut-cells. In the case where $\Omega_{i,j}$ is a trapezoidal cell (Fig. 2c), we simply assume that $\partial v / \partial x|_n = 0$ as it would be the case if the IB boundaries of $\Omega_{i,j}$ and $\Omega_{i+1,j}$ were horizontal. The same assumption $\partial v / \partial x|_n = 0$ is also made for the case of a triangular cell (Fig. 2d).

The discretization of the shear rate (4) uses the same differential quotients, but since the normal and shear stresses are located at different points, one needs to use the interpolation rules developed for the viscoelastic computations. For example, the shear rate at the immersed boundary location n of Fig. 3 is:

$$\dot{\gamma}|_n \cong \sqrt{2 \left[\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} \right]^2 + \left[\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} \right]^2 + 2 \left[\frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j} \right]^2}. \quad (14)$$

In this equation, the shear stresses are straightforwardly discretized by the procedure described above, but the normal stresses need to be interpolated by using the following volume-weighted interpolation rule denoted (\cdot) , which is defined in [6, 7] by:

The LS-STAG immersed boundary method for non-Newtonian flows

$$\overline{\frac{\partial u}{\partial x}} \Big|_{i,j} = \left[\alpha_{i,j} V_{i,j} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} + \alpha_{i+1,j} V_{i+1,j} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1,j} + \alpha_{i+1,j+1} V_{i+1,j+1} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1,j+1} + \alpha_{i,j+1} V_{i,j+1} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j+1} \right] / \tilde{V}_{i,j}, \quad (15)$$

where the volume $\tilde{V}_{i,j}$, which represents the area of the staggered CV for the elastic shear stresses, is constructed from the volume of the computational cells as:

$$\tilde{V}_{i,j} = \alpha_{i,j} V_{i,j} + \alpha_{i+1,j} V_{i+1,j} + \alpha_{i,j+1} V_{i,j+1} + \alpha_{i+1,j+1} V_{i+1,j+1}, \quad (16a)$$

and the coefficients $\alpha_{i,j}$ depend on the type of computational cells:

$$\alpha_{i,j} = \begin{cases} 0 & \text{if } \Omega_{i,j} \text{ is a solid cell,} \\ 1/3 & \text{if } \Omega_{i,j} \text{ is a triangular cell,} \\ 1/4 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (16b)$$

The time advancement of the Navier–Stokes equations is based on an IMEX fractional step method of first-order accuracy in time only, since we are only interested in steady solutions. The diffusive flux ($F_u^{\text{d,impl}}, F_v^{\text{d,impl}}$) is discretized with the backward Euler method, while the convective terms and diffusive flux ($F_u^{\text{d,expl}}, F_v^{\text{d,expl}}$) are treated with forward Euler. The shear rate at time t^{n+1} is extrapolated from its value at the previous time step. This results in a fractional step method where the computation of the provisional velocities \tilde{u}^{n+1} and \tilde{v}^{n+1} are fully decoupled. All steady solutions reported in the next section are obtained with a CFL number between 0.1 and 0.5, and we did not observe severe time step restriction due to the explicit treatment of diffusive term ($F_u^{\text{d,expl}}, F_v^{\text{d,expl}}$).

3 Numerical simulation of non-Newtonian flows between eccentric rotating cylinders

Following Rigal [24], the flow domain [sketched in Fig. 4 (left)] is the annular region between two eccentric cylinders Γ_i and Γ_o of radius ratio $\bar{R} = R_i/R_o = 1/2$, where the inner cylinder Γ_i is rotating in the clockwise sense with angular velocity Ω . The cylinders' eccentricity is defined as $\delta = OO'/R_i$, and $e_{\text{max}} = (1 + \delta)R_i$ is the widest gap between the cylinders. The concentric case $\delta = 0$ corresponds to the well-known Taylor–Couette flow. Various fluids have been considered in [24]: Emkarox (Newtonian with dynamic viscosity $\eta = 1.62$ Pa s) and xanthan for various aqueous solutions (shear-thinning and viscoelastic). The shear-thinning behavior of xanthan has been fitted with the Cross model (6), whose parameters are given in Table 1. The Reynolds number is defined as:

$$Re = \frac{\rho \bar{V} \bar{L}}{\bar{\eta}} \quad (17)$$

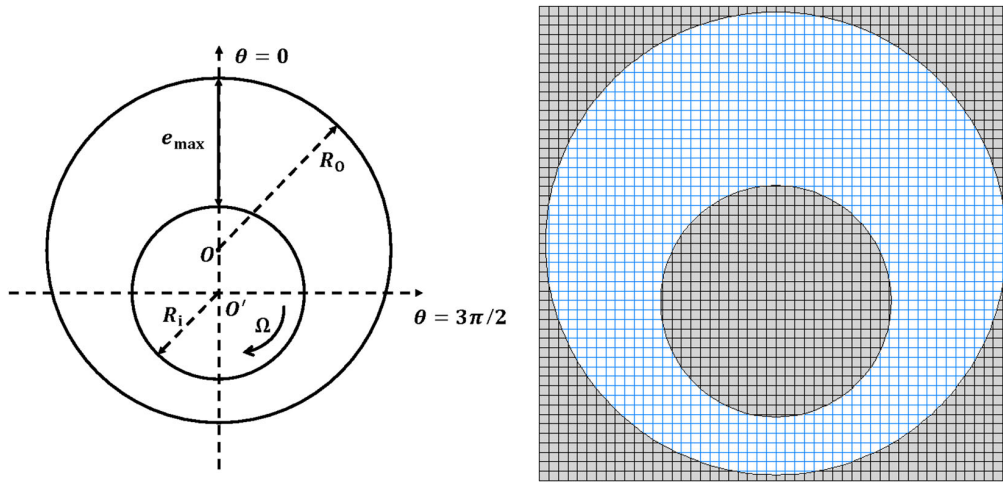


Fig. 4 At left sketch of the geometry of the flow between eccentric cylinders; the inner and outer cylinders have center at O' and O , respectively, with radius $R_i = 20$ mm and $R_o = 40$ mm. At right LS-STAG mesh of $N = 50$ cells in each direction

Table 1 Parameters of the Cross model (6) for the fitting of the viscosity–shear rate curve of various aqueous xanthan solutions (% in weight)

%w/w	η_∞ (Pa s)	η_0 (Pa s)	K (s)	m (–)
0.10	0.00214	0.524	2.12	0.656
0.20	0.00273	2.26	4.55	0.701
0.30	0.00405	10.7	16.4	0.754
0.40	0.00458	30.1	44.2	0.765

where the characteristic length and velocity of the flow are $\bar{L} = e_{\max}$ and $\bar{V} = R_i \Omega$. For non-Newtonian fluids, the characteristic viscosity $\bar{\eta}$ is usually taken as the value of the viscosity at the inner cylinder, where it is minimal [24]. We did not use this definition in this paper because it does not give a proper scaling of the results on xanthan flows presented next. Instead, we have used the value given by the Cross model (6) evaluated at the characteristic shear stress $\bar{\gamma} = R_i \Omega / e_{\max}$. For the angular velocities considered ($\Omega = 1 - 20 \text{ rad s}^{-1}$), all flow computations are in the range $Re \in [0, 120]$. Furthermore, Rigal [24] checked that the Taylor number is always below its critical value, except for the xanthan solution at 0.10% and angular velocity $\Omega = 20 \text{ rad s}^{-1}$. The two-dimensionality of these flows has been also confirmed experimentally. Thus, we will not report computation of xanthan 0.10% at $\Omega = 20 \text{ rad s}^{-1}$ with the LS-STAG method. The level of elasticity of the xanthan flows has been evaluated as low (with Weissenberg number between 0.078 and 2.3) so that viscoelastic effects are neglected from the numerical modelling.

For all the eccentricities δ we considered, the computational meshes consist in a square domain centered on the outer cylinder, with N uniform cells of size h in each direction [see Fig. 4 (right)]. The steady state is considered reached when the normalized time derivative of the velocities is below the threshold $\epsilon = 10^{-8}$; with this tolerance, we have checked that all flow features (velocity profiles, recirculation zone, forces and moments at IB boundaries) are fully converged.

3.1 Accuracy study of the LS-STAG method

First, the spatial accuracy for non-Newtonian computations is assessed on the test case of Taylor–Couette flow ($\delta = 0$) already considered in Ref. [9] for Newtonian flows. Non-Newtonian computations necessitate additional calculation of velocity gradients in the diffusive fluxes, which are absent from Newtonian computations, as discussed in Sect. 2.2. It is thus worthwhile to assess whether these additional computations, in the cut-cells in particular, degrade the global accuracy of the LS-STAG method observed in Ref. [9]. In addition, we will validate the calculation of the viscous forces at immersed boundaries (more precisely, the moment of viscous forces and the skin friction), which will be useful tools for the flow study presented in the subsequent sections.

We consider here that the non-Newtonian viscosity is given by the power-law model (5), for which the analytical solution reads in polar coordinates [18]:

$$v_r^{\text{ex}} = 0, \quad v_\theta^{\text{ex}}(r) = A (r^{-2/n} - R_o^{-2/n}) r, \quad \dot{\gamma}^{\text{ex}}(r) = -\frac{2A}{n} r^{-2/n}, \quad (18a)$$

where the coefficient A is:

$$A = \frac{\Omega}{R_i^{-2/n} - R_o^{-2/n}}. \quad (18b)$$

The geometry and flow parameters of the test case are set as:

$$R_i = 1 \text{ m}, \quad R_o = 4 \text{ m}, \quad \Omega = 1 \text{ rad s}^{-1}, \quad \rho = 1 \text{ kg m}^{-3}, \quad k = 0.26 \text{ Pa s}^n,$$

so that $\bar{R} = 1/4$ and the Taylor number is equal to 1,000 for the Newtonian computations ($n = 1$) as in [9]. Figure 5 compares the streamwise velocity error in the maximum norm:

$$E_h(u) = \max_{\text{CVs } \Omega_{i,j}^u} |u_{i,j} - u^{\text{ex}}(x_i, y_j + \frac{1}{2}\theta_{i,j}^u \Delta y_j)|, \quad (19)$$

obtained for $n = 1/2$ for the LS-STAG method and the staircase discretization discussed in [9]; for reference, the LS-STAG results obtained for the Newtonian case ($n = 1$) are also included. As in [9], the LS-STAG

The LS-STAG immersed boundary method for non-Newtonian flows

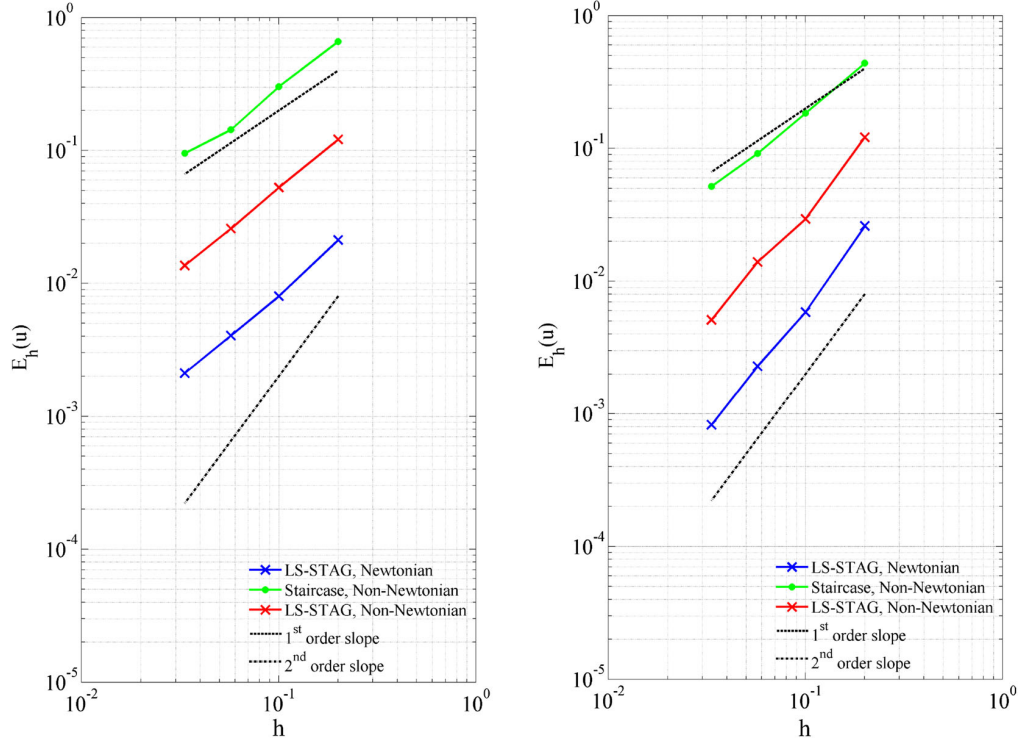


Fig. 5 L_∞ norm of the error for the streamwise velocity versus grid size $h = \frac{10R_1}{N}$ for the Taylor–Couette flow. At *left* on 90 % of the fluid domain, at *right* on the whole fluid domain. Meshes similar to [9] are used, with $N = 50, 100, 175$ and 300 cells in both directions

method shows a much better accuracy than the crude first-order staircase method: Second-order accuracy is obtained on computational cells away from the irregular boundary and superlinear convergence in the vicinity of the irregular boundaries (the measured orders are 1.4 for $n = 1$ and 1.2 for $n = 1/2$). We also observe that the magnitude of the errors is slightly higher for the non-Newtonian case, due to additional errors introduced by the computation of velocity gradients.

The second part of the accuracy tests concerns the computation of global quantities at the immersed boundary, such as the moment at point O of the viscous forces acting on the inner cylinder (denoted $M_{i,O}$), and the skin friction at the outer cylinder. Both quantities are computed at immersed boundaries with the discretization procedure introduced in Ref. [9] for the drag and lift forces. Figure 6 shows the normalized error on $M_{i,O}$ for the non-Newtonian Taylor–Couette flow with $n = 1/2$, for which the exact solution (18) gives:

$$M_{i,O}^{\text{ex}} = 2\pi k R_1^2 (\dot{\gamma}^{\text{ex}}(R_1))^n.$$

This figure shows that the staircase method fails to give a converged result due to the crude representation of the irregular boundary when the mesh is refined. In contrast, the LS-STAG method yields a nearly second-order rate of convergence, which illustrates the accuracy of the discretization in the cut-cells. Finally, the LS-STAG computation of the skin friction is validated by considering the results of Shu et al. [28], who used the sign change of this quantity to determine the separation and reattachment points (denoted θ_{sep} and θ_{reatt} , respectively) of the secondary flow of a Newtonian fluid for $\delta = 1/2$ and $\bar{R} = 1/2$. Table 2 compares the values of θ_{sep} , θ_{reatt} and the eddy center position (computed as the local extremum of the streamfunction) obtained for various values of the Reynolds number. These quantities are given in the polar angle system defined in Fig. 4. The differences between LS-STAG and Shu et al.’s results [28] are very small (less than 1°), and the conclusions are similar: As the Reynolds number is increased, the eddy center moves upstream and the size of the recirculation zone $|\theta_{\text{sep}} - \theta_{\text{reatt}}|$ grows.

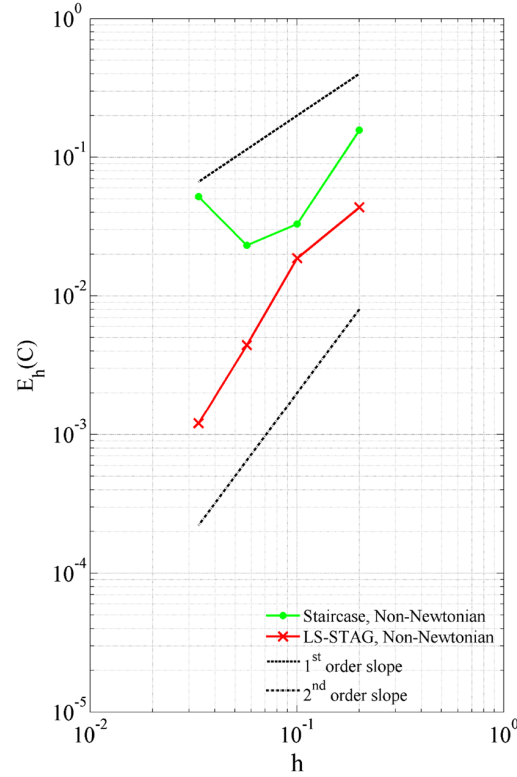


Fig. 6 Normalized error of the moment $M_{i,O}$ versus the grid size h for the Taylor–Couette flow. The meshes used are the same as in Fig. 5

Table 2 Characteristics of the recirculation zone for the Newtonian flow between eccentric cylinders with eccentricity $\delta = 1/2$ and radius ratio $\bar{R} = 1/2$

Re	Shu et al. [28]			LS-STAG		
	Eddy center (in degree)	θ_{sep} (in degree)	θ_{reatt} (in degree)	Eddy center	θ_{sep}	θ_{reatt}
20	−4.02	83.01	−82.01	−4.00	83.03	−82.78
30	−6.00	84.02	−83.01	−5.53	83.86	−83.18
40	−7.60	85.00	−83.54	−7.71	85.23	−83.65
50	−9.02	87.01	−84.00	−9.27	86.85	−84.13

The LS-STAG results are obtained on a mesh with $N = 400$ cells in each direction

3.2 Comparison with experiments

The LS-STAG code is now evaluated on non-coaxial configurations, where PIV results and FLUENT computations are available [24]. All LS-STAG results reported have been obtained on a mesh with $N = 400$ cells in each directions, which gives about 88,000 fluid cells, corresponding to 57% of all computational cells. A grid refinement study with meshes of size $N = 100, 200, 400$ and 600 showed that the results obtained on the two finest meshes were indistinguishable. In comparison, the FLUENT results have been obtained on a body conformal curvilinear mesh of 220,000 cells, more than twice as large as our $N = 400$ mesh. The flow is characterized by the appearance of a large recirculation zone that appears in the widest gap region when the eccentricity reaches a critical value δ_c . For creeping flows, the vortex is centered at the axis $\theta = 0$ and, for Newtonian fluids, moves monotonously downstream with respect to the Reynolds number. This property has been proved analytically in [1, 14] for low inertia effects and subsequently observed by various numerical studies [10, 27, 28]. For non-Newtonian fluids, such a displacement upstream is not always observed. As an illustration, Fig. 7 compares the streamlines of the flow of xanthan 10% obtained by the experiments and the two numerical codes. All three studies show a recirculation zone of comparable shape, size and position.

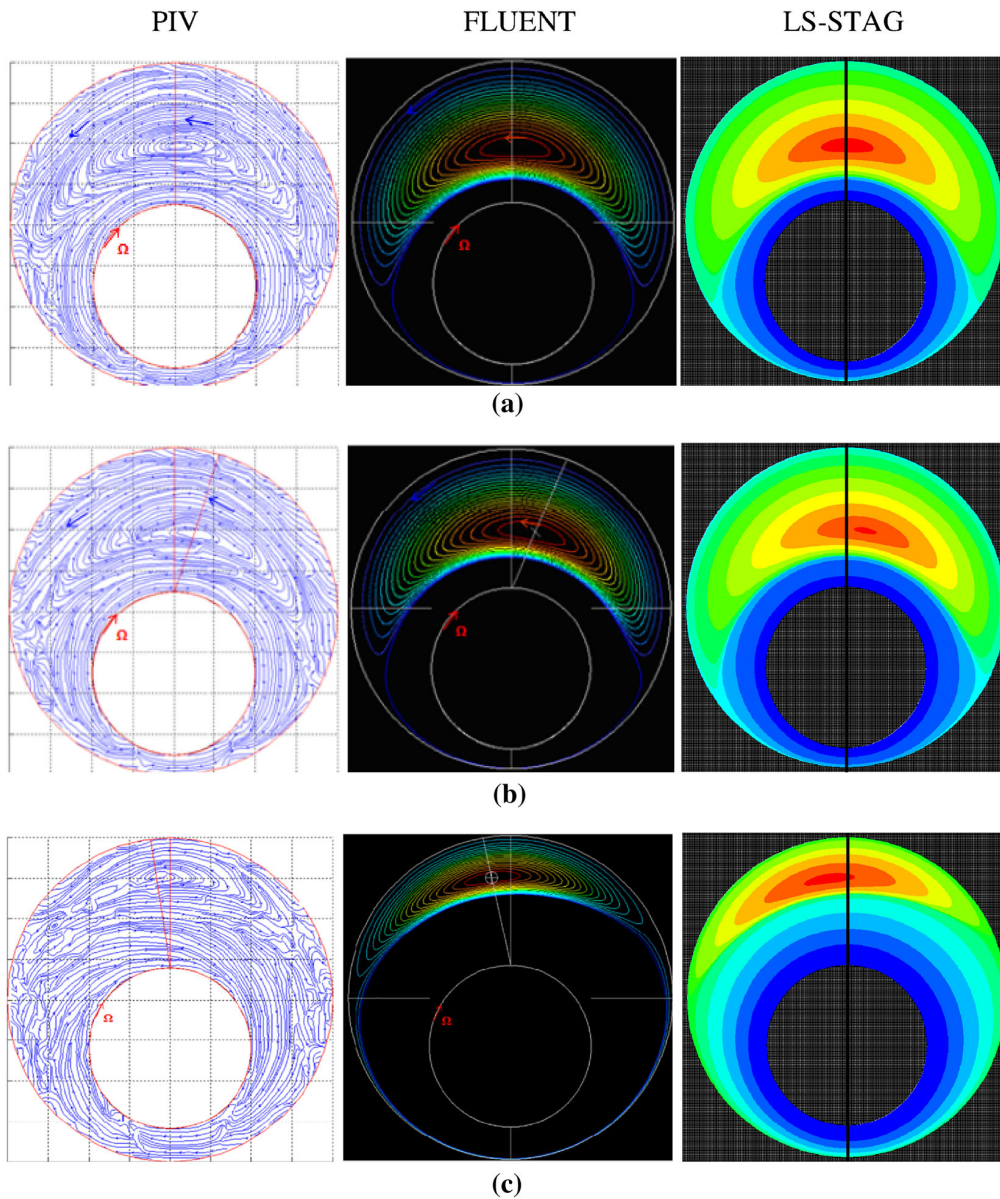


Fig. 7 Streamlines for the flow of xanthan 0.10% with PIV visualization of [24], FLUENT computations [24] and LS-STAG computations: **a** xanthan 0.10% at eccentricity $\delta = 0.60$ and inner cylinder rotation $\Omega = 10 \text{ rad s}^{-1}$; **b** xanthan 0.10% at $\delta = 0.75$ and $\Omega = 1 \text{ rad s}^{-1}$; **c** xanthan 0.10% at $\delta = 0.75$ and $\Omega = 10 \text{ rad s}^{-1}$

Under certain flow conditions (e.g., xanthan 10%, $\delta = 0.75$, $\Omega = 20 \text{ rad s}^{-1}$ in Fig. 7), the vortex zone moves upstream: This peculiar feature of non-Newtonian flows, which was first observed experimentally in [24], is well captured by both numerical codes and will be the motivation of the study of next Section.

Further validation is performed in Fig. 8, which compares the tangential velocity profiles on the axis $\theta = 0$ for the flow of xanthan 10% at $\delta = 0.75$ at various values of the cylinder rotation velocity Ω . We note that the results obtained by LS-STAG and FLUENT are in very good agreement. Discrepancies with the experiments appear in the vicinity of the rotating cylinder, where the PIV measurements are scattered, and most notably in the recirculation zone. In this region where the velocities are very weak, these discrepancies may be due to the tolerance of the measurements or the fact that the numerical solutions do not take into account the viscoelastic

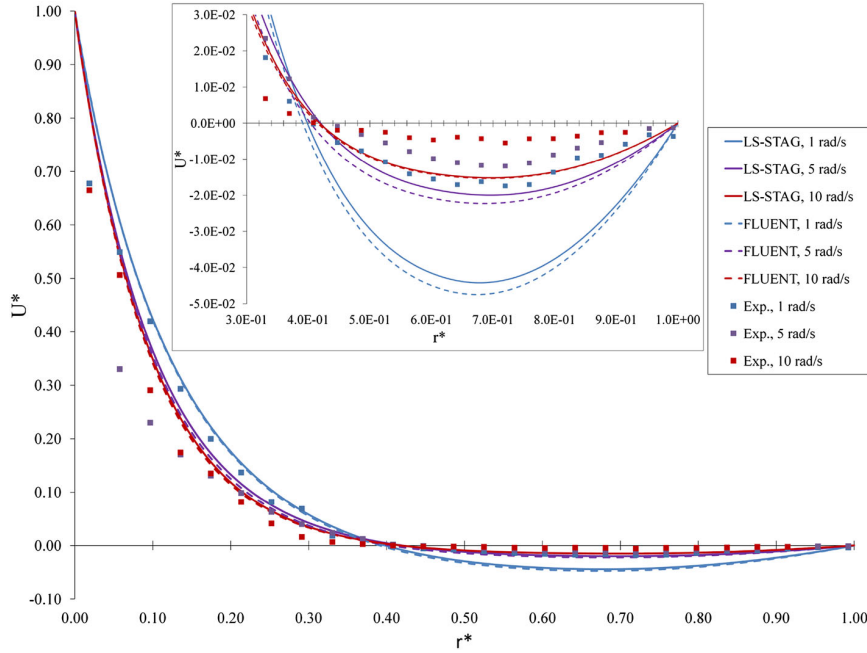


Fig. 8 Non-dimensional velocity profiles $U^* = v_\theta(r^*, \theta = 0)/r_i\Omega$ with $r^* = r/e_{\max}$ for various values of Ω given by PIV measurement and numerical simulations (xanthan 10 %, $\delta = 0.75$)

properties of the flow. Nonetheless, all three methods capture the monotonic decrease of the intensity of the vortex as Ω increases.

3.3 Study of secondary flow

As mentioned above, the recirculation zone is characterized by the critical value δ_c above which it appears, its size $|\theta_{\text{sep}} - \theta_{\text{reatt}}|$ and the position of the vortex center (in degree) with respect to the axis $\theta = 0$. In [24], it is argued that for Newtonian flows the critical value δ_c is independent of the Reynolds number and is thus a purely geometrical phenomenon, while for xanthan solutions the appearance of the zone is delayed to larger eccentricities due to shear-thinning effects. Furthermore, PIV measurements showed that the size and position of the recirculation zone evolves non-monotonously with shear-thinning effects and rotation velocity.

The purpose of this section is to extend the experimental study of [24] by performing a systematic investigation of the secondary flow of non-Newtonian fluids, in order to give new insight into its main characteristics (onset, size and position of the recirculation zone) and to firmly correlate them to global flow properties such as shear-thinning index, generalized Reynolds number and torque ratio at the cylinders. For this purpose, a series of simulations were performed for all xanthan fluids at inner cylinder rotation $\Omega = 1, 10, \text{ and } 20 \text{ rad s}^{-1}$ and eccentricity from $\delta = 0.10$ to 0.80 with a 0.10 increment. We also considered Newtonian fluids with dynamic viscosity $\eta = 0.1, 10 \text{ and } 30 \text{ Pa s}$ to complement the data on Emkarox flows ($\eta = 1.62 \text{ Pa s}$) considered in Ref. [24], so the total number of flow simulations we performed is close to 200.

Onset of recirculation zone. Our series of computations have been used for bracketing the value of δ_c with a ± 0.01 tolerance that corresponds to the grid size. The value of δ_c is found when the streamfunction exhibits a local extremum in the whole fluid domain. This critical value is then confirmed by performing additional computations at $\delta = \delta_c - 0.01$ and $\delta = \delta_c + 0.01$. The results of the Newtonian computations are summarized in Fig. 9 (left), which displays the moments ratio $\bar{M}_{i/o}$ with respect to the eccentricity δ , where

$$\bar{M}_{i/o} = |M_{i,o'}/M_{o,0}|, \quad (20)$$

with $M_{i,o'}$ and $M_{o,0}$ the moments of the viscous forces at the inner and outer cylinders, respectively. The striking result of the figure is that all curves corresponding to a given viscosity and angular velocity Ω are

The LS-STAG immersed boundary method for non-Newtonian flows

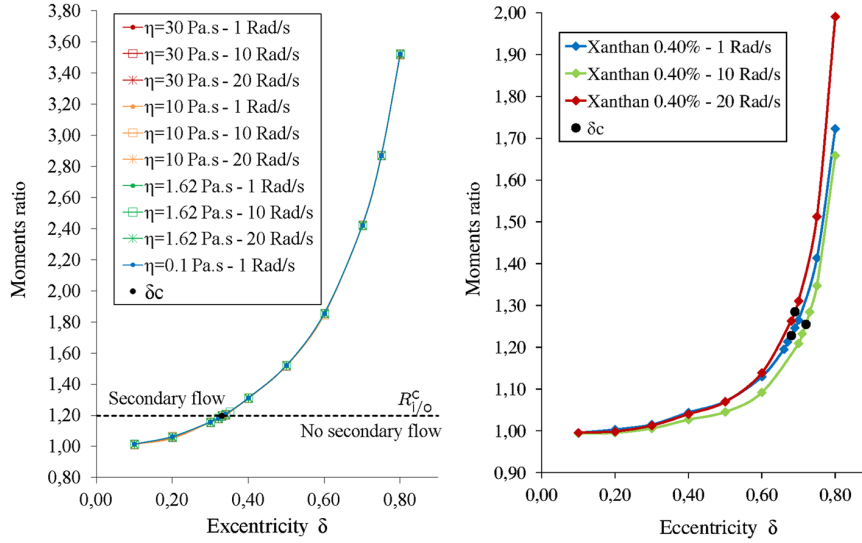


Fig. 9 Moments ratio $\bar{M}_{i/o}$ versus cylinder eccentricity δ for Newtonian fluid (at left) and xanthan 0.40% (at right) for angular velocity $\Omega = 1, 10, 20 \text{ rad s}^{-1}$. The critical eccentricity δ_c for the onset of separation is shown for each fluid with black circles

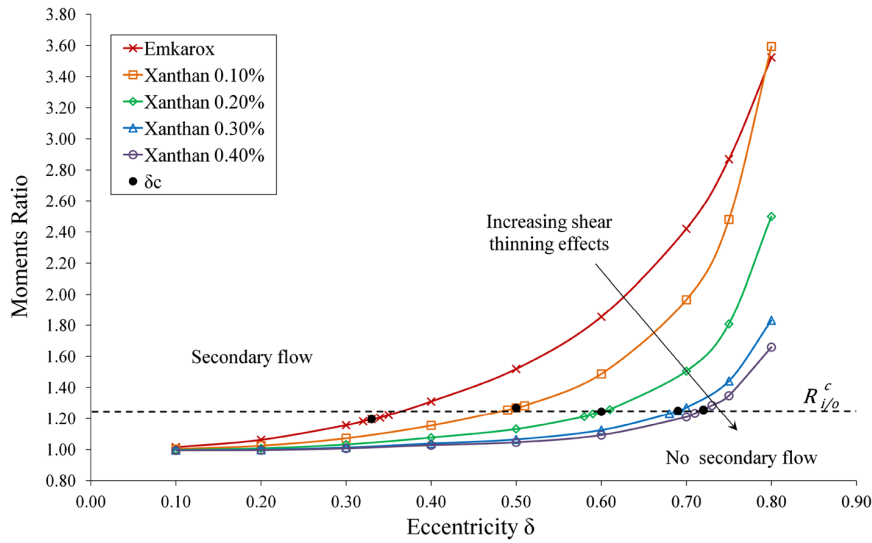


Fig. 10 Moments ratio $\bar{M}_{i/o}$ versus cylinder eccentricity δ for the various flows at $\Omega = 10 \text{ rad s}^{-1}$. The critical eccentricity δ_c for the onset of separation is shown for each fluid with black circles

superposed, which confirms that the onset of separation has a purely geometrical nature. Our computations give the value $\delta_c = 0.33 \pm 0.01$ that is in agreement with the value $\delta_c = 0.332424$ obtained analytically in Ref. [1] (we mention that the FLUENT computations of [24] gives $\delta_c = 0.40 \pm 0.025$). Furthermore, the figure shows that secondary flow occurs for a moment ratio greater than the critical value $\bar{M}_{i/o}^c = 1.196$. For non-Newtonian fluids, Fig. 9 (right) shows the non-monotonous dependence of $\bar{M}_{i/o}$ with angular velocity Ω . Furthermore, the onset of separation is no more geometrical: The value of Ω and shear-thinning effects clearly affect the apparition of the recirculation zone; for example, the critical eccentricity is $\delta_c = 0.72 \pm 0.01$ for xanthan 0.40% (FLUENT computations of [24] give $\delta_c = 0.70 \pm 0.025$).

For $\Omega = 10 \text{ rad s}^{-1}$, Fig. 10 shows the evolution of $\bar{M}_{i/o}$ with eccentricity δ for the various xanthan solutions. This figure clearly shows that shear-thinning effects delay the onset of recirculation zone, but that separation always occurs above a critical value $\bar{M}_{i/o}^c \simeq 1.2$. Computations for other cylinder rotations

Table 3 Critical eccentricity and moments ratio $\overline{M}_{i/o}^c$ for all fluids and angular velocity

Fluid	Ω					
	1 Rad s ⁻¹		10 Rad s ⁻¹		20 Rad s ⁻¹	
	δ_c	$\overline{M}_{i/o}^c$	δ_c	$\overline{M}_{i/o}^c$	δ_c	$\overline{M}_{i/o}^c$
Emkarox	0.33	1.196	0.33	1.196	0.33	1.196
Xanthan 0.10 %	0.46	1.212	0.50	1.269	–	–
Xanthan 0.20 %	0.52	1.218	0.60	1.243	0.54	1.278
Xanthan 0.30 %	0.62	1.214	0.69	1.249	0.65	1.282
Xanthan 0.40 %	0.68	1.228	0.72	1.255	0.69	1.285

($\Omega = 1$ and 20 rad s^{-1}) gave similar results that are summarized in Table 3 (we recall that the flow of xanthan 10 % at $\Omega = 20 \text{ rad s}^{-1}$ is 3D and thus not shown here). It can be noticed that the critical moments ratio $\overline{M}_{i/o}^c$ slightly increases with Ω . However, ratio $\overline{M}_{i/o}^c$ is largely independent of the shear-thinning index, with values in the range [1.21, 1.28].

Structure of secondary flow. We study now the two main characteristics of the secondary flow: size and eddy center position. We will consider mainly the configuration $\delta = 0.75$, because for this eccentricity all xanthan solutions display a recirculation zone according to Table 3. Figure 11 shows the evolution of the secondary flow with angular velocity and shear-thinning effects, while Tables 4 and 5 give the corresponding values of size and eddy center position. For the Newtonian case, the eddy center position moves downstream due to inertia effects, in accordance with the previous analytical [1, 14] and numerical studies [20, 27, 28], while the size of the recirculation zone is constant as Ω increases (see Table 4). The structure of the recirculation zone is much more complex for non-Newtonian fluids. Firstly, we observe that the size decreases monotonously for increasing shear-thinning index, but depends non-monotonously with the angular velocity. The results on the eddy center position (Table 5) confirm the experimental findings of [24] and the plots of Fig. 7: The recirculation zone can be positioned upstream or downstream of the flow direction. In spite of the apparently complex evolution of the secondary flow for non-Newtonian fluids, the next two sections are devoted to the firm correlation of the size and position of the recirculation zone with respect to relevant flow parameters, namely the moments ratio, shear-thinning index and generalized Reynolds number.

In Fig. 9 (right) and Table 4, we have observed that moments ratio $\overline{M}_{i/o}$ and vortex size both evolve non-monotonously with angular velocity Ω . It is thus relevant to plot in Fig. 12 the vortex size versus moment ratio $\overline{M}_{i/o}$ for all flow configurations that we have yet computed for δ from 0.10 to 0.80. In addition, we have performed supplementary computations at $\delta = 0.85, 0.88, 0.90$ and 0.92 for reporting results at higher eccentricities. Figure 12 strikingly shows that for low to moderate eccentricities (up to $\delta = 0.80$, which corresponds to $R_{i/o}$ lower than 3), all the computations fit in a single master curve with origin at $\overline{M}_{i/o}^c = 1.196$ since secondary flow appears above this critical value. This result shows that it is the ratio of the forces acting at the inner and outer cylinder that governs the size of the recirculation zone, irrespective of the value of the flow parameters such as eccentricity δ , shear-thinning index m , or inner cylinder rotation Ω . For higher eccentricities ($\delta = 0.80$ to 0.92), the master curve separates in two distinct branches for Newtonian and non-Newtonian fluids. For Newtonian fluids, the vortex size increases with the moments ratio until the secondary flow would eventually fill the complete domain, while for the non-Newtonian fluids the vortex size reaches a maximum at approximately 270° . This striking results warrant further numerical studies with finer grids to cope with the narrow fluid gap when δ gets closer to 1, which is out of the scope of the present paper.

As observed in Table 5, the position of the recirculation zone for non-Newtonian flows always grows monotonously with angular velocity Ω , which hints that the position can be related to the Reynolds number as for the Newtonian case. Figures 13 and 14 display the eddy center position with respect to the generalized Reynolds number (17) for eccentricity $\delta = 0.75$ and $\delta = 0.60$, respectively. For all type of fluids, the recirculation zone is symmetric and centered on the axis $\theta = 0$ in the creeping regime. As the Reynolds number is increased, each fluid give rises to a distinct quasi-linear curve whose slope is inversely proportional to the shear-thinning index. For non-Newtonian fluids with low shear-thinning index (xanthan 0.10 % in Fig. 13), the recirculation zone still evolves linearly downstream as for the Newtonian fluid, but the evolution is slowed by shear-thinning effects. For higher shear-thinning indices, the shear-thinning effects counteract the effect of inertia such as the recirculation zone is positioned upstream of the flow. This “anti-inertia” phenomenon,

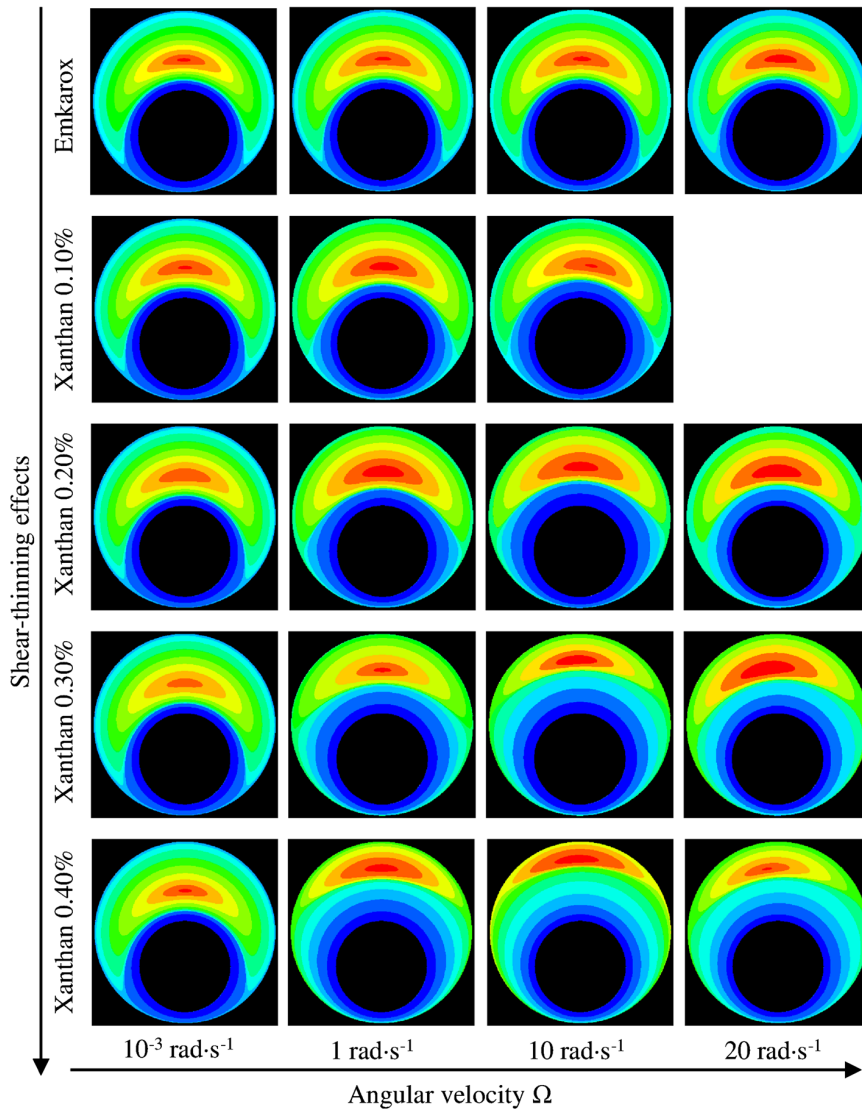


Fig. 11 Streamlines of the flow of Newtonian and non-Newtonian fluids at increasing angular velocities Ω for the configuration $\delta = 0.75$

which is directly proportional to the shear-thinning index of the fluid, is also related to the flow geometry, since the curves in Figs. 13 and 14 do not match. A similar phenomenon has been reported in [31] for the flow of power-law fluids in eccentric annuli with inner cylinder rotation, where it is observed that the increase of pressure drop due to swirl, which is an inertial effect, can be counteracted by shear-thinning effects. This “anti-inertia” property of non-Newtonian flows, which is the consequence of a complex interplay of between inertia, shear-thinning properties and flow geometry, has to our knowledge seldom been reported in the literature and thus warrants further numerical and experimental studies.

4 Summary

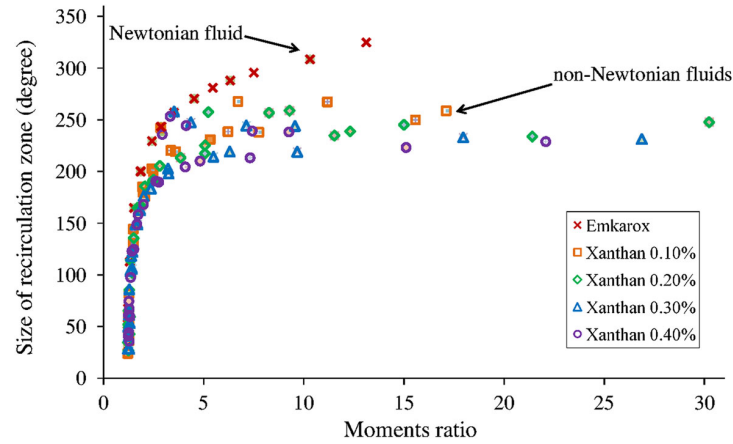
In this paper, we have extended the LS-STAG immersed boundary/cut-cell method to the numerical simulation of non-Newtonian flows, so that the computation of velocity gradients–pressure–shear stress is performed in a unified and consistent fashion. The method was tested on the exact solution for the flow of power-law fluids in a Taylor–Couette reactor, which displayed an accuracy comparable to Newtonian computations. The method

Table 4 Size of recirculation zone for Emkarox and Xanthan solutions, $\delta = 0.75$

Size of recirculation zone (in degree)					
Ω (Rad s ⁻¹)	Emkarox	Xanthan 0.10 %	Xanthan 0.20 %	Xanthan 0.30 %	Xanthan 0.40 %
10 ⁻³	243	242	242	240	236
1	243	203	186	149	123
10	243	200	166	122	98
20	243	–	191	149	125

Table 5 Eddy center position for Emkarox and xanthan solutions, $\delta = 0.75$

Eddy center position (in degree)					
Ω (Rad s ⁻¹)	Emkarox	Xanthan 0.10 %	Xanthan 0.20 %	Xanthan 0.30 %	Xanthan 0.40 %
10 ⁻³	0	0	0	0	0
1	0	-0.69	-0.34	0	0
10	-1.05	-7.83	-0.63	2.16	2.24
20	-1.76	–	0.67	6.79	7.19


Fig. 12 Size of recirculation zone versus moments ratio $\overline{M}_{i/o}$ for the series of Emkarox and xanthan flow computations considered in Sect. 3 ($\Omega = 1, 10,$ and 20 rad s^{-1} , $\delta = 0.10$ to 0.92)

has been further employed to the computation of xanthan flows between eccentric rotating cylinders, for which recent experimental (PIV) and numerical (FLUENT) data have recently shown a non-monotonous evolution of the recirculation zone when shear-thinning effects are non-negligible. A series of flow computations for varying flow parameters (eccentricity δ , rotation velocity Ω , shear-thinning index) has allowed a systematic study of the secondary flow (characterized by the critical eccentricity δ_c , its size and the position of the eddy center). According to Deng [13], the operating Reynolds number of typical oil journal bearings is between 20.3 and 1,824.1, while for our computations the Reynolds number varies from 0 to 120, so we believe that our results on the structure of the recirculation zone are of practical interest to lubrication applications.

For the critical eccentricity δ_c , the main findings of the paper are: For Newtonian flows, secondary flow occurs at $\delta_c = 0.33 \pm 0.01$ when the moments ratio $\overline{M}_{i/o}$ of forces acting at the inner and outer cylinder reaches the value $\overline{M}_{i/o}^c \simeq 1.2$. The onset of secondary flow δ_c is purely geometric and does not depend on other flow parameters. For non-Newtonian flows, the onset of secondary flow is delayed by shear-thinning effects, but occurs also when $\overline{M}_{i/o} > \overline{M}_{i/o}^c \simeq 1.2$. At a given eccentricity, the size of recirculation zone for Newtonian flows is constant as the rotation velocity Ω increases, in accordance with previous studies in the literature, while for non-Newtonian flows the dependence on Ω is non-monotonous. The main finding is that the vortex size depends monotonously on the moments ratio $\overline{M}_{i/o}$ irrespective of flow parameters such as eccentricity, shear-thinning index, or inner cylinder rotation velocity: For Newtonian fluids, the vortex size increases until it

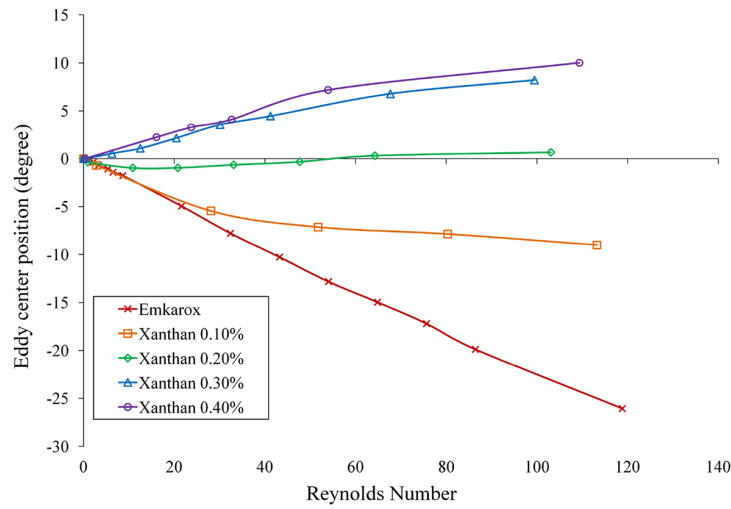


Fig. 13 Eddy center position versus Reynolds number for Emkarox and xanthan solutions at $\delta = 0.75$

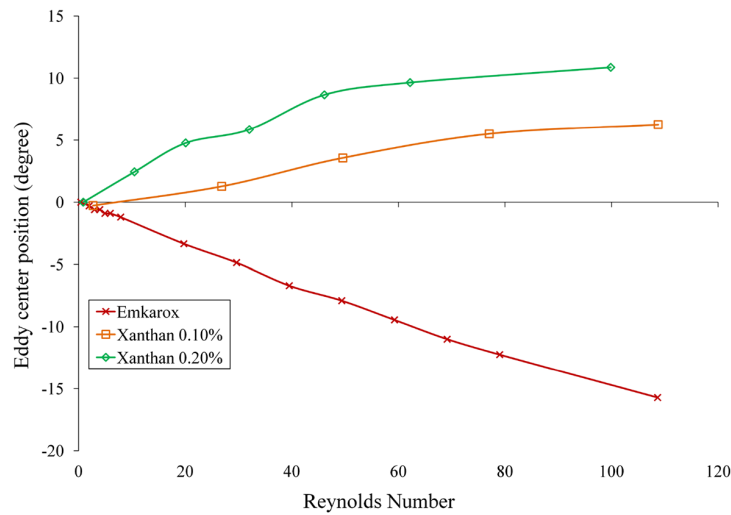


Fig. 14 Eddy center position versus Reynolds number for Emkarox and xanthan solutions at $\delta = 0.60$. Note that for this eccentricity, no secondary flow appears for xanthan 0.30 and 0.40 %

fills the complete domain at high eccentricities, while for non-Newtonian fluids the vortex reaches a maximal size which is close to 270° .

Regarding the position of the recirculation zone of Newtonian flows, we observed that the eddy is displaced downstream linearly due to inertia effects. For non-Newtonian flows, an “anti-inertia” phenomenon proportional to the shear-thinning index of the fluid, analogous to what is observed in Ref. [31] for non-Newtonian flow in drill pipes, counteracts the effect of inertia such as the recirculation zone is positioned upstream of the flow for high shear-thinning fluids.

References

1. Ballal, B.Y., Rivlin, R.S.: Flow of a Newtonian fluid between eccentric rotating cylinders: Inertial effects. Arch. Ration. Mech. Anal. **62**, 237–294 (1976)
2. Beris, A., Armstrong, R.C., Brown, R.A.: Perturbation theory for viscoelastic fluids between eccentric rotating cylinders. J. Non-Newton. Fluid Mech. **13**, 109–148 (1983)

3. Beris, A., Armstrong, R.C., Brown, R.A.: Spectral/finite element calculation of a maxwell fluid between eccentric rotating cylinders. *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **22**, 129–167 (1987)
4. Berker, A., Bouldin, M.G., Kleis, S.J., VanArsdale, W.E.: Effect of polymer on flow in journal bearings. *J. Non-Newton. Fluid Mechan.* **56**, 333–347 (1995)
5. Bird, R.B., Armstrong, R.C., Hassager, O.: *Dynamics of Polymeric Liquids*. Wiley-Interscience, New-York (1987)
6. Botella, O., Cheny, Y.: The LS-STAG method for viscous incompressible flows in irregular geometries: basics of the discretization and application to viscoelastic flows. In: *American Society of Mechanical Engineers, Fluids Engineering Division (Publication) FEDSM*, vol. 1, pp. 2441–2451 (2010)
7. Cheny, Y., Botella, O.: Application of the LS-STAG immersed boundary method to viscoelastic flow computations. *Comput. Fluids* (in Review)
8. Cheny, Y., Botella, O.: An immersed boundary/level-set method for incompressible viscous flows in complex geometries with good conservation properties. *Euro. J. Comput. Mech.* **18**, 561–587 (2009)
9. Cheny, Y., Botella, O.: The LS-STAG method: a new immersed boundary/level-set method for the computation of incompressible viscous flows in complex moving geometries with good conservation properties. *J. Comput. Phys.* **229**, 1043–1076 (2010)
10. Chou, M.H.: A multigrid finite difference approach to steady flow between eccentric rotating cylinder. *Int. J. Numer. Methods Fluids* **34**, 479–494 (2000)
11. Christie, I., Rajagopal, K.R., Szeri, A.Z.: Flow of a non-Newtonian fluid between eccentric rotating cylinders. *Int. J. Eng. Sci.* **25**, 1029–1047 (1987)
12. Davies, A.R., Li, X.K.: Numerical modelling of pressure and temperature effects in viscoelastic flow between eccentrically rotating cylinders. *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **54**, 331–350 (1994)
13. Deng, D.: A numerical and experimental investigation of Taylor flow instabilities in narrow gaps and their relationship to turbulent flow in bearings. Ph.D. thesis, University of Akron, Akron, OH (2007)
14. DiPrima, R.C., Stuart, J.T.: Flow between eccentric rotating cylinders. *ASME J. Lubr. Theory* **94**, 266–274 (1972)
15. Gibou, F., Fedkiw, R.P., Cheng, L.-T., Kang, M.: A second-order-accurate symmetric discretization of the Poisson equation on irregular domains. *J. Comput. Phys.* **176**, 205–227 (2002)
16. Gwynllwy, D.Rh., Phillips, T.N.: The influence of Oldroyd-B and PTT lubricants on moving journal bearing systems. *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **150**, 196–210 (2008)
17. Huang, X., Phan-Thien, N., Tanner, R.I.: Viscoelastic flow between eccentric rotating cylinders: unstructured control volume method. *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **64**, 71–92 (1996)
18. Jarny, S., Coussot, P.: Caractérisation des écoulements de pâte dans une géométrie Couette. *Rhéologie* **2**, 52–63 (2002)
19. Kamal, M.M.: Separation in the flow between eccentric cylinders. *ASME J. Basic Eng.* **88**, 717–724 (1966)
20. Kim, E.: A mixed Galerkin method for computing the flow between rotation cylinders. *Int. J. Numer. Methods Fluids* **26**, 877–885 (1998)
21. Mittal, R., Iaccarino, G.: Immersed boundary methods. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **37**, 239–261 (2005)
22. Owens, R.G., Phillips, T.N.: *Computational Rheology*. Imperial College Press, London (2002)
23. Reynolds, O.: On the theory of lubrication and its application to Mr. Beauchamp tower's experiments, including an experimental determination of the viscosity of olive oil. *Philos. Trans. R. Soc. Lond.* **177**, 157–234 (1886)
24. Rigal, C.: Comportement de fluides complexes sous écoulement: Approche expérimentale par résonance magnétique nucléaire et techniques optiques et simulations numériques. Ph.D. thesis, Institut National Polytechnique de Lorraine (2012)
25. Roberts, G.W., Walters, K.: On viscoelastic effects in journal-bearing lubrication. *Rheol. Acta* **31**, 55–62 (1992)
26. Saadjan, E., Midoux, N.: Flow of a Newtonian fluid between eccentric rotating cylinders. *Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flows* **2**, 261–270 (1993)
27. San Andres, A., Szeri, A.Z.: Flow between eccentric rotating cylinders. *J. Appl. Mech.* **51**, 869–878 (1984)
28. Shu, C., Wang, L., Chew, Y. T., Zhao, N.: Numerical study of eccentric Couette–Taylor flows and effect of eccentricity on flow patterns. *Theor. Comput. Fluid Dyn.* **18**, 43–59 (2004)
29. Szeri, A.Z.: *Fluid Film Lubrication*. Cambridge University Press, London (2011)
30. Verstappen, R.W.C.P., Veldman, A.E.P.: Symmetry-preserving discretization of turbulent flow. *J. Comput. Phys.* **187**, 343–368 (2003)
31. Wan, S., Morrison, D., Bryden, I.G.: The flow of Newtonian and inelastic non-Newtonian fluids in eccentric annuli with inner-cylinder rotation. *Theor. Comput. Fluid Dyn.* **13**, 349–359 (2000)
32. Wannier, G.: A contribution to the hydrodynamics of lubrication. *Q. Appl. Math.* **8**, 1–32 (1950)
33. Williamson, B.P., Walters, K.K., Bates, T.W., Coy, R.C., Mitton, A.L.: The viscoelastic properties of multigrade oils and their effect on journal-bearing characteristics. *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **73**, 115–126 (1997)

10.3 La méthode LS-STAG/2PT pour fluides viscoélastiques 2D

Commun. Comput. Phys.
doi: 10.4208/cicp.080615.010216a

Vol. 20, No. 4, pp. 870-901
October 2016

Application of the LS-STAG Immersed Boundary/ Cut-Cell Method to Viscoelastic Flow Computations

Olivier Botella*, Yoann Cheny, Farhad Nikfarjam and
Marcela Stoica

LEMTA, Université de Lorraine, CNRS, 2 avenue de la Forêt de Haye – TSA 60604,
54518 Vandoeuvre Cedex, France.

Received 8 June 2015; Accepted (in revised version) 1 February 2016

Abstract. This paper presents the extension of a well-established Immersed Boundary (IB)/cut-cell method, the LS-STAG method (Y. Cheny & O. Botella, *J. Comput. Phys.* Vol. 229, 1043-1076, 2010), to viscoelastic flow computations in complex geometries. We recall that for Newtonian flows, the LS-STAG method is based on the finite-volume method on staggered grids, where the IB boundary is represented by its level-set function. The discretization in the cut-cells is achieved by requiring that global conservation properties equations be satisfied at the discrete level, resulting in a stable and accurate method and, thanks to the level-set representation of the IB boundary, at low computational costs.

In the present work, we consider a general viscoelastic tensorial equation whose particular cases recover well-known constitutive laws such as the Oldroyd-B, White-Metzner and Giesekus models. Based on the LS-STAG discretization of the Newtonian stresses in the cut-cells, we have achieved a compatible velocity-pressure-stress discretization that prevents spurious oscillations of the stress tensor. Applications to popular benchmarks for viscoelastic fluids are presented: the four-to-one abrupt planar contraction flows with sharp and rounded re-entrant corners, for which experimental and numerical results are available. The results show that the LS-STAG method demonstrates an accuracy and robustness comparable to body-fitted methods.

AMS subject classifications: 68U20, 76A10, 76D05, 76M12, 76M25

Key words: Immersed boundary method, cut-cell method, incompressible flows, viscoelastic fluids, planar contraction flows.

1 Introduction

This paper presents an immersed boundary (IB)/cut-cell finite-volume (FV) method for the computation of viscoelastic flows in 2D irregular geometries. Lately, FV methods

*Corresponding author. *Email addresses:* olivier.botella@univ-lorraine.fr (O. Botella),
yoann.cheny@univ-lorraine.fr (Y. Cheny)

have drawn a renewed interest for viscoelastic computations, motivated by their inherent low computational costs compared to finite-element (FE) formulations. For Newtonian flows in irregular geometries, IB methods have now reached a high level of maturity (see [1] for a recent review). They rely on cost-effective Cartesian grid methods that alleviate the generation of body fitted meshes and the need of frequent remeshing in the case of problems with moving boundaries. IB methods have found numerous applications in turbulent flow computation [2, 3], fluid-structure interaction [4, 5], biofluid dynamics [6, 7], *etc.*. But, to our knowledge, IB methods have seldomly been applied to viscoelastic flows [8, 9].

One of the reasons might be related to the treatment of cells near the immersed boundary for highly elastic flows, which need accurate discretization due to the thin shear stress layers that develop near solid walls and geometrical singularities of the domain, and which are the main cause of numerical instabilities of viscoelastic computations [10–12]. As a matter of fact, classical IB methods such as the *momentum forcing method* [1] do not discretize flow equations in the cut-cells, *i.e.* cells that are cut by the immersed boundary, but use *ad hoc* extrapolations instead. The lack of consistency of IB discretization manifests in diverse forms, such as numerical stability issues, non divergence-free velocities, nonphysical oscillations of the pressure, or concentration of the numerical errors in the vicinity of the immersed boundary [13–15]. To overcome these shortcomings, we have proposed in [16, 17] a new IB method, called the LS-STAG method, where a unified discretization of the flow equations in both Cartesian and cut-cells is achieved by requiring that the global conservation properties of the flow (total mass, momentum and kinetic energy) be satisfied at the discrete level, resulting in a stable and accurate method and, thanks to the level-set representation of the IB boundary, at low computational costs. During the construction of this method, it was observed that the discretization of the Newtonian [17] and generalized Newtonian [18] stresses in the cut-cells was the most intricate part of the method, and prone to large errors if the discretization was not performed adequately. In this paper, we have the intention to extend these ideas on Newtonian stress discretization and global conservation properties of IB methods to the discretization of the flow equations for viscoelastic liquids.

For modelling the rheology of viscoelastic fluids, the various constitutive equations which have been devised (Upper-Convected Maxwell, Oldroyd-B, White-Metzner, Giesekus *etc.*, see [12, 19] for a review) have common features: a set of nonlinear hyperbolic transport equations for the elastic part of the stress tensor, that have to be coupled to the incompressible Navier-Stokes equations. The numerical solution of such coupled problems with FE [20], FV [21, 22] or spectral [23] methods shares the same numerical difficulties, and the most well known is directly associated to the coupling of the discrete velocity and stress variables. As it is observed for the velocity-pressure coupling in incompressible Newtonian flows, the discretization of the velocity and stress has to be compatible for preventing spurious oscillations of the stress variables when the level of elasticity becomes non-negligible. For FE methods, it amounts to enforcing a

Ladyzhenskaja-Babuška-Brezzi (LBB) compatibility condition between the velocity and stress trial spaces, similarly to the usual velocity-pressure LBB condition for incompressible flows [20]. For FV methods, this is usually achieved by an adequate staggering of the normal and shear stress unknowns on the computational grid [21, 22]. But the most severe issue is the breakdown of the numerical algorithms for highly elastic flows: the so-called *high Weissenberg number problem* (HWNP), named after the dimensionless parameter We that measures the level of elasticity of the flow [11, 12, 24, 25]. The HWNP manifests itself as the lack of convergence of the nonlinear discrete system when the Weissenberg number is raised above a critical value We_{crit} [11, 12, 24]. The value of We_{crit} that is reached is highly dependent on the discretization method employed [20, 26, 27]. It is also observed that mesh refinement does not help raise the threshold of We_{crit} , and one observes the paradox that the finer the mesh is, the lower is the value of We_{crit} [22, 28]. Furthermore, the spurious and/or instable behavior of the solution is exacerbated by geometrical singularities of the domain such as sharp re-entrant corners: it can be observed that prior to the solution blow-up the conformal stress tensor has negative eigenvalues in cells close to re-entrant corners [29], whereas the mathematical theory states that this tensor should be positive definite [12]. Finally, we mention that the HWNP is observed for all viscoelastic models that obey Oldroyd's frame invariance principle, such as UCM, PPT, or Giesekus [24, 30].

In the present work, we consider the discretization of a general viscoelastic tensorial equation whose special cases recover well-known constitutive laws such as the Oldroyd-B, White-Metzner and Giesekus models (in single and multi-mode versions). For building this IB method, we believe that a key ingredient lies in the discretization of the stress equations in the cut-cells, in order to accurately resolve the steep stress layers that develop near solid boundaries and corner singularities at high levels of elasticity. Hence, on the grounds of the LS-STAG discretization of the Newtonian [17] and generalized Newtonian [18] stresses in the cut-cells, we have achieved a fully staggered discretization of the viscoelastic equation that ensures a strong coupling of all flow variables, and such that the staggered arrangement on Cartesian grid introduced by Darwish & Whiteman [21] is recovered away from the immersed boundary. One of the distinctive features of this IB discretization is that, in contrary to most FV methods on staggered [21, 31, 32] or collocated grids [33], the shear stress is actually computed at solid boundaries, even at geometric singularities, yielding thus a fully conservative method. The time advancement is based on a fully segregated fractional-step scheme. Applications are presented for two popular benchmarks for viscoelastic flows in Cartesian and complex geometries: the four-to-one planar contraction flow of an Oldroyd-B fluid with sharp [31] and rounded [34] re-entrant corners, for a wide range of Weissenberg numbers. Finally, we will illustrate the ability of the LS-STAG method to compute flows of practical interest by confronting the results given by the Oldroyd-B, White-Metzner and Giesekus model (the latter with one and four modes) on the polymer flow studied experimentally by Quinzani *et al.* [35].

2 Problem description and discretization on a Cartesian mesh

2.1 Governing equations

We consider the Navier-Stokes equations for an incompressible fluid in 2D:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (2.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2.1b)$$

where ρ is the fluid density, $\boldsymbol{\tau}$ is the stress tensor, $\mathbf{v} = (u, v)$ is the velocity vector, p is the pressure. For viscoelastic flows, the shear stress $\boldsymbol{\tau}$ in Eq. (2.1a) is decomposed as: $\boldsymbol{\tau} = \eta_s \mathbf{D} + \boldsymbol{\tau}_e$, where $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)$ is the rate-of-strain tensor, η_s is the solvent shear-viscosity and $\boldsymbol{\tau}_e$ is the viscoelastic tensor:

$$\boldsymbol{\tau}_e = \begin{pmatrix} \tau_e^{xx} & \tau_e^{xy} \\ \tau_e^{xy} & \tau_e^{yy} \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

The viscoelastic tensor is governed by a general constitutive equation of the form:

$$\boldsymbol{\tau}_e + \lambda (\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_e + \alpha \mathbf{D} : \mathbf{D}) = 2\eta_e \mathbf{D}, \quad (2.3)$$

where η_e is the polymer contribution to shear viscosity, $\lambda \geq 0$ is the relaxation time of the polymer, $\alpha \geq 0$ is the dimensionless mobility factor and $(\overset{\nabla}{\cdot})$ denotes the upper-convected derivative of a tensor:

$$\overset{\nabla}{\mathbf{A}} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{v}^T - \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}. \quad (2.4)$$

Eq. (2.3) is a hyperbolic transport equation which, depending on the value of the viscometric parameters η_e , λ and α , generalizes popular viscoelastic constitutive laws [12, 19] whose ability to model shear-thinning and viscoelastic flow properties are listed in Table 1. For the non-Newtonian and White-Metzner models, shear-thinning effects are modeled with a generalized Newtonian model for the shear viscosity η_e , which depends on the local value of the shear rate $\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2} \mathbf{D} : \mathbf{D}}$. This viscoelastic model can be extended to a multi-mode version where the elastic stress is decomposed as

$$\boldsymbol{\tau}_e = \sum_{q=1}^{N_{\text{modes}}} \boldsymbol{\tau}_e^{(q)},$$

where each mode $\boldsymbol{\tau}_e^{(q)}$ obeys a constitutive law of the form (2.3) (see e.g. [36]).

In 2D, flow equations (2.1) and (2.3) possess 6 scalar variables: in addition to the flow velocity and pressure, we have to consider the extra-stress components τ_e^{xx} , τ_e^{xy} and τ_e^{yy} .

Table 1: Various constitutive laws represented by Eq. (2.3) and their ability to model shear-thinning and viscoelastic flow effects.

Fluid model	Mobility factor	Relaxation time	Solvent viscosity	Polymer viscosity	Shear-thinning	Elastic
Newtonian		$\lambda = 0$	η_s	η_e	X	X
Oldroyd-B	$\alpha = 0$	$\lambda > 0$	η_s	η_e	X	✓
White-Metzner	$\alpha = 0$	$\lambda > 0$	η_s	$\eta_e(\dot{\gamma})$	✓	✓
Giesekus	$\alpha > 0$	$\lambda > 0$	η_s	η_e	✓	✓

When we nondimensionalize these equations with L and U as the reference length and velocity of the flow, and use $(\eta_s + \eta_e)U/L$ as the reference value for pressure and stress, a set of 3 dimensionless numbers is obtained:

$$\beta = \frac{\eta_s}{\eta_s + \eta_e}, \quad We = \frac{\lambda U}{L}, \quad Re = \frac{\rho U L}{\eta_s + \eta_e}. \tag{2.5}$$

The first dimensionless number is the viscosity ratio, which measures the amount of solvent in the fluid, and the last two are representatives of the flow regime: the Weissenberg number We measures the level of elasticity of the flow, and the Reynolds number Re measures the convective effects.

After integrating the constitutive law (2.3) in a square domain Ω (of surface Γ), we obtain for each stress component:

$$\lambda \left(\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \tau dV + \int_{\Gamma} (v \cdot n) \tau dS \right) = S, \tag{2.6}$$

where $\tau = \tau_e^{xx}, \tau_e^{yy}$ or τ_e^{xy} , and S is a volumic term which stems from the upper-convected derivative (2.4) and the quadratic term $D:D$. For the normal stresses τ_e^{xx}, τ_e^{yy} and the shear stress τ_e^{xy} , this volumic term reads respectively:

$$S_e^{xx} = \int_{\Omega} \left[-\tau_e^{xx} + 2\lambda \left(\tau_e^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + 2\eta_e \frac{\partial u}{\partial x} - \lambda \alpha \left((\tau_e^{xx})^2 + (\tau_e^{xy})^2 \right) \right] dV, \tag{2.7a}$$

$$S_e^{yy} = \int_{\Omega} \left[-\tau_e^{yy} + 2\lambda \left(\tau_e^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_e^{xy} \frac{\partial v}{\partial x} \right) + 2\eta_e \frac{\partial v}{\partial y} - \lambda \alpha \left((\tau_e^{xy})^2 + (\tau_e^{yy})^2 \right) \right] dV, \tag{2.7b}$$

$$S_e^{xy} = \int_{\Omega} \left[-\tau_e^{xy} + \lambda \left(\tau_e^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_e^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \eta_e \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) - \lambda \alpha \left(\tau_e^{xx} \tau_e^{xy} + \tau_e^{xx} \tau_e^{yy} \right) \right] dV. \tag{2.7c}$$

Suitable initial and boundary conditions for the set of equations (2.1), (2.6) will be specified in the numerical results section.

In [16,17] and [18], we have introduced the LS-STAG method, an IB method for Newtonian and generalized Newtonian fluids on staggered non-uniform Cartesian grids. Basics of the LS-STAG method and relevant notations will be given in Section 3.1, but details

of the discretization of the Navier-Stokes discretization will not be repeated. Instead, we will focus on the additional difficulties represented by the discretization of the transport equations (2.6) for the elastic stresses and the coupling with the Navier-Stokes equations.

2.2 Staggered mesh for viscoelastic flows in Cartesian geometries

The earliest simulations of viscoelastic flows proved that it was extremely difficult to obtain stable numerical solutions when the Weissenberg number was moderately large, even for steady problems (see the book by Crochet *et al.* [10]). The loss of convergence of the solution procedure has been subsequently attributed to several causes, and one of the earliest that was identified is related to the spurious oscillations of the extra-stress tensor τ_e . Indeed, it is acknowledged that the discretization of the extra-stress components τ_e^{xx} , τ_e^{xy} and τ_e^{yy} must be compatible with the velocity and pressure, as much as the pressure and velocity discretizations have to be compatible for Newtonian computations to avoid pressure checkerboarding. Thus for the finite element method, velocity-pressure-stress discretizations that follow a LBB condition have been developed (see the review by Baaijens [20]). For finite volume discretizations, the discrete stress unknowns have to be adequately staggered in the well-known MAC mesh for Newtonian flows [37] or, in the context of a collocated mesh, *ad hoc* stress interpolations have to be developed in the spirit of the Rhie & Chow interpolations for Newtonian computations [33].

Let us focus on the MAC arrangement for Cartesian grids, which is the basis of the LS-STAG method: as shown in Fig. 1, the velocity unknowns are set at the middle of the cell faces and the pressure at the center of the cell. The extra-stress unknowns $\tau_{i,j}^{xx}$, $\tau_{i,j}^{xy}$ and $\tau_{i,j}^{yy}$ have to be located in the cell such that, when the level of elasticity becomes negligible ($\lambda=0$), the discretization of the constitutive equation (2.3) recovers the case of Newtonian fluids, *i.e.* $\nabla \cdot \tau = (\eta_s + \eta_e) \nabla \cdot \mathbf{D}$ in (2.1a). Hence, the location of the components of the rate-of-strain tensor \mathbf{D} indicates the location of the extra-stress unknowns as shown in Fig. 1: the normal strain rates $\partial u / \partial x|_{i,j}$ and $\partial v / \partial y|_{i,j}$ are located at the center of the cell since

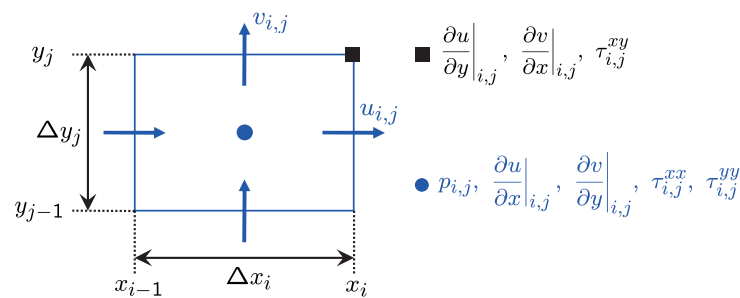


Figure 1: Staggered arrangement of the components of the velocity, pressure, rate-of-strain and extra-stress tensors in the Cartesian cell $\Omega_{i,j}$. Note that for the sake of clarity, the underscored 'e' is dropped in the definition of the discrete components of the extra-stress tensor τ_e .

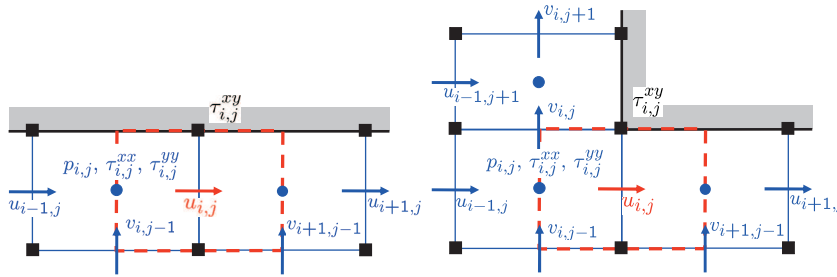


Figure 2: Fully staggered arrangement in the vicinity of a solid wall (left) and a reentrant corner (right).

they are discretized as:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x_i}, \quad \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j} = \frac{v_{i,j} - v_{i,j-1}}{\Delta y_j}. \tag{2.8}$$

In contrast, the shear strain rates $\partial u/\partial y|_{i,j}$ and $\partial v/\partial x|_{i,j}$ are located at the upper corner of the cell $\Omega_{i,j}$, and discretized as:

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\frac{1}{2}\Delta y_{j+1} + \frac{1}{2}\Delta y_j}, \quad \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{v_{i+1,j} - v_{i,j}}{\frac{1}{2}\Delta x_{i+1} + \frac{1}{2}\Delta x_i}. \tag{2.9}$$

This staggered arrangement was first introduced by Darwish & Whiteman [21], and later used in [22, 31, 38–40] with *ad hoc* modifications by some authors, because it introduces 2 difficulties. The first one is minor: one needs to define an additional control volume for the transport equation (2.6) for the shear stress, which causes additional bookkeeping in the computer coding. But the major difficulty is related to the position of the shear stress $\tau_{i,j}^{xy}$ at the upper cell corners, which give rise to unknowns located along solid walls and salient/reentrant corners, as shown in Fig. 2. However, since there is no boundary conditions for the extra-stress at solid walls, the transport equation (2.6) has to be solved there, even at reentrant corners where the mathematical theory states that the extra-stresses are singular and behave like $r^{-2/3}$ where r is the distance to the singular corner [12]. For these reasons, some authors have discarded the discretization of the shear stress equation at solid boundaries [21], or at reentrant corners only [31, 38], and replaced it by *ad hoc* interpolations or simplifications to evaluate the shear stress at these locations. We also mention some authors [22, 39, 40] who used the full staggered arrangement of Fig. 1 but never detailed their treatment at solid walls. Another strategy is to use a semi-staggered arrangement where only the velocity is staggered while all extra-stress components are located at cell centers [32, 41], but this brings back the issue of shear stress interpolation which is encountered in the fully collocated method of [33].

We will not pursue any of the special treatments proposed above, because *ad hoc* interpolations for complex geometries are much more intricate to derive than for Cartesian geometries, and principally because it would yield a treatment of the near-wall shear stress

that is totally disconnected from the computations away from the boundaries: *i.e.* the local conservation property of the fluxes would not hold near solid boundaries, and thus the global conservation properties on which the LS-STAG method is grounded will be lost. Instead, we will propose in the next section a compatible velocity-pressure-stress discretization for an immersed boundary method where the shear stress is calculated at solid boundaries, and such that, when the geometry becomes aligned with the computational domain, the configurations depicted in Fig. 2 for Cartesian geometries becomes limiting cases of our IB method.

3 The LS-STAG discretization for viscoelastic flows

3.1 Basics of the LS-STAG method for Newtonian flows in irregular geometries

The LS-STAG method is an IB/cut-cell method based on the well-known staggered grid finite-volume method for computing flows in the irregular fluid domain $\Omega^f = \Omega \setminus \Omega^{ib}$, where Ω^{ib} is a solid domain immersed in the rectangular computational domain Ω (see Fig. 3). As shown in this figure, the irregular IB boundary $\Gamma^{ib} = \partial\Omega^{ib}$ is implicitly represented by its level-set function $\phi(x,y)$, which is discretized at the vertices of the rectangular cells. Level-sets have initially been introduced in CFD for tracking dynamic boundaries and interfaces in the early 90s, and since then their application has been broadened to other areas of CFD such as complex geometry description, unstructured mesh generation, aeroacoustics and turbulence modelling (see [42] for a recent review). In this work, we employ the level-set function for representing steady solid boundaries, since it is an efficient tool for computing all relevant geometry parameters of the cut-cells (such as

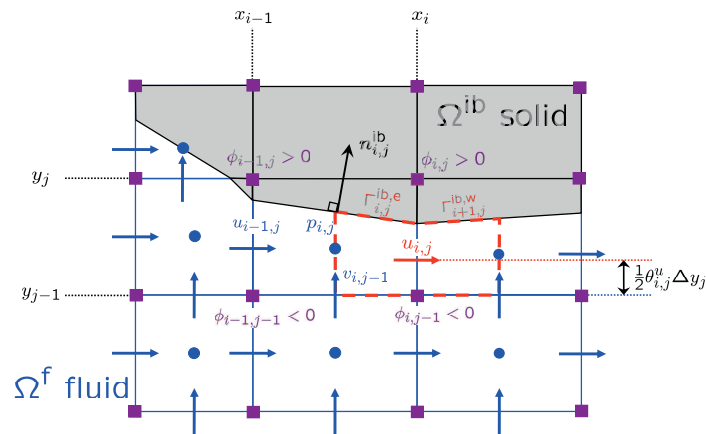


Figure 3: Staggered arrangement of the variables near the trapezoidal cut-cell $\Omega_{i,j}$ on the LS-STAG mesh. The staggered CV for $u_{i,j}$ is shown in red.

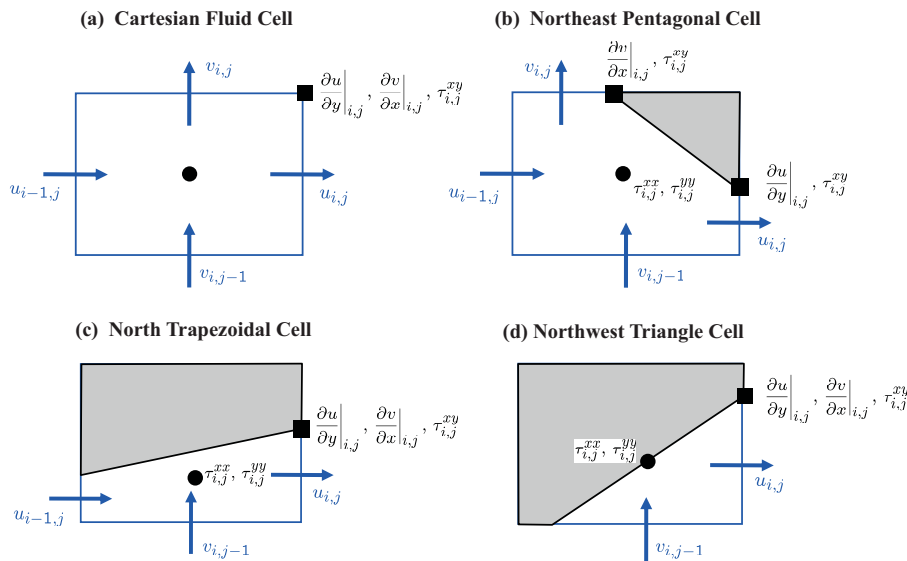


Figure 4: Sketch of the 4 generic fluid cells $\Omega_{i,j}$ and location of the normal and shear stresses.

their volume, projected areas, boundary conditions, ...), and thus reduces the bookkeeping associated to the handling of complex geometries. The relevant geometry parameters for fluid cell $\Omega_{i,j}$ are its grid-size $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ and $\Delta y_j = y_j - y_{j-1}$, its volume $V_{i,j}$ and the "cell-face fraction ratio" $\theta_{i,j}^u \in [0,1]$ which represents the fluid fraction of a face of a cut-cell. The latter quantities are constructed in [16, 17] from the values of $\phi_{i,j}$.

Fig. 4 shows the 4 types of fluid cells which are present in the LS-STAG mesh: a Cartesian fluid cell away from the IB boundary, and 3 generic types of cut-cells (pentagon, trapezoidal and triangle). The half CVs that form the staggered CV for discretizing $u_{i,j}$ are shown in red. For building the LS-STAG method in Ref. [17], we have enforced the strict conservation of total mass $\int_{\Omega_f} \nabla \cdot \mathbf{v} dV$, total momentum $\mathbf{P}(t) = \rho \int_{\Omega_f} \mathbf{v} dV$ and total kinetic energy $E_c(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega_f} |\mathbf{v}|^2 dV$ (when viscosity η becomes negligible) in each of the half CVs independently, such that any combination of half CVs yields a consistent discretization with the aforementioned global conservation properties. This results to a discrete pressure gradient which is dual to the divergence matrix, a skew-symmetric operator for the convective terms, and a viscous matrix which is positive definite. In the limiting case of meshes with Cartesian cells only (Fig. 4 (a)), the LS-STAG method recovers the case of the well-known MAC discretization for uniform grids and the method of Verstappen & Veldman [43] for non-uniform grids. The LS-STAG method has been previously applied to canonical Newtonian flows at moderate Reynolds number in fixed and moving geometries [17] and pseudoplastic flows [18]. In addition, we mention that the LS-STAG discretization has also been implemented in the ship hydrodynamics software COMFLOW [44] for the handling of irregular geometries, and has been extended

to the computation of coupled aeroelastic problems [45] and turbulent flows with RANS modelling [46].

3.2 Staggered arrangement of the extra-stresses in the cut-cells

The first step of the discretization of the viscoelastic equation (2.6) is the positioning of the extra-stress unknowns $\tau_{i,j}^{xx}$, $\tau_{i,j}^{xy}$, and $\tau_{i,j}^{yy}$ in the LS-STAG mesh. Away from the complex geometry, they are located at the discretization points of the Newtonian stresses, as it has been discussed in Section 2.2 for the case of a Cartesian mesh: *i.e.* the normal stresses $\tau_{i,j}^{xx}$ and $\tau_{i,j}^{yy}$ are at the center of the cell $\Omega_{i,j}$ and the shear stress $\tau_{i,j}^{xy}$ at its upper right corner (see Fig. 1). In the cut-cells, the discretization of the Newtonian stresses presented above entices to position the extra-stresses as shown in Fig. 4. Note that, in this figure, $\tau_{i,j}^{xx}$ and $\tau_{i,j}^{yy}$ are conveniently located at the centroid of the cut-cells but, as stated in [17], the normal stresses take constant values in the cut-cells. For the case of pentagonal cells (see Fig. 4(b)), where the Newtonian shear stresses $\partial u/\partial y|_{i,j}$ and $\partial v/\partial x|_{i,j}$ are calculated at different vertices of the immersed boundary, it is considered that $\tau_{i,j}^{xy}$ takes the same value at both vertices. Finally, we mention that this discretization has much in common with the finite element method of Saramito [47], which uses a mixed Raviart-Thomas element where pressure and normal stresses are discretized with piecewise constant polynomials with degree of freedom at the element centroid, while the shear stress is discretized with a linear continuous polynomial with degrees of freedom at the element vertices.

In the context of a FV method, this staggered arrangement introduces a different control volume for each transport equation of the extra-stresses. Thus, the new difficulty encountered compared to the Newtonian method lies in the definition of the control volumes in the cut-cells and in the quadrature of the volumic terms in the RHS (2.7) of the transport equations, that have to be adapted to the case of normal and shear stresses. To develop these quadratures, we will use conservation properties of the convective part of the transport equations in the spirit of the LS-STAG method for Newtonian flows.

3.3 Discretization of the transport equation for the normal stresses

For discretizing the transport equation (2.6) for τ_e^{xx} , it is natural to consider $\Omega_{i,j}$ as the control volume. We first start the discretization of the volumic terms in the RHS of (2.7a), *i.e.*:

$$\begin{aligned}
 S_{i,j}^{xx} = & - \underbrace{\int_{\Omega_{i,j}} \tau_e^{xx} dV}_{\textcircled{1}} + 2\lambda \underbrace{\int_{\Omega_{i,j}} \tau_e^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} dV}_{\textcircled{2}} + 2\lambda \underbrace{\int_{\Omega_{i,j}} \tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} dV}_{\textcircled{3}} + 2 \underbrace{\int_{\Omega_{i,j}} \eta_e \frac{\partial u}{\partial x} dV}_{\textcircled{4}} \\
 & - \lambda\alpha \underbrace{\int_{\Omega_{i,j}} (\tau_e^{xx})^2 + (\tau_e^{xy})^2 dV}_{\textcircled{5}}.
 \end{aligned}
 \tag{3.1}$$

For the underlined terms ①, ② and ④, the quadrature is straightforward since the integrands are considered constant in each cut-cell: for example midpoint rule applied to Term ② gives simply:

$$\int_{\Omega_{i,j}} \underline{\tau_e^{xx}} \frac{\partial u}{\partial x} dV \simeq \tau_{i,j}^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} V_{i,j}, \tag{3.2}$$

where $V_{i,j}$ is the area of the cell and the discrete quotient for $\partial u / \partial x|_{i,j}$ is given in [17]. Analogous quadrature holds for terms ①, ④ and the time-derivative term $\frac{d}{dt} \int_{\Omega_{i,j}} \tau_e^{xx} dV$. For the case of the White-Metzner model, the discretization of the generalized Newtonian viscosity $\eta_e(\dot{\gamma})$ in Term ④ is given in [18].

The discretization of Term ③ is totally different since both terms of the integrand are defined at the vertices of a fluid cell, whose number depends on the cell type. Hence, this term will be discretized in two consecutive steps. First, midpoint quadrature yields:

$$\int_{\Omega_{i,j}} \tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} dV \simeq \left[\tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right]_{i,j}^c V_{i,j}, \tag{3.3}$$

where $\left[\tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right]_{i,j}^c$ refers to the mean value of the integrand in cut-cell $\Omega_{i,j}$. This mean value is calculated differently depending on the type of the cell. For the case of the Cartesian cell of Fig. 1, pentagonal cut-cell of Fig. 4(a), and trapezoidal cut-cell of Fig. 4(b), this mean value is defined as:

$$\left[\tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right]_{i,j}^c = \frac{1}{4} \tau_{i,j}^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} + \frac{1}{4} \tau_{i-1,j}^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i-1,j} + \frac{1}{4} \tau_{i-1,j-1}^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i-1,j-1} + \frac{1}{4} \tau_{i,j-1}^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j-1}, \tag{3.4a}$$

and for the triangular cell of Fig. 4(c) the 3-point mean value is used:

$$\left[\tau_e^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right]_{i,j}^c = \frac{1}{3} \tau_{i,j}^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} + \frac{1}{3} \tau_{i-1,j-1}^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i-1,j-1} + \frac{1}{3} \tau_{i,j-1}^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j-1}. \tag{3.4b}$$

For both definitions of the mean value, the discrete Newtonian shear stress $\partial u / \partial y|_{i,j}$ is given in [17]. Finally, we mention that the discretization of the quadratic term ⑤ of the Giesekus model uses the same interpolations.

In the LHS of Eq. (2.7a), the discretization of the convective term $\int_{\Gamma_{i,j}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \tau_e^{xx} dS$ follows the lines of the Newtonian skew-symmetric discretization of [17]. The boundary of $\Omega_{i,j}$ is decomposed in elementary faces according to

$$\Gamma_{i,j} = \Gamma_{i,j}^w \cup \Gamma_{i,j}^e \cup \Gamma_{i,j}^s \cup \Gamma_{i,j}^{ib},$$

and on the immersed boundary face $\Gamma_{i,j}^{ib}$ homogeneous boundary condition on the velocity gives $\int_{\Gamma_{i,j}^{ib}} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \tau_e^{xx} dS = 0$. On the fluid faces, we discretize the convective terms in 2 steps, which will be illustrated for face $\Gamma_{i,j}^e$ only. First, midpoint quadrature yields:

$$\int_{\Gamma_{i,j}^e} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \tau_e^{xx} dS \simeq \bar{u}_{i,j} [\tau_e^{xx}]_e^e, \tag{3.5}$$

where the mass flux is given by $\bar{u}_{i,j} \cong \theta_{i,j}^u \Delta y_j u_{i,j}$ and $[\tau_e^{xx}]^e$ is the value of the normal stress on face $\Gamma_{i,j}^e$, which needs to be interpolated with the normal stress unknowns on the LS-STAG mesh. In contrary to the Navier-Stokes equations, central interpolation will not be used and first-order upwind scheme will be employed in this work:

$$[\tau_e^{xx}]^e = \begin{cases} \tau_{i,j}^{xx} & \text{if } \bar{u}_{i,j} \geq 0, \\ \tau_{i+1,j}^{xx} & \text{if } \bar{u}_{i,j} < 0. \end{cases} \quad (3.6)$$

Upwind interpolation has the merits to give a monotone discretization of the convective terms, even if its accuracy is limited to first-order and is very diffusive when the flow direction is not aligned with the mesh. But we mention that higher-order discretization can be easily adapted to the LS-STAG discretization, and is left for future work.

In summary, the LS-STAG discretization of the transport equation (2.6) for τ_e^{xx} can be written in matrix form as the semi-discrete equation:

$$\lambda \left(\mathcal{M}_e^{xx} \frac{d\tau_e^{xx}}{dt} + \mathcal{C}_e^{xx}[\bar{U}] T_e^{xx} \right) = -\mathcal{M}_e^{xx} T_e^{xx} + S_e^{xx}[T_e, U], \quad (3.7)$$

where T_e^{xx} is the vector containing the extra-stress unknowns $\tau_{i,j}^{xx}$, \mathcal{M}_e^{xx} is the diagonal mass matrix whose entries correspond to the cell areas $V_{i,j}$, the matrix $\mathcal{C}_e^{xx}[\bar{U}]$ corresponds to the discretization of the convective terms, $\mathcal{M}_e^{xx} T_e^{xx}$ corresponds to the discretization of Term ① in (3.1) and $S_e^{xx}[T, U]$ is the discretization of the remaining terms. An equation analogous to (3.7) is obtained for the transport equation of τ_e^{yy} , with $\mathcal{M}_e^{yy} = \mathcal{M}_e^{xx}$ since both discretizations are performed in the same control volume.

In the fashion of our previous works [16, 17], the LS-STAG discretization is a globally conservative discretization up to the cut-cells since the mass matrix \mathcal{M}_e^{xx} yields a consistent quadrature in the whole fluid domain Ω_f when it is summed on all fluid cells (Cartesian and cut-cells), i.e.:

$$\int_{\Omega^f} \tau_e^{xx} dV \cong \sum_{\text{Fluid cells } \Omega_{i,j}} V_{i,j} \tau_{i,j}^{xx} = \mathbf{1}^T \mathcal{M}_e^{xx} T_e^{xx}, \quad (3.8)$$

where $\mathbf{1}$ is the constant vector. In particular, for constant normal stress ($T^{xx} = 1$) one recovers the area of the whole fluid domain:

$$\text{Area}(\Omega^f) \cong \sum_{\text{Fluid cells } \Omega_{i,j}} V_{i,j} = \mathbf{1}^T \mathcal{M}_e^{xx} \mathbf{1}. \quad (3.9)$$

In addition, thanks to the property of local conservation of the fluxes at fluid faces, the convective discretization verifies the following global property:

$$\mathbf{1}^T \mathcal{C}_e^{xx}[\bar{U}] = 0, \quad (3.10)$$

since the velocity is zero on the immersed boundary.

3.4 Discretization of the transport equation for the shear stress

The semi-discretization of the transport equation (2.6) for τ_e^{xy} is now performed in a staggered control volume $\tilde{\Omega}_{i,j}$ that will be defined later. The RHS (2.7c) reads in this control volume:

$$S_{i,j}^{xy} = - \underbrace{\int_{\tilde{\Omega}_{i,j}} \tau_e^{xy} dV}_{\textcircled{1}} + \lambda \underbrace{\int_{\tilde{\Omega}_{i,j}} \tau_e^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} dV}_{\textcircled{2}} + \lambda \underbrace{\int_{\tilde{\Omega}_{i,j}} \tau_e^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} dV}_{\textcircled{3}} + \underbrace{\int_{\tilde{\Omega}_{i,j}} \eta_e \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) dV}_{\textcircled{4}} - \lambda \alpha \underbrace{\int_{\tilde{\Omega}_{i,j}} (\tau_e^{xx} \tau_e^{xy} + \tau_e^{xx} \tau_e^{yy}) dV}_{\textcircled{5}}. \quad (3.11)$$

The discretization will be performed along the lines of the normal stress equation to yield a semi-discrete equation of the form:

$$\lambda \left(\mathcal{M}_e^{xy} \frac{dT_e^{xy}}{dt} + C_e^{xy} [\bar{U}] T_e^{xy} \right) = -\mathcal{M}_e^{xy} T_e^{xy} + S_e^{xy} [T_e, U], \quad (3.12)$$

where \mathcal{M}_e^{xy} is the diagonal mass matrix whose entries, denoted $\tilde{V}_{i,j}^{xy}$, correspond to the areas of the control volume $\tilde{\Omega}_{i,j}$. As shown in Fig. 5, these staggered control volumes are

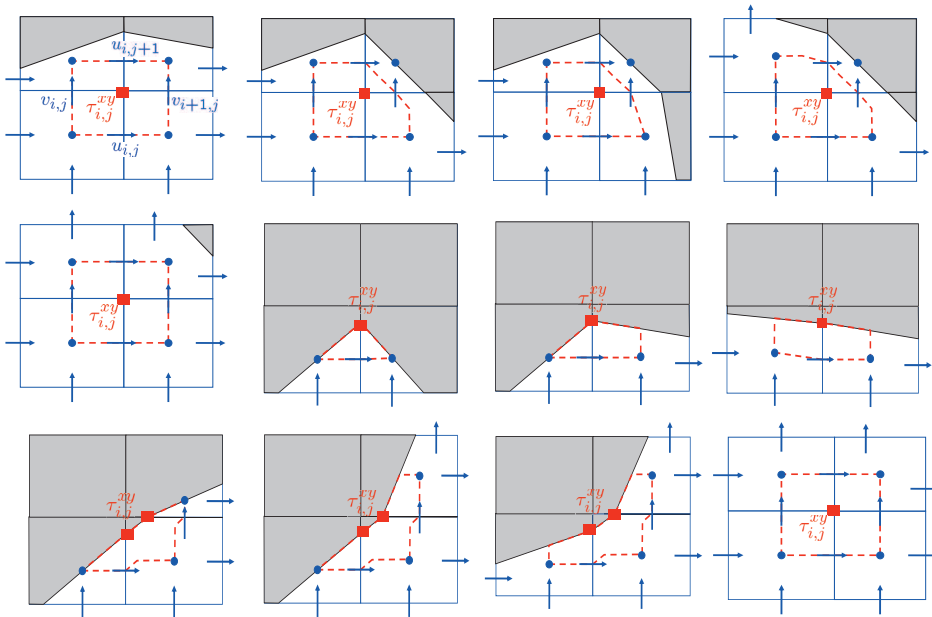


Figure 5: Generic types of control volumes $\tilde{\Omega}_{i,j}$ for the shear stress $\tau_{i,j}^{xy}$ in the LS-STAG mesh.

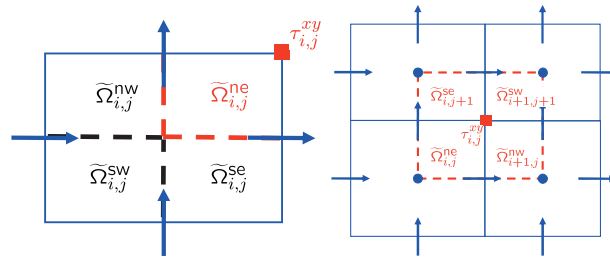


Figure 6: At left: Decomposition of Cartesian cell $\Omega_{i,j}$ in 4 quarters (see Eq. (3.13)). At right: Resulting control volume $\tilde{\Omega}_{i,j}$ for the shear stress $\tau_{i,j}^{xy}$ in a Cartesian mesh (see Eq. (3.14)).

created from quarters of the neighboring cells. Building a discretization for each of the particular cases in this figure can be a demanding task. Instead, we will use an effective strategy that has been defined in [17] for the Navier-Stokes equations: the discretization will be performed independently for each cell quarter, such that any combination of four cell-quarters yields a consistent discretization that follows conservation properties similar to (3.8) and (3.10).

To build the control volume $\tilde{\Omega}_{i,j}$ for $\tau_{i,j}^{xy}$, the fluid cells $\Omega_{i,j}$ are first decomposed in 4 cell quarters as:

$$\Omega_{i,j} = \tilde{\Omega}_{i,j}^{ne} \cup \tilde{\Omega}_{i,j}^{nw} \cup \tilde{\Omega}_{i,j}^{sw} \cup \tilde{\Omega}_{i,j}^{se}, \quad (3.13)$$

where each quarter is denoted with compass notations. Then, $\tilde{\Omega}_{i,j}$ is obtained from the cell quarters that neighbor the upper right vertex of $\Omega_{i,j}$ as:

$$\tilde{\Omega}_{i,j} = \tilde{\Omega}_{i,j}^{ne} \cup \tilde{\Omega}_{i+1,j}^{nw} \cup \tilde{\Omega}_{i+1,j+1}^{sw} \cup \tilde{\Omega}_{i,j+1}^{se}, \quad (3.14)$$

and the area $\tilde{V}_{i,j}$ of this control volume can be written as:

$$\tilde{V}_{i,j} = \text{Area}(\tilde{\Omega}_{i,j}^{ne}) + \text{Area}(\tilde{\Omega}_{i+1,j}^{nw}) + \text{Area}(\tilde{\Omega}_{i+1,j+1}^{sw}) + \text{Area}(\tilde{\Omega}_{i,j+1}^{se}), \quad (3.15)$$

or, analogously:

$$\tilde{V}_{i,j} = \alpha_{i,j} V_{i,j} + \alpha_{i+1,j} V_{i+1,j} + \alpha_{i,j+1} V_{i,j+1} + \alpha_{i+1,j+1} V_{i+1,j+1}, \quad (3.16)$$

where the weights $\alpha_{i,j}$ are to be defined. This construction is best illustrated for the case of Cartesian mesh in Fig. 6, where the resulting control volume $\tilde{\Omega}_{i,j}$ is very intuitive and corresponds to the one used in the original Cartesian method of Darwish & Whiteman [21]. For the LS-STAG mesh, the decomposition of the 3 generic cut-cells in four quarters is illustrated in Fig. 7.

We now stress out that the actual areas of the cell quarters depicted in Fig. 7 will not be used for computing $\tilde{V}_{i,j}$. Instead, the weights $\alpha_{i,j}$ in (3.16) will be determined such as the following global property is enforced:

$$\int_{\Omega^f} \tau_e^{xy} dV \cong \sum_{\text{Fluid cells } \Omega_{i,j}} V_{i,j} [\tau_e^{xy}]_{i,j}^c = \mathbf{1}^T \mathcal{M}_e^{xy} T^{xy}, \quad (3.17)$$

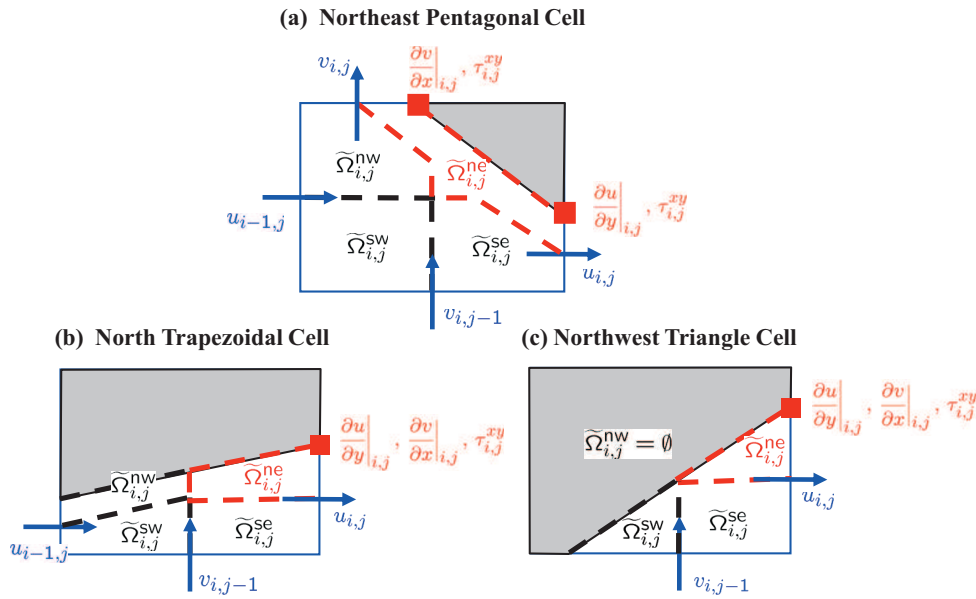


Figure 7: Decomposition of the 3 generic cut-cells of Fig. 4 in 4 quarters of cell.

where the mean value $[\cdot]^c$ at cell centers is given by (3.4). To calculate the weights, the RHS of Eq. (3.17) is expanded as:

$$\mathbf{1}^T \mathcal{M}_e^{xy} T^{xy} = \sum_{\text{Vertices } (i,j)} \tilde{V}_{i,j} \tau_{i,j}^{xy}, \quad (3.18)$$

where $\tilde{V}_{i,j}$ is given by (3.16). Now, we are able to compare Eqs. (3.17) and (3.18), i.e.:

$$\begin{aligned} & \sum_{\text{Fluid cells } \Omega_{i,j}} V_{i,j} [\tau_e^{xy}]_{i,j}^c \\ &= \sum_{\text{Vertices } (i,j)} \left(\alpha_{i,j} V_{i,j} + \alpha_{i+1,j} V_{i+1,j} + \alpha_{i,j+1} V_{i,j+1} + \alpha_{i+1,j+1} V_{i+1,j+1} \right) \tau_{i,j}^{xy}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

and, by using (3.4), this equality leads unambiguously to the following definition of the weights:

$$\alpha_{i,j} = \begin{cases} 0 & \text{if } \Omega_{i,j} \text{ is a solid cell,} \\ 1/3 & \text{if } \Omega_{i,j} \text{ is a triangular cell,} \\ 1/4 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (3.20)$$

Quadrature (3.16) is also used for discretizing the integral terms of the RHS (3.11). For example, since the integrand in Terms ② and ③ is a product of terms defined at different

locations on the LS-STAG mesh, their discretization is performed with the following 2 steps: First, midpoint rule for Term ② gives:

$$\int_{\tilde{\Omega}_{i,j}} \tau_e^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} dV \cong \left[\int_{\tilde{\Omega}_{i,j}} \tau_e^{xx} dV \right] \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j}, \tag{3.21}$$

where the discrete quotient for $\partial v/\partial x|_{i,j}$ is given in [17]. The discretization is completed by decomposing the integral in each cell quarter as:

$$\int_{\tilde{\Omega}_{i,j}} \tau_e^{xx} dV = \int_{\tilde{\Omega}_{i,j}^{ne}} \tau_e^{xx} dV + \int_{\tilde{\Omega}_{i+1,j}^{nw}} \tau_e^{xx} dV + \int_{\tilde{\Omega}_{i+1,j+1}^{sw}} \tau_e^{xx} dV + \int_{\tilde{\Omega}_{i,j+1}^{se}} \tau_e^{xx} dV. \tag{3.22}$$

Then, Quadrature (3.16) yields the following discretization for Term ②:

$$\begin{aligned} & \int_{\tilde{\Omega}_{i,j}} \tau_e^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} dV \\ & \cong \left[\alpha_{i,j} V_{i,j} \tau_{i,j}^{xx} + \alpha_{i+1,j} V_{i+1,j} \tau_{i+1,j}^{xx} + \alpha_{i+1,j+1} V_{i+1,j+1} \tau_{i+1,j+1}^{xx} + \alpha_{i,j+1} V_{i,j+1} \tau_{i,j+1}^{xx} \right] \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j}. \end{aligned} \tag{3.23}$$

The quadrature of Terms ③ and ⑤ follows the same lines, while the 2 remaining terms in (3.11) are straightforwardly discretized with midpoint rule.

The discretization of the convective terms poses no further difficulties compared to what has been done previously. The discretization is performed independently for each cell quarter that composes $\tilde{\Omega}_{i,j}$ and, as an example, the convective flux on the east face of $\tilde{\Omega}_{i,j}$ for the control volumes displayed in the first rows of Fig. 5 is:

$$\int_{\tilde{\Gamma}_{i+1,j}^{nw,e} \cup \tilde{\Gamma}_{i+1,j+1}^{sw,e}} (v \cdot e_x) \tau_e^{xy} dy \cong \frac{1}{2} \left[\frac{\bar{u}_{i,j} + \bar{u}_{i+1,j}}{2} + \frac{\bar{u}_{i+1,j+1} + \bar{u}_{i,j+1}}{2} \right] [\tau_e^{xy}]_e, \tag{3.24}$$

where $[\tau_e^{xy}]_e$ is approximated with upwind interpolation.

3.5 Time-stepping algorithm

The computations of steady flows presented in this paper are performed by means of a time-marching algorithm for the coupled system formed by the semi-discrete Navier-Stokes equations and the viscoelastic equations (3.7),(3.12). For this purpose, we extend our well established AB/BDF2 semi-implicit fractional-step scheme [17] to viscoelastic problems, except that only a first-order version is tentatively implemented. Starting from the solution (U^n, P^n) and $T_e^n = (T_{xx,e}^n, T_{xy,e}^n, T_{yy,e}^n)$ at time $t_n = n\Delta t$ where Δt is the timestep, the solenoidal velocity U^{n+1} and the corresponding pressure P^{n+1} are computed from a semi-implicit Euler fractional-step scheme. Then the extra-stress equations are advanced from:

$$\lambda \mathcal{M}_e \frac{T_e^{n+1} - T_e^n}{\Delta t} + \lambda \mathcal{C}_e [U^{n+1}] T_e^n = -\mathcal{M}_e T_e^{n+1} + S_e [T_e^{upd}, U^{n+1}]. \tag{3.25}$$

These equations are solved sequentially for $T_{xx,e}^{n+1}$, $T_{yy,e}^{n+1}$ and then $T_{xy,e}^{n+1}$. In order to increase the implicit nature of the time-advancement, each equation is solved by using the latest update of the elastic stresses, *i.e.* $T_e^{\text{upd}} = (T_{xx,e}^{n+1}, T_{xy,e}^n, T_{yy,e}^n)$ for the $T_{xx,e}^{n+1}$ equation, $T_e^{\text{upd}} = (T_{xx,e}^{n+1}, T_{xy,e}^n, T_{yy,e}^{n+1})$ for the $T_{yy,e}^{n+1}$ equation, and $T_e^{\text{upd}} = (T_{xx,e}^{n+1}, T_{xy,e}^{n+1}, T_{yy,e}^{n+1})$ for the $T_{xy,e}^{n+1}$ equation. For the case of the Giesekus model, the quadratic term is implicitly solved by node-wise Picard inner iterations.

4 Numerical simulation of planar contraction flows

The LS-STAG method is now applied to the numerical simulation of viscoelastic flows in 4:1 contraction channels (see Fig. 8). These configurations have become popular benchmarks because the abrupt change in the geometry causes very high stress levels near the contraction and, even in the creeping flow regime, thin stress boundary layers develop along the downstream boundary. For these reasons, the numerical simulation of flow in contraction geometries is highly prone to the high Weissenberg number problem (HWNP) mentioned in the Introduction: for a given mesh, a loss of accuracy of the results is observed as the Weissenberg number is increased until, eventually, no stable solution can be obtained above a critical value of the Weissenberg number We_{crit} .

Thus, the accuracy of the LS-STAG method will be assessed against the results of the literature, and its robustness will be evaluated by comparing the critical Weissenberg that is reached on a given mesh. For the configuration with a sharp re-entrant corner (Fig. 8, left), which is the most heavily studied and where the most extensive results are found [28, 31, 48–50]), only fluid cells such as the ones displayed in Figs. 1 and 2 will be found in the grids we use. The case with a rounded re-entrant corner (Fig. 8, left) is less studied [26, 30, 34], but it will be used to assess the LS-STAG discretization in the cut-cells of Fig. 7. Note that these 2 numerical benchmarks concern the Oldroyd B fluid

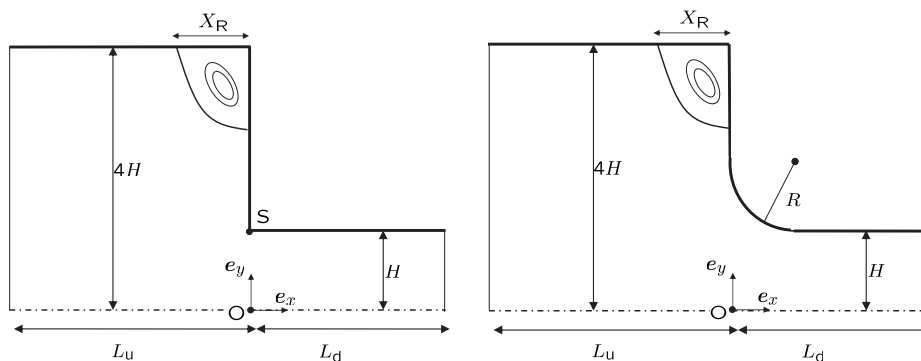


Figure 8: Sketch of the upper half of 4:1 planar contraction geometries, where $(0, e_x)$ corresponds to the symmetry plane. At left: with sharp re-entrant corner S , and at right: with rounded reentrant corner.

in creeping condition (i.e., $Re = 0$). In a final part, we will illustrate the ability of the LS-STAG method to compute flows of practical interest with various constitutive laws (Oldroyd-B, White-Metzner, one- and 4-mode Giesekus models) on the polymer flow that was studied experimentally in [35] and numerically in [51].

4.1 Geometry and boundary conditions

The flow in both configurations of Fig. 8 is considered steady, so only the upper half of the domain will be considered and a symmetry condition is applied at $y=0$. To be consistent with previous studies, the dimensionless numbers (2.5) are constructed by taking as reference values the half height H and the bulk velocity U of the downstream channel, and the solvent viscosity ratio is set to $\beta = 1/9$. Furthermore, the results given on the stresses will be normalized with $\tau_w = 3\eta U/H$, which correspond to the total shear stress at the outlet boundary given by the Poiseuille solution. As proposed by Keiller [34], the rounded reentrant corner corresponds to a quarter of circle with radius $R=0.75H$. As recommended by Phillips & Williams [38] and later used in [49], the length of the upstream and downstream channels is $L_u = L_d = 16H$. A sufficiently large computational domain that allows complete flow development is required for computing global flow quantities such as the Couette correction. For the contraction flow with sharp corner, Alves *et al.* [48] thoroughly studied the length of the downstream channel necessary for complete flow development at increasing elasticity levels, and proposed an empiric correlation that shows that a downstream channel of order $13H$ is sufficient for the computations we report in this paper. In addition, our computations with longer channels showed that there were no impact on the accuracy of the Couette correction values we report.

At the inlet boundary $x = -L_u$, a fully developed Poiseuille profile is imposed for both velocity and extra-stresses:

$$u = \frac{3U}{8} \left(1 - \frac{y^2}{(4H)^2} \right), \quad v = 0, \quad \tau_e^{xx} = 2\lambda\eta_e \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2, \quad \tau_e^{yy} = 0, \quad \tau_e^{xy} = \eta_e \frac{\partial u}{\partial y}. \quad (4.1)$$

At the cell layer next to the outlet boundary $x = L_d$, the constitutive equation for the extra-stresses is actually computed. In particular, for calculating the RHS (3.11) of the shear stress equation at the vertices of the outlet boundary, a constant extrapolation of the normal stresses is used. For the Navier-Stokes, boundary conditions at the outlet need to be formulated. Some previous studies [26, 30, 38, 50, 50, 52] prescribe fully developed velocity profiles at the outlet. In this paper, we have used a convective outflow condition [53] for all flow regimes without noticing any distortions near the outlet. All simulations are initialized from rest, and the stationary state is considered to be reached when the following criterion is fulfilled for all fluid cells:

$$\frac{\max_{i,j} |X_{i,j}^{n+1} - X_{i,j}^n|}{\max_{i,j} |X_{i,j}^n|} < 10^{-6}, \quad (4.2)$$

where X represents the components of the velocity and extra-stress tensor.

4.2 Contraction Flow with sharp reentrant corner

This study is performed on a series of Cartesian non-uniform meshes, whose main characteristics are given in Table 2, and whose coarsest mesh M1 is depicted in Fig. 9. These grids feature a similar clustering near solid walls, and most notably have square cells of size h near the sharp re-entrant corner as in [48]. Fig. 10 displays the streamlines of the flow obtained on our finest mesh M4, up to the highest value of the Weissenberg number we have reached, *i.e.* $We = 3$. This figure depicts the main feature of the flow: the presence of a large recirculation zone near the salient corner, whose size monotonically decreases as the level of elasticity is increased [11,48]. We point out that the recirculation zone is roughly of size H for the level of elasticity we considered, which means that our meshes M1 to M4 have respectively 15 to 90 cells at least in the streamwise direction to represent the salient vortex. Fig. 11 shows the iso-contours of the normal extra-stress τ^{xx} obtained for $We=3$. These contours are free from any spurious oscillations in the vicinity of the singular re-entrant corner, and the presence of a stress boundary layer along the downstream wall is clearly seen.

Table 2: Main characteristics of the meshes used for the flow in the contraction with sharp re-entrant corner. All meshes have 63.2% of fluid cells and the others are solid cells.

	$N_x \times N_y$	h/H	Number of total cells	Number of fluid cells
M1	75×33	0.04	2475	1565
M2	150×66	0.02	9900	6260
M3	300×132	0.01	39600	25040
M4	450×192	0.005	86400	54900

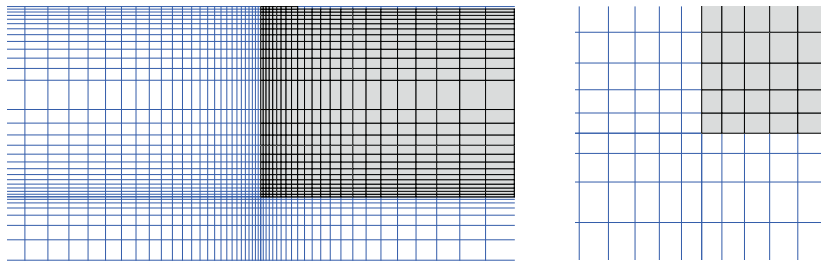


Figure 9: Close-up of the M1 mesh used for the flow in the contraction with sharp re-entrant corner. At left: on the part $[-4H, 4H] \times [0, 4H]$ of the domain; at right: on the part $[-0.25H, 0.25H] \times [0.75H, 1.25H]$ of the domain.

The recirculation zone is characterized by its size X_R (see Fig. 8) and intensity $\Delta\psi_R$. Another quantity of interest is related to the pressure drop caused by the sudden contraction, which is measured by the dimensionless Couette correction:

$$C = (\Delta P - \Delta P_{fd}) / 2\tau_w, \quad (4.3)$$

where ΔP is total pressure drop computed in the fluid domain, and ΔP_{fd} corresponds to

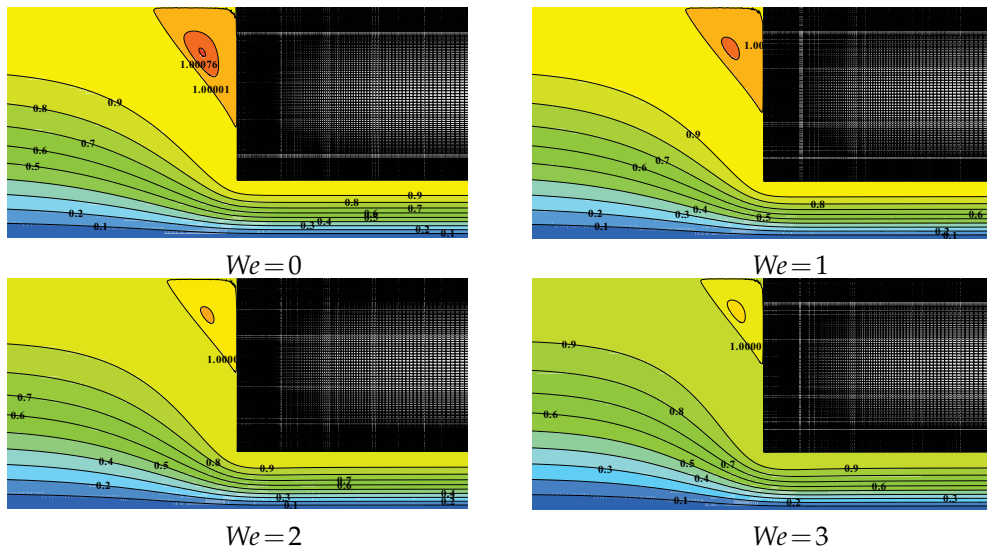


Figure 10: Streamlines of the flow in the contraction with sharp re-entrant corner obtained on the M4 mesh for increasing values of the Weissenberg number.

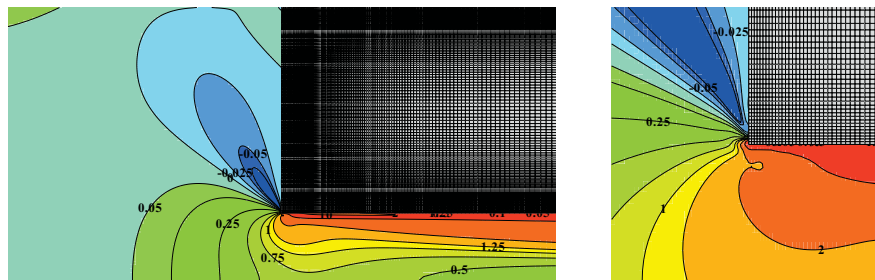


Figure 11: Iso-values of the normal extra-stress τ^{xx}/τ_w for the flow in a contraction with sharp-reentrant corner at $We=3$ on the M4 mesh. At left: on the part $[-4H, 4H] \times [0, 4H]$ of the domain; at right: on the part $[-0.25H, 0.25H] \times [0.75H, 1.25H]$ of the domain.

the fully-developed contribution in both upstream and downstream channels. Table 3 reports the value of these quantities obtained on the M1-M4 meshes and, for the purpose of comparison with Ref. [48], the maximal value of the velocity and stress on the symmetry axis (denoted respectively u_{\max} and τ_{\max}^{xx}). For Newtonian flow ($We=0$), one may consider that grid convergence is reached for mesh M3. For elastic flows, a very satisfactory mesh convergence is obtained up to a relatively high Weissenberg number ($We=2$). For the highest Weissenberg number considered ($We=3$) the convergence of the results is slightly less significant, in particular for the size and intensity of the recirculation zone. It will be seen next that this trend is also observed by the other studies. This is certainly due to the fact that we are close to the critical Weissenberg of the present method for mesh

Table 3: Results for the flow in the contraction with sharp re-entrant corner obtained on the various meshes of Table 4. All simulations were performed with the time-step $\Delta t = 5 \times 10^{-3} H/U$ except \dagger : $\Delta t = 2.5 \times 10^{-3} H/U$ and \ddagger : $\Delta t = 1 \times 10^{-3} H/U$.

	$\frac{X_R}{H}$	$\frac{\Delta\psi_R \cdot 10^3}{UH}$	$\frac{u_{\max}}{U}$	$\frac{\tau_{\max}^{xx}}{\tau_w}$	C
We=0					
M1	1.753	1.334	1.457	0.338	0.061
M2	1.493	1.159	1.492	0.494	0.327
M3	1.497	1.166	1.498	0.359	0.361
M4	1.498	1.172	1.499	0.359	0.372
We=1					
M1	1.436	1.019	1.492	0.565	-0.690
M2	1.410	0.920	1.521	0.570	-0.535
M3	1.397	0.868	1.528	0.576	-0.495
M4 [†]	1.394	0.856	1.527	0.577	-0.492
We=2					
M1	1.301	0.680	1.542	0.690	-1.699
M2	1.295	0.673	1.606	0.716	-1.487
M3 [†]	1.291	0.666	1.593	0.703	-1.354
M4 [‡]	1.263	0.597	1.566	0.672	-1.399
We=3					
M1 [†]	0.981	0.218	1.742	1.107	-1.324
M2 [†]	1.278	0.709	1.748	0.938	-1.769
M3 [‡]	1.223	0.625	1.659	0.779	-2.103
M4 [‡]	1.136	0.437	1.602	0.712	-2.231

Table 4: Comparison of the critical Weissenberg number reached for the flow in the contraction with sharp re-entrant corner.

Authors	blackPresent	[38]	Alves <i>et al.</i> [48]	Kim <i>et al.</i> [28]	Li <i>et al.</i> [50]
Mesh	M4	Mesh 3	M5	UM3	Mesh III
h/H	$5 \cdot 10^{-3}$	$4 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$
We_{crit}	black3	2.5	3	2.5	3.6

M4. As mentioned in Table 3, the value of the time-step had to be lowered by a factor of five in order to obtain a converged solution at $We = 3$. For values higher than $We = 3$, a converged solution could not be obtained even if the time-step was further decreased: hence, it can be stated that the critical Weissenberg number is $We_{\text{crit}} = 3$ for our study.

The results obtained on meshes M1-M4 will be confronted against the ones given in the literature, and most notably the finite volume method of Phillips & Williams [31] (staggered, structured mesh), Alves *et al.* [48] (collocated, structured mesh), Edussuriya *et al.* [49] (collocated, unstructured mesh), and the finite element methods of Matallah *et al.* [26], Kim *et al.* [28] and Li *et al.* [50]. But first, Table 4 gives a comparison of the critical Weissenberg number We_{crit} that is reached in the studies where this information was available, since all the studies cited above were confronted to the HWNP. The characteristic size of the cells near the reentrant corner is also given, since this numerical instability is associated to the singularity at the sharp corner: the finer the mesh is, the more robust is the method. In this respect, the LS-STAG method with $We_{\text{crit}} = 3$ on the M4 mesh has a robustness similar to the previous studies [28, 31, 48]. Only Ref. [50] reached a higher level of elasticity, but on a much coarser mesh of cell size comparable to our M2 mesh.

Table 5: Comparison of results found in the literature for the flow in the contraction with sharp re-entrant corner. All simulations were performed at $Re=0$ except [50] where $Re=0.01$ is set.

	$\frac{X_R}{H}$	$\frac{\Delta\psi_R \cdot 10^3}{UH}$	$\frac{u_{\max}}{U}$	$\frac{\tau_{\max}^{xx}}{\tau_w}$	C
$We=0$					
M4	1.498	1.172	1.499	0.359	0.372
[48]	1.500	1.178	1.501	0.360	0.374
[28]	1.448	1.150	–	–	–
[31]	1.417	1.18	–	–	–
[49]	1.391	1.1	–	–	–
[50]	1.503	1.18	–	–	0.394
$We=1$					
M4	1.394	0.856	1.527	0.577	–0.492
[48]	1.373	0.780	1.525	0.544	–0.505
[28]	1.339	0.778	–	–	–
[31]	1.384	1.10	–	–	–
[52]	1.358	0.811	–	–	–
[49]	1.408	1.1	–	–	–
[50]	1.405	1.06	–	–	–0.456
$We=2$					
M4	1.263	0.597	1.566	0.672	–1.399
[48]	1.181	0.422	1.546	0.612	–1.492
[28]	1.125	0.423	–	–	–
[31]	1.377	1.18	–	–	–
[52]	1.203	0.489	–	–	–
[49]	1.304	0.7	–	–	–
[50]	1.357	1.16	–	–	–1.340
$We=3$					
M4	1.136	0.437	1.602	0.712	–2.231
[48]	0.973	0.207	1.562	0.638	–2.501
[28]	0.900	0.212	–	–	–
[49]	1.217	0.7	–	–	–
[50]	1.543	1.93	–	–	–2.206

Table 5 compares the results obtained on our most refined mesh with those found in the literature. For all Weissenberg numbers, an excellent agreement is found with the benchmark results of Ref. [48] on the value of u_{\max} and τ_{\max}^{xx} , and with [48,50] for the Couette correction C. The characteristics of the salient vortex prove to be the most difficult quantities to predict at high level of elasticity. At $We=0$ or 1, all studies agree on its size and intensity but, for high Weissenberg numbers, the dispersion of the results becomes flagrant. Alves *et al.* [48] published highly accurate benchmark results that showed that the size of the salient vortex is monotonously decreasing as the level of elasticity is raised. These results were obtained with a high resolution scheme for convection and the use of Richardson extrapolation. However, these authors observed that when a first-order upwind scheme was used, the opposite trend was obtained: the vortex size was increasing with respect to We . Edussuriya *et al.* [49] also observed that the size of the vortex was very sensitive to the convection scheme they were using (Hybrid or QUICK). It is worthwhile to observe that, with the exception of Ref. [28], the other studies mentioned in Table 5 fail to predict the monotonic decrease of the vortex. On the other hand, our computations are able to predict the monotonic decrease of the vortex size, even on the coarser meshes M1-M3 (Table 3), which illustrates thus the capacities of our numerical methodology.

4.3 Contraction flow with rounded reentrant corner

We now turn to the simulation of the contraction flow with rounded re-entrant corner shown in Fig. 8 (right). The domain size and boundary conditions are similar to the sharp corner case. As for the sharp corner flow, a series of refined meshes named m1-m4 have been constructed (see Fig. 12). For controlling the size of the cut-cells, these meshes use an uniform mesh-block of spacing h near the rounded corner. The main characteristics of these meshes are reported in Table 6. In this table, $\overline{\Delta x_{cc}}$ is defined as the average grid spacing of our meshes in the vicinity of the immersed boundary, where $\Delta x_{cc} = \sqrt{V_{cc}}$ is the characteristic length of the cut-cells and $\overline{(\cdot)}$ is the mean value of all cut-cells on the quarter of circle. This quantity will be used for comparison with the grid spacing used by other studies on conformal meshes.

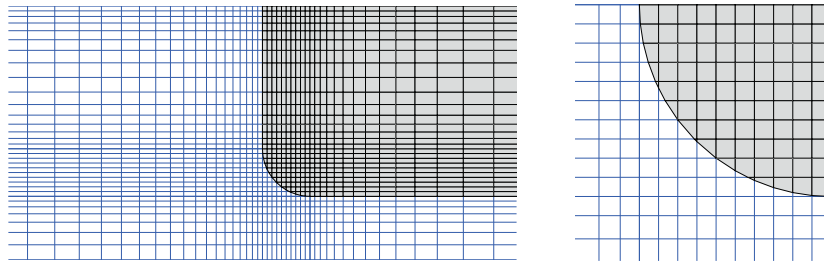


Figure 12: Close-up of the m1 mesh for the flow in the contraction with rounded re-entrant corner. At left: on the part $[-4H, 4H] \times [0, 4H]$ of the domain; at right: on the part $[-0.25H, 0.25H] \times [0.75H, 1.25H]$ of the domain.

Table 6: Main characteristics of the meshes used for the flow in the contraction with rounded re-entrant corner.

Mesh	$N_x \times N_y$	h/H	Number of total cells	Number of fluid cells	N_{cc}	$\overline{\Delta x_{cc}}/H$
m1	64×33	0.075	2112	1285 (61%)	21	1.210^{-2}
m2	96×50	0.05	4800	2952 (59%)	31	6.510^{-3}
m3	150×71	0.03	10650	6820 (64%)	51	3.010^{-3}
m4	240×114	0.01875	27360	17552 (64%)	81	1.510^{-3}

The contraction flow with rounded corner has been much less extensively studied than the sharp corner case, and we have only been able to compare our results with those of Ref. [26], who used a finite element method with various stress splitting schemes for stabilizing the computations, and those of [30] who used a hybrid finite volume/element method on triangular elements. As in the sharp corner case, the HWNP is encountered but at a higher level of elasticity since the singular corner is smoothed: as reported in Table 7, the critical Weissenberg number $We_{crit} = 8$ has been reached on the m2 mesh, whose smaller cut-cell has length $\Delta x_{cc} = 8 \cdot 10^{-4}H$. This table also shows we have reached a much higher level of elasticity than previous studies on comparable meshes. Fig. 13

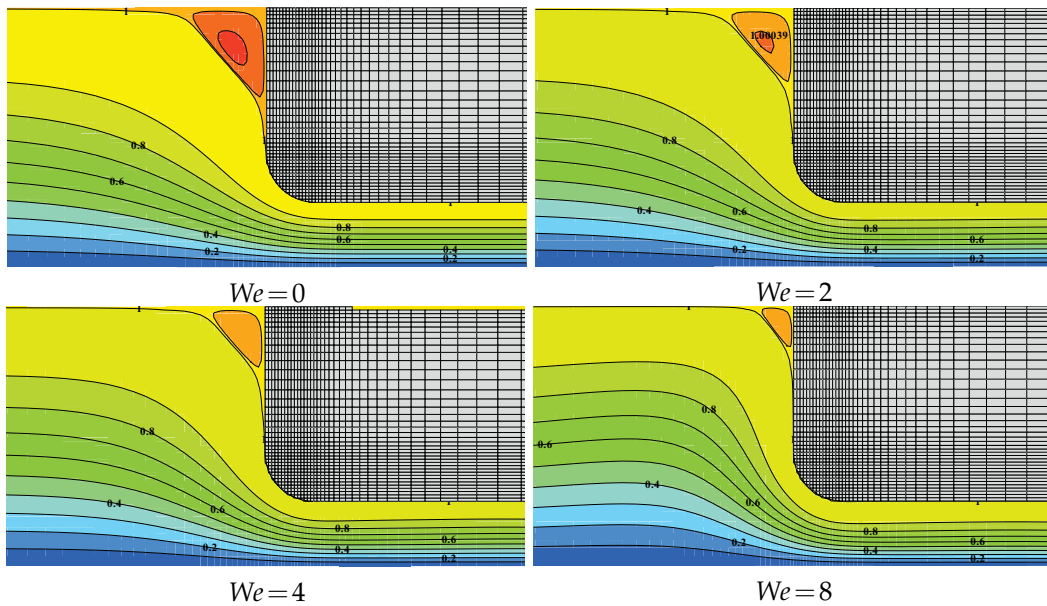


Figure 13: Streamlines of the flow in the contraction with rounded re-entrant corner obtained on the m2 mesh for increasing values of the Weissenberg number.

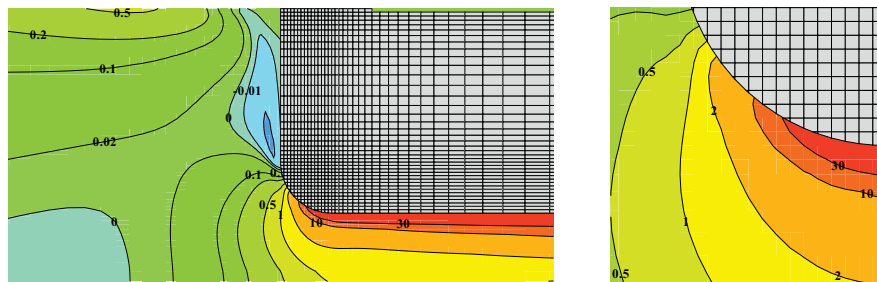


Figure 14: Isovalues of the extra-stress τ^{xx} / τ_w at $We=8$ for the contraction flow with rounded re-entrant corner on the m2 mesh. At left: on the part $[-4H, 4H] \times [0, 4H]$ of the domain; At right: on the part $[-0.25H, 0.75H] \times [0.5H, 1.5H]$.

shows the streamlines for flows up to $We=8$ on the m2 mesh. A monotonic contraction of the salient vortex is observed as the elasticity level increases, as reported in the literature. Fig. 14 shows the iso-contours of the extra stress τ^{xx} for the highest Weissenberg we reached. As in [30], these contours clearly show the stress boundary layer along the downstream wall at the higher levels of elasticity but, in contrary to their results at $We=4$ and above, our stress field is free from any spurious oscillations. These computations clearly demonstrate that the cut-cells discretization presented in Section 3 is both robust and accurate.

Table 7: Comparison of the critical Weissenberg number reached for the flow in the contraction with rounded re-entrant corner.

Authors	blackPresent	Matalah <i>et al.</i> [26]	Aboubacar <i>et al.</i> [30]
Name of mesh	m2	m2	m3
$\overline{\Delta x}/H$	$6.5 \cdot 10^{-3}$	$1.7 \cdot 10^{-2}$	$9.7 \cdot 10^{-3}$
We_{crit}	black8	6	4.4

Table 8: Salient results on the flow in the contraction with rounded re-entrant corner obtained on the various meshes of Table 6, and comparison with the literature. For the simulations with We lower than 3, the value of the time-step is 5×10^{-3} . For $We=4, 6$ and 8 , the time-step used is respectively $2.5 \times 10^{-3}, 1 \times 10^{-3}$ and 5×10^{-4} .

	$\frac{X_R}{H}$	$\frac{\Delta\psi_R \cdot 10^3}{UH}$	$\frac{u_{max}}{U}$	$\frac{\tau_{max}^{xy}}{\tau_w}$	C
$We=0$					
m1	1.253	0.602	1.479	0.305	0.045
m2	1.261	0.602	1.492	0.310	0.102
m3	1.265	0.593	1.494	0.311	0.112
m4	1.268	0.594	1.498	0.313	0.131
$We=1$					
m1	1.187	0.506	1.507	0.515	-0.875
m2	1.193	0.496	1.518	0.507	-0.735
m3	1.202	0.496	1.519	0.503	-0.733
m4	1.205	0.491	1.522	0.499	-0.716
[30]	-	0.471	-	-	-0.775
$We=2$					
m1	1.108	0.433	1.535	0.666	-1.598
m2	1.092	0.370	1.539	0.618	-1.598
m3	1.092	0.354	1.535	0.595	-1.635
m4	1.086	0.342	1.538	0.577	-1.644
[26]	-	0.46	-	-	-0.69
[30]	-	0.342	-	-	-1.874
$We=3$					
m1	1.050	0.361	1.573	0.788	-2.205
m2	0.999	0.287	1.564	0.689	-2.314
m3	0.979	0.254	1.551	0.641	-2.425
m4	0.955	0.230	1.553	0.609	-2.490
[30]	-	0.225	-	-	-2.963
$We=4$					
m1	0.985	0.326	1.619	0.914	-2.560
m2	0.914	0.238	1.593	0.747	-3.399
m3	0.879	0.201	1.570	0.671	-3.041
[26]	-	0.33	-	-	-1.44
[30]	-	0.160	-	-	-3.921
$We=6$					
m1	0.839	0.295	1.731	1.249	-2.427
m2	0.746	0.194	1.667	0.889	-3.690
[26]	-	0.26	-	-	-2.27
$We=8$					
m1	0.616	0.289	1.892	1.862	-0.960
m2	0.535	0.181	1.789	1.142	-2.378

Table 8 reports the results obtained on meshes m1-m4 and give comparison with the literature, when available. Up to $We = 4$, we obtained a very satisfactory convergence for the various quantities displayed in the table, which validates our treatment in the cut-cells. A quantitative agreement is met with Ref. [30] on the Couette correction and the intensity of the salient vortex. Quantitative data on the length X_r of the salient vortex were unavailable, so we observed graphically on the figures of Ref. [30] the decrease of X_r

from $1.2H$ at $We=0.1$ to $0.8H$ at $We=4.4$, which is a trend similar to our prediction. For higher elasticity levels, we could only obtain a converged solution on the two coarsest meshes, which hints that the critical Weissenberg number is soon reached. For $We=8$, we are the first to report results on this flow. Even though results are very disperse, showing that the meshes are not fine enough to resolve the thin shear stress layers, we hope these results will be a worthwhile contribution to the study of this flow.

4.4 Comparison with experiments

The paper is now concluded by demonstrating the ability of the LS-STAG method to simulate polymer flows in a regime of practical interest. For this purpose, we considered the experimental results of Quinzani *et al.* [35, 36] for the flow of a polymer solution (polyisobutylene) in the planar 4:1 contraction geometry of Section 4.2 with $H=0.32\text{cm}$. All the numerical results reported in this section were obtained with the M4 mesh of Table 2.

The polymer fluid has been characterized rheologically as shear-thinning and viscoelastic, and in the vicinity of the die entry the flow undergoes large extensional deformations that yield numerical and modelling challenges to differential constitutive laws [36]. Fig. 15 displays the shear viscosity $\eta = \eta_s + \eta_e$ and the first normal stress coefficient $\Psi_1 = (\tau^{xx} - \tau^{yy})/\dot{\gamma}^2$ for steady shear flow obtained with the various viscoelastic models we consider, namely Oldroyd-B (OB), White-Metzner (WM, with a Carreau-Yasuda law for the polymer viscosity), one-mode (G1M) and 4-mode (G4M) Giesekus models (the value of the viscometric parameters of the models are given in [36]). As expected, the Oldroyd B model is unable to fit the viscometric data since it predicts constant shear viscosity and zero normal stress differences. The White-Metzner model accurately fits $\eta(\dot{\gamma})$ but overpredicts $\Psi_1(\dot{\gamma})$ while the Giesekus one-mode model underpredicts $\eta(\dot{\gamma})$ at high shear rates and overpredicts $\Psi_1(\dot{\gamma})$. As a consequence, we do not expect that the

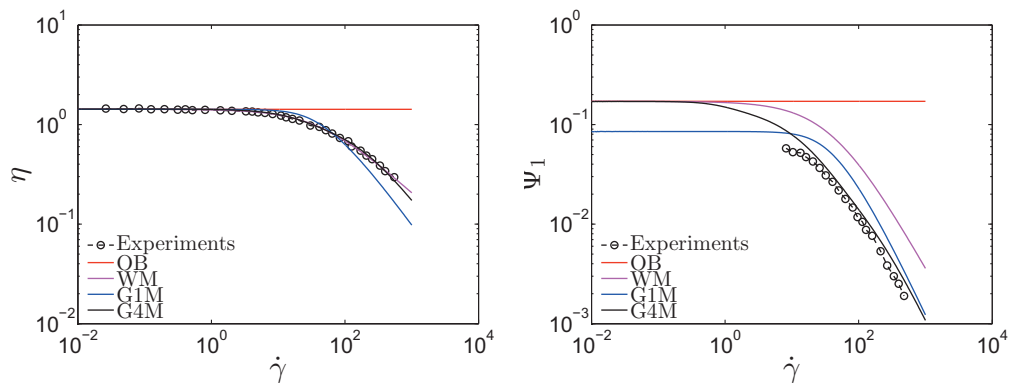


Figure 15: Shear viscosity and first normal stress coefficient versus shear rate $\dot{\gamma}$ for the various viscoelastic models and the experimental results of Ref. [35].

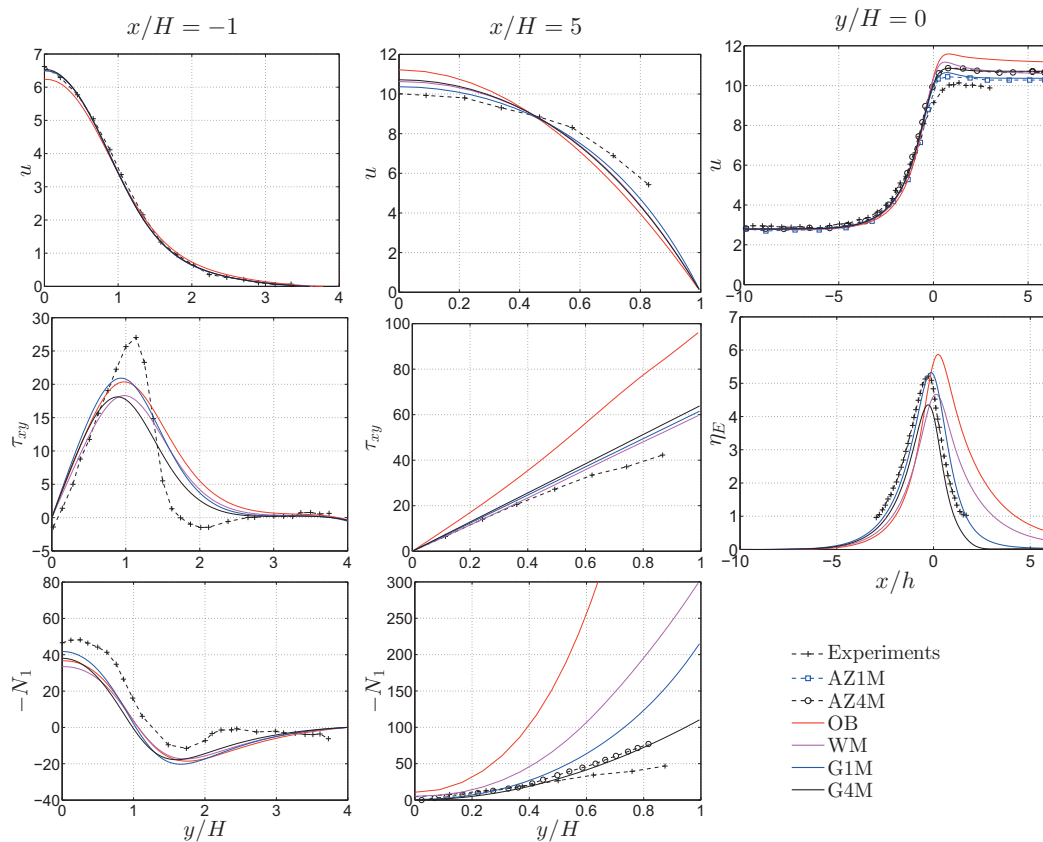


Figure 16: Comparison of the numerical predictions of the LS-STAG code with experimental data [35] and numerical results obtained in [51] with one-mode (AZ1M) and four-mode (AZ4M) Giesekus model.

one-mode models give quantitative matches to the flow experiments. In contrast the 4-mode Giesekus, which improves significantly the fitting of the experimental data compared to one-mode models, is expected to give the best prediction of this flow.

We consider now the Run 3 experiment in Ref. [35] with inflow velocity $U = 7.44 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$, which yields the flow parameters $Re = 0.28$, $We = 1.39$ and $\beta = 0.0014$. Azaïez *et al.* [51] were one of the first to report numerical simulation of this flow with a EVSS finite element method. These authors have considered 4 constitutive models (namely: FENE-P, Phan-Thien-Tanner, one- and 4-mode Giesekus laws). We will report in the following the results they obtained with both Giesekus models, which give the best fit to the flow experiments. Fig. 16 shows profiles of the velocity, shear and normal stresses (first normal stress difference $N_1 = \tau^{xx} - \tau^{yy}$ and extensional viscosity $\eta_E = \tau^{xx} - \tau^{yy} / \dot{\epsilon}_{\max}$, where $\dot{\epsilon}_{\max}$ is the maximum of the extension rate $\dot{\epsilon} = \partial u / \partial x$ along the centerline) at various axial cross sections and on the centerline of the domain. Upstream of the contraction (section

$x = -H$), all models perform well to predict the trends observed in the experiments. In particular, due to the low stress levels in this part of the geometry, the velocity profiles do not show the flat profile representative of shear-thinning shear flows. Downstream of the contraction (section $x = 5H$) where the flow undergoes strong elongational deformations, the computed profiles show a flattening qualitatively similar to the experimental data, except for the Oldroyd-B model which is unable to predict shear-thinning, and thus give by far the worst numerical predictions. For the stress profiles, all one-mode models fail to give quantitative agreement with the experimental measurements. In contrast, the 4-mode Giesekus model gives satisfactory results downstream of the contraction and along the centerline. It is worthwhile to observe that the LS-STAG and EVSS results are virtually undistinguishable, showing that the modelling errors greatly dominate the discretization errors.

Finally, we evaluate the various viscoelastic models by giving in Table 9 the maximal Weissenberg number we could reach for this experimental configuration. It is striking to observe that the Oldroyd-B model, which is the only one that cannot predict shear-thinning and gives the poorer results, is also the less stable. All other models reach substantially higher elasticity levels, certainly due to their shear-thinning properties which mitigate stress singularities near sharp corners. This result hints that viscoelastic models that give the most physically realistic results have the best stability properties at the discrete level.

Table 9: Critical Weissenberg number reached for the various viscoelastic models on the M4 mesh.

Models	OB	WM	G1M	G4M
We_{crit}	7	15	15	33 ^a
^a The Weissenberg number is based on the relaxation time of the first mode.				

5 Concluding remarks

This paper presents what is, to our knowledge, one of the first IB/cut-cell method for viscoelastic flows. For this type of flows, accurate discretization up to the cut-cells is of paramount importance for stability and accuracy, so the LS-STAG discretization of the Newtonian stresses [16, 17] has been extended to the transport equation for the elastic stresses. To prevent node-to-node oscillations of the stress variables, we have achieved a compatible velocity-pressure-stress coupling in the cut-cells which extends the staggered method of Darwish & Whiteman [21] for Cartesian meshes. The discretization of the constitutive equation is performed by constructing special quadratures which yield a globally conservative discretization up to the cut-cells. It is worthwhile to note that in the limiting case of a Cartesian domain, the LS-STAG discretization actually computes the shear stress at solid walls and at salient/re-entrant corners, in contrast to previous staggered discretization that use *ad hoc* interpolations at solid boundaries [21] or at re-

entrant corners [31]. The LS-STAG discretization is valid for a wide range of constitutive equations, such as the Oldroyd-B, White-Metzner and Giesekus models (in single and multi-mode versions).

The LS-STAG method has been successfully applied to popular benchmarks for viscoelastic flows: the four-to-one abrupt planar contraction flows with sharp corner (for assessing the robustness of the method) and with rounded re-entrant corner (for assessing the accuracy of the discretization in the cut-cells) for a wide range of Weissenberg numbers. Its application to flows of practical interest is also demonstrated for the polymer flows studied experimentally in Ref. [35]. It is worthwhile to observe that for the same discretization parameters, it is the model that gives the most physically realistic results (4-mode Giesekus) that displays the best stability properties. Nevertheless, the stability of our computations at high Weissenberg numbers need to be improved. In this respect, work is under way for combining the LS-STAG discretization with matrix logarithm formulations of the stress tensor [24] or the time-integration strategy borrowed from the numerical integration of Riccati differential systems [54].

References

- [1] R. Mittal and G. Iaccarino. Immersed boundary methods. *Annual Review of Fluid Mechanics*, **37**, 239–261, 2005.
- [2] E. Balaras. Modeling complex boundaries using an external force field on fixed Cartesian grids in large-eddy simulations. *Computers Fluids*, **33**, 375–404, 2004.
- [3] P. Parnaudeau, J. Carlier, D. Heitz, and E. Lamballais. Experimental and numerical studies of the flow over a circular cylinder at reynolds number 3900. *Physics of Fluids*, **20** 085101, 2008.
- [4] J. Yang, S. Preidikman, and E. Balaras. A strongly coupled, embedded-boundary method for fluid-structure interactions of elastically mounted rigid bodies. *Journal of Fluids and Structures*, **24**(2), 167–182, 2008.
- [5] L. Monasse, V. Daru, C. Mariotti, and S. Piperno. A conservative immersed boundary method for fluid-structure interaction in the compressible inviscid case. *Computational Fluid Dynamics 2010*, A. Kuzmin (Ed.), Springer, 2010.
- [6] M. D. De Tullio, A. Cristallo, E. Balaras, and R. Verzicco. Direct numerical simulation of the pulsatile flow through an aortic bileaflet mechanical heart valve. *Journal of Fluid Mechanics*, **622**, 259–290, 2009.
- [7] M. Bergmann and A. Iollo. Modeling and simulation of fish-like swimming. *Journal of Computational Physics*, **230**, 329–348, 2011.
- [8] J. Teran, L. Fauci, and M. Shelley. Peristaltic pumping and irreversibility of a Stokesian viscoelastic fluid. *Physics of Fluids*, **20**, 073101, 2008.
- [9] A. Nonaka, D. Trebotich, G. H. Miller, D. T. Graves, and P. Colella. A higher-order upwind method for viscoelastic flow. *Communications in Applied Mathematics and Computational Science*, **4**, 57–83, 2009.
- [10] M. J. Crochet, A. R. Davies, and K. Walters. *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow*. Elsevier, Amsterdam, 1984.
- [11] K. Walters and M. F. Webster. The distinctive CFD challenges of computational rheology. *International Journal For Numerical Methods in Fluid*, **43**, 577-596, 2003.

- [12] R. G. Owens and T. N. Phillips. *Computational Rheology*. Imperial College Press, London, 2002.
- [13] S. Kang, G. Iaccarino, and P. Moin. Accurate and efficient immersed-boundary interpolations for viscous flows. In *Center for Turbulence Research Briefs*, NASA Ames/Stanford University, pp. 31–43, 2004.
- [14] F. Muldoon and S. Acharya. A divergence-free interpolation scheme for the immersed boundary method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **56**, 1845–1884, 2008.
- [15] R. D. Guy and D. A. Hartenstine. On the accuracy of direct forcing immersed boundary methods with projection methods. *Journal of Computational Physics*, **229**(7), 2479–2496, 2010.
- [16] Y. Cheny and O. Botella. An immersed boundary/level-set method for incompressible viscous flows in complex geometries with good conservation properties. *European Journal of Mechanics*, **18**, 561–587, 2009.
- [17] Y. Cheny and O. Botella. The LS-STAG method: A new immersed boundary / level-set method for the computation of incompressible viscous flows in complex moving geometries with good conservation properties. *Journal of Computational Physics*, **229**, 1043–1076, 2010.
- [18] O. Botella, M. Ait-Messaoud, A. Pertat, C. Rigal, and Y. Cheny. The LS-STAG immersed boundary method for non-Newtonian flows in irregular geometries: Flow of shear-thinning liquids between eccentric rotating cylinders. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, **29**, 93–110, 2015.
- [19] R. B. Bird, R. C. Armstrong, and O. Hassager. *Dynamics of Polymeric Liquids*. Wiley-Interscience, New-York, 1987.
- [20] F. P. T. Baaijens. Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis: A review. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **79**, 361–385, 1998.
- [21] M. S. Darwish and J. R. Whiteman. Numerical modeling of viscoelastic liquids using a finite-volume method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **45**, 311–337, 1992.
- [22] M. Gerritsma. *Time dependant numerical simulations of a viscoelastic fluid on a staggered grid*. PhD thesis, University of Groningen, The Netherlands, 1996.
- [23] V. Van Kemenade and M. O. Deville. Application of spectral elements to viscoelastic creeping flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **51**(3), 277–308, 1994.
- [24] R. Fattal and R. Kupferman. Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high Weissenberg number using the log-conformation representation. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **126**, 23–37, 2005.
- [25] J. Hao, T.-W. Pan, R. Glowinski, and D. D. Joseph. A fictitious domain/distributed Lagrange multiplier method for the particulate flow of Oldroyd-B fluids: A positive definiteness preserving approach. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **156**, 95–111, 2009.
- [26] H. Matallah, P. Townsend, and M. F. Webster. Recovery and stress-splitting schemes for viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **75**, 139–166, 1998.
- [27] M. A. Alves, F. T. Pinho, and P. J. Oliveira. Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **93**, 287–314, 2000.
- [28] J. M. Kim, C. Kim, J. H. Kim, C. Chung, K. H. Ahn, and S. J. Lee. High-resolution finite element simulation of 4:1 planar contraction flow of viscoelastic fluid. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **129**, 23–37, 2005.
- [29] F. Dupret, J. M. Marchal, and M. J. Crochet. On the consequence of discretization errors in the numerical calculation of viscoelastic flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **18**, 173–186, 1985.
- [30] M. Aboubacar, H. Matallah, H. R. Tamaddon-Jahromi, and M. F. Webster. Numerical predic-

- tion of extensional flows in contraction geometries: Hybrid finite volume/element method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **104**, 125–164, 2002.
- [31] T. N. Phillips and A. J. Williams. Viscoelastic flow through a planar contraction using a semi-Lagrangian finite volume method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **87**, 215–246, 1999.
- [32] J. Y. Yoo and Y. Na. A numerical study of the planar contraction flow of a viscoelastic fluid using the SIMPLER algorithm. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **39**, 89–106, 1991.
- [33] P. J. Oliveira, F. T. Pinho, and G. A. Pinto. Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite-volume method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **79**, 1–43, 1998.
- [34] R. A. Keiller. Entry-flow calculations for the Oldroyd-B and FENE equations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **46**, 143–178, 1993.
- [35] L. M. Quinzani, R. C. Armstrong, and R. A. Brown. Birefringence and laser-Doppler velocimetry (LDV) studies of viscoelastic flow through planar contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **52**, 1–36, 1994.
- [36] L. M. Quinzani, R. C. Armstrong, and R. A. Brown. Used of coupled birefringence and LDV studies of flow through planar contraction to test constitutive equations for concentrated polymer solutions. *Journal of Rheology*, **39**, 1201–1228, 1995.
- [37] F. H. Harlow and J. E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surfaces. *Physics of Fluids*, **8**, 2181–2189, 1965.
- [38] T. N. Phillips and A. J. Williams. Comparison of creeping and inertial flow of an Oldroyd-B fluid through planar and axisymmetric contractions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **108**, 25–47, 2002.
- [39] G. Mompean and M. Deville. Unsteady finite volume simulation of Oldroyd-B fluid through a three-dimensional planar contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **872**, 253–279, 1997.
- [40] H. Al Moatassime and C. Jouron. A multigrid method for solving steady viscoelastic fluid flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **190**(31), 4061–4080, 2001.
- [41] G. P. Sasmal. A finite volume approach for calculation of viscoelastic flow through an abrupt axisymmetric contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **56**(1), 15–47, 1995.
- [42] H. Xia, P. G. Tucker, and W. N. Dawes. Level sets for CFD in aerospace engineering. *Progress in Aerospace Sciences*, **46**, 274–283, 2010.
- [43] R. W. C. P. Verstappen and A. E. P. Veldman. Symmetry-preserving discretization of turbulent flow. *Journal of Computational Physics*, **187**, 343–368, 2003.
- [44] P. van der Plas, H. J. L. van der Heiden, A. E. P. Veldman, R. Luppens, and R. W. C. P. Verstappen. Efficiently simulating viscous flow effects by means of regularization turbulence modeling and local grid refinement. Seventh International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD7), Hawaii, paper ICCFD-2503, 2012.
- [45] V. Puzikova and I. Marchevsky. Application of the LS-STAG immersed boundary method for numerical simulation in coupled aeroelastic problems. Proceedings of the 11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI), E. Oñate, J. Oliver and A. Huerta (Eds), 20-25 July 2014, Barcelona, Spain., 2014.
- [46] V. Puzikova and I. Marchevsky. Extension of the LS-STAG cut-cell immersed boundary method for RANS-based turbulence models. Proceedings of the International Summer School-Conference “Advanced Problems in Mechanics”, June 30-July 5, St. Petersburg, Russia., 2014.
- [47] P. Saramito. Efficient simulation of nonlinear viscoelastic fluid flows. *Journal of Non-*

- Newtonian Fluid Mechanics*, **60**(2-3), 199–223, 1995.
- [48] M. A. Alves, P. J. Oliveira, and F. T. Pinho. Benchmark solutions for the flow of Oldroyd-B and PTT fluids in planar contractions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **110**, 45–75, 2003.
- [49] S. S. Edussuriya, A. J. Williams, and C. Bailey. A cell-centred finite volume method for modelling viscoelastic flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **117**, 47–61, 2004.
- [50] X. Li, X. Han, and X. Wang. Numerical modeling of viscoelastic flows using equal low-order finite elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **199**(9-12), 570–581, 2010.
- [51] J. Azaiez, R. Guénette, and A. Aït-Kadi. Entry flow calculations using multi-mode models. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **66**, 271–281, 1996.
- [52] M. Aboubacar and M. F. Webster. A cell-vertex finite volume/element method on triangles for abrupt contraction viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **98**, 83–106, 2001.
- [53] I. Orlanski. A simple boundary condition for unbounded hyperbolic flows. *Journal of Computational Physics*, **21**, 251–269, 1976.
- [54] L. Dieci and T. Eirola. Positive definiteness in the numerical solution of Riccati differential equations. *Numerische Mathematik*, **67**, 303–313, 1994.

10.4 La méthode LS-STAG/2PT pour fluides newtoniens et viscoplastiques en géométries 3D-extrudées

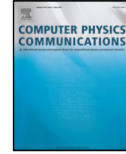
Computer Physics Communications 226 (2018) 67–80



Contents lists available at ScienceDirect

Computer Physics Communications

journal homepage: www.elsevier.com/locate/cpc



The LS-STAG immersed boundary/cut-cell method for non-Newtonian flows in 3D extruded geometries



F. Nikfarjam, Y. Cheny, O. Botella*

LEMTA, Université de Lorraine, 2 avenue de la Forêt de Haye, TSA 60604, 54518 Vandœuvre CEDEX, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 28 July 2017

Received in revised form 20 December 2017

Accepted 10 January 2018

Available online 3 February 2018

Keywords:

Computational fluid dynamics (CFD)

Non-Newtonian fluids

Immersed boundary methods

Cut-cell methods

High-performance computing (HPC)

ABSTRACT

The LS-STAG method is an immersed boundary/cut-cell method for viscous incompressible flows based on the staggered MAC arrangement for Cartesian grids, where the irregular boundary is sharply represented by its level-set function, results in a significant gain in computer resources (wall time, memory usage) compared to commercial body-fitted CFD codes. The 2D version of LS-STAG method is now well-established (Cheny and Botella, 2010), and this paper presents its extension to 3D geometries with translational symmetry in the z direction (hereinafter called 3D extruded configurations). This intermediate step towards the fully 3D implementation can be applied to a wide variety of canonical flows and will be regarded as the keystone for the full 3D solver, since both discretization and implementation issues on distributed memory machines are tackled at this stage of development. The LS-STAG method is then applied to various Newtonian and non-Newtonian flows in 3D extruded geometries (axisymmetric pipe, circular cylinder, duct with an abrupt expansion) for which benchmark results and experimental data are available. The purpose of these investigations are (a) to investigate the formal order of accuracy of the LS-STAG method, (b) to assess the versatility of method for flow applications at various regimes (Newtonian and shear-thinning fluids, steady and unsteady laminar to turbulent flows) (c) to compare its performance with well-established numerical methods (body-fitted and immersed boundary methods).

© 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Advanced computational fluid dynamics (CFD) applications concern flows in highly irregular three-dimensional geometries, whose process of grid generation, from the early stage of CAD design to final volume meshing, is very time-consuming and requires highly trained users. Typical unstructured body-conformal meshes are made of elements (cells of hexahedral, tetrahedral shape, ...) with irregular connectivity, which makes the solution algorithms extremely memory and CPU intensive. Moreover, it is difficult to assess the quality of the grid (smooth, undistorted cells properly clustered at the wall, ...), which may negatively impact the convergence and accuracy of the numerical solution. In contrast, cut-cell/immersed boundary CFD codes (see [1] for a review) are based on Cartesian methods which are extremely robust and optimized, and thus requires only a fraction of the computer resources of an unstructured code. Cartesian grid generation is greatly simplified compared to the body-conformal approach, and the grid regularity and quality is not significantly impacted by the complexity of the geometry. Moreover, the computation of flows with moving

boundaries can be performed on fixed grids, without the domain remeshing which is required by body-conformal methods.

The major difficulty of traditional IB methods is the treatment of the cut-cells (cells of irregular shape which are formed by the intersection of the Cartesian mesh with the immersed boundary). Classical IB methods such as the *momentum forcing method* [1] discard the discretization of flow equations in the cut-cells, and use special interpolations instead. Thus, strict conservation of mass is not observed, which leads to non-divergence free velocities or non-physical pressure oscillations in the vicinity of the immersed boundary [2]. On the other hand, cut-cell methods aim for discretizing the flow equations in cut-cells by *ad hoc* treatments, whose major drawback is the loss of the 5-points structure (in 2D) of Cartesian methods. Moreover, these methods rely on cell-merging techniques for which 3D extension is known to be non-trivial [1]. Therefore, the development of an accurate and cost-effective 3D solver based upon the IB/cut-cell approach is still a challenging task.

In Ref. [3] we have developed an innovative cut-cell discretization for 2D incompressible flows called "LS-STAG" (*Level-Set, STAGgered*), which is based on the classical MAC method for Cartesian staggered grids, where the irregular boundary is sharply represented by its level-set function. In three basic types of 2D cut-cells (pentagonal, trapezoidal and triangular, see [3]), the discretization

* Corresponding author.

E-mail address: olivier.botella@univ-lorraine.fr (O. Botella).

<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.01.006>

0010-4655/© 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.

is designed such as the global invariants of the flow (total mass, momentum and kinetic energy) are preserved at the discrete level. The LS-STAG discretization in the cut-cells is consistent with the MAC discretization used in Cartesian fluid cells, and has the ability to preserve the 5-point Cartesian structure of the stencil, resulting in a highly computationally efficient method. The LS-STAG method has been successfully applied to Newtonian flows at moderate Reynolds number in fixed and moving geometries [3], pseudoplastic flows [4], and viscoelastic flows [5].

The purpose of this paper is to present a progress report towards a fully 3D LS-STAG code for Newtonian and pseudoplastic liquids, totally optimized for high-performance computing. One of the major difficulty in cut-cell discretization for 3D geometries is the large number of cases to consider: we have enumerated 16 different types of cut-cells in 3D whereas there are only 3 in 2D. In order to mitigate this issue we first consider building the LS-STAG discretization for 3D configurations with translational symmetry in the z direction, that will be subsequently called 3D extruded geometries. This intermediate step towards the fully 3D implementation can be applied to a wide variety of canonical flows (flow in Taylor–Couette reactors, flow past cylinder of arbitrary cross section shape, abrupt axisymmetric expansion/contraction flow, ...) and will be regarded as the keystone for the full 3D solver, since both discretization and implementation issues on distributed memory machines are tackled at this stage of development. In these geometries, 3D cut-cells are only extruded extensions of pentagonal, trapezoidal and triangular cut-cells in 2D, which enables us to extend the principles of the energy-conserving discretization of Ref. [3] to 3D: the discretization of the continuity equation, pressure gradient, convective fluxes, normal stresses are direct extension of the 2D LS-STAG formulas. The discretization of velocity gradient components such as $\partial w/\partial x$ and $\partial w/\partial y$, which were absent from the 2D cases, needs further attention. These terms are tentatively discretized with the formula proposed by van der Heiden et al. [6].

The LS-STAG method is then applied to various Newtonian and non-Newtonian flows in 3D extruded geometries (Taylor–Couette reactor, axisymmetric pipe, circular cylinder, duct with sudden expansion) for which benchmark results and experimental data are available. The purposes of these investigations are (a) to evaluate the formal order of accuracy of the LS-STAG method, (b) to assess the versatility of the method for flow applications at various regimes (Newtonian and shear-thinning fluids, steady and unsteady laminar to turbulent flows) (c) to compare its performance with well-established numerical method (unstructured method, IBM method). First, a grid convergence study is conducted on the Hagen–Poiseuille flow for power-law liquids. A thorough comparison on the accuracy and computational costs (memory usage, CPU time) with respect to a commercial CFD package on unstructured grid (ANSYS FLUENT) is performed on the DFG benchmark for cylinder flow in unsteady laminar regime [7]. The ability to perform computation of high Reynolds number flow is addressed on the (weakly) turbulent cylinder flow at $Re = 300$ [8,9], for which comparison with the results of a well-established IB method [10] is provided. The paper is concluded by studying the flow of shear-thinning fluids in an axisymmetric sudden expansion geometry, for which rheological characterization, experimental flow measurements and FLUENT[®] simulations have been performed in [11].

2. Governing equations for non-Newtonian flows

Let Ω be a 3D computational box domain and Γ its surface. The governing equations are the incompressible Navier–Stokes equations for non-Newtonian fluids written in conservative form. The continuity equation reads:

$$\int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = 0, \quad (1)$$

where $\mathbf{v} = (u, v, w)$ is the velocity, and the momentum equations in the x , y and z directions are respectively:

$$\rho \frac{d}{dt} \int_{\Omega} u \, dV + \rho \int_{\Gamma} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u \, dS + \int_{\Gamma} p \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Gamma} \eta(\dot{\gamma})(\dot{\gamma}_{xx} \mathbf{e}_x + \dot{\gamma}_{xy} \mathbf{e}_y + \dot{\gamma}_{xz} \mathbf{e}_z) \cdot \mathbf{n} \, dS = 0, \quad (2a)$$

$$\rho \frac{d}{dt} \int_{\Omega} v \, dV + \rho \int_{\Gamma} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) v \, dS + \int_{\Gamma} p \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Gamma} \eta(\dot{\gamma})(\dot{\gamma}_{yx} \mathbf{e}_x + \dot{\gamma}_{yy} \mathbf{e}_y + \dot{\gamma}_{yz} \mathbf{e}_z) \cdot \mathbf{n} \, dS = 0, \quad (2b)$$

$$\rho \frac{d}{dt} \int_{\Omega} w \, dV + \rho \int_{\Gamma} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) w \, dS + \int_{\Gamma} p \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Gamma} \eta(\dot{\gamma})(\dot{\gamma}_{zx} \mathbf{e}_x + \dot{\gamma}_{zy} \mathbf{e}_y + \dot{\gamma}_{zz} \mathbf{e}_z) \cdot \mathbf{n} \, dS = 0, \quad (2c)$$

where ρ is the fluid density, p is the pressure and $\dot{\gamma} = (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)$ is the rate-of-strain tensor.

In the following two rheological models are employed to describe the shear-dependent dynamic viscosity $\eta(\dot{\gamma})$, where the scalar shear-rate $\dot{\gamma}$ is defined as:

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2} \dot{\gamma} : \dot{\gamma}} = \sqrt{[\dot{\gamma}_{xx}]^2 + [\dot{\gamma}_{yy}]^2 + [\dot{\gamma}_{zz}]^2 + [\dot{\gamma}_{xy}]^2 + [\dot{\gamma}_{yz}]^2}. \quad (3)$$

The simplest one is the power-law (Ostwald–de Waele) model:

$$\eta(\dot{\gamma}) = k \dot{\gamma}^{n-1}, \quad (4)$$

where k and n are the consistency and power-law index respectively. Based on the value of the power-law index, the fluid exhibits 3 distinct non-Newtonian behaviors: shear-thinning or pseudoplastic ($n < 1$), Newtonian ($n = 1$) and shear-thickening or dilatant ($n > 1$). The power-law model is widely used in engineering applications and its simplicity allows to derive analytical solutions of the Navier–Stokes equations for canonical flows [12]. This rheological model will be used for evaluating the accuracy of the LS-STAG method in Section 6.1. However the power-law model describes only approximatively the behavior of a real non-Newtonian fluid and most notably fails to predict the Newtonian plateaus that reaches the viscosity at low ($\eta \cong \eta_0$) and high ($\eta \cong \eta_{\infty}$) shear-rates. These limitations are overcome by the Cross model:

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_{\infty} + \frac{(\eta_0 - \eta_{\infty})}{1 + (K \dot{\gamma})^m}, \quad (5)$$

where K and m are 2 fitting parameters. The Cross parameters can be correlated to the power-law parameters (4) by observing that $k = \eta_0 K^{-m}$ and $n = 1 - m$ in the limiting case where $\eta_0 \gg \eta_{\infty}$, $K \dot{\gamma} \gg 1$ and η_{∞} is small. The Cross model will be used for evaluating the LS-STAG method against experimental results in Section 6.3.

3. The LS-STAG mesh for 3D extruded geometries

We consider a 3D irregular solid domain Ω^{ib} which is embedded in the computational domain Ω , such that $\Omega^{\text{f}} = \Omega \setminus \Omega^{\text{ib}}$ represents the fluid domain where the flow equations are to be discretized. To keep track of the irregular boundary Γ^{ib} , we employ a signed distance function $\phi(\mathbf{x})$ (i.e., the level-set function [13]) such that $\phi(\mathbf{x})$ is negative in the fluid region Ω^{f} , $\phi(\mathbf{x})$ is positive in the solid region Ω^{ib} , and such that the boundary Γ^{ib} corresponds to the zero level-set of this function.

This leads to the extension of the well-known MAC mesh (see e.g. [14]) that will be subsequently referred to as the LS-STAG mesh.

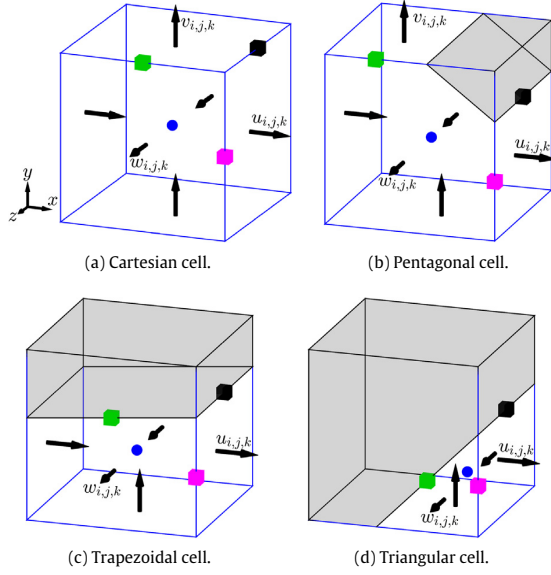


Fig. 1. Four basic types of fluid cells present in the LS-STAG mesh for extruded geometries. Velocity unknowns are located at face centroids, pressure and diagonal components of $\nabla \mathbf{v}$ at cell centroids (●), off-diagonal components of $\nabla \mathbf{v}$ at edge midpoints: $\frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial v}{\partial x}$ (■), $\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial z}$ (■) and $\frac{\partial w}{\partial y}, \frac{\partial w}{\partial z}$ (■).

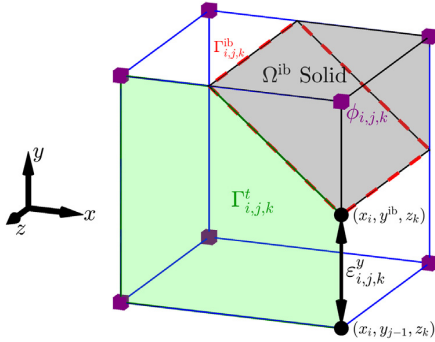


Fig. 2. Geometry parameters of pentagonal cut-cell $\Omega_{i,j,k}$. The top elementary fluid face $\Gamma_{i,j,k}^t$ is colored in green, the immersed boundary face $\Gamma_{i,j,k}^{ib}$ is outlined with red dashed line (---) and the level-set values $\phi_{i,j,k}$ are stored at cell vertices (■).

In the case of irregular geometries extruded in the z direction, the computational cells $\Omega_{i,j,k}$ are either Cartesian cells of size $\Delta x_i \times \Delta y_j \times \Delta z_k$ or cut-cells, whose generic types (pentagonal, trapezoidal and triangular) are depicted in Fig. 1. For all cell types, the velocities unknowns are located at face centers and the pressure $p_{i,j,k}$ is at cell centroids. In the cut-cell shown in Fig. 2, the immersed boundary is represented by the rectangular plane $\Gamma_{i,j,k}^{ib}$ whose extremities are defined by linear interpolation of the level-set function $\phi_{i,j,k} = \phi(x_i, y_j, z_k)$ at cell corners. This leads to the following decomposition of the surface $\Gamma_{i,j,k}$ of a cut-cell:

$$\Gamma_{i,j,k} = \Gamma_{i,j,k}^w \cup \Gamma_{i,j,k}^e \cup \Gamma_{i,j,k}^s \cup \Gamma_{i,j,k}^n \cup \Gamma_{i,j,k}^b \cup \Gamma_{i,j,k}^t \cup \Gamma_{i,j,k}^{ib}, \quad (6)$$

by using the usual compass notations for Cartesian discretizations [15].

In [3], the level-set function was employed to obtain analytical expressions of the geometry parameters of 2D cut-cells, such as their face areas and volume. These definitions are now extended

to the 3D case, by calculating first the fluid portion of the cut-cell edges. For the cut-cell of Fig. 2, the length of Edge $\varepsilon_{i,j,k}^y = \{(x_i, y, z_k), y \in [y_{j-1}, y_j^{ib}]\}$ is $y_j^{ib} - y_{j-1} = \alpha_{i,j,k}^y \Delta y_j$, where the cell-edge fraction ratio $\alpha_{i,j,k}^y$ is computed by linear interpolation of $\phi(x_i, y, z_k)$ as:

$$\alpha_{i,j,k}^y = \frac{\phi_{i,j-1,k}}{\phi_{i,j-1,k} - \phi_{i,j,k}}, \quad (7)$$

since $\phi(x_i, y_j^{ib}, z_k) = 0$. Note that cell-edge fraction ratios take values in $[0, 1]$ by construction, and due to extrusion $\alpha_{i,j,k-1}^x = \alpha_{i,j,k}^x$, $\alpha_{i,j,k-1}^y = \alpha_{i,j,k}^y$ and $\alpha_{i,j,k}^z$ is either 0 or 1.

The cell-edge fraction ratios are subsequently used to calculate the fluid area of cut-cell faces. For example, the fluid area of the top face $\Gamma_{i,j,k}^t$ in Fig. 2 is $\theta_{i,j,k}^w \Delta x_i \Delta y_j$ where the cell-face fraction ratio is:

$$\theta_{i,j,k}^w = 1 - \frac{1}{2}(1 - \alpha_{i,j,k}^x)(1 - \alpha_{i,j,k}^y), \quad (8)$$

for a pentagonal face. Analytical expressions for trapezoidal and triangular faces (which correspond to volumes in a 2D mesh) are given in [3]. Finally, the volume $V_{i,j,k}$ of a cut-cell is simply:

$$V_{i,j,k} = (\theta_{i,j,k}^w \Delta x_i \Delta y_j) \Delta z_k. \quad (9)$$

since each cut-cell is a prism of base $\Gamma_{i,j,k}^t$ due to extrusion. These geometry parameters will extensively be used to discretize the flow equations in the next sections.

4. Discretization of the continuity equation

The starting point of the discretization concerns the continuity equation (1), which is written as the net mass flux through each elementary face of control volume (CV) $\Omega_{i,j,k}$ according to (6):

$$\begin{aligned} \dot{m}^{i,j,k} &\equiv -\bar{u}_{i-1,j,k} + \bar{u}_{i,j,k} - \bar{v}_{i,j,k-1} + \bar{v}_{i,j,k} \\ &\quad - \bar{w}_{i,j,k-1} + \bar{w}_{i,j,k} + \bar{U}_{i,j,k}^{ib} = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

In the following, we consider homogeneous boundary conditions at the immersed boundary Γ^{ib} , so that the mass flux through the immersed boundary $\bar{U}_{i,j,k}^{ib} \equiv \int_{\Gamma_{i,j,k}^{ib}} \mathbf{v}^{ib} \cdot \mathbf{n}_{i,j,k}^{ib} dS$ is zero. The mass fluxes through fluid faces (denoted with a bar) are approximated with midpoint quadrature, yielding for example at the top face:

$$\bar{w}_{i,j,k} \equiv \int_{\Gamma_{i,j,k}^t} \mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_z dS \approx \theta_{i,j,k}^w \Delta x_i \Delta y_j w_{i,j,k}. \quad (11)$$

After similar discretizations at the other faces, the discrete continuity equation reads:

$$\begin{aligned} \dot{m}^{i,j,k} &\approx (\theta_{i,j,k}^u u_{i,j,k} - \theta_{i-1,j,k}^u u_{i-1,j,k}) \Delta y_j \Delta z_k + \\ &\quad (\theta_{i,j,k}^v v_{i,j,k} - \theta_{i,j-1,k}^v v_{i,j-1,k}) \Delta x_i \Delta z_k + \\ &\quad (\theta_{i,j,k}^w w_{i,j,k} - \theta_{i,j,k-1}^w w_{i,j,k-1}) \Delta x_i \Delta y_j = 0, \end{aligned} \quad (12)$$

and is valid for any type of fluid cells.

5. Momentum discretization

Momentum discretization will be illustrated for the x -momentum equation (2a) in the staggered CV $\Omega_{i,j,k}^u$ represented in Fig. 3. This CV is centered around $u_{i,j,k}$ and is formed by halves of neighboring cut-cells $\Omega_{i,j,k}$ and $\Omega_{i+1,j,k}$, such as its volume is $\frac{1}{2}V_{i,j,k} + \frac{1}{2}V_{i+1,j,k}$ and its surface is decomposed as:

$$\Gamma_{i,j,k}^u = \Gamma_{i,j,k}^{u,w} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,e} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,s} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,ib} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,b} \cup \Gamma_{i,j,k}^{u,t}. \quad (13)$$

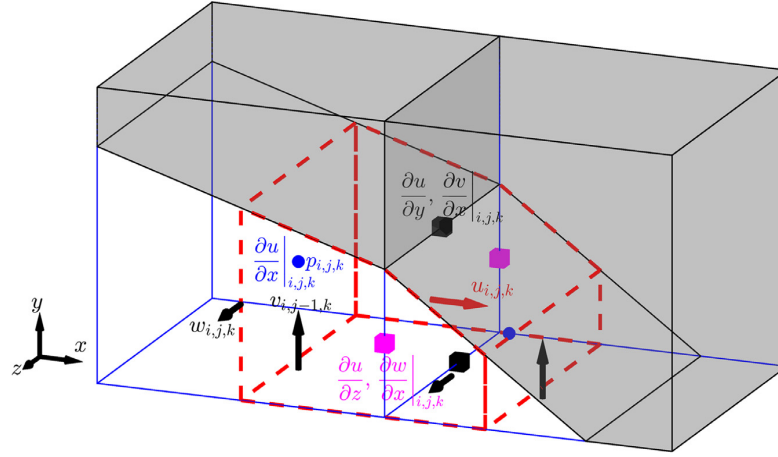


Fig. 3. Staggered arrangement of the variables for two adjacent cut-cells on the LS-STAG mesh. CV $\Omega_{i,j,k}^u \in \Omega_{i,j,k} \cup \Omega_{i+1,j,k}$ is indicated in red dashed line (---).

5.1. Basics of the LS-STAG discretization

As in 2D [3,4], the key idea of the LS-STAG discretization is to enforce the strict conservation of total mass $\int_{\Omega^f} \nabla \cdot \mathbf{v} dV$, total momentum $\mathbf{P}(t) = \rho \int_{\Omega^f} \mathbf{v} dV$ and total kinetic energy $E_c(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega^f} |\mathbf{v}|^2 dV$ (when viscosity η becomes negligible) in each of the half CVs of $\Omega_{i,j,k}^u$ independently, such that any combination of half CVs yields a consistent discretization with the aforementioned global conservation properties. This results to a discrete pressure gradient which is dual to the discrete divergence (10), a skew-symmetric discretization for the convective terms, and a viscous stress discretization which is positive definite.

Some of these terms are direct extensions of the 2D formulas: the discrete divergence (10), the discrete pressure gradient which reads in the x -direction:

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^u} p \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} dS \cong [\mathcal{G}^x P]_{i,j,k} = \theta_{i,j,k}^u \Delta y_j \Delta z_k (p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}), \quad (14)$$

and the skew-symmetric discretization of the convective terms, which amounts to using centered approximations with constant weights irrespective of the cell size [14], for example at top face $\Gamma_{i,j,k}^{u,t}$:

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^{u,t}} u (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_z) dS \cong \frac{u_{i,j,k} + u_{i,j,k+1}}{2} \frac{\bar{w}_{i,j,k} + \bar{w}_{i+1,j,k}}{2}. \quad (15)$$

These formulas are valid for any type of fluid cells, and in the particular case of Cartesian fluid cells (such that the cell-face fraction ratios are equal to 1), the MAC discretization on non-uniform Cartesian grids of Verstappen & Veldman [14] is recovered.

In contrast, the discretization of the viscous stresses in extruded cut-cells introduces additional difficulties compared to the 2D case, which will be discussed in the next sections.

5.2. Discretization of the velocity gradient

We first consider the discretization of the velocity gradient:

$$\nabla \mathbf{v} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial v}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (16)$$

which plays an important role in the numerical modeling of the viscous fluxes presented in the next section since it defines the strain-rate tensor $\dot{\gamma}$ and the shear-rate $\dot{\gamma}$ from which the local viscosity is evaluated. Due to the staggering of the velocity unknowns, the diagonal and off-diagonal components of $\nabla \mathbf{v}$ are respectively located at centroids and edges of the computational cells (see Fig. 1), leading thus to distinct discretization formulas.

The computation of the diagonal components of $\nabla \mathbf{v}$ at cell centroids is performed as in the 2D case by enforcing the Green theorem $\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{v} dV = \int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS$ at the discrete level [3]. This leads to a unique formula in all types of cut-cells, e.g. for $\partial u / \partial x$:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j,k} \cong \frac{\theta_{i,j,k}^u u_{i,j,k} - \theta_{i-1,j,k}^u u_{i-1,j,k}}{V_{i,j,k} / (\Delta z_k \Delta y_j)}, \quad (17)$$

which reduces to a standard two-point formula in Cartesian cells.

An issue related to the 3D extension of the LS-STAG method concerns the computation of the off-diagonal components of $\nabla \mathbf{v}$ at the edge midpoints where the orthogonality property of the MAC mesh is lost [16]. In the case of extruded geometries, it only concerns terms $\partial w / \partial x$ and $\partial w / \partial y$ in the cut-cells (see Fig. 3, where Edge $\mathcal{E}_{i,j,k}^y$ and the line connecting $w_{i,j,k}$ and $w_{i+1,j,k}$ is not orthogonal), where the use of a standard two-point finite-difference formula would be inaccurate unless a non-orthogonal correction is taken into account [16]. The design of such a scheme, which requires data interpolation and leads to an enlarged stencil near the cut-cells is left to future work. Instead, we employ the discretization of Van der Plas et al. [6] who suggest to compute these terms by analogy with the pressure gradient in 2D:

$$\frac{\partial w}{\partial x} \Big|_{i,j,k} \cong \frac{\alpha_{i,j,k}^y \Delta y_j (w_{i+1,j,k} - w_{i,j,k})}{\frac{1}{2} (\theta_{i+1,j,k}^w \Delta x_{i+1} \Delta y_j + \theta_{i,j,k}^w \Delta x_i \Delta y_j)}, \quad (18)$$

and $\partial w / \partial y$ is computed similarly. The impact of this *ad hoc* two-point formula on the overall accuracy of the method will be investigated in details in Section 6.1.

For other terms standard 2-point formulas are used, such as for $\partial u / \partial y$ at the midpoint of Edge $\mathcal{E}_{i,j-1,k}^z$ in Fig. 3:

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j-1,k} \cong \frac{u_{i,j,k} - u_{i,j-1,k}}{\widetilde{\Delta y}}, \quad \widetilde{\Delta y} = \frac{1}{2} \alpha_{i,j,k}^y \Delta y_j + \frac{1}{2} \Delta y_{j-1}, \quad (19)$$

and at the midpoint of solid edge $\mathcal{E}_{i,j,k}^z$:

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j,k} \cong \frac{0 - u_{i,j,k}}{\Delta y^{ib}}, \quad \Delta y^{ib} = \frac{1}{2} \alpha_{i,j,k}^y \Delta y_j. \quad (20)$$

for the case of homogeneous boundary conditions. However, for terms such as $\partial v/\partial x$ at the solid boundary, similar formulas cannot be derived since $\theta_{i,j,k}^v$ and $\theta_{i+1,j,k}^v$ are both null. To address this issue, we have derived a discretization of $\partial v/\partial x|_{i,j,k}$ by enforcing that the Schwarz theorem (symmetry of second derivatives):

$$\frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (21)$$

holds discretely on cell face $\Gamma_{i,j,k}^e$. Firstly, the LHS of (21) is readily discretized as:

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) \Big|_{i,j,k} = \frac{1}{2\Delta y^{\text{ib}}} \left[\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j,k} - \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j-1,k} \right], \quad (22)$$

where $\partial v/\partial x|_{i,j-1,k}$ has an expression similar to (19). Secondly, the RHS of (21) is discretized by analogy with the pressure gradient (14) since $\partial v/\partial y$ is also located at cell centroids, leading to:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) \Big|_{i,j,k} = \frac{\theta_{i,j,k}^u \Delta y_j \Delta z_k}{\frac{1}{2}V_{i,j,k} + \frac{1}{2}V_{i+1,j,k}} \left[\frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i+1,j,k} - \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j,k} \right]. \quad (23)$$

Finally, the identification of (22) with (23) gives the expression of $\partial v/\partial x|_{i,j,k}$:

$$\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j,k} = \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j-1,k} + \frac{\theta_{i,j,k}^u \Delta y_j \Delta z_k \Delta y^{\text{ib}}}{\frac{1}{4}V_{i,j,k} + \frac{1}{4}V_{i+1,j,k}} \left[\frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i+1,j,k} - \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j,k} \right], \quad (24)$$

which is completed with discretization formulas for $\partial v/\partial y|_{i,j,k}$ and $\partial v/\partial y|_{i+1,j,k}$ analogous to (17).

5.3. Discretization of the viscous fluxes

The discrete velocity gradients are now used for discretizing the viscous fluxes of the x-momentum equation (2a):

$$F_u^v = \int_{\Gamma_{i,j,k}^u} \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}_{xx} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \, dS + \int_{\Gamma_{i,j,k}^u} \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}_{xy} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \, dS + \int_{\Gamma_{i,j,k}^u} \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}_{xz} \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n} \, dS. \quad (25)$$

As in our previous works [3,4], the normal stress flux is computed by analogy with the pressure gradient (14):

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^u} \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}_{xx} \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \, dS \cong \theta_{i,j,k}^u \Delta y_j \Delta z_k \left[2\eta(\dot{\gamma}_e) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1,j,k} - 2\eta(\dot{\gamma}_w) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j,k} \right], \quad (26)$$

and the discretization is completed with Eq. (17).

For the shear stress fluxes, midpoint quadrature is applied to each of the faces of $\Gamma_{i,j,k}^u$ (given by (13)), leading to:

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^u \cup \Gamma_{i,j,k}^{\text{ib}}} \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}_{xy} \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} \, dS \cong \Delta S^{\text{ib}} \eta(\dot{\gamma}_n) \left[\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right]_{i,j,k} - \Delta S^s \eta(\dot{\gamma}_s) \left[\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right]_{i,j-1,k}, \quad (27a)$$

$$\int_{\Gamma_{i,j,k}^u \cup \Gamma_{i,j,k}^{\text{ub}}} \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}_{xz} \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{n} \, dS \cong \Delta S^t \eta(\dot{\gamma}_t) \left[\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right]_{i,j,k} - \Delta S^b \eta(\dot{\gamma}_b) \left[\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right]_{i,j,k-1}. \quad (27b)$$

In these formulas, $\Delta S^{\text{ib}} = \frac{1}{2}(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})$ is the projected area of the solid face along the y axis, and the fluid face areas are evaluated

by mean of the cell-face fraction ratios, for instance the surface area of $\Gamma^{u,t}$ in Eq. (27b) reads:

$$\Delta S^t = \frac{1}{2}(\theta_{i,j,k}^w \Delta x_i + \theta_{i+1,j,k}^w \Delta x_{i+1}) \Delta y_j, \quad (28)$$

which ensures local flux conservativity across fluid faces.

For evaluating the non-Newtonian viscosity in (26) and (27), the shear-rate $\dot{\gamma}$ (3) has to be computed at cell centroids for the normal stresses (e.g. $\dot{\gamma}_w$ in (26)) and at edge midpoints for the shear stresses (e.g. $\dot{\gamma}_s$ in (27)). This is achieved by first computing $\dot{\gamma}$ at cell centroids, for example, see the equation in Box 1, where the off-diagonal terms are interpolated from values at the surrounding edges by arithmetic average $[\bar{\cdot}]$. Then, the shear-rate at cell edges is obtained from its neighboring cell-centroid values by using the volume-weighted interpolation first employed in [5] in the framework of viscoelastic flow simulations. For example, the value of $\dot{\gamma}_s$ at Edge $\mathcal{E}_{i,j-1,k}^z$ is interpolated as:

$$\dot{\gamma}_s = \left([\beta V \dot{\gamma}]_{i,j,k} + [\beta V \dot{\gamma}]_{i-1,j,k} + [\beta V \dot{\gamma}]_{i-1,j-1,k} + [\beta V \dot{\gamma}]_{i,j-1,k} \right) / \tilde{V}_{i,j,k}, \quad (30)$$

where $\tilde{V}_{i,j,k}$ is the weighted sum of the neighboring cell volumes:

$$\tilde{V}_{i,j,k} = \beta_{i,j,k} V_{i,j,k} + \beta_{i-1,j,k} V_{i-1,j,k} + \beta_{i-1,j-1,k} V_{i-1,j-1,k} + \beta_{i,j-1,k} V_{i,j-1,k}, \quad (31)$$

and the coefficients $\beta_{i,j,k}$ depend on the type of cell $\Omega_{i,j,k}$:

$$\beta_{i,j,k} = \begin{cases} 0 & \text{Solid cells,} \\ 1/3 & \text{Triangular cells,} \\ 1/4 & \text{Otherwise.} \end{cases} \quad (32)$$

These coefficients have been defined in [5] for deriving a conservative discretization of the elastic shear stresses, and then successfully employed in [4] for 2D non-Newtonian computations.

5.4. Solution strategy and parallel implementation

The time-advancement of the Navier–Stokes equations is based on the IMEX fractional-step method described in [3] for Newtonian flows and extended in [4] to non-Newtonian flows. For the steady computations reported in the next section, first-order time stepping with Euler schemes is used until the solution reaches steady-state. Unsteady computations of Newtonian flows are performed with second-order methods (BDF2 time-stepping with Adams–Bashforth extrapolations).

The LS-STAG flow solver is a Message Passing Interface (MPI) [17] code written in FORTRAN-90 where parallelism is achieved by performing a Cartesian decomposition of the domain. Each cuboid-shaped sub-domain of the decomposition is identified with a coordinate triplet (I, J, K) and is surrounded by one overlapping layer of buffer cells (see Fig. 4), which allows to compute the discrete fluxes at the boundary of the sub-domain.

The data in the layer of buffer cells are updated from the neighboring sub-domains $(I \pm 1, J \pm 1, K \pm 1)$ by using border exchange communication MPI routines (MPL_SENDRECV) at the end of each key step of the fractional-step algorithm, as summarized in Fig. 5. The resulting sequence of operations is the same as for any standard Cartesian method, which notably shows that the LS-STAG cut-cell method introduces no specific issues related to parallelism.

The HYPRE [18] library (V2.10) is employed for the iterative solution of linear systems, most notably the Poisson pressure equation. All the simulations reported in the next section were performed on the computer cluster of *Institut Jean Lamour* (Université de Lorraine) with an infiniband network and an Intel[®] Xeon E5-2660 2.20 GHz processor. A comparison of the LS-STAG solver performance with the commercial CFD code Ansys-FLUENT[®] will be given in Section 6.2.1.

$$\dot{\gamma}_w = \dot{\gamma}_{i,j,k} \cong \sqrt{(\dot{\gamma}_{xx}|_{i,j,k}^2 + \dot{\gamma}_{yy}|_{i,j,k}^2 + \dot{\gamma}_{zz}|_{i,j,k}^2) + [\dot{\gamma}_{xy}]_{i,j,k}^2 + [\dot{\gamma}_{xz}]_{i,j,k}^2 + [\dot{\gamma}_{yz}]_{i,j,k}^2} \quad (29)$$

Box I.

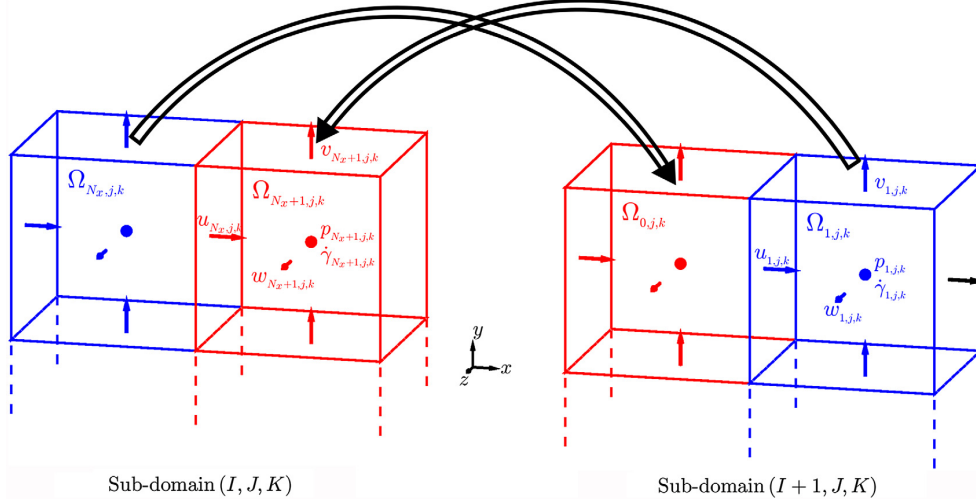


Fig. 4. Information interchange between two adjacent sub-domains (I, J, K) and $(I + 1, J, K)$. Data in the buffer cells $\Omega_{N_x+1,j,k}$ and $\Omega_{0,j,k}$ (in red) are duplicated respectively from the appropriate values in the computational cells $\Omega_{1,j,k}$ and $\Omega_{N_x,j,k}$ (in blue). (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

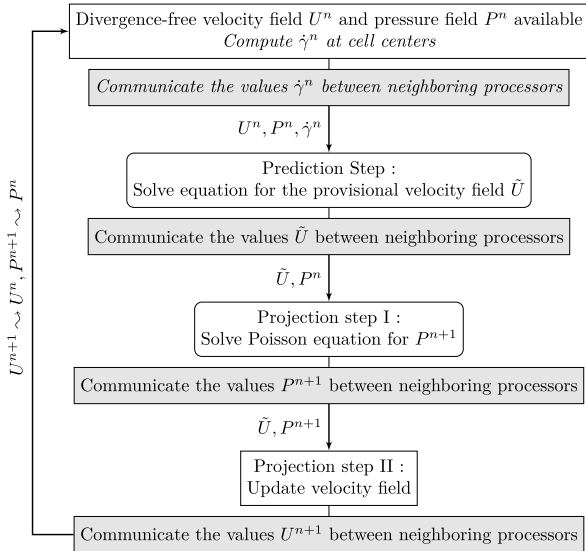


Fig. 5. Flowchart of the parallel fractional-step algorithm, the corresponding sequential algorithm is recovered by discarding steps in shaded boxes. The steps marked in italic are required for simulations of non-Newtonian flows only.

6. Results and discussion

The LS-STAG flow solver is now evaluated on various benchmark flows of Newtonian and non-Newtonian fluids in 3D extruded geometries, such as Hagen–Poiseuille flow, flows past a circular cylinder and through a duct with an abrupt expansion. For

all computations, the Reynolds number is defined as

$$Re_D = \rho U_{ref}^{2-n} D^n / K \quad (33)$$

where D and U_{ref} are reference length and velocity, $n > 0$ and K are the power-law parameters (Section 2).

6.1. Accuracy study of the LS-STAG method

The spatial accuracy of the LS-STAG method for 2D non-Newtonian fluids has thoroughly been studied on Taylor–Couette flows in [4], where second-order accuracy has been observed in Cartesian cells away from the complex geometry and super-linear convergence in the cut-cells. Although a Taylor–Couette cell is an extruded geometry, the independence of exact solution in the axial direction makes impossible to evaluate the accuracy of LS-STAG discretization in that direction. Hence, a more suitable test-case is the Hagen–Poiseuille flow, where a constant pressure drop drives the flow through a circular cylinder of radius R with no-slip boundaries. For power-law fluids, the analytical solution reads in polar coordinates:

$$w(r) = w_c \left[1 - \left(\frac{2r}{D} \right)^{\frac{n+1}{n}} \right], \quad (34)$$

where w_c is the streamwise velocity at the centerline. This test-case has already been considered in [6] for a Newtonian fluid and, following their recommendations, the pipe dimensions are $2R \times L_z = 1 \times 2$ with periodic boundary conditions at the streamwise boundaries. The constant pressure drop is modeled as a source term in the Navier–Stokes equations. Computations are performed at $Re_D = 2000$, where D and w_c are the reference length and velocity, on a series of refined meshes with square cells of size h . In order to evaluate the LS-STAG cut-cell treatment, we have also performed computation with the staircase method which

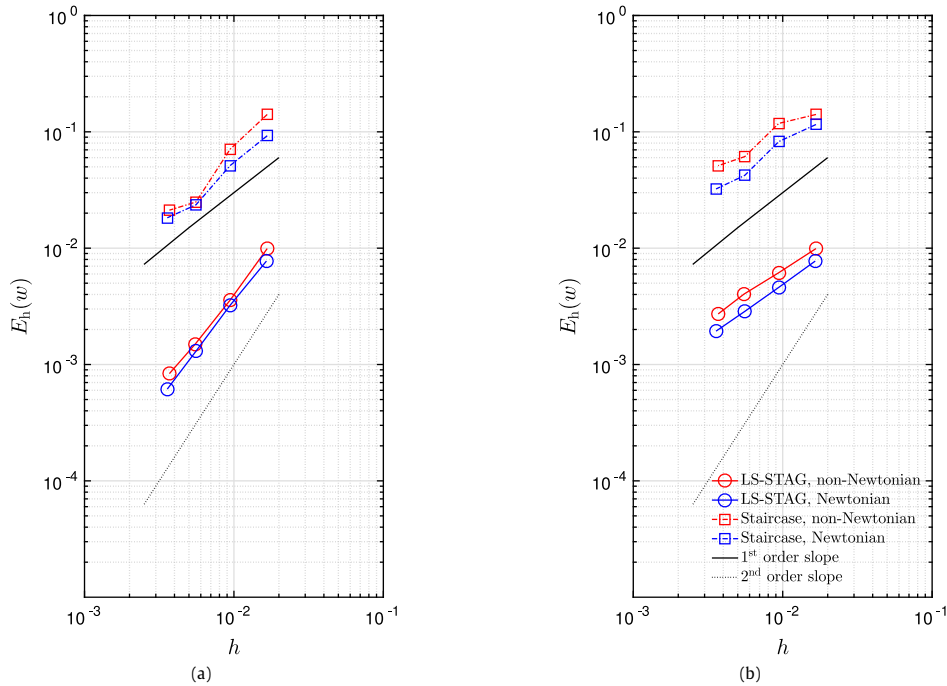


Fig. 6. Maximal error on the streamwise velocity versus grid size h for the Hagen–Poiseuille flow. At left: on 90% of the fluid domain; at right: on the whole fluid domain.

corresponds to a stepwise approximation of the irregular boundaries with Cartesian cells. As a result the staircase treatment only affects the discretization in cut-cells, while it remains unchanged in Cartesian cells.

Fig. 6 compares the errors on the streamwise velocity measured in the maximum norm on the whole computational domain and in Cartesian cells away from the irregular boundary for both Newtonian ($n = 1$) and shear-thinning ($n = 0.5$) fluids. As in the 2D case [4], the LS-STAG errors are more than a decade lower than those of the first-order staircase method, which highlights the benefits of our cut-cell treatment. Second order accuracy is obtained in Cartesian cells away from the irregular boundary for both fluid types. The magnitude of errors is slightly higher for the power-law fluids due to additional errors introduced by the computation of the non-Newtonian viscosity. However, compared to the 2D case, the error on the whole domain (which actually measures the error in cut-cells) reduces from superlinear to linear only. This behavior, also observed in the cut-cell method of Ref. [6], is certainly caused by the *ad hoc* computation of the off-diagonal gradients $\partial w/\partial x$ and $\partial w/\partial y$ (see Section 5.2) which were absent from the 2D version.

Further insight on the structure of discretization error is given in Fig. 7, which displays the pointwise error on mesh points along cross-section $z = 1$ for $h = 5.5 \times 10^{-3}$. First, it can be observed that the largest errors are localized near the complex boundary and, for the LS-STAG method, the errors drop to several orders of magnitude away from the cut-cells. In contrast, the crude treatment of the staircase method pollutes the solution in the whole fluid domain. For non-Newtonian fluids, the difference between the staircase and LS-STAG method is less pronounced. This trend was also observed in the 2D version [4], and is attributed to the additional errors introduced by the evaluation of the non-Newtonian viscosity in the viscous fluxes.

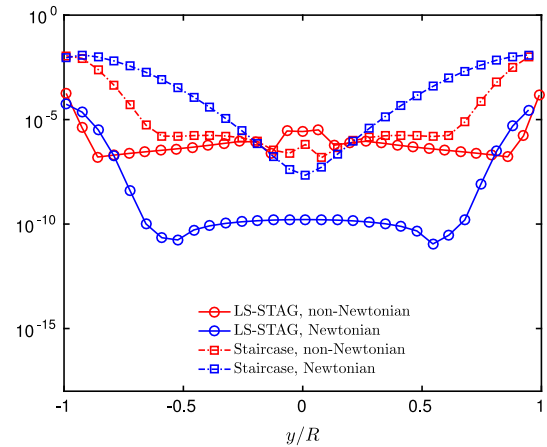


Fig. 7. Pointwise error profile for $h = 5.5 \times 10^{-3}$ on cross-section $z = 1$ of Hagen–Poiseuille flow.

6.2. Flows past circular cylinder

In this part, we consider the flow past circular cylinder at two different flow regimes: an unsteady laminar flow with time-varying Reynolds number and a weakly turbulent flow. The computational domain is depicted in Fig. 8 ; its dimensions and conditions at the boundaries will be given below for each configuration.

6.2.1. Comparison with unstructured body-fitted solver Ansys-FLUENT®

The purpose of this part is to address 2 crucial questions regarding flow computations in complex geometries which, to the best

Table 1
 Salient properties of the LS-STAG meshes used for the circular cylinder benchmark.

Mesh	$\Delta t U_{ref}/D$	$N_x \times N_y \times N_z$	Cell types			# fluid cells	$h_x/D \times h_y/D$
			Cartesian	Cut-cell	Solid		
M2	0.016	$83 \times 38 \times 16$	97.4%	1.1%	1.5%	49 136	0.118×0.105
M3	0.008	$159 \times 77 \times 32$	97.6%	0.6%	1.8%	391 776	0.060×0.051
M4	0.004	$317 \times 153 \times 64$	97.8%	0.3%	1.9%	3104 064	0.030×0.026

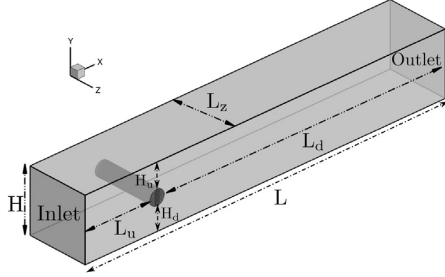

Fig. 8. Computational domain for the cylinder flows of Section 6.2.

Table 2
 Relative errors (in percent) of the force coefficients with respect to the reference solution [22] ($C_{Dmax} = 3.2978$, $C_{Lmax} = 0.00276$ and $C_{Lmin} = -0.0110$) and L_2 errors for $t \in [0, 8$ s].

Solver	Mesh	% error			% L_2 error	
		C_{Dmax}	C_{Lmax}	C_{Lmin}	C_D	C_L
LS-STAG	M2	3.72	11.05	36.61	3.74	48.06
	M3	2.23	2.96	18.07	2.42	16.94
	M4	2.96	0.49	10.02	3.05	10.22
FLUENT [®]	L2	2.35	4.40	16.29	2.11	17.03
	L3	0.96	2.16	10.96	0.81	10.01
	L4	0.25	0.08	2.89	0.21	2.67

of our knowledge, have seldomly been addressed in the literature: how accurate is the solution given by a cut-cell/IBM code compared to a body-fitted unstructured solver of same formal order of accuracy? How do the computational resources of the cut-cell/IBM code (memory usage, CPU time) compare with those of the body-fitted solver?

For that purpose, we have conducted a series of computations with the LS-STAG code and the commercial CFD package FLUENT[®] (V14.57) on the benchmark 3D-3Z initially proposed in [19], which concerns the unsteady laminar flow past a circular cylinder in a confined square duct. The computational domain is depicted in Fig. 8, with spanwise and cross-stream dimensions $H = 0.41$ m and $L_z = 0.41$ m, respectively. The upstream and downstream distances of the cylinder (of diameter $D = 0.1$ m) are set to $L_u = 0.45$ m and $L_d = 1.95$ m with an 1.0 cm offset in the cross-stream direction ($H_d = 0.15$ m and $H_u = 0.16$ m). At the spanwise and cross-stream boundaries, no-slip conditions are applied, while a parabolic stream-wise velocity profile is set at the inlet:

$$u_{inlet} = 16U_{max}yz \sin\left(\frac{\pi t}{8}\right) \frac{(H-y)(H-z)}{H^4}, \quad (35)$$

$$U_{max} = 2.25 \text{ m/s.}$$

At the outlet, a convective outflow condition [20] is applied. The fluid viscosity is $\nu = 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$, yielding a time-varying Reynolds number $Re(t) \in [0, 100]$ based on the cylinder diameter D and the mean flow velocity $U_{ref} = 4U_{max}/9$ at the inlet.

For this configuration, Bayraktar et al. [7] recently conducted a thorough comparison of the performances of 3 unstructured CFD packages (OpenFOAM, Ansys-CFX and FEATFLOW) on a sequence of body-fitted curvilinear grids and provided highly accurate benchmark results. The same grids have been used for our FLUENT[®]

computations: a xy view of the coarsest mesh we considered, labeled L2 in [7], is shown in Fig. 9(a). The refined grid layer around the cylinder surface consists in near-uniform hexahedral cells of size $\Delta_2/D \simeq 0.31$ (based on the main diagonal) at the cylinder surface. The 3D mesh is obtained by extrusion in the z direction with a uniform distribution of cells, which gives a number of 49 152 3D cells. Finer meshes of cell size $\Delta_2/2$ and $\Delta_2/4$ are obtained by successive refinement, yielding meshes L3 and L4 with 393 216 and 3145 728 cells respectively. Corresponding block-structured Cartesian grids M2–M4 have been constructed for the LS-STAG solver with the following constraints: the total number of fluid cells and the grid resolution near the complex boundary should be as close as possible to the curvilinear meshes L2–L4, in spite of the inferior flexibility of Cartesian grids. The xy view of grid M2 is shown in Fig. 9(b): grid clustering around the cylinder is obtained by defining a rectangular block of $L_x/D \times L_y/D = 4.0 \times 2.0$ with uniform cells of size $h_x/D \times h_y/D = 0.118 \times 0.105$, while the grid size is relaxed upstream and downstream of this block. In the spanwise direction, a uniform cell distribution of size $\Delta z/D = 0.256$ is used. The resulting 3D mesh has 49 136 fluid cells of average size $\Delta_2/D \simeq 0.30$ near the cylinder body, which is similar to the L2 mesh. The main characteristics of the M2–M4 meshes are given in Table 1, along with the time-step used for the LS-STAG and FLUENT[®] computations.

The FLUENT[®] computations have been performed with the pressure-based solver, with second-order spatial discretizations [21]: QUICK scheme for convection discretization, Green-Gauss node-based interpolation for gradient calculation, and PRESTO! for pressure interpolation. Second-order implicit time-stepping (BDF2) has been selected. For pressure-velocity coupling, 2 variants of the segregated PISO time-advancement have been evaluated: the iterative (default) and non-iterative (NITA) versions. The default PISO algorithm performs several inner iterations per time-step to solve the momentum and pressure equations while the NITA variant solves these equations only once per time-step, yielding thus a time-advancement which resembles the most to our AB/BDF2 fractional step method. All other numerical parameters have been left to their default settings.

As in [7,19], the LS-STAG and FLUENT[®] simulations are conducted for the time interval $[0, 8$ s] corresponding to a half period of the inflow condition (35), and are evaluated against a highly accurate FEATFLOW solution obtained on a fine L5 mesh [22]. Fig. 10 displays the time evolution of the force coefficients obtained on the various meshes. First, it can be seen that both LS-STAG and FLUENT[®] solvers fail to capture the flow dynamics on the M2/L2 mesh due to insufficient grid resolution. Accurate results are obtained on the 2 finer meshes although, as shown in the close-ups of Fig. 10, the LS-STAG results appear to be slightly inferior to FLUENT[®]. A quantitative comparison is provided by Table 2 where, as proposed in Ref. [7], errors on the extrema of force coefficients and L_2 errors for $t \in [0, 8$ s] are compared. The LS-STAG results display a monotonic convergence for the lift coefficient, C_{Lmin} , C_{Lmax} and C_L . The errors are comparable to FLUENT[®] on the first 2 meshes, and only slightly inferior to FLUENT[®] on M4/L4. In addition, results on the drag coefficient, C_{Dmax} and C_D , although satisfactory, do not display a grid convergence as smooth as FLUENT[®]. As already observed in Section 6.1, this behavior is certainly due to the *ad hoc* discretization of the off-diagonal gradients $\partial w/\partial x$ and $\partial w/\partial y$ in the cut-cells.

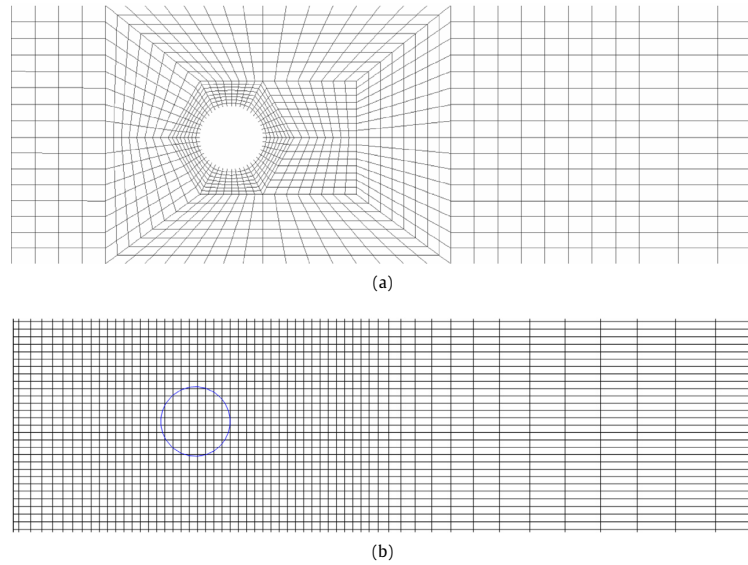


Fig. 9. 2D view of the coarsest meshes for the circular cylinder benchmark: (a) FLUENT[®] L2 mesh and (b) LS-STAG M2 mesh.

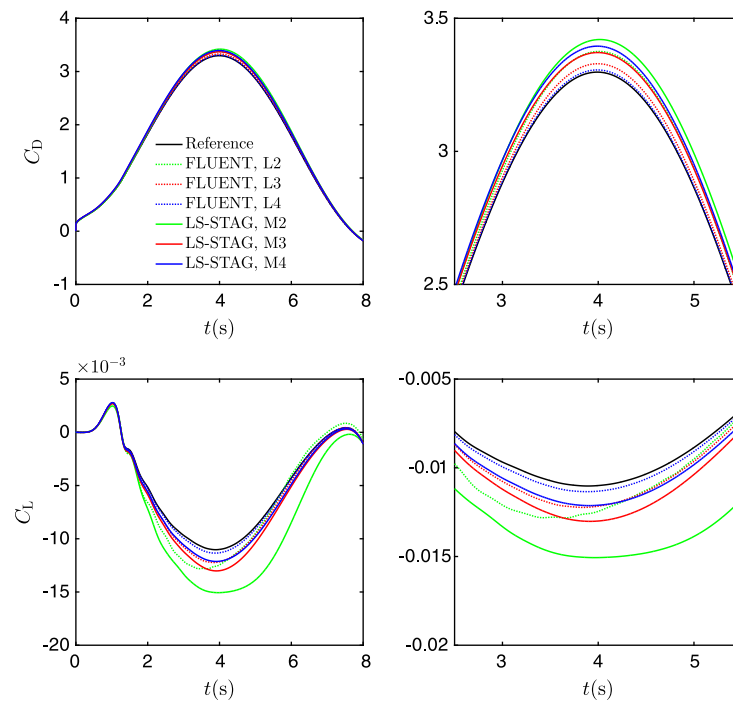


Fig. 10. Time evolution of the force coefficients computed by LS-STAG, FLUENT[®], and reference solution [22] at the cylinder. At left: on the total time interval; at right: close up around $t = 4$ s.

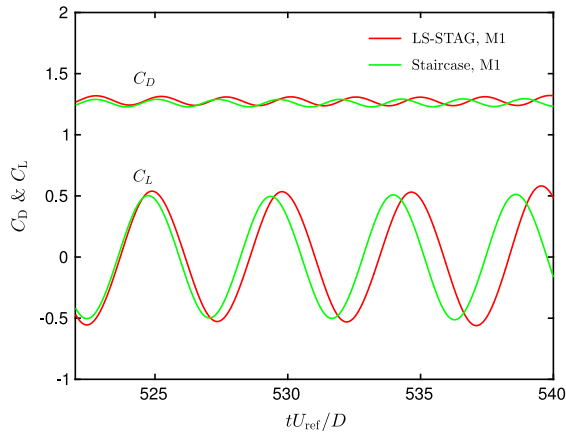
Finally, Table 3 presents the run-time and memory usage for the LS-STAG and FLUENT[®] computations. Due to the limited availability of FLUENT[®] licenses in our institution, the comparisons have been performed on 2 processors for the coarse mesh computation (M2 and L2) and 4 processors for the two finer meshes. The FLUENT[®] computations with the default PISO algorithm proved to be exceedingly time consuming (more than 22 times slower than LS-STAG) due to the cost of inner iterations and have not

been pursued on the finest mesh. Compared to the NITA variant of the PISO algorithm, the LS-STAG code is still substantially faster (approximately 3–4 times faster than FLUENT[®]). The memory savings of the LS-STAG methods are also substantial (4.5 times less memory needed than FLUENT[®] on M2/L2 and superior to 3 times for the finer meshes) due to the on-the-fly computation of cell geometry parameters of the LS-STAG code. Finally, we mention that these comparisons are made with the current implementation

Table 3

 Clock time and memory usage of the LS-STAG and FLUENT® computations on the JLL-LEMETA parallel machine (*np* refers to the number of processors).

Mesh	<i>np</i>	Wall time (min)				Memory usage (mb)			
		LS-STAG		FLUENT®		LS-STAG		FLUENT®	
				PISO	NITA			PISO	NITA
M2/L2	2	16	363	55	90	406	400		
M3/L3	4	132	2943	488	411	1368	1388		
M4/L4	4	2164	–	7841	2417	–	7927		


Fig. 11. Time evolution of the force coefficients for the cylinder flow at $Re_D = 300$ on the M1 mesh.

of LS-STAG code that uses the HYPRE library for solving the linear systems. Since these linear systems typically take up to 60% of the computational cost of a simulation, the optimization of LS-STAG code will always be limited by the performances of its algebraic solver package.

6.2.2. Turbulent flow at $Re_D = 300$

The purpose of this section is to assess the ability of LS-STAG method to perform accurate direct numerical simulation (DNS) of turbulent flows in complex geometries. The selected test-case is the (weakly) turbulent flow at $Re = 300$, at beginning of the wake turbulent shedding regime [23], for which accurate treatment of the fine scale structures in the near-cylinder wake is needed to properly capture the flow dynamics. It has been selected due to the availability of experimental results [24] and accurate body-conforming DNS (the spectral simulations of Mittal & Balachandar [8] and the zonal B-splines computations of Kravchenko et al. [9]). These studies will serve as reference for our simulations. In addition, this flow has also been computed by a state-of-the-art immersed boundary method [10]. In order to address the comparison of LS-STAG method with this IBM computation, we have used the same domain definition ($L = 50D$, $H = 30D$ and $L_z = 6D$ in Fig. 8) and built Cartesian grids with similar resolution. The coarse mesh M1 (correspond to the Case 1 mesh in [10]) has $243 \times 133 \times 64$ cells and a grid distribution similar to the mesh displayed in Fig. 9(b): the grid distribution is uniform in the spanwise direction, and in the xy plane a uniform block of size $4D \times 4D$ is used around the circular cylinder with grid resolution $h/D = 3.88 \times 10^{-2}$. A finer mesh M2 of $422 \times 226 \times 64$ cells with grid resolution $h/D = 1.94 \times 10^{-2}$ near the cylinder (similar to Case 2 in [10]) has also been considered.

The boundary conditions are the following: uniform velocity $u = U_{ref}$ at the inlet boundary, periodicity at the spanwise boundaries, traction-free conditions at cross-stream boundaries,

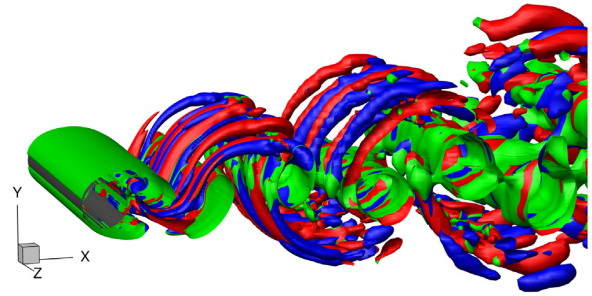

Fig. 12. Vortex visualization of the cylinder flow at $Re_D = 300$ by the Q-criterion on mesh M2. As in [10], the isosurfaces displayed correspond to the value $Q = 0.1$ and are colored with streamwise vorticity values: red is $\omega_x D/U_{ref} = 0.25$ and blue is $\omega_x D/U_{ref} = -0.25$. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

Table 4

 Mean flow parameters for the cylinder flow at $Re_D = 300$.

Case	\bar{C}_D	$\bar{C}_{L_{rms}}$	St
Measurement [26]	1.22	–	–
Measurement [24]	–	0.435	0.203
Spectral simulation [8]	1.26	0.380	0.203
B-spline simulation [9]	1.28	0.40	0.203
LS-STAG, M1	1.29	0.420	0.203
LS-STAG, M2	1.29	0.437	0.203
Staircase, M1	1.24	0.346	0.217
IBM Case 1 [10]	1.41	0.44	0.20
IBM Case 2 [10]	1.27	0.42	0.21
Body-fitted finite-volume [27]	1.28	0.499	0.195

and convective outflow condition at the outlet boundary. The time step is set as $\Delta t U_{ref}/D = 9 \times 10^{-3}$ and 4.5×10^{-3} on mesh M1 and M2 respectively, yielding a maximal cell CFL number of 0.41 during one shedding period. The initial condition is defined as the rest with random perturbations in the spanwise and crosswise direction to trigger the flow instability. The simulations were advanced in time up to a statistically steady flow pattern. Then, statistics were calculated by averaging in space in the spanwise direction and in time over 15 shedding cycles ($T \sim 80D/U_{ref}$). In addition to LS-STAG computations on M1 and M2 meshes, a staircase simulation (see Section 6.1) on M1 mesh has also been performed in order to evaluate the benefits of our cut-cell treatment. For both methods, the time history of the drag and lift coefficients is displayed in Fig. 11. Although both methods give force signals with comparable amplitudes, the crude staircase treatment of the complex geometry introduces a spurious lag in the force signals which yield incorrect prediction of the shedding frequency, as we shall see next.

The flow at $Re_D = 300$ is characterized by the presence of streamwise-oriented coherent structures of spanwise length order of D [23] in the cylinder wake. These large vortical structures are best visualized by the Q-criterion [25], which identifies vortical flow regions to positive values of the second invariant of the velocity gradient Q . Fig. 12 displays isosurfaces of Q in the near-wake of circular cylinder at an instantaneous time. It clearly shows the presence of large counter-rotating streamwise vortices in the near cylinder wake, whose number decreases further downstream. A similar qualitative observation of the wake structure has been performed in [9] by visualizing the instantaneous streamwise vorticity.

Table 4 compares the main flow characteristics, namely the mean drag coefficient, \bar{C}_D , root mean square average of the lift coefficient, $\bar{C}_{L_{rms}}$, and the Strouhal number $St = fD/U_{ref}$, where f is the shedding frequency, with reference body-fitted simulations [8,9],

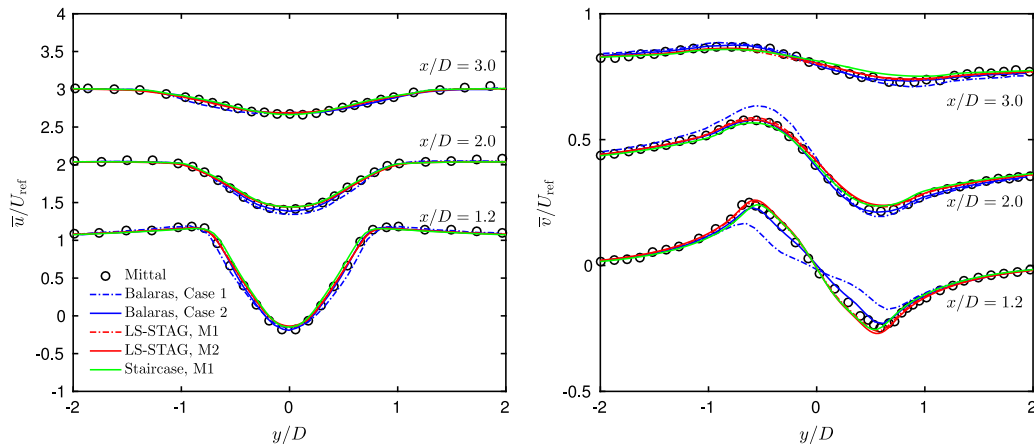


Fig. 13. Mean velocity profiles at different locations in the wake of circular cylinder at $Re_D = 300$: stream-wise (left) and cross-flow (right) components.

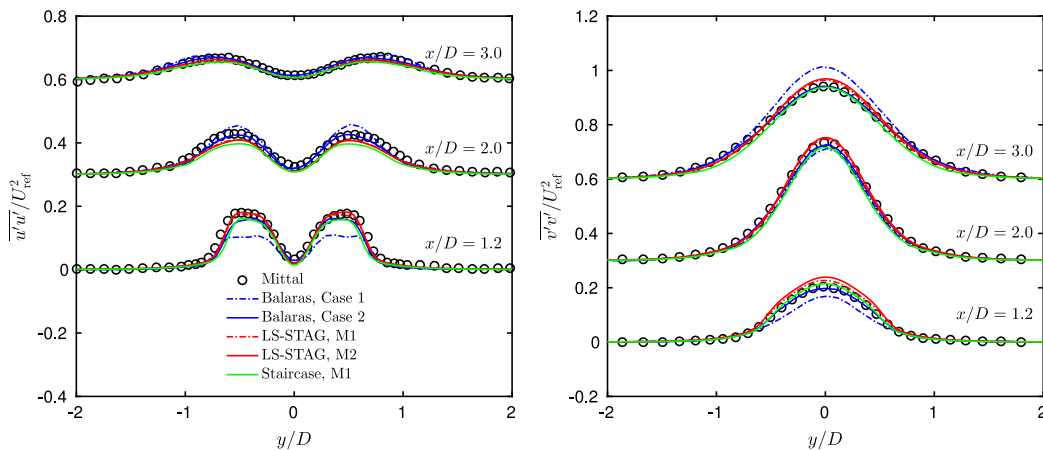


Fig. 14. Time-averaged velocity fluctuations at different locations in the wake of circular cylinder at $Re_D = 300$. At left: stream-wise component and right: cross-flow component.

experimental measurements [26,24], IBM computations [10] and the recent DNS of Rajani et al. [27] with a finite-volume solver on multiblock polar grids. It can be clearly seen that the shedding frequency is the easiest quantity to predict: only the IBM and staircase method on the coarsest mesh M1 and Ref. [27] misestimate its value. For the drag coefficient, accurate reference computations bracket its value in the range [1.26, 1.28], for which the LS-STAG computations on both coarse and fine meshes give a very close prediction, $\bar{C}_D = 1.29$. The rms lift coefficient proves to be the most sensitive value to predict, with reference values spread in the range [0.380, 0.435], with an upper value given by the experiments [24]. Both coarse and fine mesh LS-STAG simulation fall in this range, and in particular the M2 prediction is the closest computational result to the experimental value.

The mean velocity profiles, time-averaged velocity fluctuations and Reynolds shear stress at three different downstream locations in the wake of circular cylinder are displayed in Figs. 13–15, respectively. The LS-STAG and staircase computations are compared to IBM simulations [10] and reference spectral results [8]. (The B-spline solution of Ref. [9] are virtually indistinguishable from the spectral data and not shown in these figures.) Firstly, it can be observed that the LS-STAG results on both coarse and fine meshes show excellent agreement with the reference results, which indicates that the M1 grid resolution is sufficiently fine to capture

the wake dynamics at this flow regime. For this grid resolution, the IBM computation exhibits notable discrepancies on the cross-flow velocities (Fig. 13) and velocity fluctuations (Fig. 14) in the cylinder wake. It was conjectured that these discrepancies were caused by insufficient grid resolution, see [10]. However, on the light of LS-STAG computations, these discrepancies are more likely due to the inferior treatment of complex geometries given by the IBM compared to a cut-cell method of formally same order of accuracy. It is also interesting to observe that the staircase method, which is formally first-order accurate according to Section 6.1, gives superior results to the IBM method at similar grid resolution, see Table 4 and Figs. 13 and 14.

6.3. Flow of shear-thinning liquids in a 1:2 axisymmetric sudden expansion

Finally, the LS-STAG method is applied to the flow of Newtonian and shear-thinning fluids in an axisymmetric sudden expansion geometry of ratio $ER = 2$, for which rheological characterization, experimental flow measurements (nuclear magnetic resonance, NMR) and FLUENT[®] simulations have recently been performed by Rigal [11]. Following this work, the geometry sketched in Fig. 16 is composed by two pipes of diameter $D_1 = D_2/2 = 10$ mm, with upstream ($L_u = 150$ mm) and downstream ($L_d = 300$ mm) lengths

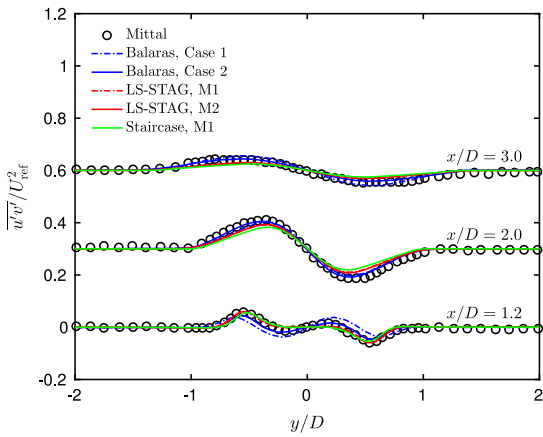


Fig. 15. Time-averaged Reynolds shear stress at different locations in the wake of circular cylinder at $Re_D = 300$.

set sufficiently large to allow complete flow development. At the pipe inlet, an Ostwald velocity profile is imposed:

$$w(r) = \frac{3n + 1}{n + 1} U_{ref} \left[1 - \left(\frac{2r}{D_1} \right)^{\frac{n+1}{n}} \right], \quad (36)$$

where U_{ref} is the inlet mean velocity and n is the power-law index. 3 types of fluids are considered: water (Newtonian) and two Xanthan solutions (of 0.1% and 0.3% mass concentration) whose shear-thinning behavior has been fitted with the power-law (4) and Cross (5) models in Table 5. The power-law parameters are used to calculate the flow Reynolds number (33) and inlet velocity (36), while the Cross model is used to model the shear-thinning viscosity in the LS-STAG computations.

First, a grid convergence study is conducted on 4 refined meshes whose properties are reported in Table 6. In the axial direction, the grid size h_z is kept constant in the vicinity of the singular expansion ($z \in [-5 \text{ mm}, 15 \text{ mm}]$), and is relaxed upstream and downstream. In the other 2 directions, the grid is uniform of size h .

For the Xanthan 0.1% flow at $Re_{D_1} = 56$, Fig. 17 displays axial velocity profiles at various cross sections (defined in Fig. 16(right)) given by the LS-STAG computations and the experiments. Negative velocities at $z = 1 \text{ mm}$ and $z = 9 \text{ mm}$ indicate the presence of a recirculation zone which vanishes downstream ($z = 21 \text{ mm}$). An excellent agreement is observed with the experimental results measured by NMR velocimetry, although a close inspection of the profile at $z = 1 \text{ mm}$ next to the abrupt expansion indicates a lack of grid resolution for the 2 coarsest meshes only.

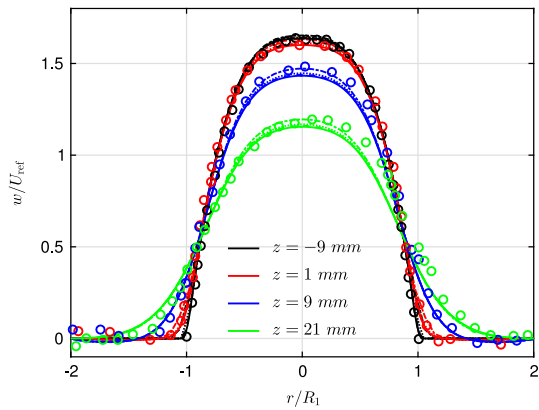


Fig. 17. Grid convergence of axial velocity profiles at various cross sections before and after the expansion plane for the Xanthan 0.1% flow at $Re_{D_1} = 56$. Circles (\circ) correspond to experimental results [11] while the dash-dotted (---), dotted (\cdots), dashed (--) and solid (—) lines represent the LS-STAG solutions on meshes M1 to M4 respectively.

The main feature of expansion flows is the presence of a recirculating vortex caused by the separation of fluid flow at the singularity and its reattachment at the wall further downstream. For non-Newtonian fluids, the vortex characteristics in axisymmetric geometries have been studied experimentally in [28,29] and numerically in [30,31]. The quantities of interest are the vortex length L_v , its intensity $\Delta\psi$ characterized by the maximal value of the stream function in the recirculation zone, and the establishment length L_e which is the downstream distance to the expansion plane from which the axial velocity becomes constant. These quantities, non-dimensionalized with the step-height $d = (D_2 - D_1)/2$, are reported in Table 7 at $Re_{D_1} = 56$ for meshes M1–M4. This table shows that nearly grid independent results are obtained on grid M3, with discrepancies below 1% for L_v and L_e , and below 3% for $\Delta\psi$ compared to the M4 results. It can be observed that the higher is the shear-thinning index, the weaker is the intensity of vortex. In effect, since the drop in velocity gradients is more pronounced in the recirculation zone for high shear-thinning fluids, the bulk flow is able to drive the secondary flow at a lower rate. Furthermore, we observe that the establishment length increases significantly with the shear-thinning index, while the vortex size tends to shorten. A similar trend has also been observed in the numerical computations of [30] for power-law fluids and the experiments of [29] for purely viscous non-Newtonian fluids in the laminar regime.

More insight in the vortex characteristics is given by varying the Reynolds number, with computations performed at $Re_{D_1} = 9, 22$,

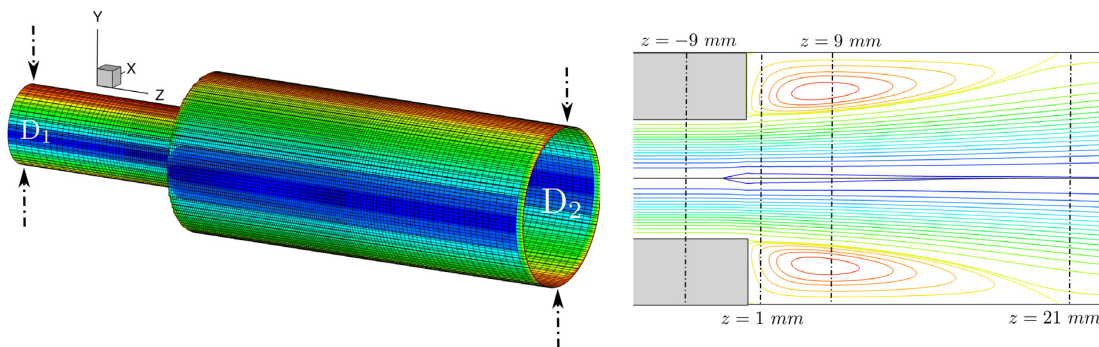


Fig. 16. Sketch of the axisymmetric sudden expansion geometry: At left: isometric view and at right: 2D view. The sudden expansion plane is placed at $z = 0$.

Table 5
Parameters of the power-law and Cross model reported by Rigal [11] for the 2 Xanthan solutions.

Fluid type	n	k (Pa s ^{n})	η_0 (Pa s)	η_∞ (Pa s)	m	K (s)
Xanthan 0.1%	0.543	0.128	0.376	0.00193	0.631	1.64
Xanthan 0.3%	0.322	1.11	9.84	0.0048	0.764	13.1

Table 6
Main properties of the grids for axisymmetric expansion flow.

Mesh	$N_x \times N_y \times N_z$	Cell types			h/D_1	h_z/D_1
		Cartesian	Cut-cell	Solid		
M1	$50 \times 50 \times 185$	254 844	32 336	175 320	4.08×10^{-2}	16.7×10^{-2}
M2	$100 \times 100 \times 370$	2 147 480	130 200	1 422 320	2.02×10^{-2}	8.33×10^{-2}
M3	$150 \times 150 \times 555$	7 321 320	294 780	4 871 400	1.35×10^{-2}	5.56×10^{-2}
M4	$200 \times 200 \times 740$	17 428 564	523 916	11 647 520	1.01×10^{-2}	4.17×10^{-2}

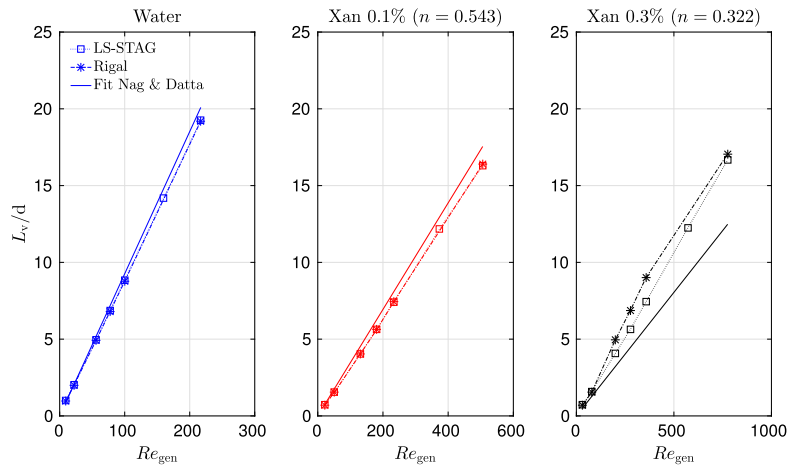


Fig. 18. Variation of the vortex length with respect to the generalized Reynolds number.

Table 7
Grid convergence study of the dimensionless vortex length (L_v/d), vortex intensity $\Delta\psi^* = \Delta\psi/(\pi d^2 U_{ref})$ and establishment length (L_e/d) at $Re_{D_1} = 56$. The establishment length is defined as the location where the axial and outlet velocity difference becomes lower than 2%.

Fluid type	Mesh	L_v/d	$\Delta\psi^* \times 10^3$	L_e/d
Water	M1	5.05	15.86	14.33
	M2	5.00	15.32	14.17
	M3	4.97	15.23	14.11
	M4	4.96	15.11	14.08
Xanthan 0.1%	M1	4.25	6.24	15.33
	M2	4.10	5.68	15.33
	M3	4.04	5.55	15.56
	M4	4.00	5.43	15.58
Xanthan 0.3%	M1	4.37	2.98	21.00
	M2	4.16	2.44	21.00
	M3	4.08	2.27	21.22
	M4	4.03	2.16	21.33

56, 77.5, 100, 160 and 217 on the M3 mesh. Fig. 18 shows the vortex length predicted by the LS-STAG code and the axisymmetric FLUENT® computations of Rigal [11] with respect to the generalized Reynolds number [31] $Re_{gen} = 2^{3-n}(\frac{n}{3n+1})^n Re_{D_1}$, where n is the power-law index given in Table 5. As first observed by Halmos et al. [30,28], the length of recirculation zone is a linear function of Re_{gen} for all fluid types. Deviation from linearity for the FLUENT® computations of the Xanthan 0.3% flows may be attributed to grid

under-resolution [11]. In addition, the empirical curve fitting of Nag & Datta [31] have been added to this figure. For expansion ratio $ER = 2$, it predicts a linear growth of the recirculation zone as:

$$\frac{L_v}{d} = (0.0297 n + 0.0629 n^2) Re_{gen}. \quad (37)$$

However, the authors stated that this fitting is only valid for the range $Re_{gen} \in [50, 200]$. It explains why the agreement of our computational results is excellent for the lower Reynolds number, while a deviation from this fit is observed as the Reynolds number is increased, most notably for the Xanthan 0.3% computations at $Re_{D_1} \geq 56$ (which corresponds to $Re_{gen} \gtrsim 200.1$).

Fig. 19 displays the evolution of establishment length L_e and secondary vortex intensity $\Delta\psi$ with respect to the Reynolds number for the various fluids. The monotonic growth of L_e with the Reynolds number is directly related to the size of vortex. In effect, a longer recirculation zone allows the flow to decelerate more gradually, retarding thus flow establishment as the Reynolds number increases. Vortex intensity is a monotonically increasing function of the Reynolds number that reaches a plateau at high Reynolds number. In [30], this behavior is attributed to the increase in rate of momentum transfer from the bulk flow to the recirculation zone, until the momentum dissipated in the wall region reaches an asymptotical value. Similar trends were observed in [32,33] for Newtonian flows with various expansion ratios.

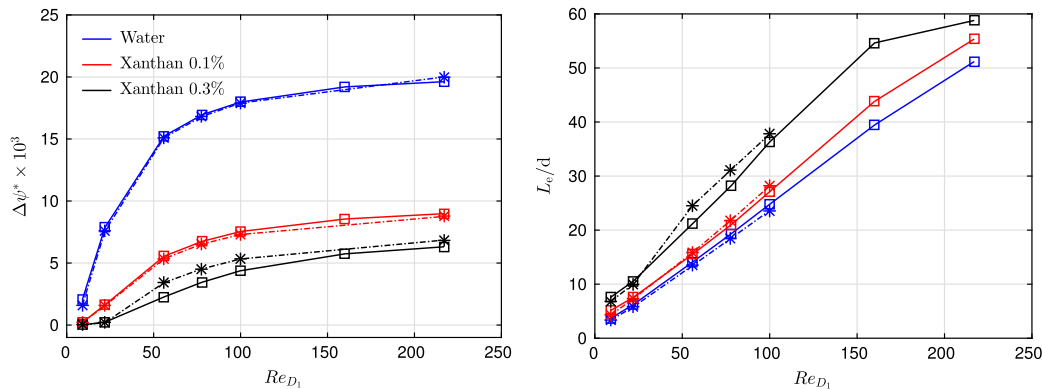


Fig. 19. Evolution of vortex intensity (left) and establishment length (right) with the Reynolds number: (—□—) LS-STAG and (---*) FLUENT® [11] results.

7. Concluding remarks

This paper has presented the extension of the LS-STAG cut-cell method to 3D extruded geometries in a parallel computing environment. A series of benchmark Newtonian and non-Newtonian flows have been conducted for assessing the performance of the LS-STAG solver (accuracy, computer resources) compared to well established flow solvers (Ansys-FLUENT® on body-fitted grids, immersed boundary method). To our knowledge, these issues have seldomly been addressed in the literature to such extent.

The results of these benchmark cases are very promising for cut-cell methods. The computations of the confined cylinder benchmark (Section 6.2.1) showed that a cut-cell solver was able to provide solution nearly as accurate as a commercial body-fitted CFD package, at a fraction of the computational cost. The DNS of turbulent cylinder flow (Section 6.2.2) highlighted the superior accuracy of the LS-STAG treatment of complex geometries compared to more traditional immersed boundary methods. Finally, the computation of Xanthan flows in axisymmetric sudden expansion illustrates the versatility of the method.

However, a close inspection on the accuracy of the LS-STAG method shows that the convergence rate is not as smooth as for methods on body-fitted grids. As stated in Sections 6.1 and 6.2.1, this behavior is certainly caused by the *ad-hoc* discretization of the off-diagonal velocity gradients $\partial w/\partial x$ and $\partial w/\partial y$ in cut-cells, which is not yet as mature as the discretization of other terms in the Navier–Stokes equations. Future work will be dedicated to the improvement of the discretization of these terms, by adding non-orthogonal corrections in the fashion of the diamond scheme for unstructured grids [34,16].

References

- [1] R. Mittal, G. Iaccarino, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 37 (2005) 239–261.
- [2] S. Kang, G. Iaccarino, P. Moin, Center for Turbulence Research Briefs, NASA Ames/Stanford University, 2004, pp. 31–43.
- [3] Y. Cheny, O. Botella, *J. Comput. Phys.* 229 (2009) 1043–1076.
- [4] O. Botella, M. Ait-Messaoud, A. Pertat, C. Rigal, Y. Cheny, *Theor. Comput. Fluid Dyn.* 29 (2015) 93–110.
- [5] O. Botella, Y. Cheny, F. Nikfarjam, M. Stoica, *Commun. Comput. Phys.* 20 (2016) 870–901.
- [6] P. van der Plas, H. van der Heiden, A. Veldman, R. Luppens, R. Verstappen, Seventh International Conference on Computational Fluid Dynamics, ICCFD7, Hawaii, paper ICCFD-2503, 2012.
- [7] E. Bayraktar, O. Mierka, S. Turek, *Int. J. Comput. Sci. Eng.* 7 (3) (2012) 253–266. <http://dx.doi.org/10.1504/IJCSE.2012.048245>.
- [8] R. Mittal, S. Balachandar, ASME Fluids Engineering Division Summer, Vancouver, British Columbia, Canada, 1997. Available on CD-ROM only.
- [9] A.G. Kravchenko, P. Moin, K. Shariff, *J. Comput. Phys.* 151 (2) (1999) 757–789. <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1999.6217>.
- [10] E. Balaras, *Comput. & Fluids* 33 (3) (2004) 375–404. [http://dx.doi.org/10.1016/S0045-7930\(03\)00058-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0045-7930(03)00058-6).
- [11] C. Rigal, *Comportement de Fluides Complexes Sous écoulement: Approche Expérimentale Par Résonance Magnétique Nucléaire et Techniques Optiques et Simulations Numériques* (Ph.D. thesis), Université de Lorraine, 2012.
- [12] R.B. Bird, R.C. Armstrong, O. Hassager, *Dynamics of Polymeric Liquids*, Wiley-Interscience, New-York, 1987.
- [13] S. Osher, R.P. Fedkiw, *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*, Springer, New-York, 2003.
- [14] R.W.C.P. Verstappen, A.E.P. Veldman, *J. Comput. Phys.* 187 (2003) 343–368.
- [15] J.H. Ferziger, M. Perić, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer, Berlin, 1996.
- [16] F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish, et al., *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics*, Springer, 2016, pp. 211–270 (Chapter 8).
- [17] W. Gropp, E. Lusk, A. Skjellum, *Using MPI: Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface*, MIT press, 1999.
- [18] R. Falgout, A. Cleary, J. Jones, E. Chow, V. Henson, C. Baldwin, P. Brown, P. Vassilevski, U.M. Yang, Center for Applied Scientific Computing (CASC), Lawrence Livermore National Laboratory. URL <http://acts.nersc.gov/hypre/>.
- [19] M. Schäfer, S. Turek, F. Durst, E. Krause, R. Rannacher, in: E.H. Hirschel (Ed.), *Notes on Numerical Fluid Mechanics (NNFM)*, Vol. 48, Vieweg+Teubner Verlag, 1996, pp. 547–566. http://dx.doi.org/10.1007/978-3-322-89849-4_39. Ch. Flow Simulation with High-Performance Computers II.
- [20] I. Orlanski, *J. Comput. Phys.* 21 (1976) 251–269.
- [21] Ansys FLUENT theory guide, release 14.0, 2013.
- [22] E. Bayraktar, Private communication, 2016.
- [23] C.H.K. Williamson, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 28 (1) (1996) 477–539. <http://dx.doi.org/10.1146/annurev.fl.28.010196.002401>.
- [24] C. Norberg, *J. Fluids Struct.* 15 (3–4) (2001) 459–469. <http://dx.doi.org/10.1006/jfls.2000.0367>.
- [25] J.C. Hunt, A. Wray, P. Moin, Center for Turbulence Research, Proceedings of the 1988 Summer Program, 1988, pp. 193–208.
- [26] C. Wieselsberger, *New Data on the Law of Hydro and Aerodynamic Resistance*, Vol. 84, NACA TN, 1992 (in German).
- [27] B. Rajani, A. Kandasamy, S. Majumdar, *Appl. Math. Model.* 33 (2009) 1228–1247.
- [28] A. Halmos, D. Boger, *AIChE J.* 21 (3) (1975) 550–553.
- [29] B. Pak, Y.I. Cho, S.U. Choi, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* 37 (2) (1990) 175–199.
- [30] A. Halmos, D. Boger, A. Cabelli, *AIChE J.* 21 (3) (1975) 540–549.
- [31] D. Nag, A. Datta, *J. Fluids Eng.* 129 (2) (2007) 245–250.
- [32] P. Scott, F. Mirza, J. Vlachopoulos, *Comput. & Fluids* 14 (4) (1986) 423–432.
- [33] D. Badekas, D. Knight, *J. Fluids Eng.* 114 (1) (1992) 119–121.
- [34] Y. Coudière, J.-P. Vila, P. Villedieu, *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.* 33 (3) (1999) 493–516.

Chapitre 11

Article sur la méthode LS-STAG/DCM

11.1 La méthode LS-STAG/DCM en géométries 2D et 3D-extrudées

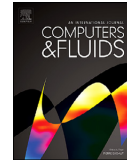
Computers and Fluids 189 (2019) 34–45



Contents lists available at ScienceDirect

Computers and Fluids

journal homepage: www.elsevier.com/locate/compfluid



Benchmark solutions

Accurate discretization of diffusion in the LS-STAG cut-cell method using diamond cell techniques

B. Portelenelle, O. Botella*, Y. Cheny

LEMETA - Université de Lorraine - 2 avenue de la Forêt de Haye, TSA Vandœuvre CEDEX 60604 - 54518, France



ARTICLE INFO

Article history:

Received 20 December 2018
 Revised 30 April 2019
 Accepted 8 May 2019
 Available online 9 May 2019

Keywords:

Computational fluid dynamics (CFD)
 Incompressible flows
 Heat transfer
 Cut-cell method
 Finite volume method
 Gradient discretisation

ABSTRACT

In cut-cell methods for fluid flow in complex geometries such as the LS-STAG method (Nikfarjam et al. Comput Phys Commun 226:67–80, 2018), mesh non-orthogonality near the immersed boundary makes inaccurate 2-point formulas for computing the face-normal gradients in diffusive fluxes. A way to improve the accuracy is to compute the whole solution gradient at the cut-cell faces, thus decomposing the flux as an orthogonal contribution (using a standard 2-point formula) and non-orthogonal correction (using data at cell vertices). The solution at cut-cell vertices is then interpolated from cell-centered data and boundary conditions. This gradient reconstruction technique is commonly denominated “diamond cell method”.

The diamond cell method is implemented in the LS-STAG code for cell-centered data (temperature equation in 2D geometries) and face-centered data (Navier-Stokes equations in 3D-extruded geometries) using various interpolation schemes for vertex reconstruction. The accuracy of the diamond cell discretization is firmly assessed on a series of 2D benchmark problems (Taylor-Couette solution, natural convection from a cylinder in an enclosure) by inspecting the formal order of accuracy and the heat flux distribution at the immersed boundary. Finally, the diamond cell technique is employed for enhancing the accuracy of the velocity gradients in 3D-extruded geometries which were previously computed with 2-point formulas. These computations illustrate the versatility of the diamond cell technique, which can be applied to other cut-cell methods.

© 2019 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The LS-STAG method [1] is a Cartesian method for incompressible flow computations in irregular geometries which aims at discretizing accurately the flow equations in the cut-cells, *i.e.* cells of complex polyhedral shape formed by the intersection of the Cartesian mesh with the immersed boundary. In the three basic types of 2D cut-cells (pentagonal, trapezoidal and triangular, see Fig. 1(top)), the discretization is designed such as the global invariants of the flow (total mass, momentum and kinetic energy) are preserved at the discrete level. The LS-STAG discretization in the cut-cells is consistent with the MAC discretization used in Cartesian fluid cells, and has the ability to preserve the 5-point Cartesian structure of the stencil, resulting in a highly computationally efficient method. The LS-STAG method has successfully been applied to Newtonian flows at moderate Reynolds number in fixed and moving geometries [1], pseudoplastic flows [2], and

viscoelastic flows [3]. In a recent paper [4], the LS-STAG discretization has been extended to 3D configurations with translational symmetry in the z direction (subsequently called “3D-extruded” configurations), where only the 4 types of cells depicted in Fig. 1(bottom) are present. In such geometries, only extruded 2D cut-cells are present, which enables us to easily extend the principles of the energy-conserving discretization of Ref. [1] to the cut-cells of Fig. 1(bottom) : the discretization of the continuity equation, pressure gradient, convective fluxes, normal stresses are straightforward extensions of the 2D LS-STAG formulas.

However, the discretization of cell-face dissipative fluxes involving shear stresses such as $\partial w/\partial x$ and $\partial w/\partial y$, which were absent from the 2D case, needed further attention. In effect, due to the non-orthogonality of the cut-cells, the use of 2-point formulas for computing these fluxes proves to be inaccurate. A way to improve the accuracy of the dissipative fluxes is to compute the whole velocity gradient at the cell faces, thus decomposing the flux as an orthogonal contribution (using a standard 2-point formula) and a non-orthogonal correction. This gradient reconstruction technique at cell faces is commonly denominated “secondary gradients” [5–9] in the CFD community and “diamond cell method”

* Corresponding author.

E-mail addresses: brice.portelenelle@univ-lorraine.fr (B. Portelenelle), olivier.botella@univ-lorraine.fr (O. Botella), yoann.cheny@univ-lorraine.fr (Y. Cheny).

<https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2019.05.005>

0045-7930/© 2019 Elsevier Ltd. All rights reserved.

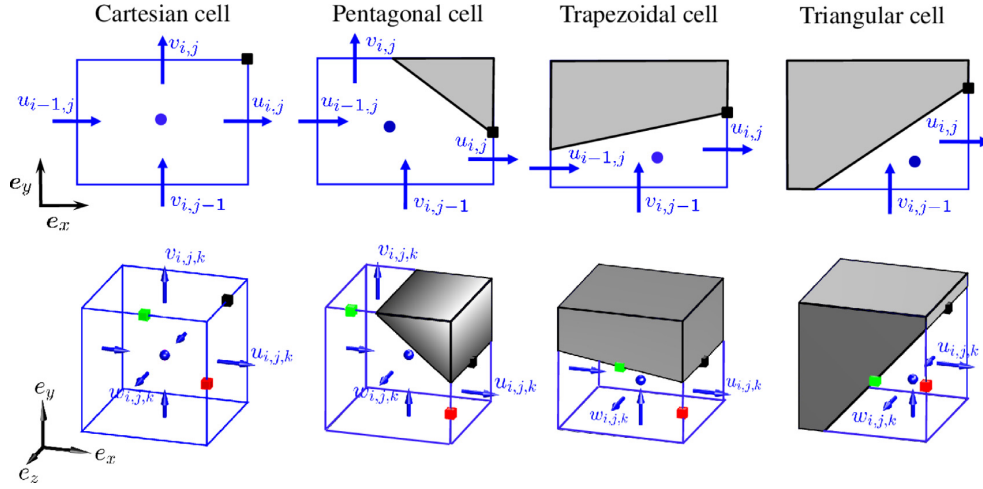


Fig. 1. Cartesian cell and 3 basic types of cut-cells present in the LS-STAG mesh in 2D (top, from left to right) and 3D extruded (bottom) geometries. Velocity unknowns are located at face centroids. Pressure, diagonal components of $\nabla \mathbf{v}$ and temperature are located at cell centroids (●). Off-diagonal components of $\nabla \mathbf{v}$ are located at cell vertices in 2D, and edge centroids in 3D : $\frac{\partial u}{\partial y}$, $\frac{\partial v}{\partial x}$ (■), $\frac{\partial u}{\partial x}$, $\frac{\partial v}{\partial z}$ (■) and $\frac{\partial w}{\partial y}$, $\frac{\partial w}{\partial z}$ (■).

[10–12] in the applied mathematics community, since the discrete gradient can be derived by applying the Gauss formula in the diamond-shaped control-volume formed by neighboring cell centers and vertices. For this reason, this technique will subsequently be denominated “diamond cell method”, or simply DCM. In the DCM, the non-orthogonal component can be computed by a deferred correction algorithm using discrete gradients calculated at cell centers [7–9], or can be expressed from data at cell vertices [6,10–12]. The data at cell vertices are then interpolated from the velocity unknowns and the boundary conditions, most notably by using least-squares reconstruction [6,10]. The gradient reconstruction with vertex data is the one that is pursued in this paper, since it allows an implicit solution of linear systems with black-box iterative solvers [13]. Note also that in a Cartesian cut-cell mesh, non-orthogonal correction is only needed in the vicinity of the immersed boundary.

This non-orthogonality issue is also found for computing heat transfer problems with the 2D version of the LS-STAG method, where the temperature unknowns are positioned at cell centers. Hence, for the ease of discussion the diamond cell method will first be described and analyzed for the diffusive fluxes of the heat equation, using various interpolation schemes for vertex reconstruction. In addition to the interpolation schemes usually employed by unstructured methods (inverse distance weighting, least-squares, see the discussion in [12]), we will propose a barycentric interpolation based on triangulation that produces excellent results on our cut-cell meshes. Simple and effective strategies for implementing Dirichlet and Neumann boundary conditions will also be presented. The accuracy of the DCM and the various variants of vertex reconstruction will be investigated on a series of benchmark problems (Taylor-Couette exact solution, natural convection from a cylinder in an enclosure [14]) by inspecting the formal order of accuracy and the heat flux distribution at the immersed boundary. In particular, the impact of the cut-cell quality (non-orthogonality, smoothness ratio) on the accuracy of the heat flow distribution will be thoroughly investigated. One of the main findings is that the largest errors in the diffusive flux computations are located in cut-cells of very small size (the so-called “small cut-cell problem” that hampers the stability and accuracy of cut-cell methods, see [15] for a review). The use of DCM with second-order vertex reconstruction greatly limits the magnitude of these local errors,

and does not reduce the stability of the numerical solution, since DCM and 2-point results have been obtained with the same time-integration scheme and time-step values. In this respect, DCM gradient discretization can be considered as a viable alternative to *ad-hoc* procedures such as cell-merging [16] or cell-linking [17].

Finally, the diamond cell technique is employed for enhancing the accuracy of the dissipative terms for isothermal flows in 3D extruded geometries, most notably the shear stresses $\partial w/\partial x$ and $\partial w/\partial y$ which were discretized with 2-point formulas in [4] in spite of the non-orthogonality of the cut-cells. Furthermore, DCM formulas at the boundary enables us to revisit the discretization of the hydrodynamic forces at the immersed boundary, in order to provide a more systematic and accurate formulation than the one proposed in our previous works [1,4]. This formulation is valid for the 2D and 3D-extruded version of the LS-STAG method. The method will be applied to the unsteady flow past circular cylinder [18] already computed in [4] with the 2-point LS-STAG method and an unstructured commercial solver (ANSYS FLUENT®), and the benefits of the DCM discretization in terms of accuracy and computational cost will be investigated.

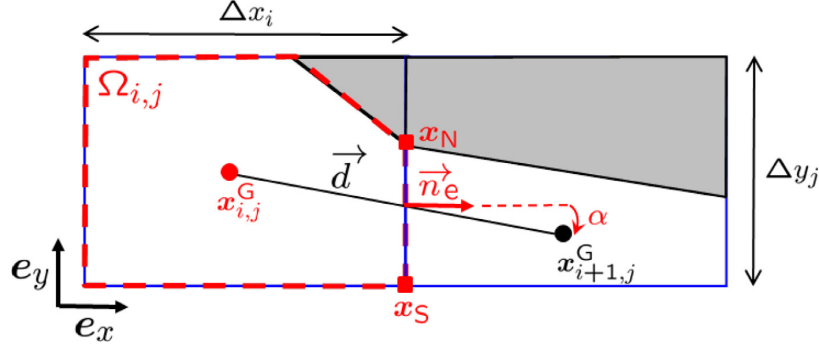
2. Discretization of diffusion with the diamond cell technique

The various discretization of diffusion that we consider are best detailed for the 2D temperature equation :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}T) - \kappa \nabla^2 T = 0, \quad (1)$$

where T is the temperature, $\mathbf{v} = (u, v)$ is the convection velocity and κ is the thermal diffusivity. In the cut-cell Ω_{ij} depicted in red in Fig. 2, whose volume is denoted V_{ij} , the temperature T_{ij} is located at the centroid $\mathbf{x}_{i,j}^c = (x_{i,j}^c, y_{i,j}^c)$, and the faces of the cut-cell are decomposed as $\Gamma_{i,j} = \Gamma_{i,j}^w \cup \Gamma_{i,j}^e \cup \Gamma_{i,j}^s \cup \Gamma_{i,j}^n \cup \Gamma_{i,j}^{ib}$, where $\Gamma_{i,j}^{ib}$ denotes the solid part of the cut-cell, while the fluid faces are denoted with the standard compass notations. The diffusive flux at the east face $F_e^d = \kappa \int_{\Gamma_{i,j}^e} \nabla T \cdot \mathbf{n} dS$ is discretized with midpoint quadrature, yielding :

$$F_e^d \cong \kappa \theta_{i,j}^u \Delta y_j \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_e, \quad (2)$$


 Fig. 2. Relevant notations for the discretization of the diffusion flux at the east face of cut-cell $\Omega_{i,j}$.

where $\theta_{i,j}^u \in [0, 1]$ is the fluid fraction ratio of the face, such as $\theta_{i,j}^u \Delta y_j = \|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_S\|$ in Fig. 2, and $\partial T / \partial x|_e = \nabla T|_e \cdot \mathbf{n}_e$ is the face-normal temperature gradient.

Several alternate formulas can be considered for computing $\partial T / \partial x|_e$. The simplest is the following two-point approximation :

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_e \cong \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{\|\mathbf{d}\|}, \quad (3)$$

where $\mathbf{d} = \mathbf{x}_{i+1,j}^G - \mathbf{x}_{i,j}^G$ is the vector joining the cell centroids. In the case where \mathbf{d} and the face normal vector $\mathbf{n}_e = \mathbf{e}_x$ are colinear, formulae (2)–(3) recover the usual second-order Cartesian discretization. However, for the cut-cells depicted in Fig. 2, the colinearity is lost and formula (3) loses its accuracy as the non-colinearity increases, i.e. as the angle $\alpha = \text{mes}(\mathbf{n}_e, \mathbf{d})$ becomes large. This issue, which is analogous to the non-orthogonality of curvilinear and unstructured grids [9], has first been observed in [19] for the LS-STAG method in 3D extruded geometries. In this reference, they proposed to compute off-diagonal components of the velocity gradients of the Navier-Stokes equations with a formula consistent with the pressure gradient discretization. For the case of the temperature equation, this *ad hoc* formula amounts to :

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_e \cong \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{(\frac{1}{2}V_{i+1,j} + \frac{1}{2}V_{i,j})/\theta_{i,j}^u \Delta y_j}. \quad (4)$$

However, the Navier-Stokes computations in [4] reported that the use of the above two-point formulas diminishes the accuracy of the LS-STAG method, and that only a superlinear order of convergence was obtained. The reason is that, when $\alpha \neq 0$, the face-normal gradient $\partial T / \partial x|_e$ cannot be written as a function of $T_{i,j}$ and $T_{i+1,j}$ only, it also has a component tangential to the face. It is thus necessary to compute the whole temperature gradient, which reads in the local basis of the east face :

$$\nabla T|_e = \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_e \mathbf{e}_x + \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_e \mathbf{e}_y, \quad (5)$$

since $\mathbf{n}_e = \mathbf{e}_x$ in Fig. 2.

An elegant way to proceed is to approximate the gradient in the \mathbf{d} direction as :

$$\nabla T|_e \cdot \frac{\mathbf{d}}{\|\mathbf{d}\|} = \cos \alpha \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_e + \sin \alpha \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_e \cong \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{\|\mathbf{d}\|}, \quad (6)$$

while the gradient tangential to the face is computed as :

$$\frac{\partial T}{\partial y} \Big|_e \cong \frac{T_N - T_S}{\theta_{i,j}^u \Delta y_j}, \quad (7)$$

where T_N and T_S are located at the face endpoints \mathbf{x}_N and \mathbf{x}_S . Then, substitution of (7) in (6) gives the following approximation of the

face-normal gradient :

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_e \cong \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{\|\mathbf{d}\| \cos \alpha} - \tan \alpha \frac{T_N - T_S}{\theta_{i,j}^u \Delta y_j}, \quad (8a)$$

with

$$\|\mathbf{d}\| \cos \alpha = x_{i+1,j}^G - x_{i,j}^G, \quad \tan \alpha = \frac{y_{i+1,j}^G - y_{i,j}^G}{x_{i+1,j}^G - x_{i,j}^G}. \quad (8b)$$

The first quotient in the RHS of (8a) is the orthogonal contribution of the gradient discretization, while the second quotient is the non-orthogonal contribution that vanishes when \mathbf{d} and \mathbf{n}_e are colinear ($\alpha = 0$), yielding a two-point approximation identical to (3) and (4). Compared to the two-point approximations, this formula introduces supplementary unknowns at face vertices \mathbf{x}_N and \mathbf{x}_S , that need to be reconstructed for the solution at the centroids, as discussed in the next section.

The gradient formula (8a) can also be derived by applying the Green-Gauss theorem in the diamond-shaped control volume formed by joining the cell centers $\mathbf{x}_{i,j}^G$, $\mathbf{x}_{i+1,j}^G$ and the face endpoints \mathbf{x}_N , \mathbf{x}_S ; the resulting formula is known as the *diamond cell scheme*. The diamond cell method (hereafter labeled DCM) has been introduced in [5,6,20] for viscous compressible computations on unstructured meshes. Mathematical analysis has been performed in [10,11] for the convection-diffusion equation. Furthermore, formula (8) is equivalent to the over-relaxed approach for diffusion discretization presented in [9].

A similar procedure is employed to approximate diffusion at the immersed boundary. The diffusion flux at the immersed boundary is $F_{ib}^d \equiv \kappa \int_{\Gamma_{i,j}^{ib}} \nabla T \cdot \mathbf{n} \, dS \cong \kappa \|\Delta \mathbf{S}_{i,j}^{ib}\| \partial T / \partial n|_{ib}$, where $\Delta \mathbf{S}_{i,j}^{ib}$ is the face area vector of the solid face whose coordinates are given by :

$$[\Delta S_x]_{i,j}^{ib} = (\theta_{i-1,j}^u - \theta_{i,j}^u) \Delta y_j, \quad [\Delta S_y]_{i,j}^{ib} = (\theta_{i,j}^v - \theta_{i-1,j}^v) \Delta x_i, \quad (9)$$

for all types of cut-cells. Application of the DCM technique (6)–(8) in the direction $\mathbf{d}_{i,j}^{ib}$ joining centroid $\mathbf{x}_{i,j}^G$ to the center $\mathbf{x}_{i,j}^{ib}$ of the solid face $\Gamma_{i,j}^{ib}$ (see Fig. 3) yields the following gradient approximation in the local basis $(\mathbf{n}_{i,j}^{ib}, \mathbf{t}_{i,j}^{ib})$ of the face :

$$\frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{ib} \cong \frac{T_{i,j}^{ib} - T_{i,j}}{\Delta_{i,j}^{ib}} - \tan \alpha_{i,j}^{ib} \frac{T_{NN} - T_N}{\|\mathbf{x}_{NN} - \mathbf{x}_N\|}, \quad (10a)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} \Big|_{ib} \cong \frac{T_{NN} - T_N}{\|\mathbf{x}_{NN} - \mathbf{x}_N\|}, \quad (10b)$$

where $T_{i,j}^{ib}$ is the temperature at $\mathbf{x}_{i,j}^{ib}$ and $\Delta_{i,j}^{ib} = d_{i,j}^{ib} \cos \alpha_{i,j}^{ib}$ is the perpendicular distance from centroid $\mathbf{x}_{i,j}^G$ to segment $\Gamma_{i,j}^{ib}$. For some applications (see Section 4.3), the components of the gradient at

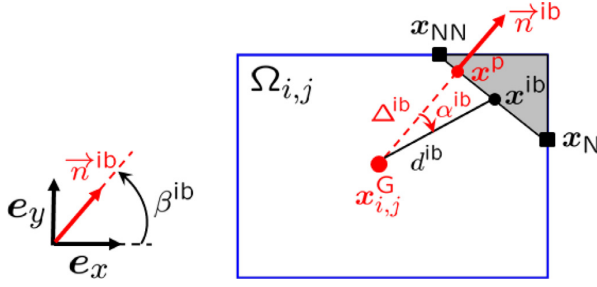


Fig. 3. Relevant notations for the discretization of the diffusion flux at the solid face of cut-cell $\Omega_{i,j}$. For sake of clarity, some of the subscripts i, j have been omitted in the figure.

the solid boundary are needed in the Cartesian basis $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y)$ of the computational domain. By denoting $\beta_{i,j}^{\text{ib}} = \text{mes}(\mathbf{e}_x, \mathbf{n}_{i,j}^{\text{ib}})$ the inclination of the solid face, a simple change of basis yields :

$$\frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\text{ib}} \cong \cos \beta_{i,j}^{\text{ib}} \frac{T_{i,j}^{\text{ib}} - T_{i,j}}{\Delta_{i,j}^{\text{ib}}} - (\sin \beta_{i,j}^{\text{ib}} + \cos \beta_{i,j}^{\text{ib}} \tan \alpha_{i,j}^{\text{ib}}) \frac{T_{\text{NN}} - T_{\text{N}}}{\|\mathbf{x}_{\text{NN}} - \mathbf{x}_{\text{N}}\|}, \quad (11a)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \mathbf{y}} \Big|_{\text{ib}} \cong \sin \beta_{i,j}^{\text{ib}} \frac{T_{i,j}^{\text{ib}} - T_{i,j}}{\Delta_{i,j}^{\text{ib}}} + (\cos \beta_{i,j}^{\text{ib}} - \sin \beta_{i,j}^{\text{ib}} \tan \alpha_{i,j}^{\text{ib}}) \frac{T_{\text{NN}} - T_{\text{N}}}{\|\mathbf{x}_{\text{NN}} - \mathbf{x}_{\text{N}}\|}, \quad (11b)$$

where the boundary inclination is efficiently calculated as $\cos \beta_{i,j}^{\text{ib}} = [\Delta S_{x_{i,j}^{\text{ib}}} / \|\Delta \mathbf{S}_{i,j}^{\text{ib}}\|]$ and $\sin \beta_{i,j}^{\text{ib}} = [\Delta S_{y_{i,j}^{\text{ib}}} / \|\Delta \mathbf{S}_{i,j}^{\text{ib}}\|]$.

3. Practical implementation of the diamond cell scheme

In the DCM formulae (8a) and (10), solution unknowns at the vertices of the solid boundary $(\mathbf{x}_{\text{N}}$ and $\mathbf{x}_{\text{NN}})$ and in the fluid domain (\mathbf{x}_{S}) need to be interpolated from the boundary conditions and from neighboring cell-centered values in the fluid domain. Boundary data are discretized at the endpoints of the solid segments representing the immersed boundary, e.g. \mathbf{x}_{N} and \mathbf{x}_{NN} in Fig. 3.

3.1. Implementation of the gradient formulas

In the DCM formulas (8), all coefficients are efficiently calculated with explicit formulas. In formulas (10) and (11), the computation of $\Delta_{i,j}^{\text{ib}}$ and $\tan \alpha_{i,j}^{\text{ib}}$ is performed after having calculated $\mathbf{x}_{i,j}^{\text{p}}$, the orthogonal projection of $\mathbf{x}_{i,j}^{\text{G}}$ on the solid face $\Gamma_{i,j}^{\text{ib}}$ (see Fig. 2). Then we get $\Delta_{i,j}^{\text{ib}} = \|\mathbf{x}_{i,j}^{\text{p}} - \mathbf{x}_{i,j}^{\text{G}}\|$ and :

$$\tan \alpha_{i,j}^{\text{ib}} = \frac{x_{i,j}^{\text{ib}} - x_{i,j}^{\text{p}}}{\Delta_{i,j}^{\text{ib}}}, \quad (12)$$

where $x_{i,j}^{\text{ib}}$ and $x_{i,j}^{\text{p}}$ denote the abscissae of $\mathbf{x}_{i,j}^{\text{ib}}$ and $\mathbf{x}_{i,j}^{\text{p}}$ in the interval $(x_{\text{N}}, x_{\text{NN}})$.

As a matter of fact, the DCM formula (10) (or (11)) at the boundary is independent of the point where it is calculated when the data at the immersed boundary is assumed to vary linearly. This can be shown by writing the abscissa of $\mathbf{x}_{i,j}^{\text{ib}}$ as :

$$x_{i,j}^{\text{ib}} = \omega_{\text{ib}} x_{\text{NN}} + (1 - \omega_{\text{ib}}) x_{\text{N}}, \quad \omega_{\text{ib}} = \frac{x_{i,j}^{\text{ib}} - x_{\text{N}}}{x_{\text{NN}} - x_{\text{N}}}, \quad (13a)$$

and assuming linear variation of the boundary values :

$$T_{i,j}^{\text{ib}} \cong \omega_{\text{ib}} T_{\text{NN}} + (1 - \omega_{\text{ib}}) T_{\text{N}}. \quad (13b)$$

After inserting (12) and (13b) in (10a), one gets :

$$\frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{\text{ib}} \cong \frac{\omega_{\text{p}} T_{\text{NN}} + (1 - \omega_{\text{p}}) T_{\text{N}} - T_{i,j}}{\Delta_{i,j}^{\text{ib}}}, \quad \omega_{\text{p}} = \frac{x_{i,j}^{\text{p}} - x_{\text{N}}}{x_{\text{NN}} - x_{\text{N}}}, \quad (14)$$

which corresponds to the discretization of the temperature gradient in the direction normal to the boundary, since $\omega_{\text{p}} T_{\text{NN}} + (1 - \omega_{\text{p}}) T_{\text{N}}$ is a linear approximation of the temperature at $\mathbf{x}_{i,j}^{\text{p}}$, denoted $T_{i,j}^{\text{p}}$. This property shows that, for non-homogeneous boundary data, the discrete gradient can be calculated at any location on the solid boundary. This property will prove useful for the practical implementation of the DCM method, most notably for the Neumann boundary conditions discussed next, and the calculation of the hydrodynamic forces discussed in Section 4.3.

3.2. Implementation of boundary conditions

In the case of Dirichlet boundary conditions, the temperature is prescribed at the endpoints of the solid faces, providing thus the values of T_{N} , T_{NN} and $T_{i,j}^{\text{ib}} = (T_{\text{N}} + T_{\text{NN}})/2$ in (8a) and (10a). Note that in the case of homogeneous boundary conditions, the non-orthogonal component in (10a) vanishes.

For the Neumann boundary condition $\partial T / \partial n|_{\text{ib}} = \phi$, the flux at the solid boundary is explicitly given by $F_{\text{ib}}^{\text{d}} \cong \kappa \|\Delta \mathbf{S}_{i,j}^{\text{ib}}\| \phi$ and the value of T_{N} in (8a) is reconstructed from the following procedure. First, linear variation of the temperature at the boundary yields :

$$T_{\text{N}} \cong \omega T_{i,j}^{\text{p}} + (1 - \omega) T_{i+1,j}^{\text{p}}, \quad \omega = \frac{\|\mathbf{x}_{i+1,j}^{\text{p}} - \mathbf{x}_{\text{N}}\|}{\|\mathbf{x}_{i+1,j}^{\text{p}} - \mathbf{x}_{\text{N}}\| + \|\mathbf{x}_{i,j}^{\text{p}} - \mathbf{x}_{\text{N}}\|}. \quad (15)$$

Next, $T_{i,j}^{\text{p}}$ is reconstructed from cell-centered values by using the boundary condition, yielding $T_{i,j}^{\text{p}} \cong T_{i,j} + \phi \Delta_{i,j}^{\text{ib}}$ from (14). After using a similar approximation for $T_{i+1,j}^{\text{p}}$, the value of T_{N} is finally given by :

$$T_{\text{N}} \cong \omega (\phi \Delta_{i,j}^{\text{ib}} + T_{i,j}) + (1 - \omega) (\phi \Delta_{i+1,j}^{\text{ib}} + T_{i+1,j}). \quad (16)$$

3.3. Solution reconstruction at fluid vertices

In the DCM formula (8a), the temperature at \mathbf{x}_{S} needs to be reconstructed from neighboring cell-centered values :

$$T_{\text{S}} \cong \sum_{(i,j) \in N_b(\text{S})} \omega_{i,j} T_{i,j}, \quad (17)$$

where $N_b(\text{S})$ refers to the indices of the 4 cells neighboring vertex \mathbf{x}_{S} . Bertolazzi and Manzini [12] reviewed various possibilities for defining the reconstruction weights $\omega_{i,j}$. Basic choices include the inverse-volume interpolation, with weights based on the cell volumes :

$$\omega_{i,j} = \frac{V_{i,j}}{\sum_{(i,j) \in N_b(\text{S})} V_{i,j}}, \quad (18)$$

and the inverse-distance interpolation, with weights :

$$\omega_{i,j} = \frac{\|\mathbf{x}_{i,j}^{\text{G}} - \mathbf{x}_{\text{S}}\|^{-p}}{\sum_{(i,j) \in N_b(\text{S})} \|\mathbf{x}_{i,j}^{\text{G}} - \mathbf{x}_{\text{S}}\|^{-p}}, \quad (19)$$

where $p \geq 1$ is a given exponent ($p = 1$ corresponds to the Euclidean distance).

These two choices of weights give exact reconstruction for constant functions only, reducing thus the formal accuracy of the DCM formula to first-order only. In [12], an algorithm is discussed to

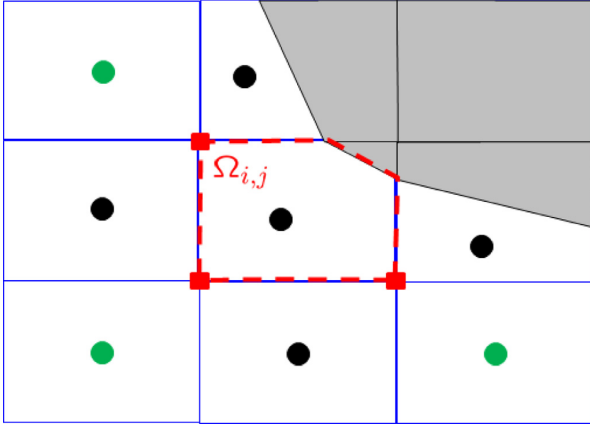


Fig. 4. Stencil used for the discretization of diffusion in cut-cell $\Omega_{i,j}$. In black: 5-point stencil for 2-point discretization. For the DCM discretization with reconstruction at vertices (■), unknowns at the green centroids are added to the stencil. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

reach second-order accuracy, by altering the values of the weights in order to fulfill the condition for exact reconstruction of linear functions. Note however that this algorithm involves centroid selection, solution of linear systems, and the resulting set of weights is not unique.

Second-order accuracy can also be reached by using least-squares weights that minimize the reconstruction of linear functions. This least-squares reconstruction is described in [6] for the solution of the compressible Navier-Stokes equations on unstructured grids, and has been analyzed in [10,12] for model diffusion problems. However, our numerical experiments (see next section) showed that negative weights may appear for some cut-cells, giving rise to oscillatory solutions. For this reason, we have implemented a reconstruction based on triangulation [21] that ensures non-negativity of the weights. Out of the 4 triangles formed by the neighboring centroids of a given vertex, we select the triangle of largest minimal angle that contains the vertex. The value at the vertex is then obtained by barycentric interpolation.

3.4. Other implementation issues

In the LS-STAG code, diffusion is treated with an implicit time-integration method, so the use of the DCM with vertex reconstruction has the effect to increase the stencil of the linear systems. As shown in Fig. 4, the DCM discretization needs to be applied to the four fluid faces of cut-cell $\Omega_{i,j}$, yielding a 9-point stencil instead of the standard 5-point stencil for 2-point discretization. Note that DCM needs only to be applied to neighboring cells of the immersed boundary. In the vast majority of the computational domain, the mesh is orthogonal and the standard 5-point stencil is recovered. The linear systems are solved with the HYPRE library (V2.10) using the semi-structured-grid system interface [13].

4. Numerical results

The diamond cell method is implemented in the 2D and 3D-extruded LS-STAG code for the discretization of face-normal gradients in the temperature and Navier-Stokes equations. First, an accuracy study of the DCM is presented for the 2D temperature equation. The temperature equation is then coupled with the Navier-Stokes equations for computing 2D natural convection problems, with the aim to compute accurately local heat flux at

immersed boundaries, which is a sensible quantity since it involves temperature gradients at the solid face of cut-cells. Once the DCM is assessed on 2D flows, the DCM is applied to the Navier-Stokes equations in 3D-extruded geometries to enhance the accuracy of isothermal incompressible flows computed with the LS-STAG method with 2-point discretization reported in [4].

For interpolation at fluid vertices, the following reconstruction schemes discussed in Section 3.3 are considered :

- LS-STAG/DCM-ID1: first-order inverse distance weights with $p = 2$,
- LS-STAG/DCM-ID2: second-order inverse distance weights with $p = 2$, using the algorithm discussed in [12],
- LS-STAG/DCM-LSQ: least-squares weights,
- LS-STAG/DCM-TRI: barycentric interpolation on triangulation.

For all variants of the DCM, Dirichlet and Neumann boundary conditions are imposed following the procedures discussed in Section 3.2. The performance of DCM is also compared with the 2-point gradient (4), which is labeled LS-STAG/2PT.

All computations are performed with the parallel LS-STAG flow solver described in [4]. Unsteady results are obtained with second-order time accurate time stepping, while steady state results are obtained with first-order time stepping, and is considered reached when the normalized time derivatives of the velocity and temperature is below the threshold $\epsilon = 10^{-7}$ (for the 2D flows of Sections 4.1 and 4.2), or $\epsilon = 10^{-6}$ (for the 3D extruded flow of Section 4.3). For the natural convection benchmark of Section 4.2, an additional convergence condition based on the wall heat flux balance is considered.

4.1. 2D thermal conduction in Taylor-Couette cell

First the spatial accuracy of the various variants of DCM is assessed on the test case of pure thermal conduction between concentric cylinders of diameters $r = R_1$ and $r = R_2$, for which the steady radial temperature distribution :

$$T_{\text{ex}}(r) = \phi R_1 \ln(r/R_2) + T_2, \quad \phi = \frac{T_1 - T_2}{R_1 \ln(R_1/R_2)}, \quad (20)$$

is solution to the heat equation (Eq. (1) with $\nu = 0$) with both Dirichlet ($T_{\text{ex}}(R_1) = T_1$, $T_{\text{ex}}(R_2) = T_2$ for $r = R_2$) or Neumann ($\partial T_{\text{ex}}(R_1)/\partial r = \phi$, $\partial T_{\text{ex}}(R_2)/\partial r = \phi R_1/R_2$) boundary conditions. For the numerical experiments, we set the temperature difference as $T_1 - T_2 = 1\text{K}$, and employ the same geometry ($R_1 = 1\text{m}$ and $R_2 = 4\text{m}$) and uniform meshes (of size $\Delta x = \Delta y = h$) considered in [2] for non-Newtonian computations with the LS-STAG method.

For both Dirichlet and Neumann boundary conditions, Fig. 5 compares the maximal error :

$$E_h^\infty(T) = \frac{\max_{CVs\Omega_{i,j}} |T_{i,j} - T_{\text{ex}}(\mathbf{x}_{i,j}^C)|}{\max_{CVs\Omega_{i,j}} |T_{\text{ex}}(\mathbf{x}_{i,j}^C)|} \quad (21)$$

obtained on the whole computational domain (including the cut-cells) for the various DCM variants. The 2-point method gives clearly the worst results, with a first-order rate of convergence for the Dirichlet case while no convergence is observed for the Neumann case. The errors given by all DCM variants are several decades lower, highlighting the benefits of this gradient computation. Note however that the errors of DCM-ID1 quickly saturates to a first-order rate when the grid size is reduced, due to the low accuracy of the vertex reconstruction scheme. All other reconstruction schemes (DCM-ID2, DCM-LSQ, DCM-TRI) give a similar second-order accuracy, with almost indistinguishable results on this test case. The performance of these three variants will be more thoroughly investigated in the next section.

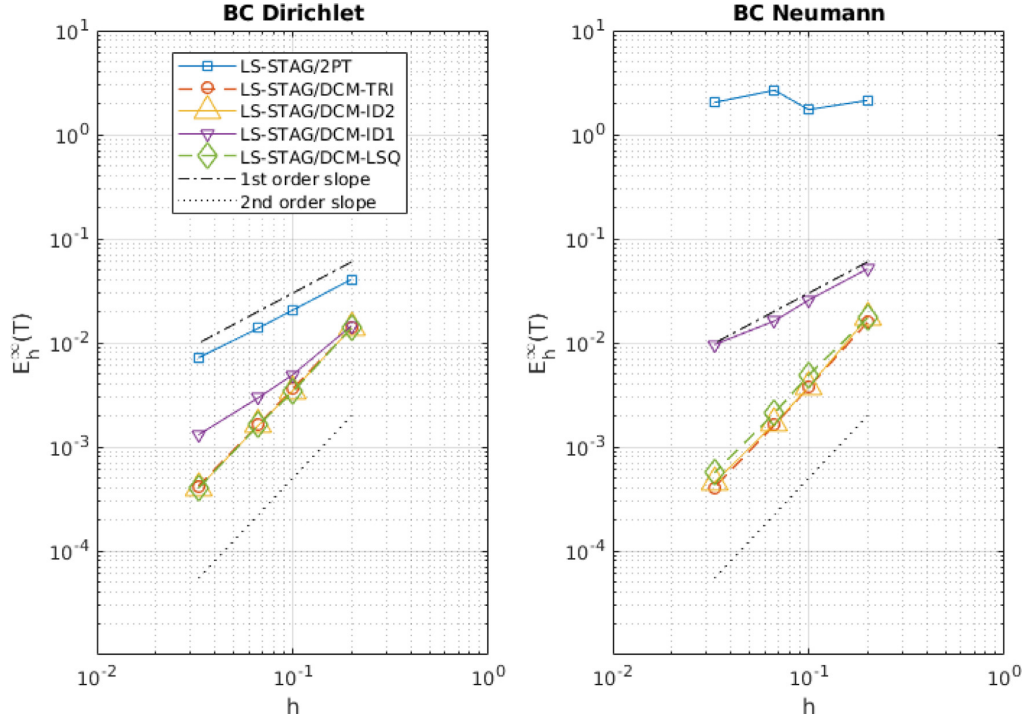


Fig. 5. Maximal error on the temperature versus grid size h for the pure conduction test case for both types of boundary conditions.

4.2. 2D natural convection from a cylinder in an enclosure

The second test-case concerns a fluid flow and heat transfer problem in complex geometries, for which Demirdžić et al [14] published accurate benchmark solutions. This test case concerns natural convection of a heated cylinder placed eccentrically in an enclosure (test C4 in [14]), where the heat Eq. (1) is coupled with the Navier-Stokes equations in the Boussinesq approximation. The computational domain and boundary conditions are shown in Fig. 6 (left), with gravity acting in the downwards direction; since the solution possesses a vertical symmetry at $x = 0$, only half of the geometry is considered. As in [14], the dimensions and fluid properties are: enclosure length $L = 1$ m, density $\rho = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, gravity constant $g = 1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$, thermal expansion coefficient $\beta = 0.1 \text{ K}^{-1}$, thermal diffusivity $\kappa = 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, dynamic viscosity $\mu = 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ and temperature difference $T_H - T_C = 1 \text{ K}$, that set the Rayleigh and Prandtl number respectively as:

$$\text{Ra} \equiv \frac{\beta \rho g L^3}{\mu \kappa} (T_H - T_C) = 10^6, \quad (22)$$

$$\text{Pr} \equiv \frac{\mu}{\rho \kappa} = 10. \quad (23)$$

The purpose of these computations is to assess the ability of the LS-STAG/DCM method to compute accurately gradients at the immersed boundary, in the present case the average Nusselt number on the half-cylinder of length $|\Gamma^{\text{ib}}|$:

$$\overline{\text{Nu}} = \frac{1}{|\Gamma^{\text{ib}}| (T_H - T_C)/L} \int_{\Gamma^{\text{ib}}} \nabla T \cdot \mathbf{n} \, dS, \quad (24)$$

and the distribution of the local Nusselt number along the half cylinder, which is calculated at the center of the solid boundary of the cut-cells using formula (10a).

The LS-STAG computations are performed on a series of refined meshes M1-M5 of square uniform Cartesian cells, where the coarsest mesh M1 represented in Fig. 6 (right) has 32×64 cells and the finer meshes are obtained by doubling the number of cells in each direction, such as the finest mesh M5 has 512×1024 cells. For comparison purpose, we have also computed solutions with the commercial CFD package FLUENT[®] (V15.07), on a series of high-quality curvilinear meshes L1-L5 (see Fig. 6 (middle)) of same number of cells, with cell clustering near the heated cylinder. The FLUENT[®] computations have been performed with the pressure-based solver and the steady SIMPLE algorithm, using second-order spatial discretizations: QUICK scheme for convection discretization, Green-Gauss node-based interpolation for gradient calculation, and body-force weighted pressure interpolation. As it is done for the benchmark computations of [14], both LS-STAG and FLUENT[®] results are reported after the steady state is reached and the heat flux difference between the hot and cold walls is sufficiently low to give a four-digit accuracy on the average Nusselt number.

It is worthwhile to inspect the quality of the meshes in the area of interest, *i.e.* the vicinity of the half cylinder. In effect, due to the Cartesian nature of the cut-cell mesh, it is very cumbersome to control the shape of the cut-cells, which may impact the accuracy of the discretization. Mesh quality is usually measured by two metrics: the orthogonal quality and the smoothness. The orthogonal quality $\text{OQ}_{i,j}$ of cut-cell $\Omega_{i,j}$ is defined as the minimal value of $\cos \alpha$ in (8) for all its faces, where a value close to 0 corresponds to low quality cells. The mesh smoothness is measured by the volume-change ratio of the cut-cells:

$$\text{RV}_{i,j} = \min_{(k,l) \in \mathcal{N}_b} \frac{V_{i,j}}{V_{k,l}}, \quad (25)$$

where \mathcal{N}_b refers to the neighboring cells that share a face with cut-cell $\Omega_{i,j}$ (solid cells are excluded). For each cut-cell $\text{RV}_{i,j} \in]0, 1]$

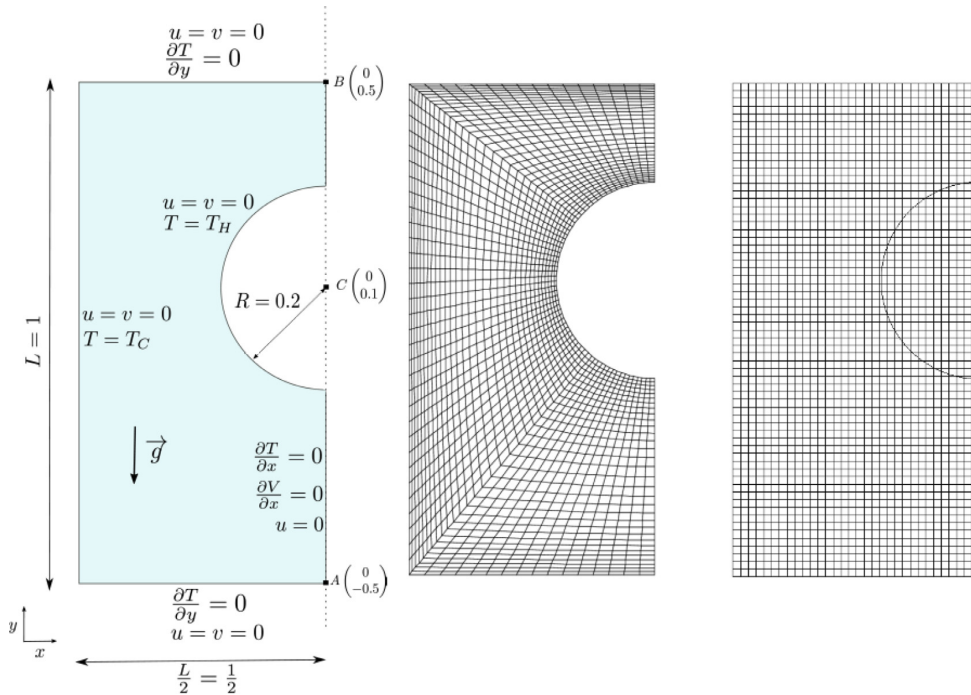


Fig. 6. Sketch of the computational domain for the natural convection test-case (with $L = 1$ m, $T_H = 1$ K, $T_C = 0$ K), curvilinear mesh L1 and Cartesian mesh M1 of size 32×64 used respectively for the FLUENT[®] and LS-STAG computations.

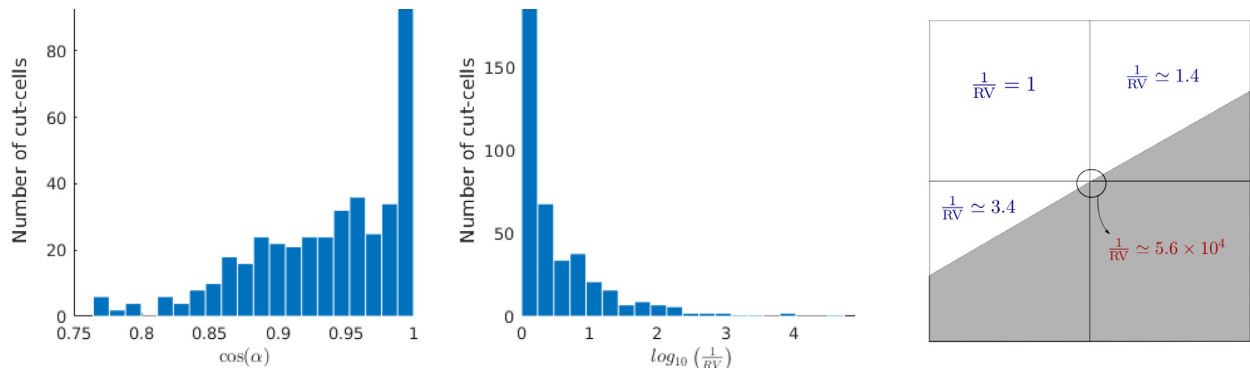


Fig. 7. Histogram of the orthogonal quality (left) and volume-change ratio (middle) of the cut-cell M4 mesh; on this mesh the total number of cut-cells is 410. At right: mesh close-up in the vicinity of the cut-cell with the highest value of $1/RV_{ij}$.

since at least one neighboring cell is Cartesian, and a value close to 0 indicates a cut-cell of small volume compared to Cartesian cells. Fig. 7 reports both metrics for mesh M4 (similar trends are found on all cut-cell meshes). First, it can be observed that no cut-cells display low non-orthogonality values : it can be shown that for background Cartesian cells of size $\Delta x \times \Delta y$, the minimal value of OQ_{ij} is $\min(\Delta x/\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}, \Delta y/\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2})$, which gives a minimal value of $\sqrt{2}/2$ for square cells consistent with the results of the figure. Nevertheless, the orthogonal quality of the curvilinear meshes is superior, with $OQ \approx 0.95$ near the half-cylinder. Concerning the smoothness metric, we observe that a small portion of the cut-cells display very low value of RV, indicating large changes of volume: 5% of the cut cells of meshes M1-M5 are such that $1/RV_{ij} > 100$. For comparison, the maximal value of $1/RV$ is 1.25 for the curvilinear meshes. As shown in Fig. 7 (right), which displays the M4 mesh in the vicinity of the most degenerate

cut-cell, these cut-cells correspond to very small triangular cells surrounded by Cartesian and large pentagonal or trapezoidal cells. Hence, the mesh smoothness metric RV_{ij} is an indicator of the occurrence of the “small cut-cell problem” that hampers the stability and accuracy of most cut-cell methods (see [16,17] and the review in [15]). In the following, we will investigate the local errors in heat flux distribution as a function of the cut-cell smoothness to evaluate the accuracy of the various gradient discretizations.

Fig. 8 shows the grid convergence of the average Nusselt number, which is given in [14] with four significant digits as $\bar{Nu} \approx 7.384$. Irrespective of the gradient discretization scheme, all LS-STAG variants converge at a similar rate to the same grid-independent value $\bar{Nu} \approx 7.380$, while the FLUENT[®] computation yields $\bar{Nu} \approx 7.383$ on the finest mesh. It is also worthwhile to observe that on the 2 coarsest meshes, the FLUENT[®] computations are more accurate than LS-STAG. The slight superiority of the

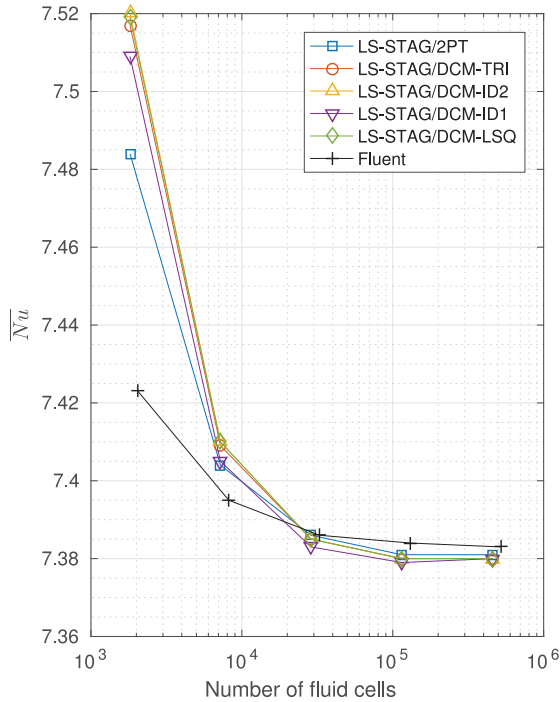


Fig. 8. Convergence of the average Nusselt number with respect to the number of fluid cells for meshes M1/L1 to M5/L5.

FLUENT® results is certainly due to the higher quality of the curvilinear meshes near the complex boundary, as discussed above.

Fig. 9 (left) displays the distribution of the local Nusselt number along the immersed cylinder obtained for the LS-STAG and FLUENT® computations on the M4/L4 mesh, along with reference results [14]. In order to quantify the influence of the cut-cells shape on the accuracy of the results, the LS-STAG profiles are colored with the volume-change ratio of the cut-cells (25). First it can be observed that the LS-STAG method with 2-point gradients gives a highly oscillatory profile, confirming the inaccuracy of this approximation of diffusion. The use of the diamond scheme diminishes the level of oscillations for the first-order method DCM-ID1 and for DCM-LSQ. However, both methods still present oscillations in cut-cells with small volume-change ratio RV_{ij} , indicating inaccurate discretization in small cut-cells. In contrast, the profiles obtained with the other second-order interpolations (DCM-ID2 and DCM-TRI) are virtually free of any oscillations, and perfectly match the reference results. Fig. 9 (right) plots the local error on the Nusselt distribution with respect to the volume change of the cut-cells. For the 2PT, DCM-ID1 and DCM-LSQ discretization, the errors grow exponentially with $1/RV$, showing clearly that small cut-cells are the source of the discretization errors. In contrast, it is striking to observe that for the most accurate discretizations (DCM-ID2 and DCM-TRI), the errors are virtually independent of the magnitude of RV . These results illustrate the robustness of these interpolations, which yields accurate discretization irrespective of the size and shape of the cut cells.

Finally, in order to give a quantitative measure of the oscillations generated by the various gradient discretizations, Table 1 compares the total variation (TV) of the local Nusselt number at the cylinder surface :

$$TV = \frac{1}{N_{cc}} \sum_{i=1}^{N_{cc}} \left| \frac{Nu_{i+1} - Nu_i}{\theta_{i+1} - \theta_i} \right|, \quad (26)$$

Table 1

Total variation (26) of the local Nusselt number for the various gradient discretizations on the M1–M5 grids.

	M_1	M_2	M_3	M_4	M_5
LS-STAG/2PT	80.10	163.6	364.2	671.5	1345
LS-STAG/DCM-ID1	15.44	28.70	67.21	119.9	245.5
LS-STAG/DCM-ID2	9.430	8.440	8.837	8.179	8.291
LS-STAG/DCM-LSQ	14.35	13.12	15.33	13.89	20.60
LS-STAG/DCM-TRI	8.931	7.798	8.248	7.606	7.724

where N_{cc} is the number of cut-cells on the half cylinder. On a given grid distribution, the numerical solution with the lowest TV is the least oscillatory solution. This table confirms that on all grids DCM-ID2 and DCM-TRI are by far the most accurate methods, with a value of TV slightly inferior for the DCM-TRI interpolation.

As a conclusion, these computations show that accurate solutions can be achieved with the DCM discretization. Nonetheless, the accuracy of the DCM approximation is highly dependent on the interpolation scheme that is used, otherwise inaccurate results are encountered in the smaller cut-cells. These results show that the second-order methods DCM-ID2 and DCM-TRI stand as the best discretization methods, yielding almost indistinguishable results on the local Nusselt distribution. Owing to the simplicity of the triangular interpolation compared to the inverse distance interpolation of second order, the DCM-TRI variant is selected for implementation in the 3D-extruded code.

4.3. Flows in 3D extruded geometries

The DCM is now applied to the Navier-Stokes equations in 3D-extruded geometries to enhance the accuracy of the viscous fluxes computed with the LS-STAG method with 2-point discretization reported in [4]. In the 3 basic types of cut-cells shown in Fig. 1, the velocities unknowns are located at face centroids, the pressure and diagonal components of the rate-of-strain tensor $\dot{\boldsymbol{\gamma}} = \nabla \boldsymbol{v} + \nabla \boldsymbol{v}^T$ are located at cell centroids, and the off-diagonal components of $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$ are located at edge centroids. A complete description of the LS-STAG method in 3D-extruded geometries is given in [4].

Relevant notations for the DCM discretization are given in Fig. 10. Due to the extrusion in the z direction, the DCM discretization only needs to be applied to the off-diagonal components of $\nabla \boldsymbol{w}$ (namely $\partial w / \partial x$ and $\partial w / \partial y$), while the off-diagonal components of $\nabla \boldsymbol{u}$ and $\nabla \boldsymbol{w}$ are accurately computed with 2-point formulas. Note also that due to the staggering of the discrete velocities, the discretization of $\partial w / \partial x$ and $\partial w / \partial y$ involves co-planar unknowns (on planes of constant index k), such that only the 2D DCM formula of Section 2 is needed.

In addition, the DCM discretization enables us to revisit the discretization of the viscous forces at the immersed boundary by providing accurate formula for the rate-of-strain components which could not be discretized by standard 2-point formulas [2,4]. Since $\boldsymbol{n}^{ib} \cdot \boldsymbol{e}_z = 0$ in 3D geometries extruded in the z direction, the streamwise (drag) and spanwise (lift) forces at the boundary read respectively :

$$F_x = \mu \int_{\Gamma^{ib}} \dot{\gamma}_{xx} \boldsymbol{e}_x \cdot \boldsymbol{n} \, dS + \mu \int_{\Gamma^{ib}} \dot{\gamma}_{xy} \boldsymbol{e}_y \cdot \boldsymbol{n} \, dS, \quad (27a)$$

$$F_y = \mu \int_{\Gamma^{ib}} \dot{\gamma}_{xy} \boldsymbol{e}_x \cdot \boldsymbol{n} \, dS + \mu \int_{\Gamma^{ib}} \dot{\gamma}_{yy} \boldsymbol{e}_y \cdot \boldsymbol{n} \, dS, \quad (27b)$$

where μ is the dynamic viscosity and the components of the rate-of-strain tensor are $\dot{\gamma}_{xx} = 2\partial u / \partial x$, $\dot{\gamma}_{xy} = \partial u / \partial y + \partial v / \partial x$ and $\dot{\gamma}_{yy} = 2\partial v / \partial y$. For all type of cut-cells, the discretization of the drag and lift components reads :

$$F_x \cong \mu [\Delta S_x]_{i,j,k}^{ib} \dot{\gamma}_{xx}^{ib} + \mu [\Delta S_y]_{i,j,k}^{ib} \dot{\gamma}_{xy}^{ib}, \quad (28a)$$

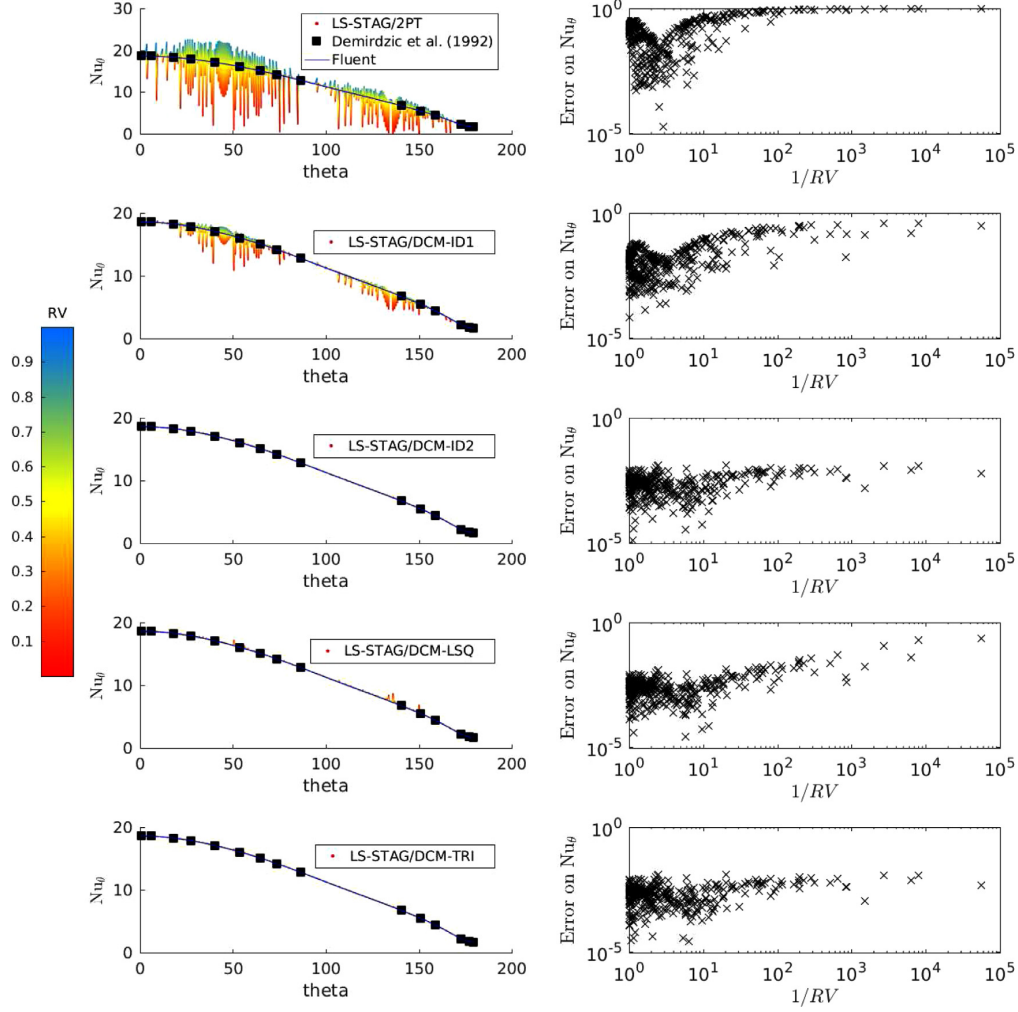


Fig. 9. At left, from top to bottom: Profiles of the Nusselt number along the half cylinder for the various discretization of diffusion in the LS-STAG method, and comparison with the FLUENT[®] computation and reference results of Demirdžić et al [14]. The LS-STAG profiles are colored with respect to the volume-change ratio RV_{ij} (25) of the cut-cells. At right: corresponding cell-wise local errors as a function of RV_{ij} (the reference is the FLUENT L5 solution).

$$F_y \cong \mu [\Delta S_x]_{i,j,k}^{ib} \dot{\gamma}_{xy}|_{i,j,k}^{ib} + \mu [\Delta S_y]_{i,j,k}^{ib} \dot{\gamma}_{yy}|_{i,j,k}^{ib}, \quad (28b)$$

with face-area vector components $[\Delta S_x]_{i,j,k}^{ib} = (\theta_{i-1,j}^u - \theta_{i,j}^u) \Delta y_j \Delta z_k$ and $[\Delta S_y]_{i,j,k}^{ib} = (\theta_{i,j-1}^v - \theta_{i,j}^v) \Delta x_i \Delta z_k$, and the discretization of the normal rate-of-strains $\dot{\gamma}_{xx}|_{i,j,k}^{ib}$, $\dot{\gamma}_{yy}|_{i,j,k}^{ib}$ are given by formulae based on the Green-Gauss theorem, valid for all type of cut-cells [14]. In contrast, the discretization of the shear component $\dot{\gamma}_{xy}|_{i,j,k}^{ib}$ has to be adapted to each type of cut-cells by means of the DCM discretization. Following the notations of Fig. 10, the discretization on the solid face of pentagonal cut-cell $\Omega_{i,j,k}$ is given by the symmetric formula :

$$\dot{\gamma}_{xy}|_{i,j,k}^{ib} \cong \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i-1,j,k}^{ib,\mathbf{x}_{NN}} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j,k}^{ib,\mathbf{x}_{NN}} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j,k}^{ib,\mathbf{x}_N} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j-1,k}^{ib,\mathbf{x}_N} \right], \quad (29)$$

where the DCM formulas at point \mathbf{x}_N involve discrete velocities $u_{i,j,k}$ and $v_{i,j-1,k}$ using formulas in the Cartesian basis analogous to (11),

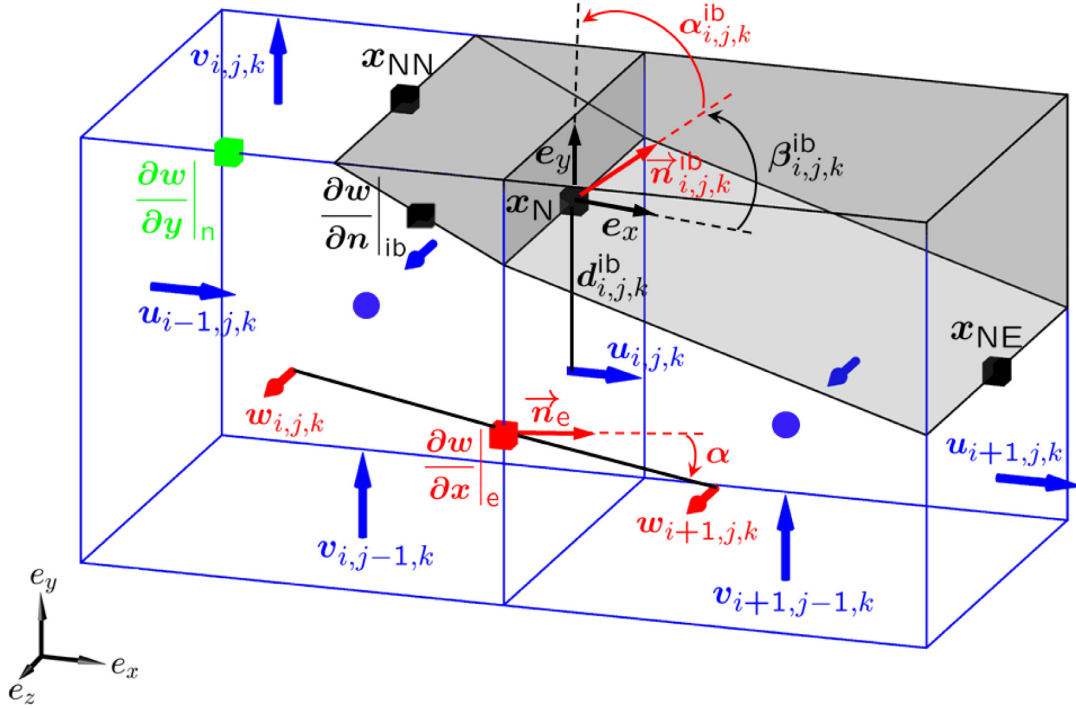
for example :

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j,k}^{ib,\mathbf{x}_N} \cong \sin \beta_{i,j,k}^{ib} \frac{u_N - u_{i,j,k}}{\cos \alpha_{i,j,k}^{ib} d_{i,j,k}^{ib}} + (\cos \beta_{i,j,k}^{ib} - \sin \beta_{i,j,k}^{ib} \tan \alpha_{i,j,k}^{ib}) \frac{u_{NN} - u_N}{\|\mathbf{x}_{NN} - \mathbf{x}_N\|}. \quad (30)$$

In a similar fashion, the DCM formulas at point \mathbf{x}_{NN} involve discrete velocities $v_{i,j,k}$ and $u_{i-1,j,k}$.

It is interesting to observe that for the computation of $\partial u / \partial y|_{i,j,k}^{ib,\mathbf{x}_N}$ at point \mathbf{x}_N , since the solid boundary of $\Omega_{i,j,k}$ cut the eastern face where $u_{i,j,k}$ is positioned, the DCM direction $\mathbf{d}_{i,j,k}^{ib}$ is parallel to \mathbf{e}_y . In this case, the solid boundary inclination and the angle of non-orthogonality verify $\beta_{i,j,k}^{ib} + \alpha_{i,j,k}^{ib} \equiv \text{mes}(\mathbf{e}_x, \mathbf{n}_{i,j,k}^{ib}) + \text{mes}(\mathbf{n}_{i,j,k}^{ib}, \mathbf{d}_{i,j,k}^{ib}) = \pi/2$ (see Fig. 10), which allows Eq. (30) to simplify to :

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j,k}^{ib,\mathbf{x}_N} \cong \frac{u_N - u_{i,j,k}}{d_{i,j,k}^{ib}}, \quad d_{i,j,k}^{ib} = \theta_{i,j,k}^u \Delta y_j, \quad (31)$$


 Fig. 10. Staggered mesh for 3D extruded geometries in the z direction, and location of the off-diagonal components of ∇w .

showing that in this case the DCM discretization is independent of the solid boundary inclination. An analogous simplification can be performed for $\partial v/\partial x|_{i,j,k}^{ib,x_{NN}}$, but not for $\partial u/\partial y|_{i-1,j,k}^{ib,x_{NN}}$ or $\partial v/\partial x|_{i,j-1,k}^{ib,x_{NN}}$ where the DCM direction is not parallel to e_x or e_y . As a matter of fact, Formula (31) is identical to the Ghost Fluid Method (GFM) used in [22] for discretizing the Poisson equation in irregular geometries. In previous works on the LS-STAG method [1,2,4], the GFM was employed to calculate $\partial u/\partial y|_{i,j,k}^{ib,x_N}$ and $\partial v/\partial x|_{i,j,k}^{ib,x_{NN}}$, while *ad hoc* approximations were used for $\partial u/\partial y|_{i-1,j,k}^{ib,x_{NN}}$ and $\partial v/\partial x|_{i,j-1,k}^{ib,x_N}$ (for example, Ref. [4] used a discrete version of the Schwartz identity). In this respect, the Diamond Cell Method can be viewed as an extension of the Ghost Fluid Method for computing accurately gradients at irregular boundaries.

For completeness, we give the discretization of the shear component of the rate-of-strain for the 2 other types of cut-cells. For trapezoidal cut-cell $\Omega_{i+1,j,k}$ in Fig. 10, the shear rate of strain is :

$$\dot{\gamma}_{xy}|_{i+1,j,k}^{ib} \cong \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j,k}^{ib,x_N} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+1,j-1,k}^{ib,x_N} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i+1,j,k}^{ib,x_{NE}} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+1,j-1,k}^{ib,x_{NE}} \right], \quad (32)$$

In the case where $\Omega_{i+1,j,k}$ is a triangular cut-cell such its right edge cuts the south face of the cell, only velocities $u_{i,j,k}$ and $v_{i+1,j-1,k}$ are present in the cut-cell, and the shear rate-of-strain is given by the symmetric formula :

$$\dot{\gamma}_{xy}|_{i+1,j,k}^{ib} \cong \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j,k}^{ib,x_N} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+1,j-1,k}^{ib,x_{NE}}. \quad (33)$$

Finally, we mention that the discrete shear rates (29), (32) and (33) involve DCM gradients evaluated at distinct endpoints of the

solid boundaries, in order to highlight the underlying symmetry of the formulas. As mentioned in Section 3.1, DCM gradients are independent of the location on the boundary where they are evaluated. Thus, for ease of implementation in the LS-STAG code, the shear rate is evaluated at the center of the solid part of the cut-cells.

The DCM discretization is tested on the benchmark flow 3D-3Z proposed by [18], which concerns unsteady laminar flow past a circular cylinder in a confined square duct. The flow unsteadiness is induced by a time-varying inflow boundary condition, yielding a time-periodic Reynolds number $Re \in [0, 100]$. This flow has previously been computed in [4] with the LS-STAG/2PT method, where its performances were compared against an unstructured commercial solver (ANSYS FLUENT[®]) with comparable discretization schemes and computational meshes. Although LS-STAG/2PT compared favorably in terms of wall time and memory usage, inferior results were observed on the computation of the drag and lift forces. We refer to [4] for a complete description of the geometry, boundary conditions, meshes and discretizations used by both solvers.

Fig. 11 compares the drag and lift computations on one-half period of the simulation ($t \in [0, 8s]$) obtained by the LS-STAG/2PT and LS-STAG/DCM methods on a series of refined meshes M1-M3 (500,000 to 3M cells). LS-STAG/DCM clearly displays a superior accuracy on each mesh level, most notably after $t \approx 3s$ where the force signals undergo rapid variations. A more quantitative comparison is performed in Table 2, that compares the computational accuracy (L^2 errors on the force coefficients) and the wall time of the 2 variants of LS-STAG and the FLUENT[®] computations [4]. As observed in this reference the LS-STAG/2PT solver gives only monotonic convergence for the lift quantity, while the drag coefficient fails to converge. In contrast, the DCM discretization show a dramatic increase in the accuracy of the LS-STAG discretization, yielding a smooth convergence for all force coefficients, with an accuracy comparable to the FLUENT[®] solver on all 3 grids. In

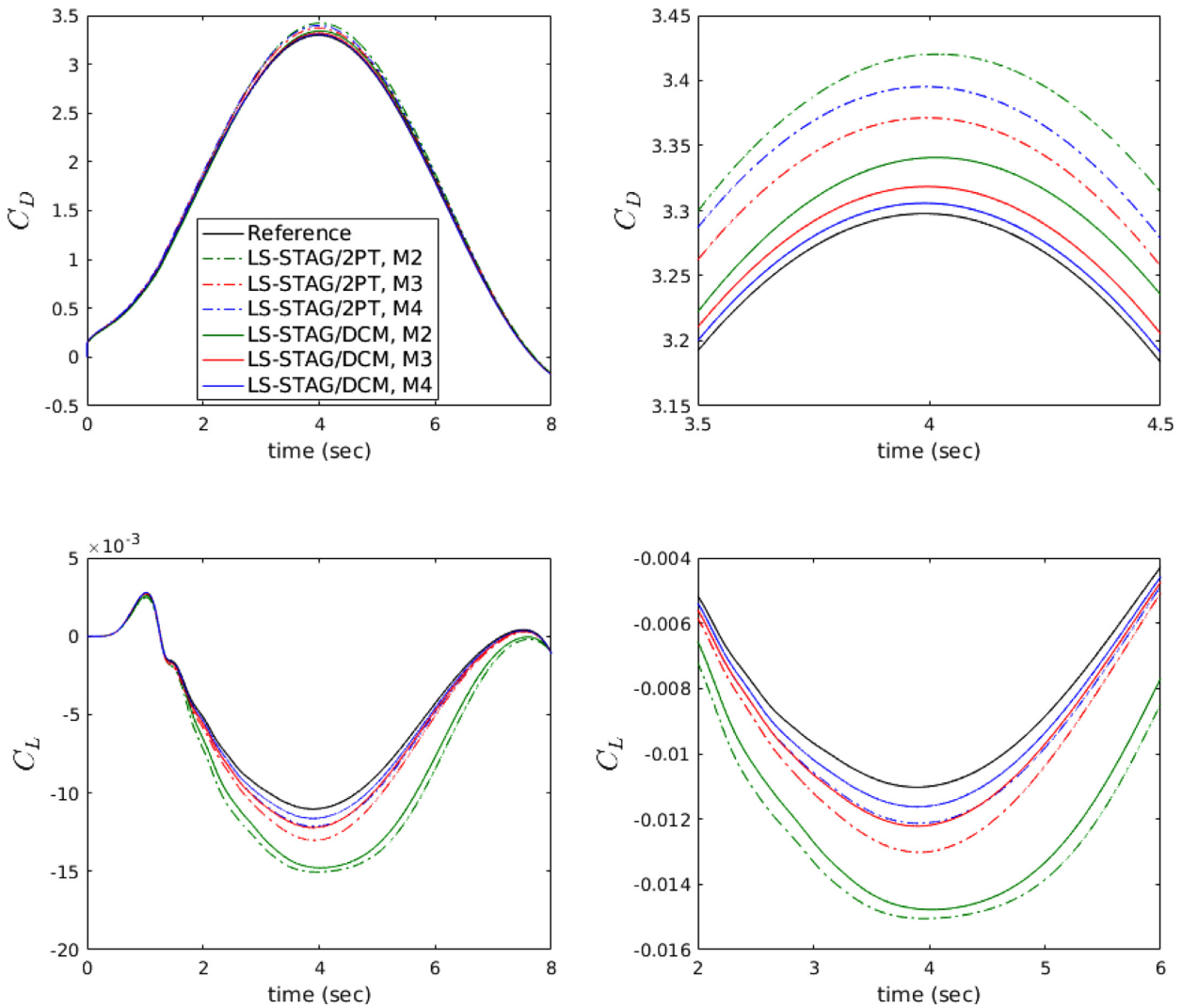


Fig. 11. Time evolution of the force coefficients computed by the 2 variants of the gradient computations and reference solution [23]. At left: on the total time interval; at right: close up around $t = 4$ s.

Table 2

Performances of the LS-STAG and FLUENT® computations in terms of computational accuracy (normalized errors on the force coefficients with respect to the reference solution [23] for one flow period) and wall time (the computations have been performed on the IJL-LEMETA parallel machine with 2 processors for the M2 mesh and 4 processors for the M3 and M4 meshes).

	% L_2 Error on C_D			% L_2 Error on C_L			Wall time (min)		
	M_2	M_3	M_4	M_2	M_3	M_4	M_2	M_3	M_4
LS-STAG/2PT [4]	3.74	2.42	3.05	48.06	16.94	10.22	15	125	2013
LS-STAG/DCM	1.48	0.65	0.22	41.91	10.06	5.46	17	138	2241
FLUENT® [4]	2.11	0.81	0.21	17.03	10.01	2.67	55	488	7841

terms on run-time efficiency, LS-STAG/DCM is only 10% more CPU intensive than LS-STAG/2PT, due to the need of vertex reconstruction and the use of a wider stencil for the linear solves at each time-step. Both variants of LS-STAG are about 300% faster than FLUENT®. These results show that a cut-cell method with DCM gradients can be a promising kernel, in terms of computational cost and accuracy, to traditional body-fitted solvers for flows in complex geometries.

5. Conclusion and future work

This paper has presented the application of the diamond cell method (DCM) for improving the accuracy of diffusion in the LS-STAG cut-cell method compared to the standard 2-point approximation. The DCM has been employed for cell-centered data (temperature equation in 2D) and face-centered data (Navier-Stokes equations in 3D-extruded geometries), which illustrates

the versatility of the approach, that can be applied to other cut-cell methods. Simple and effective strategies for implementing Dirichlet and Neumann boundary conditions are detailed, and have shown no impact on the global accuracy of the method. One of the main findings of the paper is that the accuracy of the DCM approximation is highly dependent on the interpolation scheme that is used, otherwise inaccurate results are encountered in the smaller cut-cells. In particular, the barycentric interpolation that we propose is able to obtain local accuracy in cut-cells comparable to the one reached in Cartesian cells, irrespective of the size and shape of the cut-cell. Finally, the benchmark flow in extruded geometry with DCM discretization has shown a dramatic increase in accuracy compared to the 2-point discretization, for comparable computational costs.

Progress is on the way to employ DCM for full 3D computations with the LS-STAG method. The DCM framework will enable us to formulate a systematic discretization in the cut-cells that alleviates the need to adapt the discretization to each different type of cut-cells, as it was done in [4] for 3D-extruded geometries. For all components of the velocity gradients, only the 2D version of DCM is needed, since velocities are stored at face centers. However, for scalar quantities such as temperature which are stored at cell centers, a 3D extension of the DCM [24] needs to be employed.

References

- [1] Cheny Y, Botella O. The LS-STAG method : a new immersed boundary / level-set method for the computation of incompressible viscous flows in complex moving geometries with good conservation properties. *J Comput Phys* 2010;229:1043–76.
- [2] Botella O, Ait-Messaoud M, Pertat A, Rigal C, Cheny Y. The LS-STAG immersed boundary method for non-newtonian flows in irregular geometries : flow of shear-thinning liquids between eccentric rotating cylinders. *Theor Comput Fluid Dyn* 2015;29:93–110.
- [3] Botella O, Cheny Y, Nikfarjam F, Stoica M. Application of the LS-STAG immersed boundary/cut-cell method to viscoelastic flow computations. *Commun Comput Phys* 2016;20:870–901.
- [4] Nikfarjam F, Cheny Y, Botella O. The LS-STAG immersed boundary/cut-cell method for non-Newtonian flows in 3D extruded geometries. *Comput Phys Commun* 2018;226:67–80.
- [5] Martinelli L, Jameson A. Validation of a multigrid method for the Reynolds averaged equations. *AIAA paper No. 88-0414*; 1988.
- [6] Jacon F, Knight D. A Navier-Stokes algorithm for turbulent flows using an unstructured grid and flux difference splitting. *AIAA paper No. 94-2292*; 1994.
- [7] Ferziger JH, Peric M. *Computational methods for fluid dynamics*. Berlin: Springer; 1996.
- [8] Mathur S, Murthy J. A pressure-based method for unstructured meshes. *Numer Heat Transf* 1997;31:195–215.
- [9] Moukalled F, Mangani L, Darwish M. *The finite volume method in computational fluid dynamics*. Springer; 2016.
- [10] Coudière Y, Vila J-P, Villedieu P. Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional convection-diffusion problem. *ESAIM* 1999;33:493–516.
- [11] Bertolazzi E, Manzini G. A cell-centered second-order accurate finite volume method for convection-diffusion problems on unstructured meshes. *Math Model Methods ApplSci* 2004;14:1235–60.
- [12] Bertolazzi E, Manzini G. On vertex reconstructions for cell-centered finite volume approximations of 2D anisotropic diffusion problems. *Math Model Methods ApplSci* 2007;17:1–32.
- [13] Falgout R, Cleary A, Jones J, Chow E, Henson V, Baldwin C, et al. Center for Applied Scientific Computing (CASC); Lawrence Livermore National Laboratory; <http://acts.nersc.gov/hypre/>.
- [14] Demirdžić I, Lilek Ž, Perić M. Fluid flow and heat transfer test problems for non-orthogonal grids: bench-mark solutions. *Int J Numer Methods Fluids* 1992;15(3):329–54.
- [15] Sotiropoulos F, Yang X. Immersed boundary methods for simulating fluid-structure interaction. *Prog Aerosp Sci* 2014;65:1–21.
- [16] Ye T, Mittal R, Udaykumar HS, Shyy W. An accurate Cartesian grid method for viscous incompressible flows with complex immersed boundaries. *J Comput Phys* 1999;156:209–40.
- [17] Kirkpatrick MP, Armfield SW, Kent JH. A representation of curved boundaries for the solution of the Navier-Stokes equations on a staggered three-dimensional Cartesian grid. *J Comput Phys* 2003;184:1–36.
- [18] Bayraktar E, Mierka O, Turek S. Benchmark computations of 3D laminar flow around a cylinder with CFX, OpenFOAM and FeatFlow. *Int J Comput SciEng* 2012;7(3):253–66.
- [19] van der Plas P, van der Heiden H, Veldman A, Luppens R, Verstappen R. Efficiently simulating viscous flow effects by means of regularization turbulence modeling and local grid refinement. Seventh International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD7), Hawaii, paper ICCFD-2503; 2012.
- [20] Martinelli L. Calculations of viscous flows with a multigrid method. Princeton University; 1987.
- [21] Amidror I. Scattered data interpolation methods for electronic imaging systems: a survey. *J Electron Imaging* 2002;11:157–76.
- [22] Gibou F, Fedkiw RP, Cheng L-T, Kang M. A second-order-accurate symmetric discretization of the Poisson equation on irregular domains. *J Comput Phys* 2002;176:205–27.
- [23] Bayraktar E. Private communication. 2016.
- [24] Coudière Y, Manzini G. Benchmark 3D: The cell-centered finite volume method using least squares vertex reconstruction (diamond scheme). In: *Finite volumes for complex applications VI problems & perspectives*; 2011. p. 985–992.

Bibliographie

- [1] M Aboubacar, H Matallah, HR Tamaddon-Jahromi, and MF Webster. Numerical prediction of extensional flows in contraction geometries : hybrid finite volume/element method. *Journal of non-Newtonian fluid mechanics*, 104(2) :125–164, 2002.
- [2] M. Aboubacar, H. Matallah, and M.F. Webster. Highly elastic solutions for Oldroyd-B and Phan-Thien/Tanner fluids with a finite volume/element method : Planar contraction flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **103**, 65-103, 2002.
- [3] S Acharya, BR Baliga, K Karki, JY Murthy, C Prakash, and SP Vanka. Pressure-based finite-volume methods in computational fluid dynamics. *Journal of Heat Transfer*, 129 :407–424, 2007.
- [4] M Aftosmis, J Melton, and M Berger. Adaptation and surface modeling for Cartesian mesh methods. In *12th Computational Fluid Dynamics Conference, 1995 - San Diego, United States*, pages 881–891, 1995.
- [5] M. J. Aftosmis. Solution adaptive Cartesian grid methods for aerodynamic flows with complex geometries. *VKI Lecture Series*, 1997.
- [6] M. A. Alves, F. T. Pinho, and P. J. Oliveira. Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **93**, 287 - 314, 2000.
- [7] I. Amidror. Scattered data interpolation methods for electronic imaging systems : A survey. *Journal of electronic imaging*, 11 :157–176, 2002.
- [8] P. Angot, C.-H. Bruneau, and P. Fabrie. A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. *Numerische Mathematik*, 81 :497–520, 1999.
- [9] Ansys Fluent Ansys. 14.0 Theory Guide. *ANSYS inc*, pages 218–221, 2011.
- [10] A. Arakawa. Computational design for long-term numerical integration of the equations of fluid motion : two-dimensional incompressible flow, part I. *J. Comput. Phys.*, 1 :119–143, 1966.
- [11] Uri M Ascher and Linda R Petzold. *Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations*, volume 61. Siam, 1998.
- [12] Uri M Ascher and Linda R Petzold. *Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations*. SIAM, 1998.
- [13] F. Asllanaj, S. Contassot-Vivier, A. Hohmann, and A. Kienle. Light propagation in biological tissue. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 224 :78–90, 2019.
- [14] Frank P.T. Baaijens. Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis : a review. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **79**,361 - 385, 1998.
- [15] T.J. Baker. Mesh generation : Art or science? *Progress in Aerospace Sciences*, 41 :29–63, 2005.

- [16] E. Balaras. Modeling complex boundaries using an external force field on fixed Cartesian grids in large-eddy simulations. *Computers & Fluids*, 33 :375–404, 2004.
- [17] Henry Bandringa. Immersed boundary methods. In *Master Thesis, Université de Gronigen*, 2010.
- [18] RE Bank, WM Coughran, W Fichtner, EH Grosse, DJ Rose, and RKt Smith. Transient simulation of silicon devices and circuits. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 4 :436–451, 1985.
- [19] Evren Bayraktar. Private communication. 2016.
- [20] Evren Bayraktar, Otto Mierka, and Stefan Turek. Benchmark computations of 3D laminar flow around a cylinder with CFX, OpenFOAM and FeatFlow. *International Journal of Computational Science and Engineering*, 7(3) :253–266, 2012.
- [21] MA Belenli, LG Rebholz, and F Tone. A note on the importance of mass conservation in long-time stability of Navier–Stokes simulations using finite elements. *Applied Mathematics Letters*, 45 :98–102, 2015.
- [22] M. Berger. Cut cells : Meshes and solvers. In *Handbook of Numerical Analysis*, volume 18, pages 1–22. Elsevier, 2017.
- [23] M. Berger and R. Leveque. An adaptive Cartesian mesh algorithm for the Euler equations in arbitrary geometries. In *9th Computational Fluid Dynamics Conference*, page 1930, 1989.
- [24] Christine Bernardi and Yvon Maday. *Approximations spectrales de problèmes aux limites elliptiques*, volume 10. Springer, 1992.
- [25] E. Bertolazzi and G. Manzini. A cell-centered second-order accurate finite volume method for convection–diffusion problems on unstructured meshes. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 14 :1235–1260, 2004.
- [26] E. Bertolazzi and G. Manzini. On vertex reconstructions for cell-centered finite volume approximations of 2D anisotropic diffusion problems. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 17 :1–32, 2007.
- [27] Robert Byron Bird, Robert Calvin Armstrong, Ole Hassager, and Charles F Curtiss. *Dynamics of polymeric liquids*, volume 1. Wiley New York, 1977.
- [28] Jiri Blazek. *Computational Fluid Dynamics : Principles and Applications*. Butterworth-Heinemann, 2015.
- [29] F. Bouchon, T. Dubois, and N. James. A second-order cut-cell method for the numerical simulation of 2D flows past obstacles. *Computers & fluids*, 65 :80–91, 2012.
- [30] CWS Bruner. Geometric properties of arbitrary polyhedra in terms of face geometry. *AIAA journal*, 33 :1350–1350, 1995.
- [31] CALIF3S. Institut National de Recherche en Sécurité Nucléaire. <https://gforge.irsn.fr/gf/project/calif3s/>.
- [32] Francesco Capuano, Gennaro Coppola, Luis Rández, and Luigi de Luca. Explicit runge–kutta schemes for incompressible flow with improved energy-conservation properties. *Journal of Computational Physics*, 328, 2017.
- [33] EJ Caramana, DE Burton, Mikhail J Shashkov, and PP Whalen. The construction of compatible hydrodynamics algorithms utilizing conservation of total energy. *Journal of Computational Physics*, 146 :227–262, 1998.

-
- [34] F Cavalcanti Miranda. Large eddy simulation of turbulent reacting flows with radiative heat transfer. In *Thèse de TU Darmstadt*, 2019.
- [35] Pramod N Chivate and Andrei G Jablokow. Review of surface representations and fitting for reverse engineering. *Computer Integrated Manufacturing Systems*, 8(3) :193–204, 1995.
- [36] Dochul Choi, Dilip Prasad, Meng Wang, and Charles Pierce. Evaluation of an industrial CFD code for LES applications. In *Center for Turbulence Research, Proceedings of the Summer Program*, pages 221–228, 2000.
- [37] Meng-Hsuan Chung. Cartesian cut cell approach for simulating incompressible flows with rigid bodies of arbitrary shape. *Computers & Fluids*, 35(6) :607–623, 2006.
- [38] Donald Keith Clarke, HA Hassan, and MD Salas. Euler calculations for multielement airfoils using Cartesian grids. *AIAA journal*, 24(3) :353–358, 1986.
- [39] PJ Coelho. Radiative heat transfer in turbulent combustion systems : Theory and applications. In *Handbook of Thermal Science and Engineering*, 2018.
- [40] W. Coirier and K. Powell. Solution-adaptive Cartesian cell approach for viscous and inviscid flows. *AIAA journal*, 34, 1996.
- [41] Gennaro Coppola, Francesco Capuano, and Luigi de Luca. Discrete energy-conservation properties in the numerical simulation of the Navier-Stokes equations. *Applied Mechanics Reviews*, 71, 2019.
- [42] Y. Coudière, J.-P. Vila, and P. Villedieu. Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional convection-diffusion problem. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 33 :493–516, 1999.
- [43] Yves Coudière and Gianmarco Manzini. Benchmark 3D : The cell-centered finite volume method using least squares vertex reconstruction (“diamond scheme”). In *Finite Volumes for Complex Applications VI Problems & Perspectives*, pages 985–992. Springer, 2011.
- [44] Marcel J Crochet, Arthur Russell Davies, and Kenneth Walters. *Numerical simulation of non-Newtonian flow*. Elsevier, 2012.
- [45] M.S. Darwish and J.R. Whiteman. Numerical modeling of viscoelastic liquids using a finite-volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **45**, 311–337, 1992.
- [46] I Demirdžić, Ž Lilek, and M Perić. Fluid flow and heat transfer test problems for non-orthogonal grids : Bench-mark solutions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 15(3) :329–354, 1992.
- [47] S Dharmaraja, Y Wang, and G Strang. Optimal stability for trapezoidal–backward difference split-steps. *IMA journal of numerical analysis*, 30 :141–148, 2010.
- [48] L. Dieci and T. Eirola. Positive definiteness in the numerical solution of Riccati differential equations. *Numerische Mathematik*, **67**, 303–313, 1994.
- [49] M. Dröge. *Cartesian grid methods for turbulent flow simulation in complex geometries*. PhD Thesis, University of Gronigen, 2007.
- [50] M. Dröge and R. Verstappen. A new symmetry-preserving Cartesian-grid method for computing flow past arbitrarily shaped objects. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 47 :979–985, 2005.
- [51] R. Eymard, T. Gallouet, and R. Herbin. Finite volume methods. In P. Ciarlet and J. L. Lions, editors, *Handbook for Numerical Analysis*, pages 715–1022, 2000.

- [52] EA Fadlun, R Verzicco, P Orlandi, and J Mohd-Yusof. Combined immersed-boundary finite-difference methods for three-dimensional complex flow simulations. *Journal of computational physics*, 161 :35–60, 2000.
- [53] Robert D Falgout and Ulrike Meier Yang. Hypre : A library of high performance preconditioners. In *International Conference on Computational Science*, pages 632–641. Springer, 2002.
- [54] R. Fattal and R. Kupferman. Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high Weissenberg number using the log-conformation representation. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **126**, 23 - 37, 2005.
- [55] J. H. Ferziger and M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, Berlin, 1996.
- [56] Bengt Fornberg. Steady viscous flow past a sphere at high Reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, 190 :471–489, 1988.
- [57] Richard Franke. Scattered data interpolation : tests of some methods. *Mathematics of computation*, 38(157) :181–200, 1982.
- [58] T. Gallouët, R. Herbin, J-C Latché, and K Mallem. Convergence of the Marker-and-Cell scheme for the incompressible Navier-Stokes equations on non-uniform grids. *Foundations of Computational Mathematics*, 18 :249–289, 2018.
- [59] F. Gibou, R. P. Fedkiw, Li-Tien Cheng, and M. Kang. A second-order-accurate symmetric discretization of the Poisson equation on irregular domains. *J. Comput. Phys.*, 176 :205–227, 2002.
- [60] Nandan Gokhale, Nikos Nikiforakis, and Rupert Klein. A dimensionally split Cartesian cut cell method for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 364 :186–208, 2018.
- [61] T Gornak. A goal oriented survey on immersed boundary methods. In *Master Thesis, TU Kaiserslautern*, 2013.
- [62] D Grapsas, R Herbin, W Kheriji, and J-C Latché. An unconditionally stable staggered pressure correction scheme for the compressible Navier-Stokes equations. *SMAI Journal of Computational Mathematics*, 2 :51–97, 2016.
- [63] M. Griebel, T. Dornseifer, and T. Neunhoffer. *Numerical Simulation in Fluid Dynamics*. Siam, Philadelphia, 1998.
- [64] H. Guillard and B Nkonga. On the behaviour of upwind schemes in the low Mach number limit : A review. In *Handbook of Numerical Analysis*, volume 18, pages 203–231. Elsevier, 2017.
- [65] F. Haider, J-P Croisille, and B. Courbet. Stability analysis of the cell centered finite-volume MUSCL method on unstructured grids. *Numerische Mathematik*, 113 :555–600, 2009.
- [66] FE Ham, FS Lien, and AB Strong. A fully conservative second-order finite difference scheme for incompressible flow on nonuniform grids. *Journal of Computational Physics*, 177 :117–133, 2002.
- [67] F. H. Harlow and J. E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surfaces. *Physics of fluids*, 8(12) :2181–2189, 1965.
- [68] FH Harlow and AA Amsden. Numerical calculation of almost incompressible flow. *Journal of Computational Physics*, 3 :80–93, 1968.
- [69] FH Harlow and AA Amsden. A numerical fluid dynamics calculation method for all flow speeds. *Journal of Computational Physics*, 8 :197–213, 1971.
- [70] John C Hart. Sphere tracing : A geometric method for the antialiased ray tracing of implicit surfaces. *The Visual Computer*, 12(10) :527–545, 1996.

-
- [71] Daniel Hartmann, Matthias Meinke, and Wolfgang Schröder. A strictly conservative Cartesian cut-cell method for compressible viscous flows on adaptive grids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(9-12), 2011.
- [72] R Herbin, W Kheriji, and J-C Latché. On some implicit and semi-implicit staggered schemes for the shallow water and Euler equations. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 48 :1807–1857, 2014.
- [73] Raphaële Herbin, Walid Kheriji, and Jean-Claude Latche. Staggered schemes for all speed flows. In *ESAIM : Proceedings*, volume 35, pages 122–150. EDP Sciences, 2012.
- [74] Charles Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows : The fundamentals of computational fluid dynamics*. Elsevier, 2007.
- [75] Kenneth Holmström and Jöran Petersson. A review of the parameter estimation problem of fitting positive exponential sums to empirical data. *Applied Mathematics and Computation*, 126(1) :31–61, 2002.
- [76] Kai Hormann. Barycentric interpolation. In *Approximation Theory XIV : San Antonio 2013*, pages 197–218. Springer, 2014.
- [77] F. Jacon and D.D. Knight. A Navier-Stokes algorithm for turbulent flows using an unstructured grid and flux difference splitting. AIAA paper No. 94-2292, 1994.
- [78] S. Jarny and P. Coussot. Caractérisation des écoulements de pâte dans une géométrie de Couette. *Rhéologie*, 2 :52–63, 2002.
- [79] TA. Johnson and VC. Patel. Flow past a sphere up to a Reynolds number of 300. *Journal of Fluid Mechanics*, 378 :19–70, 1999.
- [80] DA. Jones and DB. Clarke. Simulation of flow past a sphere using the Fluent code. Technical report, Defense Science and Technology Organization Victoria (Australia) Maritime, 2008.
- [81] D. D. Joseph. *Fluid Dynamics of Viscoelastic Liquids*. Springer, New York, 1990.
- [82] B. Kadoch, D. Kolomenskiy, P. Angot, and K. Schneider. A volume penalization method for incompressible flows and scalar advection-diffusion with moving obstacles. *Journal of Computational Physics*, 231(12) :4365–4383, 2012.
- [83] S. Kang, G. Iaccarino, and P. Moin. Accurate immersed-boundary reconstructions for viscous flow simulations. *AIAA journal*, 47 :1750–1760, 2009.
- [84] Dongjoo Kim and Haecheon Choi. Laminar flow past a sphere rotating in the streamwise direction. *Journal of Fluid Mechanics*, 461 :365–386, 2002.
- [85] M. P. Kirkpatrick, S. W. Armfield, and J. H. Kent. A representation of curved boundaries for the solution of the Navier-Stokes equations on a staggered three-dimensional Cartesian grid. *Journal of Computational Physics*, 184 :1–36, 2003.
- [86] B. Koren, R. Abgrall, P.l Bochev, JE Frank, and B. Perot. Physics-compatible numerical methods. *Journal of Computational Physics*, 257 :1039–1039, 2014.
- [87] Arthur G Kravchenko, Parviz Moin, and Karim Shariff. B-spline method and zonal grids for simulations of complex turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 151 :757 – 789, 1999.
- [88] A. Lerat, P. Cinnella, B. Michel, and F. Falissard. High-order residual-based compact schemes for aerodynamics and aeroacoustics. *Computers & fluids*, 61 :31–38, 2012.

- [89] D. K. Lilly. Introduction to “Computational design for long-term numerical integration of the equations of fluid motion : two-dimensional incompressible flow, part I”. *J. Comput. Phys.*, 135 :101–102, 1966.
- [90] A Limache, S Idelsohn, R Rossi, and E Oñate. The violation of objectivity in Laplace formulations of the Navier-Stokes equations. *International journal for numerical methods in fluids*, 54 :639–664, 2007.
- [91] Xiu Quan Lu, Wei Cai, Wen Xing Ma, Yue Shi Wu, and Wen Xu. Interpolation Methods used for one-way Fluid Structure Interaction of hydrodynamic coupling. In *Applied Mechanics and Materials*, volume 513, pages 4298–4301. Trans Tech Publ, 2014.
- [92] XL Luo, ZL Gu, KB Lei, S Wang, and K Kase. A three-dimensional Cartesian cut cell method for incompressible viscous flow with irregular domains. *International journal for numerical methods in fluids*, 69 :1939–1959, 2012.
- [93] Roel Luppès, Bülent Düz, H van der Heiden, Peter van der Plas, and A Veldman. Numerical simulations of two-phase flow with COMFLOW : past and recent developments. In *Proceedings of the ECCOMAS 2012 Conference*, pages 1–16, 2012.
- [94] A Majda and J Sethian. The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion. *Combustion science and technology*, 42 :185–205, 1985.
- [95] IK Marchevskii and VV Puzikova. Numerical simulation of the flow around two fixed circular airfoils positioned in tandem using the LS-STAG method. *Journal of Machinery Manufacture and Reliability*, 45 :130–136, 2016.
- [96] Ilia Marchevsky and Valeria Puzikova. Numerical simulation in coupled aeroelastic problems by using the LS-STAG method. In *Joint EUROMECH/ERCOTAC Colloquium*, volume 549, 2013.
- [97] Ilia K Marchevsky and Valeria V Puzikova. Numerical simulation of wind turbine rotors autorotation by using the modified LS-STAG immersed boundary method. *International Journal of Rotating Machinery*, 2017, 2017.
- [98] Philip S. Marcus and Laurette S. Tuckerman. Simulation of flow between concentric rotating spheres. Part 1. Steady states. *Journal of Fluid Mechanics*, 185 :1–30, 1987.
- [99] L. Martinelli and A. Jameson. Validation of a multigrid method for the Reynolds averaged equations. AIAA paper No. 88-0414, 1988.
- [100] H. Matallah, P. Townsend, and M. F. Webster. Recovery and stress-splitting schemes for viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **75**, 139-166, 1998.
- [101] S.R. Mathur and J.Y. Murthy. A pressure-based method for unstructured meshes. *Numerical Heat Transfer*, 31 :195–215, 1997.
- [102] S. May and M. Berger. An explicit implicit scheme for cut cells in embedded boundary meshes. *Journal of Scientific Computing*, 71 :919–943, 2017.
- [103] Chloé Mimeau, G-H Cottet, and Iraj Mortazavi. Direct numerical simulations of three-dimensional flows past obstacles with a vortex penalization method. *Computers & Fluids*, 136 :331–347, 2016.
- [104] R. Mittal and G. Iaccarino. Immersed boundary methods. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 37 :239–261, 2005.
- [105] M. Modest and D. Haworth. *Radiative Heat Transfer in Turbulent Combustion Systems : Theory and Applications*. Springer, 2016.
- [106] H Keith Moffatt. Viscous and resistive eddies near a sharp corner. *Journal of Fluid Mechanics*, 18 :1–18, 1964.

-
- [107] P Moin and K Mahesh. Direct numerical simulation : a tool in turbulence research. *Annual review of fluid mechanics*, 30 :539–578, 1998.
- [108] Y. Morinishi, T. S. Lund, O. V. Vasilyev, and P. Moin. Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flow. *J. Comput. Phys.*, 143 :90–124, 1998.
- [109] F. Moukalled, L. Mangani, and M. Darwish. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics*. Springer, 2016.
- [110] F. Muldoon and S. Acharya. A divergence-free interpolation scheme for the immersed boundary method. *International journal for numerical methods in fluids*, 56 :1845–1884, 2008.
- [111] Balaji Muralidharan and Suresh Menon. A high-order adaptive Cartesian cut-cell method for simulation of compressible viscous flow over immersed bodies. *Journal of Computational Physics*, 321 :342–368, 2016.
- [112] Debabrata Nag and Amitava Datta. Variation of the recirculation length of Newtonian and non-Newtonian power-law fluids in laminar flow through a suddenly expanded axisymmetric geometry. *Journal of Fluids Engineering*, 129(2) :245–250, 2007.
- [113] J. O’Rourke. *Computational Geometry in C*. Cambridge University Press, 1998.
- [114] S. Osher and R. P. Fedkiw. Level set methods : An overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, 169 :463–502, 2001.
- [115] S. Osher and R. P. Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer, New-York, 2003.
- [116] Robert G Owens and Timothy N Phillips. *Computational rheology*. World Scientific, 2002.
- [117] P2REMICS. Institut National de Recherche en Sécurité Nucléaire. <https://gforge.irs.fr/gf/project/p2remics/>.
- [118] Suhas Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. CRC press, 1980.
- [119] N. Peller, A. Le Duc, F. Tremblay, and M. Manhart. High-order stable interpolations for immersed boundary methods. *Int. J. Numer. Meth. Fluids.*, 52 :1175–1193, 2006.
- [120] R. Pember, J. Bell, P. Colella, W. Curtchfield, and M. Welcome. An adaptive Cartesian grid method for unsteady compressible flow in irregular regions. *Journal of computational Physics*, 120(2) :278–304, 1995.
- [121] J Blair Perot. Discrete conservation properties of unstructured mesh schemes. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 43 :299–318, 2011.
- [122] C. Peskin. The immersed boundary method. *Acta numerica*, 11 :479–517, 2002.
- [123] C.S. Peskin. Flow patterns around heart valves : a numerical method. *Journal of computational physics*, 10 :252–271, 1972.
- [124] Roger Peyret. *Spectral methods for incompressible viscous flow*. Springer, 2013.
- [125] N.A. Phillips. An example of non-linear computational instability. *The atmosphere and the sea in motion*, 501 :504, 1959.
- [126] T. N. Phillips and A. J. Williams. Comparison of creeping and inertial flow of an Oldroyd-B fluid through planar and axisymmetric contractions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **108**, 25 - 47, 2002.
- [127] T.N. Phillips and A.J. Williams. Viscoelastic flow through a planar contraction using a semi-Lagrangian finite volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **87**, 215-246, 1999.
- [128] Olivier Pironneau. *Finite element methods for fluids*. Wiley Chichester, 1989.
- [129] T. Poinsoot and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards Inc, 2005.

- [130] D. Poitou. Modélisation du rayonnement dans la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente. In *Thèse de l'INP Toulouse*, 2009.
- [131] V Puzikova and I Marchevsky. Extension of the LS-STAG cut-cell immersed boundary method for RANS-based turbulence models. In *Proceedings of the International Summer School-Conference "Advanced Problems in Mechanics"*, June, 2014.
- [132] Valeria V Puzikova. On generalization of the LS-STAG immersed boundary method for Large Eddy Simulation and Detached Eddy Simulation. In *Advanced Problems in Mechanics International Summer School-Conference (Inst. for Problems in Mechanical Engineering, St.-Petersburg, 2015)*, pages 411–417, 2015.
- [133] L.M. Quinzani, R.C. Armstrong, and R.A. Brown. Birefringence and laser-Doppler velocimetry (LDV) studies of viscoelastic flow through planar contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **52**, 1-36, 1994.
- [134] H Ramirez-Lancheros. Etude expérimentale et modélisation cinétique de l'oxydation, l'auto-inflammation et la combustion de carburants Diesel et bio-Diesel. In *Thèse de l'Université d'Orleans*, 2012.
- [135] C. Rigal. *Comportement de fluides complexes sous écoulement : Approche expérimentale par résonance magnétique nucléaire et techniques optiques et simulations numériques*. PhD Thesis, Institut National Polytechnique de Lorraine, 2012.
- [136] PL Roe. Error estimates for cell-vertex solutions of the compressible Euler equations. In *ICASE Report No. 87-6*, 1987.
- [137] JS Rosenbaum. Conservation properties of numerical integration methods for systems of ordinary differential equations. *Journal of Computational Physics*, 20 :259–267, 1976.
- [138] JS Rosenbaum. Conservation properties for numerical integration methods for systems of differential equations. 2. *The Journal of Physical Chemistry*, 81 :2362–2365, 1977.
- [139] W Rozema, JC Kok, RWCP Verstappen, and AEP Veldman. A symmetry-preserving discretisation and regularisation model for compressible flow with application to turbulent channel flow. *Journal of Turbulence*, 15(6) :386–410, 2014.
- [140] B. Sanderse. Energy-conserving Runge-kutta methods for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 233 :100–131, 2013.
- [141] P Saramito. Numerical simulation of viscoelastic fluid flows using incompressible finite element method and a θ -method. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 28(1) :1–35, 1994.
- [142] G. P. Sasmal. A finite volume approach for calculation of viscoelastic flow through an abrupt axisymmetric contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 56(1) :15–47, 1995.
- [143] Michael Schäfer, Stefan Turek, Franz Durst, Egon Krause, and Rolf Rannacher. Benchmark computations of laminar flow around a cylinder. In *Flow simulation with high-performance computers II*, pages 547–566. Springer, 1996.
- [144] K. Schneider. Immersed boundary methods for numerical simulation of confined fluid and plasma turbulence in complex geometries : a review. *Journal of Plasma Physics*, 81 :435810601, 2015.
- [145] J.H. Seo and R. Mittal. A sharp-interface immersed boundary method with improved mass conservation and reduced spurious pressure oscillations. *Journal of computational physics*, 230 :7347–7363, 2011.
- [146] Donald Shepard. A two-dimensional interpolation function for irregularly-spaced data. In *Proceedings of the 1968 23rd ACM national conference*, pages 517–524. ACM, 1968.

-
- [147] Fotis Sotiropoulos and Xiaolei Yang. Immersed boundary methods for simulating fluid–structure interaction. *Progress in Aerospace Sciences*, 65 :1–21, 2014.
- [148] Roger Temam. Une méthode d’approximation de la solution des équations de Navier-Stokes. *Bulletin de la Société Mathématique de France*, 96 :115–152, 1968.
- [149] N Therme and C Zaza. Comparison of cell-centered and staggered pressure-correction schemes for all-Mach flows. In *Finite Volumes for Complex Applications VII-Elliptic, Parabolic and Hyperbolic Problems*, pages 975–983. Springer, 2014.
- [150] A. Tomboulides and S. Orszag. Numerical investigation of transitional and weak turbulent flow past a sphere. *Journal of Fluid Mechanics*, 416 :45–73, 2000.
- [151] CD Toth, J O’Rourke, and J E Goodman. *Handbook of discrete and computational geometry*. CRC press, 2017.
- [152] L. Trovalet, G. Jeandel, PJ Coelho, and F. Asllanaj. Modified finite-volume method based on a cell vertex scheme for the solution of radiative transfer problems in complex 3d geometries. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112 :2661–2675, 2011.
- [153] PG Tucker and Z Pan. A Cartesian cut cell method for incompressible viscous flow. *Applied Mathematical Modelling*, 24 :591–606, 2000.
- [154] S. Turek. A comparative study of time-stepping techniques for the incompressible Navier-Stokes equations : from fully implicit non-linear schemes to semi-implicit projection methods. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 22 :987–1011, 1996.
- [155] H. S. Udaykumar, R. Mittal, P. Rampungoon, and A. Khanna. A sharp interface Cartesian grid method for simulating flows with complex moving boundaries. *Journal of Computational Physics*, 174 :345–380, 2001.
- [156] M. Uhlmann. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 209 :448–476, 2005.
- [157] Henri JL van der Heiden, Arthur EP Veldman, and Roel Luppés. A Quasi-3-D extension of the LS-STAG cut-cell immersed boundary method. In *Joint EUROMECH/ERCOFTAC Colloquium*, volume 549, 2013.
- [158] HJL van der Heiden. *Modelling viscous effects in offshore flow problems : A numerical study*. PhD thesis, University of Groningen, 2019.
- [159] P van der Plas. *Local Grid Refinement for Free-Surface Flow Simulations*. PhD thesis, University of Groningen, 2017.
- [160] P Van der Plas, HJL Van der Heiden, AEP Veldman, R Luppés, and RWCP Verstappen. Efficiently simulating viscous flow effects by means of regularization turbulence modeling and local grid refinement. In *Seventh International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD7), Hawaii, paper ICCFD-2503*, 2012.
- [161] J. van Kan, C. Vuik, and P. Wesseling. Fast pressure calculation for 2D and 3D time dependent incompressible flow. *Numer. Linear Algebra Appl.*, 7 :429–447, 2000.
- [162] B. van’t Hof and A. Veldman. Mass, momentum and energy conserving (MaMEC) discretizations on general grids for the compressible Euler and shallow water equations. *Journal of Computational Physics*, 231(14) :4723–4744, 2012.
- [163] O. V. Vasilyev. High order finite difference schemes on non-uniform meshes with good conservation properties. *Journal of Computational Physics*, 157 :746–761, 2000.

- [164] Arthur EP Veldman. A general condition for kinetic-energy preserving discretization of flow transport equations. *Journal of Computational Physics*, 398, 2019.
- [165] R. W. C. P. Verstappen and A. E. P. Veldman. Spectro-consistent discretization of navier-stokes : a challenge to RANS and LES. *Journal of Engineering Mathematics*, 34 :163–179, 1998.
- [166] R. W. C. P. Verstappen and A. E. P. Veldman. Symmetry-preserving discretization of turbulent flow. *J. Comput. Phys.*, 187 :343–368, 2003.
- [167] R. Verzicco, J. Mohd-Yusof, P. Orlandi, and D Haworth. LES in complex geometries using boundary body forces. In *Proceedings of the CTR summer program*, pages 171–186, 1998.
- [168] K. Walters and M.F. Webster. The distinctive CFD challenges of computational rheology. *International Journal For Numerical Methods in fluid*, **43**, 577-596, 2003.
- [169] ZJ Wang. Improved formulation for geometric properties of arbitrary polyhedra. *AIAA journal*, 37 :1326–1327, 1999.
- [170] Holger Wendland. *Scattered data approximation*, volume 17. Cambridge university press, 2004.
- [171] J-S. Wu and GM. Faeth. Sphere wakes in still surroundings at intermediate Reynolds numbers. *AIAA journal*, 31(8) :1448–1455, 1993.
- [172] J Xiao, W Breitung, M Kuznetsov, H Zhang, JR Travis, R Redlinger, and T Jordan. GASFLOW-MPI : A new 3-D parallel all-speed CFD code for turbulent dispersion and combustion simulations : Part I : Models, verification and validation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42 :8346–8368, 2017.
- [173] G. Yang, DM. Causon, and DM. Ingram. Calculation of compressible flows about complex moving geometries using a three-dimensional Cartesian cut cell method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 33 :1121–1151, 2000.
- [174] J. Yang. *An embedded-boundary formulation for large-eddy simulation of turbulent flows interacting with moving boundaries*. PhD thesis, 2005.
- [175] T. Ye, R. Mittal, H. S. Udaykumar, and W. Shyy. An accurate Cartesian grid method for viscous incompressible flows with complex immersed boundaries. *J. Comput. Phys.*, 156 :209–240, 1999.

Résumé

Dans ce manuscrit, je présente les travaux de recherche que j'ai effectué depuis mon affectation en tant que maître de conférences à l'Université de Lorraine. Ces travaux ont été principalement consacrés au développement d'une méthode numérique originale de type "frontières immergées"/*cut-cell* : la méthode LS-STAG (Level-Set, STAGgered), qui permet de simuler les écoulements de fluides visqueux incompressibles sur des grilles cartésiennes qui ne sont pas alignées avec la géométrie. L'une des contributions de ces travaux est de proposer une discrétisation originale des équations de Navier-Stokes dans les *cut-cells*, qui permet de préserver l'une des propriétés remarquables de la méthode MAC classique sur grilles cartésiennes : la conservation de la contrepartie discrète des invariants globaux de l'écoulement (masse, quantité de mouvement et énergie cinétique totale). Ce document présente de façon unifiée les différents développements qui ont permis d'aboutir à une discrétisation systématique, précise et algorithmiquement efficace pour les géométries complexes 3D. Il présente aussi les différentes applications numériques réalisées pour vérifier et valider le calcul LS-STAG en 2D (écoulements de fluides non-newtoniens viscoplastiques et viscoélastiques, convection naturelle) et 3D (écoulements derrière un cylindre, sphère en rotation longitudinale) dans les régimes laminaire, instationnaire et faiblement turbulent.

Mots-clés: Mécanique des fluides numérique, Equations de Navier-Stokes, Fluides non-newtoniens, Méthode de *cut-cell*, 3D.

