

Interpolation de Lagrange et volumes finis

Nous décrivons une approche générale qui permet de calculer les termes de dissipation du second ordre des équations de la dynamique des gaz sur des maillages non structurés généraux dans le cas de deux et trois dimensions d'espace avec la méthode des volumes finis. Les opérateurs de dérivation en espace sont discrétisés en se fondant sur leur caractère à la fois local et linéaire. L'opérateur de dérivation discret est souple à construire et est choisi de façon à être exact pour des polynômes de bas degré. Le schéma obtenu reste toujours compact et ne fait intervenir que sept points au plus dans le cas bidimensionnel et onze points en tridimensionnel.

1) Introduction.

- La méthode des volumes finis est aujourd'hui l'une des plus simples pour mener à bien des calculs de mécanique des fluides compressibles pouvant comporter des ondes de choc fortes ou des ondes de détente. Elle est en général employée avec des maillages structurés en espace (des grilles de type $i - j - k$) ou structurés par blocs dans la variante multidomaine. La discrétisation des opérateurs de dérivation s'effectue à l'aide d'arguments classiques qui s'apparentent avant tout aux différences finies. Le livre de Peyret et

Rapport de recherche Aérospatiale Lanceurs [Du92], février 1992. Traduction en "TEX" juillet 2003. Edition février 2011 ; 48 pages.

Taylor [PT83] donne un point de vue très complet sur ces travaux maintenant classiques.

- Lorsque le maillage subit de fortes distorsions, l’approche retenue par l’équipe de T. Gallouët pour l’approximation numérique de problèmes de diffusion (voir par exemple Faille-Gallouët-Herbin [FGH91]) avec le schéma “VF9” consiste à se ramener à un schéma aux différences finies en prenant en compte de façon précise la géométrie du maillage sans référence à une quelconque transformation de coordonnées.

- L’extension aux maillages non structurés (maillages en triangles dans le cas bidimensionnel par exemple) est délicate car d’une part on doit se passer de l’intuition qu’apporte la méthode des différences finies et d’autre part de nombreux auteurs utilisent la méthode des éléments finis (donc une approche variationnelle) pour écrire les équations aux dérivées partielles sur un maillage non structuré. L’approche introduite à l’Inria pour résoudre les équations d’Euler de la dynamique des gaz sur un maillage en triangles (voir Vijayasundaram [Vi86]) utilise à la fois la méthode des volumes finis et les degrés de liberté des éléments finis P_1 . Le champ fluide est discrétisé par ses valeurs aux sommets du maillage. Le prix à payer pour cette simplicité est double : les volumes de contrôle sont de géométrie relativement complexe (polyèdres de Dirichlet) et sont définis de façon peu satisfaisante à la paroi solide en particulier.

- C’est pourquoi nous avons adopté à l’Aérospatiale (Mercier [Me87]) avec le code de calcul Ns3gr une approche de type volumes finis très pure : un maillage du domaine d’étude étant donné, les volumes de contrôle pour les équations aux dérivées partielles sont constitués par les éléments finis géométriques que définit naturellement le maillage ; ce sont tout simplement des triangles en maillage triangulaire ! Les degrés de liberté sont alors naturellement les valeurs moyennes des champs dans chaque élément (noté le plus souvent K dans la suite de ce mémoire) à partir desquels on doit calculer au mieux les flux sur les interfaces du maillage (arêtes dans le cas bidimensionnel, faces dans le cas tridimensionnel) de façon à définir l’évolution en temps des degrés de liberté selon le système différentiel ordinaire

$$(1.1) \quad |K| \frac{\partial W_K}{\partial t} + \sum_{f \in \partial K} \Phi(f) = 0.$$

Le flux $\Phi(f)$ le long de l’interface f est calculé “au mieux” en fonction des degrés de liberté $\{W_L\}$ qui sont *a priori* portés par les éléments L du maillage. Pour les mailles frontières, une attention particulière doit être apportée au

calcul du flux frontière pour la facette f qui touche le bord du domaine. Nous renvoyons à notre travail avec Olivier Michaux [DM92] par exemple pour une description de l'algorithme qui permet d'évaluer les flux non visqueux à l'aide d'un schéma décentré précis au second ordre.

- La prise en compte d'effets visqueux modifie la situation précédente de deux façons essentiellement. D'une part, le flux $\Phi(f)$ est somme d'un flux eulérien $\Phi^E(f)$ et d'un flux visqueux $\Phi^V(f)$ qu'il convient de calculer :

$$(1.2) \quad \Phi(f) = \Phi^E(f) + \Phi^V(f).$$

D'autre part, la donnée de condition limite à la paroi solide (vitesse nulle ou température imposée typiquement) ou à la frontière fluide nous impose d'adjoindre aux degrés de liberté déjà envisagés plus haut (à savoir les moyennes W_K des variables conservatives dans les éléments K du domaine de calcul) des degrés de liberté supplémentaires naturellement portés par les arêtes du maillage sur la frontière du domaine de calcul (par exemple $T(f)$, champ de température à la paroi solide). Rappelons également que, compte tenu de l'expression algébrique des tensions visqueuses d'un fluide newtonien, tout le problème numérique consiste à calculer le champ de vitesse et de température le long des interfaces du maillage comme nous l'avons exposé dans une étude précédente [Du89c].

- Le problème modèle que nous étudions dans la suite de ce rapport est décrit ci-dessous. On se donne un maillage \mathcal{T} . Dans le cas tridimensionnel, c'est un complexe cellulaire selon la dénomination des topologues, c'est à dire une famille de quatre ensembles qui décrivent les divers objets qui composent le maillage : $\mathcal{S}_{\mathcal{T}}$ pour les sommets, $\mathcal{A}_{\mathcal{T}}$ pour les arêtes, $\mathcal{F}_{\mathcal{T}}$ pour les faces et $\mathcal{E}_{\mathcal{T}}$ pour les éléments. Les éléments du maillage satisfont les contraintes d'intersection usuelles (voir par exemple Ciarlet [Ci78]) : l'intersection de deux éléments K et K' de $\mathcal{E}_{\mathcal{T}}$ est soit égale à K ou K' lui-même, soit est une face f appartenant à l'ensemble $\mathcal{F}_{\mathcal{T}}$, soit est une arête a et elle appartient à l'ensemble $\mathcal{A}_{\mathcal{T}}$, soit est un élément S de l'ensemble $\mathcal{S}_{\mathcal{T}}$, soit est vide. Dans le cas bidimensionnel, on a de plus $\mathcal{F}_{\mathcal{T}} \equiv \mathcal{A}_{\mathcal{T}}$. On se donne ensuite des degrés de liberté sur chaque élément du maillage (valeur moyenne du champ, confondue ici, peut être à tort, avec la valeur ponctuelle au centre de gravité) d'un champ scalaire u :

$$(1.3) \quad \sigma(u) = u(G_K), \quad G \text{ centre de gravité de l'élément } K, \quad K \in \mathcal{E}_{\mathcal{T}}$$

et sur chaque face frontière :

$$(1.4) \quad \sigma(u) = u(f) \text{ ou } \sigma(u) = \frac{\partial u}{\partial n}(f), \text{ } f \text{ facette du maillage sur la frontière.}$$

Nous cherchons à calculer le gradient du champ u sur toutes les faces du maillage :

$$(1.5) \quad \nabla u(f) = ? , \quad f \text{ face du maillage,} \quad f \in \mathcal{F}_T .$$

- L'idée que nous exploitons dans la suite est fondée sur la remarque (triviale !) suivante : la dérivation est un opérateur **linéaire** et **local**. Pour combler le point d'interrogation au membre de droite de la relation (1.5), nous choisissons un voisinage $V(f)$ pour chacune des facettes du maillage

(1.6) $V(f) = \{ \text{degrés de liberté } \sigma \text{ au voisinage de } f \}$; f face du maillage et un jeu de coefficients vectoriels $\alpha(f, \sigma)$ associés à la face f et aux degrés de liberté σ appartenant à $V(f)$ de façon à représenter $\nabla u(f)$ sous la forme

$$(1.7) \quad \nabla u(f) = \sum_{\sigma \in V(f)} \alpha(f, \sigma) \sigma(u) .$$

Le calcul des coefficients $\alpha(f, \sigma)$ est simple ; il suffit d'écrire que la relation (1.7) est **exacte** pour un espace vectoriel $LS(f)$ de fonctions donné *a priori*, ce qui conduit alors à réinterpréter (1.7) comme un système linéaire d'inconnues $\alpha(f, \sigma)$. Nous interprétons à l'Annexe A cette approche en termes d'interpolation de Lagrange.

- Nous avons proposé l'idée énoncée ci-dessus en 1988. Dans le cas d'un maillage cartésien, nous avons vérifié que l'on retrouve les schémas aux différences classiques (Mercier-Terrasse [MT89]) et nous avons implémenté la méthode dans le code Ns3gr de résolution des équations de Navier Stokes en se limitant dans un premier temps au cas d'un maillage localement structuré ([Du90c] et [DM93]). Par ailleurs, S. Pavsic [PDC91] a montré que les conditions aux limites classiques (1.4) peuvent s'étendre aux conditions aux limites de glissement qui modélisent une mince couche de Knudsen hors équilibre thermodynamique en atmosphère raréfiée :

$$(1.8) \quad \sigma(u) = \frac{\partial u}{\partial n} - \beta u(f) .$$

Enfin, nous avons montré (voir le chapitre suivant !) que l'implication en temps d'un tel schéma est très naturelle à partir de la relation (1.7). Ce schéma implicite a été mis en œuvre dans le code Ns3gr par Olivier Michaux (voir Bertagnolio et al [BDM91]) et une version incluant des opérateurs d'axisymétrie a été étudiée par Rémy Baraille [Ba91].

- Nous proposons dans la suite de ce mémoire un algorithme général qui permet, une fois donné un maillage comportant des triangles et des quadrangles

dans le cas de deux dimensions d'espace ou alors des tétraèdres, des prismes, des pyramides et des hexaèdres dans le cas tridimensionnel, de déterminer le voisinage $V(f)$ de chaque interface du maillage et préciser le choix de l'espace $LS(f)$, ce qui permet le calcul des coefficients $\alpha(f, \sigma)$ du schéma (1.7).

2) Le cas bidimensionnel.

- Nous traitons d'abord le cas d'un maillage en quadrangles structurés du domaine de calcul Ω , puis celui d'un maillage en triangles dans le cas générique avant d'aborder le cas général et de détailler le cas des conditions limites et quelques cas d'exception.

2.1) Quadrangles structurés.

- Il s'agit du cas qui a déjà été abordé dans des rapports antérieurs comme [Du89c]. Les notations sont introduites à la figure 1. Le maillage contient deux directions privilégiées, au moins localement. L'axe Ox est par convention dirigé le long de la normale n à la facette et l'axe Oy contient donc la facette f . On peut également placer l'origine O au milieu de f .

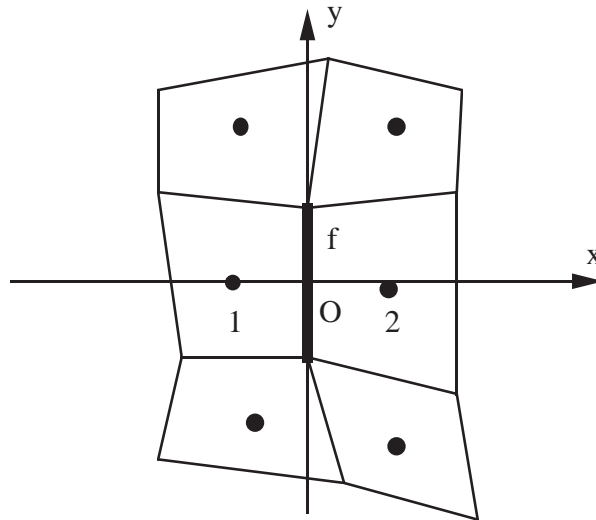


Figure 1 Quadrangles structurés.

- Le voisinage $V(f)$ est formé des six degrés de liberté présentés figure 1. Il peut être défini de nombreuses façons. En maillage structuré, l'interface a pour "numéro" naturel $(i+1/2, j)$ et l'on a donc :

$$(2.1) \quad V(i+1/2, j) = \{u_{kl}, \quad k = i \text{ ou } i+1, \quad l = j-1, j \text{ ou } j+1\}.$$

Les six voisins de la figure 1 sont aussi définis par

$$(2.2)(i) \quad V(f) = \left\{ \begin{array}{l} \text{éléments } K \text{ du maillage tels qu'il existe} \\ \text{un sommet } S \text{ du maillage appartenant} \\ \text{à l'intersection du bord de } K \text{ et du bord de } f. \end{array} \right\}$$

$$(2.2)(ii) \quad V(f) = \{ K \in \mathcal{E}_{\mathcal{T}}, \quad \exists S \in \mathcal{S}_{\mathcal{T}}, \quad S \in \partial K \cap \partial f \}.$$

où \mathcal{T} est une notation usuelle pour désigner le maillage, $\mathcal{E}_{\mathcal{T}}$ l'ensemble de ses éléments et $\mathcal{S}_{\mathcal{T}}$ l'ensemble de ses sommets. La troisième définition utilise la notion de cobord d'une interface, que nous précisons immédiatement.

• **Cobord d'une interface**

Par définition, c'est l'ensemble $C(f)$ des éléments du maillage dont le bord contient la face f :

$$(2.3) \quad C(f) = \{ K \in \mathcal{E}_{\mathcal{T}}, \quad \partial K \supset f \}, \quad f \in \mathcal{F}_{\mathcal{T}}.$$

Le cobord d'une interface est toujours formé, tant pour un maillage structuré que pour un maillage non structuré, de deux éléments notés K_g et K_d (de numéros respectifs 1 et 2 sur la figure 1) situés respectivement à gauche et à droite de la face f une fois donnée une direction normale, sauf pour les faces du bord du domaine où il n'y a pas d'élément "à droite" (et l'on utilise toujours par convention la normale extérieure au domaine de calcul). Nous avons alors :

$$(2.4)(i) \quad V(f) = C(f) \cup \left\{ \begin{array}{l} \text{éléments } L \text{ appartenant au cobord des faces } g \\ \text{du bord des éléments de } C(f) \text{ qui ont} \\ \text{exactement un sommet commun avec la face } f \end{array} \right\}$$

c'est à dire

$$(2.4)(ii) \quad V(f) = C(f) \cup \left\{ \begin{array}{l} C(g), \quad g \in \mathcal{F}_{\mathcal{T}}, \quad g \neq f, \\ \exists K \in C(f), \quad g \in \partial K \\ \exists S \in \mathcal{S}_{\mathcal{T}}, \quad S \in \partial f \cap \partial g \end{array} \right\}.$$

L'espace $LS(f)$ des fonctions de base privilégie la direction de l'interface. Nous avons choisi, après discussion approfondie avec Bertrand Mercier en 1988 :

$$(2.5) \quad LS(f) = P_1(x) \otimes P_2(y)$$

où $P_1(x)$ (respectivement $P_2(y)$) est l'espace des polynomes en x (respectivement en y) de degré inférieur ou égal à un (respectivement à deux). Aux six degrés de liberté $V(f)$ (*c.f.* (2.1), (2.2) ou (2.4)) correspondent les six fonctions de base de l'espace $LS(f)$ que l'on note $B(f)$, à savoir

$$(2.6) \quad B(f) = \{ 1, x, y, xy, y^2, xy^2 \}$$

et le système (1.7) définit correctement en pratique les coefficients $\alpha(f, \sigma)$.

2.2) Triangles : cas générique.

• Nous étudions le cas d'un maillage par des triangles satisfaisant les conditions classiques d'un maillage par éléments finis. Une face intérieure du maillage

sépare deux triangles et son cobord est formé des triangles numérotés 1 et 2 sur la figure 2. Nous devons choisir le voisinage $V(f)$ de cette face ainsi que la base $B(f)$ de l'espace des fonctions tests $LS(f)$ qui permet le calcul des coefficients de couplage $\alpha(f, \sigma)$ grâce à la relation (1.7).

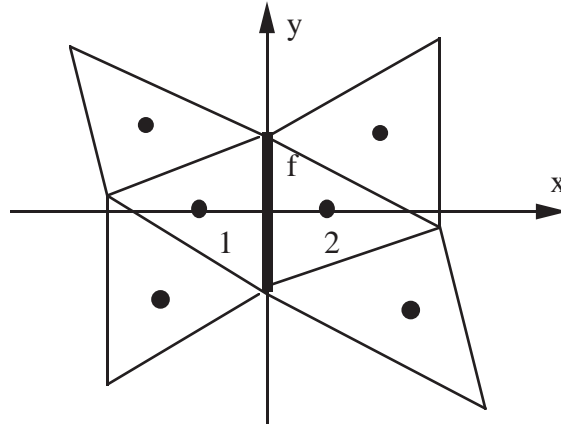


Figure 2 Triangles voisins de la face f .

- La généralisation au cas triangulaire de la relation (2.1) est évidemment impossible puisque les éléments K du maillage ne peuvent pas être indexés par un couple d'entiers (k, l) . La relation (2.2) par contre se généralise sans difficulté au cas d'un maillage triangulaire (figure 3). Le voisinage de f est alors formé des triangles dont l'un des sommets coïncide avec l'un des deux sommets du bord de la face f . Il apparaît alors un problème typique du cas d'un maillage ayant une structure "quelconque" de complexe cellulaire : le nombre d'éléments de $V(f)$ est **variable** (cinq éléments contiennent l'un des sommets de la face de la figure 3 alors que l'autre sommet appartient à six triangles du maillage). Ceci constitue un handicap important pour choisir de façon simple les coefficients $\alpha(f, \sigma)$, c'est à dire l'espace de fonctions tests $LS(f)$. De plus, la vectorisation du calcul de $\nabla u(f)$ grâce à la relation (1.7) est difficile si le nombre de termes $\text{Card}[V(f)]$ de cette somme n'est pas constant, ou n'est pas majoré uniformément par rapport à la variable f , ce qui n'est pas le cas avec la relation (2.2) puisqu'un nombre *a priori* quelconque d'éléments peuvent contenir un sommet donné du maillage.

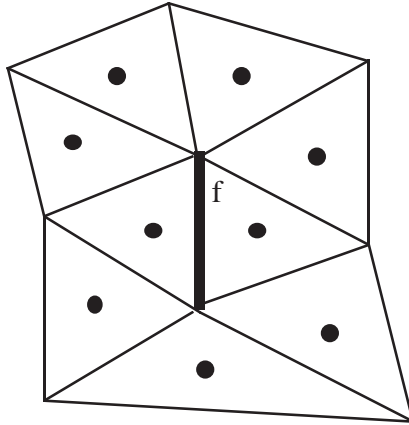


Figure 3 Voisinage de f défini par la relation (2.2).

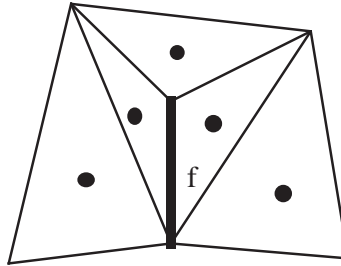


Figure 4 Triangles voisins d'une face f . Cas non générique.

- Nous choisissons donc de ne pas généraliser la définition de $V(f)$ à l'aide de la relation (2.2) mais nous nous tournons vers la relation (2.4). Nous déterminons d'abord les faces g appartenant au bord des éléments 1 et 2 du cobord de f (*c.f.* figure 2) et qui ont une intersection non vide avec f . Il y a toujours quatre faces de ce type pour un maillage en triangles ou en quadrangles, que le maillage soit structuré ou non. Dans le cas que nous qualifions ici de générique et qui correspond au cas de la figure 2, le cobord des quatre faces définies plus haut est formé d'une part du cobord $C(f)$ de f et d'autre part de quatre éléments distincts. Ce cas de figure n'est pas obligatoire comme le montre la figure 4 où $V(f)$ défini à la relation (2.4) est formé de cinq éléments voisins seulement. Toutefois, si le maillage ne contient que des triangles ne comportant que des angles aigus, le voisinage $V(f)$ d'une face intérieure comporte toujours six éléments.

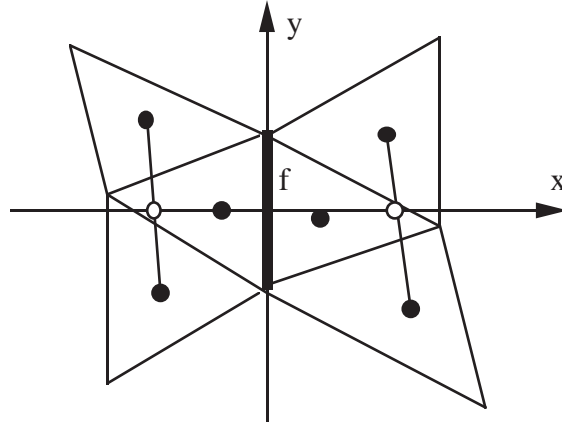


Figure 5 Interpolation dans la direction Ox à partir des six degrés de liberté constituant le voisinage $V(f)$.

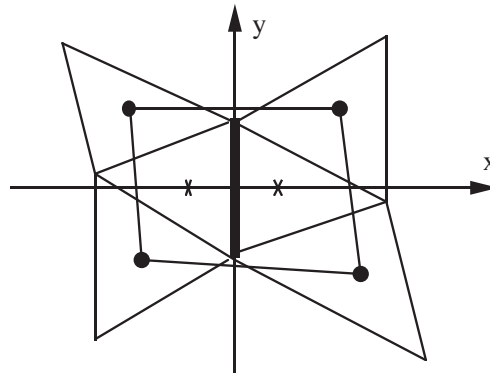


Figure 6 Interpolation du champ $(x, y) \mapsto xy$ à partir des six degrés de liberté constituant le voisinage $V(f)$.

- Nous cherchons maintenant à définir l'espace de fonctions $LS(f)$ qui permet d'interpoler la fonction u aux "points de grille" qui constituent $V(f)$. Nous utilisons les notations de la figure 2 : l'origine est au milieu de l'arête f et l'axe des x est dirigé selon la direction normale à la face, alors que l'axe des y est une direction tangentielle. Nous déterminons de façon semi-empirique très intuitive (ce dont nous sommes bien désolés !) un choix possible pour une base $B(f)$ de $LS(f)$. Bien entendu, selon une remarque classique de Rivas [Ri82], la base $B(f)$ doit contenir les polynômes de degré inférieur ou égal à 1 :

$$(2.7) \quad \{1, x, y\} \subset B(f).$$

De plus, au vu de la figure 5, on peut assez naturellement trouver quatre points distincts sur l'axe Ox où le champ u étudié peut prendre naturellement une valeur ponctuelle, ce qui conduit à admettre dans l'espace $LS(f)$ des polynômes en x de degré inférieur ou égal à 3 :

$$(2.8) \quad \{1, x, x^2, x^3\} \subset B(f).$$

Enfin, les quatre valeurs nodales de la figure 6 constitués par les degrés de liberté n'appartenant pas au cobord de $C(f)$ nous incitent à permettre une interpolation sous-jacente possible de type Q_1 , c'est à dire :

$$(2.9) \quad \{1, x, y, xy\} \subset B(f).$$

Les relations (2.7) à (2.9) nous conduisent donc à un espace $LS(f)$ de dimension six dont une base est donnée par

$$(2.10) \quad B(f) = \{1, x, y, x^2, xy, x^3\}.$$

On notera la différence entre la base (2.10) et la proposition (2.6) que nous avons faite pour les quadrangles.

2.3) Cas général.

- Nous considérons un maillage bidimensionnel de type éléments finis, formé de quadrangles et de triangles comme à la figure 7. Nous considérons une arête intérieure f de ce maillage qui peut être voisine de deux triangles, deux quadrangles ou même un triangle et un quadrangle. Nous supposons que l'ensemble des degrés de liberté voisins $V(f)$, défini grâce à la relation (2.4), comporte exactement six éléments, ce qui exclut pour le moment des configurations telles que celle de la figure 4. Nous cherchons à déterminer la base $B(f)$ par un procédé le plus général possible de façon à satisfaire les deux cas particuliers déjà définis :

(2.11) $C(f)$ est composé de deux quadrangles : $B(f)$ donné par la relation (2.6),

(2.12) $C(f)$ est composé de deux triangles : $B(f)$ donné par la relation (2.10).

Nous formalisons le procédé de construction de $B(f)$ rappelé en (2.11) (2.12) de la façon suivante : on doit "marier" les deux éléments du cobord de part et d'autre de la face f , avec un ensemble de degrés de liberté spécifique et un espace de fonctions tests spécifique également. De façon précise, étant donné un couple (K, f) formé d'un élément du maillage et d'une face f contenue dans le bord de K (*i.e.* $K \in C(f)$), nous définissons un voisinage partiel $V(K, f)$ par la relation :

$$(2.13) \quad V(K, f) = \left\{ \begin{array}{l} C(g), \text{ } g \text{ face de } K, \text{ } g \neq f, \\ f \cap g \text{ est un sommet du maillage} \end{array} \right\}, f \in \partial K, K \in C(f).$$

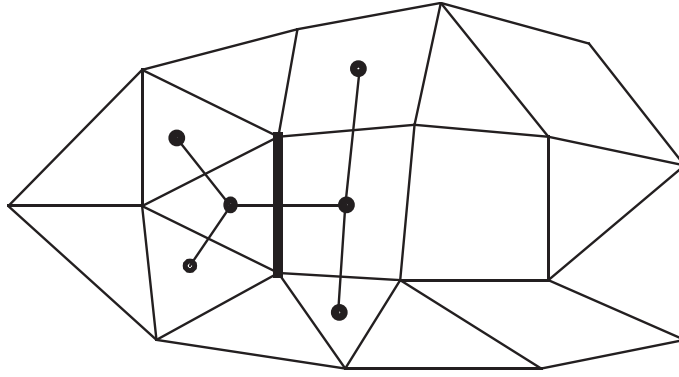


Figure 7 Maillage bidimensionnel général.

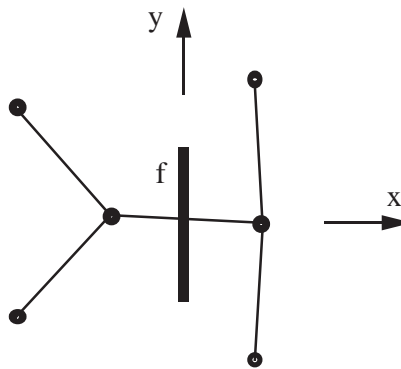


Figure 8 Face f séparant un triangle et un quadrangle ;
représentation symbolique de l'ensemble $V(f)$.

- Concrètement, pour l'interface en gras sur la figure 7 ou la figure 8, l'ensemble $V(K, f)$ est formé pour le triangle à gauche de la facette par les trois degrés de liberté à gauche de f et pour le quadrangle de droite par les trois éléments à droite de la face. Nous avons alors simplement

$$(2.14) \quad V(f) = V(K_g, f) \cup V(K_d, f), \quad \text{avec } C(f) = \{K_g, K_d\}, \quad f \in \mathcal{F}_T.$$

Nous introduisons également deux espaces fonctionnels d'interpolation $LS(K, f)$ associés au couple (élément, face) de façon à garantir l'unisolvance entre l'espace fonctionnel $LS(K, f)$ et l'ensemble de degrés de liberté $V(K, f)$. Avec les notations de la figure 8, nous proposons

$$(2.15) \quad LS(Q, f) = \{1, y, y^2\}, \quad Q \text{ quadrangle du maillage}$$

$$(2.16) \quad LS(T, f) = \{1, x, y\}, \quad T \text{ triangle du maillage.}$$

Nous ne pouvons pas définir $B(f)$ (c.f. (2.6) et (2.10)) comme étant une base de la somme algébrique de l'espace $LS(T, f)$ et de $LS(Q, f)$ (la dimension de la somme algébrique des sous-espaces est en général trop faible) et nous proposons une procédure de "mariage" de ces deux espaces de façon à garantir semi-empiriquement (!) l'unisolvance.

- **Mariage** de $LS(K_g, f)$ et de $LS(K_d, f)$.

Dans ce qui suit, K_g et K_d désignent les deux éléments qui constituent le cobord de la face f . Une base de l'espace $LS(f)$ est obtenue par mariage des bases B_g et B_d de $LS(K_g, f)$ et $LS(K_d, f)$ respectivement :

$$(2.17) \quad B(f) = B_g \mathcal{M} B_d.$$

Le produit $B_g \mathcal{M} B_d$ est obtenu par définition par regroupement successif des fonctions de B_d avec celles de B_g de la façon suivante :

$$\diamond \quad B_g^0 = B_g, \quad B_d^0 = B_d$$

\diamond Etape n^o i :

$$B_g^i = (\varphi_1, \dots, \varphi_k), \quad B_d^i = (\psi_1, \dots, \psi_m).$$

Si ψ_1 n'appartient pas à l'espace engendré par $\varphi_1, \dots, \varphi_k$, alors

$$B_g^{i+1} = (\varphi_1, \dots, \varphi_k, \psi_1), \quad B_d^{i+1} = (\psi_2, \dots, \psi_m).$$

Sinon

$$B_g^{i+1} = (\varphi_1, \dots, \varphi_k), \quad B_d^{i+1} = (x\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_m).$$

\diamond Passage à l'étape numéro $i+1$.

- On peut appliquer le programme précédent au cas du mariage de deux triangles, c'est à dire au calcul de $B(T_g, f) \mathcal{M} B(T_d, f)$. On a :

étape 0 : $B_g^0 = \{1, x, y\};$	$B_d^0 = \{1, x, y\}$
étape 1 : $B_g^1 = \{1, x, y\};$	$B_d^1 = \{x, x, y\}$
étape 2 : $B_g^2 = \{1, x, y\};$	$B_d^2 = \{x^2, x, y\}$
étape 3 : $B_g^3 = \{1, x, y, x^2\};$	$B_d^3 = \{x, y\}$
étape 4 : $B_g^4 = \{1, x, y, x^2\};$	$B_d^4 = \{x^2, y\}$
étape 5 : $B_g^5 = \{1, x, y, x^2\};$	$B_d^5 = \{x^3, y\}$
étape 6 : $B_g^6 = \{1, x, y, x^2, x^3\};$	$B_d^6 = \{y\}$
étape 7 : $B_g^7 = \{1, x, y, x^2, x^3\};$	$B_d^7 = \{xy\}$
étape 8 : $B_g^8 = \{1, x, y, x^2, x^3, xy\}.$	

On retrouve alors la relation obtenue à la relation (2.10), c'est à dire

$$(2.18) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(T_g, f) \mathcal{M} B(T_d, f) \text{ est donné par la relation (2.10),} \\ T_g \text{ et } T_d \text{ triangles.} \end{array} \right.$$

- Dans le cas de deux quadrangles, on effectue un calcul analogue :

$$\begin{array}{ll}
 \text{étape 0 : } & B_g^0 = \{1, y, y^2\}; & B_d^0 = \{1, y, y^2\} \\
 \text{étape 1 : } & B_g^1 = \{1, y, y^2\}; & B_d^1 = \{x, y, y^2\} \\
 \text{étape 2 : } & B_g^2 = \{1, y, y^2, x\}; & B_d^2 = \{y, y^2\} \\
 \text{étape 3 : } & B_g^3 = \{1, y, y^2, x\}; & B_d^3 = \{xy, y^2\} \\
 \text{étape 4 : } & B_g^4 = \{1, y, y^2, x, xy\}; & B_d^4 = \{y^2\} \\
 \text{étape 5 : } & B_g^5 = \{1, y, y^2, x, xy\}; & B_d^5 = \{xy^2\} \\
 \text{étape 6 : } & B_g^6 = \{1, y, y^2, x, xy, xy^2\}.
 \end{array}$$

On retrouve encore, par le “calcul” le résultat proposé plus haut au premier paragraphe.

$$(2.19) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(Q_g, f) \mathcal{M} B(Q_d, f) \text{ donné à la relation (2.6),} \\ Q_g \text{ et } Q_d \text{ quadrangles.} \end{array} \right.$$

- Dans le cas de la figure 7, l’élément de gauche est un triangle et celui de droite un quadrangle. Nous effectuons donc le mariage des espaces (2.16) et (2.15) respectivement. On trouve :

$$\begin{array}{ll}
 \text{étape 0 : } & B_g^0 = \{1, x, y\}; & B_d^0 = \{1, y, y^2\} \\
 \text{étape 1 : } & B_g^1 = \{1, x, y\}; & B_d^1 = \{x, y, y^2\} \\
 \text{étape 2 : } & B_g^2 = \{1, x, y\}; & B_d^2 = \{x^2, y, y^2\} \\
 \text{étape 3 : } & B_g^3 = \{1, x, y, x^2\}; & B_d^3 = \{y, y^2\} \\
 \text{étape 4 : } & B_g^4 = \{1, x, y, x^2\}; & B_d^4 = \{xy, y^2\} \\
 \text{étape 5 : } & B_g^5 = \{1, x, y, x^2, xy\}; & B_d^5 = \{y^2\} \\
 \text{étape 6 : } & B_g^6 = \{1, x, y, x^2, xy, y^2\}.
 \end{array}$$

Nous en déduisons :

$$(2.20) \quad B(f) = P_2(x, y) \quad \text{si } C(f) = (\text{quadrangle, triangle}).$$

Nous remarquons que l’on a commutativité de l’opérateur \mathcal{M} dans ce cas :

$$(2.21) \quad B(Q, f) \mathcal{M} B(T, f) = B(T, f) \mathcal{M} B(Q, f)$$

ce qui pourrait nous inciter à étudier théoriquement le produit de mariage \mathcal{M} d’un point de vue purement algébrique dans l’anneau $\mathbb{Z}[X, Y]$ des polynômes à deux indéterminées sur l’anneau des entiers. La commutativité doit sûrement être une propriété générale, puisqu’on a le développement suivant selon les puissances croissantes de x :

$$(2.22) \quad LS_1 \mathcal{M} LS_2 = LS_1 + LS_2 + x(LS_1 \cap LS_2) + \dots$$

et par ailleurs, elle ne fait qu’exprimer l’invariance du calcul du gradient dans la symétrie par rapport au plan de l’interface.

2.4) Conditions aux limites.

• Quand une interface entre deux mailles appartient à la frontière du domaine d'étude (figure 9) ou touche cette frontière en un sommet du maillage (figure 2.10), il faut reprendre avec soin la définition (2.4) afin de prendre en compte à la fois des degrés de liberté portés par les éléments du maillage (*c.f.* (1.3)) ou des degrés de liberté associés aux faces de bord (*c.f.* (1.4) ou (1.8)). Nous devons modifier la définition du cobord pour une facette paroi, ce de la façon suivante.

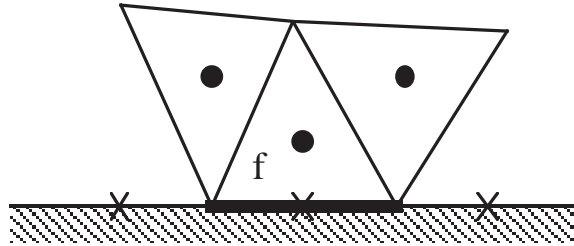


Figure 9 Face f au bord du domaine d'étude.

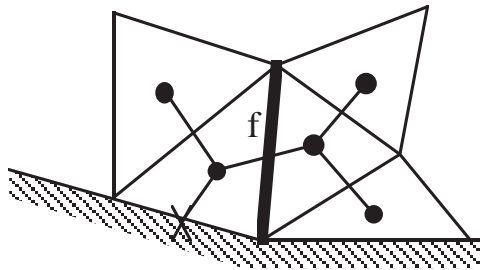


Figure 10 Face f touchant le bord du domaine d'étude.

• **Cobord d'une facette paroi**

Si la facette f du maillage est sur la frontière du domaine d'étude Ω , la relation (2.3) qui définit le cobord de f est remplacé par :

$$(2.23) \quad C(f) = \{K \text{ élément du maillage } \mathcal{T}, \partial K \supset f\} \cup \{ \text{facette } f \}.$$

Le cobord est ainsi formé de l'unique élément du maillage contenant f et de la facette f elle-même. Le voisinage $V(f)$ est encore défini comme la réunion (2.14) des voisinages partiels $V(\sigma, f)$, avec σ dans le cobord de f . La définition (2.13) de l'ensemble des degrés de liberté est inchangée si $\sigma = K$ est un élément du maillage et $C(g)$ est défini par l'une des relations (2.3) ou

(2.23) selon que la facette g est intérieure au domaine d'étude ou sur le bord. Nous obtenons ainsi un voisinage $V(f)$ parfaitement défini par la relation (2.14) lorsque la face f touche le bord, comme nous l'illustrons à la figure 2.10. Par contre, il convient de préciser ce que vaut le voisinage $V(f, f)$, c'est à dire ce que sont exactement les degrés de liberté voisins de la face f qui sont "du côté de f ". La frontière (discrète) $\partial\Omega$ du domaine d'étude est une courbe fermée ou une réunion de courbes fermées. Donc toute arête f sur le bord $\partial\Omega$ possède exactement deux arêtes voisines sur le bord du domaine qui la touchent en un sommet exactement. Nous proposons ici de définir ces deux arêtes comme "voisines" de la face f . Nous posons donc :

$$(2.24) \quad V(f, f) = \left\{ \begin{array}{l} g \text{ face de } \partial\Omega \cap \mathcal{F}_{\mathcal{T}}, f \cap g \text{ contient} \\ \text{au moins un sommet du maillage} \end{array} \right\}, \quad f \in \partial\Omega \cap \mathcal{F}_{\mathcal{T}}.$$

L'ensemble $V(f, f)$ est donc toujours formé de trois facettes du maillage (en comptant f elle-même). Nous précisons maintenant le choix des espaces de polynômes permettant d'interpoler la fonction u à l'aide des degrés de liberté de l'ensemble $V(f, f)$ lorsque f est sur le bord de Ω . Comme précédemment, nous définissons $LS(f)$ par mariage des espaces $LS(K, f)$ et $LS(f, f)$ associés au cobord de f :

$$(2.25) \quad LS(f) = LS(K, f) \otimes LS(f, f) \quad \text{avec } C(f) = \{K, f\}$$

mais si l'espace de polynômes $LS(K, f)$ a déjà été défini par l'intermédiaire de sa base $B(K, f)$ aux relations (2.15) et (2.16), il nous faut préciser ce que vaut l'espace $LS(f, f)$. Nous posons simplement :

$$(2.26) \quad B(f, f) = \{1, y, y^2\}, \quad f \in \partial\Omega \cap \mathcal{F}_{\mathcal{T}}$$

puisque, en général, la frontière est régulière donc les degrés de liberté de $V(f, f)$ différents de la face f elle-même sont situés approximativement dans la direction tangentielle à f comme le montre la figure 2.9. Dans le cas où le morceau de frontière considéré est situé dans un coin du domaine, nous pourrions remplacer la relation (2.26) par le choix fait en (2.16) mais la notion de coin nous semble très subjective sur un domaine discrétisé, qui ne contient en toute rigueur que des facettes planes séparées par des coins !

2.5) Cas d'exception.

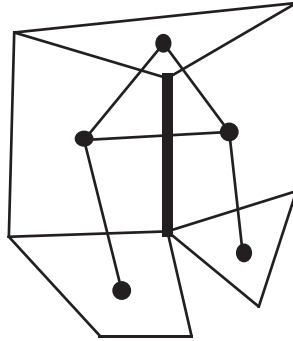


Figure 11 Voisinage d'une face comprenant seulement cinq degrés de liberté ; cas dégénéré numéro 1.

• Nous ne serions pas complet si nous ne traitions pas de façon précise les cas de figure qui peuvent mettre en défaut la construction proposée plus haut. En effet, lorsqu'on réunit deux voisinages comme proposé en (2.14), on n'obtient pas nécessairement six éléments. La figure 4 par exemple montre un cas où les deux triangles ayant en commun la face f n'engendrent que cinq éléments dans $V(f)$ et la figure 11 un cas analogue faisant intervenir deux quadrangles. Nous devons donc modifier la loi de mariage \mathcal{M} pour traiter au coup par coup ces cas de figure exceptionnels. Nous étudions ensuite le traitement de certains cas limites, en vue d'une plus grande cohérence avec les travaux antérieurs.

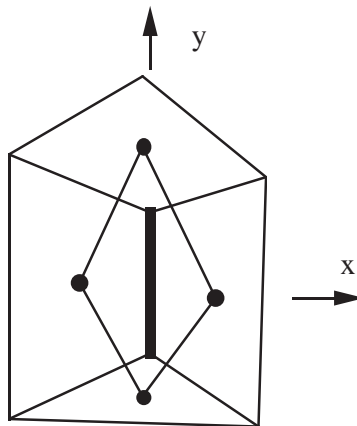


Figure 12 Voisinage d'une face comprenant seulement quatre degrés de liberté ; cas dégénéré numéro 2.

• Nous étudions d'abord le cas particulier décrit à la figure 4 ou à la figure 11. L'un des sommets constituant le bord de f n'appartient qu'à trois

éléments du maillage et deux des éléments voisins de $V(f)$ coïncident. Dans ce cas, nous décidons :

$$(2.27) \quad \begin{cases} \text{on enlève de la base } B(f) \text{ le polynôme de plus haut degré total} \\ \text{parmi les polynômes de plus haut degré partiel par rapport à } y. \end{cases}$$

Dans le cas du mariage de deux quadrangles (figure 11) on obtient ainsi dans ce cas exceptionnel numéro 1 :

$$(2.28) \quad B(f) = \{1, x, y, y^2, xy\}.$$

Dans le cas (figure 4) où deux triangles constituent le cobord de f , nous avons :

$$(2.29) \quad B(f) = \{1, x, y, x^2, x^3\}$$

et pour un mélange quadrangle-triangle, il vient très simplement :

$$(2.30) \quad B(f) = \{1, x, y, x^2, xy\}.$$

- Un second cas de figure a lieu lorsque les deux sommets constituant le bord de f appartiennent tous deux à trois éléments du maillage. Pour des raisons géométriques, il est alors clair que le cobord de f est formé de deux quadrangles mais les triangles ne sont pas *a priori* exclus de la configuration globale (figure 12). Nous ne disposons que de quatre degrés de liberté pour $V(f)$ et nous décidons d'imposer simplement

$$(2.31) \quad B(f) = \{1, x, y, xy\}$$

ce qui revient à enlever au résultat (2.28) le polynôme de plus haut degré en y .

- Nous étudions maintenant le cas d'un quadrangle tel que la face f de son bord appartient au bord du domaine d'étude Ω . Dans ce cas, comme l'illustre la figure 13, nous avons à notre disposition six degrés de liberté et l'espace d'interpolation a une base donnée grâce à la relation (2.6). Nous remarquons que le polynôme x^2 ne figure pas dans cette base, alors qu'il figure bien si un triangle touche le bord du domaine puisque $B(f)$ est alors calculé grâce à la relation (2.20) qui résulte du mariage de $\{1, x, y\}$ avec $\{1, y, y^2\}$. Nous insistons sur l'importance de ce terme pour traiter correctement les gradients normaux à la paroi à l'Annexe B. Nous nous forçons donc, pour assurer la consistance du schéma dans le cas d'un maillage régulier, à introduire la fonction x^2 dans la base $B(f)$. On se contente d'adjoindre cette fonction à la définition (2.6), c'est à dire on choisit

$$(2.32) \quad B(f) = \{1, x, y, xy, y^2, xy^2, x^2\}$$

qui comporte maintenant sept fonctions de base et on ajoute un degré de liberté à $V(K, f)$ donc nous prenons

$$(2.33) \quad V(K, f) = \{C(g), \quad g \text{ face de } \partial K, \quad g \neq f\}.$$

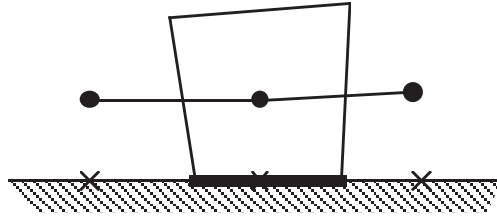


Figure 13 Quadrangle frontière. Cas général.

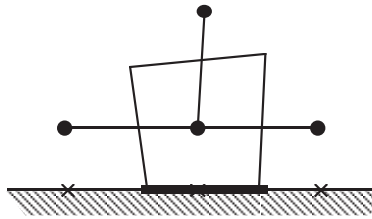


Figure 14 Quadrangle frontière. Cas modifié.

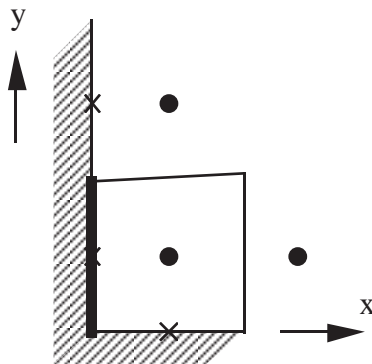


Figure 15 Facette frontière bordant un quadrangle Q au coin du domaine de calcul.

- Nous terminons l'étude des cas d'exception par celle des coins du maillage. Dans ce cas, certains degrés de liberté de la figure 14 coïncident et il faut modifier la relation (2.10) (triangles) ou (2.31) (quadrangles) en conséquence. Dans le cas où la face f contient un quadrangle Q dans son cobord et est située au coin du domaine de calcul (voir par exemple la figure 15). Il est naturel d'enlever à la base (2.31) le monôme xy^2 , ce qui revient à enlever le polynôme de plus haut degré par rapport à y :

$$(2.34) \quad B(f) = \{1, x, y, xy, y^2, x^2\}, \quad \begin{cases} f \text{ face de } \partial\Omega \text{ dans un coin,} \\ C(f) \text{ contient un quadrangle } Q. \end{cases}$$

Dans le cas où la face f dans le coin du domaine d'étude a un cobord qui contient un triangle T (voir la figure 16), on modifie la base (2.10) en enlevant le monôme de plus haut degré partiel par rapport à y . Il vient

$$(2.35) \quad B(f) = \{1, x, y, xy, x^2\}, \quad \begin{cases} f \text{ face de } \partial\Omega \text{ dans un coin,} \\ C(f) \text{ contient un triangle } T. \end{cases}$$

Ces deux cas particuliers permettent de préciser l'essentiel des cas de figure que l'on peut rencontrer en pratique, donc de conclure l'étude pour le cas bidimensionnel.

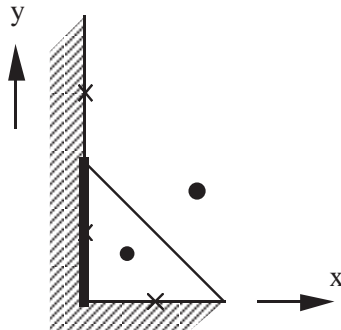


Figure 16 Facette frontière bordant un triangle T au coin du domaine de calcul.

3) Le cas tridimensionnel.

- Nous supposons le domaine d'étude Ω de \mathbb{R}^3 maillé en respectant la contrainte classique des éléments finis : les éléments (ou volumes de contrôle) recouvrent Ω et l'intersection de deux éléments K et L du maillage \mathcal{T} ($K \in \mathcal{E}_{\mathcal{T}}, L \in \mathcal{E}_{\mathcal{T}}$) soit est vide, soit est un sommet de K et L , (c'est à dire appartient à $\mathcal{S}_{\mathcal{T}}$), soit est une arête de K et L , (donc appartient à l'ensemble $\mathcal{A}_{\mathcal{T}}$ des arêtes du maillage), soit est une face de K et de L , (*i.e.* appartient à l'ensemble $\mathcal{F}_{\mathcal{T}}$), soit K est égal à L . Nous supposons que les éléments ont l'une des quatre formes suivantes : hexaèdre, pyramide, prisme ou tétraèdre. Nous cherchons, pour chaque face f du maillage, à déterminer son voisinage $V(f)$ formé des degrés de liberté voisins de la face ainsi que l'espace $LS(f)$ d'interpolation qui lui est associé, dont une base est systématiquement notée $B(f)$. Nous procédons par étapes successives.

- Nous précisons d'abord le choix d'un voisinage partiel $V(K, f)$ pour K élément du cobord $C(f)$ de la face f (ce qui signifie que f est l'une des faces du bord ∂K de l'élément K) puis nous proposons une définition de $V(f, f)$

lorsque f est sur la frontière du domaine Ω . Deux cas sont envisagés, selon que la face étudiée est quadrangulaire ou triangulaire. Nous “calculons” ensuite l’espace d’approximation $LS(K, f)$ (et $LS(f, f)$ si la face f est sur la frontière) qui permet d’effectuer une interpolation de Lagrange de façon à assurer au mieux l’unisolvance entre les degrés de liberté σ de $V(f)$ et l’espace de polynomes $LS(K, f)$ ou $LS(f, f)$. Enfin, nous “marions” les espaces $LS(\sigma, f)$ pour les deux degrés de liberté σ appartenant au cobord de f , à l’aide d’une extension de l’algorithme exposé dans la seconde partie de ce mémoire, en précisant le résultat obtenu pour la plupart des cas rencontrés en pratique. Nous étudions enfin quelques cas de figure qui se présentent en pratique à la frontière du domaine Ω et proposons des solutions appropriées.

3.1) Choix des degrés de liberté voisins.

• Soit $f \in \mathcal{F}_{\mathcal{T}}$ une face du maillage \mathcal{T} supposé fixé dans la suite. Nous rappelons d’abord la définition du cobord $C(f)$ de cette face

$$(3.1) \quad C(f) = \begin{cases} \{K \text{ élément de } \mathcal{T}, f \subset \partial K\} & \text{si } f \not\subset \partial\Omega \\ \{K \text{ élément de } \mathcal{T}, f \subset \partial K\} \cup \{f\} & \text{si } f \subset \partial\Omega. \end{cases}$$

Il est toujours constitué de deux objets, soit deux éléments du maillage si f n’est pas sur le bord du domaine et soit la face f elle même jointe à l’élément du maillage qui la contient dans son bord si f appartient au bord de Ω . L’ensemble des degrés de liberté voisins est défini comme suit.

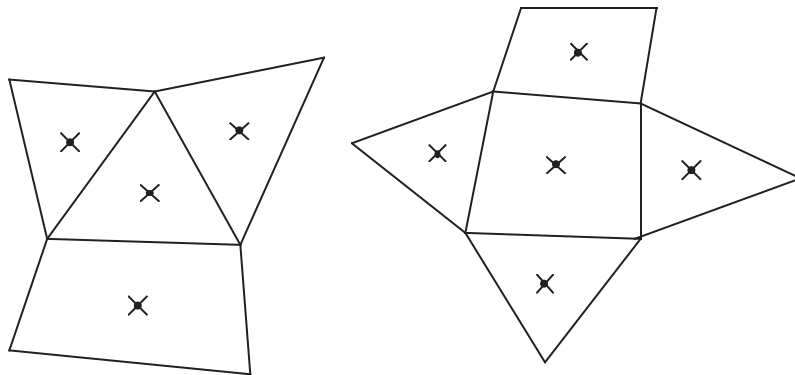


Figure 17 Voisinage $V(f, f)$ d’une facette f située sur le bord du domaine Ω ; il n’est constitué que par des facettes du bord.

• Si f est une face sur le bord du domaine, on pose

$$(3.2) \quad V(f, f) = \left\{ \begin{array}{l} g, \text{ face du maillage sur le bord } \partial\Omega, \\ g \cap f \text{ est une arête du maillage} \end{array} \right\}.$$

Comme $\partial\Omega$ est nécessairement une surface fermée (c'est un bord !), $V(f, f)$ contient exactement quatre facettes si f est un triangle et cinq si f est un quadrangle (c.f. figure 17).

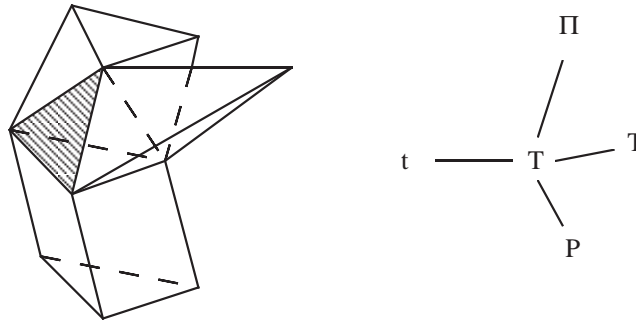


Figure 18 Voisinage $V(K, f)$ d'une face triangulaire sur le bord d'un tétraèdre.

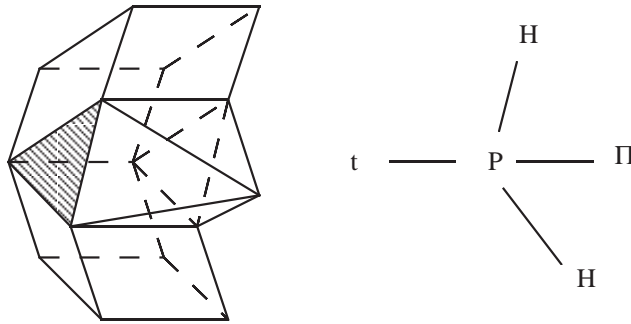


Figure 19 Face triangulaire sur le bord d'un prisme.

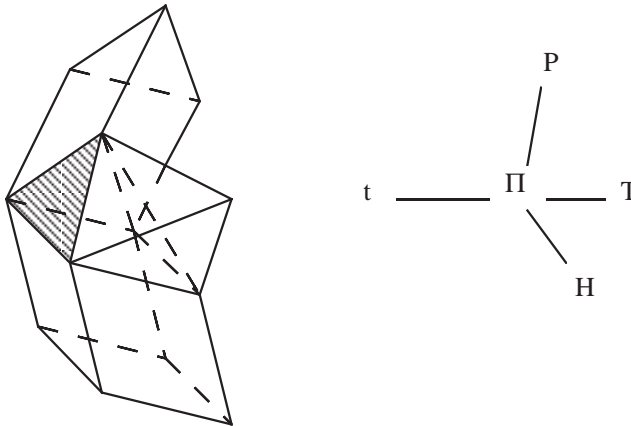


Figure 20 Face triangulaire sur le bord d'une pyramide.

- Si f est une face quelconque du domaine et K un élément de son cobord, on pose

$$(3.3) \quad V(K, f) = \left\{ \begin{array}{l} C(g), \quad g \text{ face du maillage incluse dans } \partial\Omega, \\ g \neq f, \quad g \cap f \text{ est une arête du maillage} \end{array} \right\}.$$

Si la face f contient m arêtes ($m = 3$ pour un triangle et $m = 4$ pour un quadrangle !), il est clair que m facettes g du maillage sont à prendre en compte dans la définition (3.3), donc $(m + 1)$ degrés de liberté distincts sont définis par la relation (3.3) (il ne faut pas oublier l'élément K lui-même !). Nous illustrons aux figures 18 à 23 ce voisinage pour différents cas de figure, en notant de façon abrégée t pour un triangle, q pour un quadrangle, T pour un tétraèdre, P pour un prisme, Π pour une pyramide et H pour un hexaèdre.

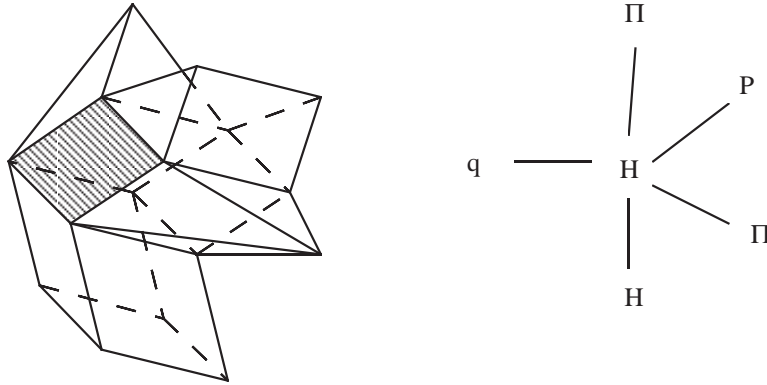


Figure 21 Face quadrangulaire sur le bord d'un hexaèdre.

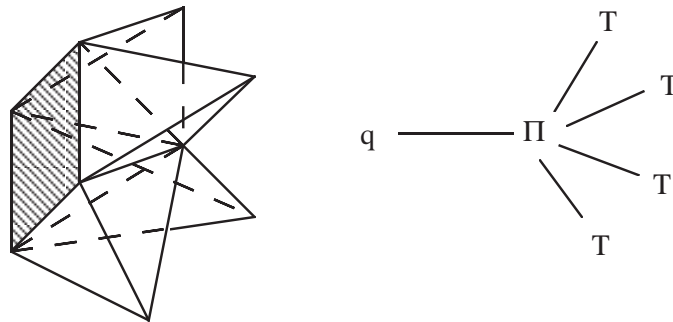


Figure 22 Face quadrangulaire sur le bord d'une pyramide.

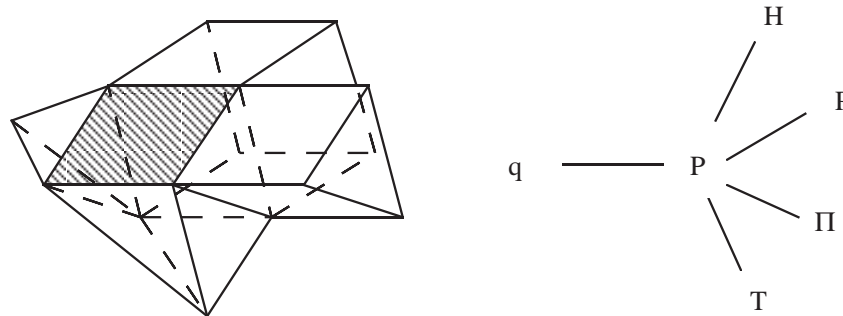


Figure 23 Face quadrangulaire sur le bord d'un prisme.

- Si la face f est une facette triangulaire du maillage à l'intérieur du domaine ou sur le bord, $V(\sigma, f)$ est toujours formé, pour σ dans le cobord de f , de quatre degrés de liberté. Si f est une face quadrangulaire, $V(\sigma, f)$ contient, pour σ appartenant à $C(f)$, exactement cinq degrés de liberté. La réunion $V(f)$ des ensembles $V(\sigma, f)$ pour σ parcourant le cobord de f est donc formée d'au plus huit degrés de liberté dans le cas d'une face triangulaire et dix pour une face quadrangulaire. Nous remarquons que dans le cas d'un maillage quadrangulaire structuré, $V(f)$ contient effectivement dix voisins distincts.

3.2) Espaces d'interpolation.

- Nous commençons par le cas où f est un triangle. Nous notons x la direction normale à la face, supposons l'origine O placée au centre de f et notons y, z des axes tangents à la face de sorte que le repère $Oxyz$ soit orthonormé direct. Lorsque f est au bord du domaine, le cas le plus courant est celui où $\partial\Omega$ est "proche" d'une section plane. La figure 17 est donc à prendre "quasiment" dans le plan de la feuille de papier, et les quatre degrés de liberté de $V(f, f)$ permettent d'interpoler "naturellement" les quatre fonctions de base suivantes :

$$(3.4) \quad B(t, t) = \{ 1, y, z, y^2 + z^2 \}, \quad t \text{ triangle sur la frontière.}$$

Nous supposons maintenant connu un élément K du maillage dans le cobord de f . Cet élément peut être un tétraèdre T , un prisme P , une pyramide Π , mais jamais un hexaèdre H . Pour chacun de ces trois cas, la géométrie des éléments considérés et les directions particulières associées aux cas de maillages cartésiens coupés en sous-éléments nous conduisent aux choix suivants, illustrés aux figures 24 à 26.

$$(3.5) \quad B(T, t) = \{ 1, x, y, z \}, \quad T \text{ tétraèdre}, \quad t \text{ triangle}$$

$$(3.6) \quad B(P, t) = \{ 1, y, z, y^2 + z^2 \}, \quad P \text{ prisme}, \quad t \text{ triangle}$$

$$(3.7) \quad B(\Pi, t) = \{ 1, x, y, z \}, \quad \Pi \text{ pyramide}, \quad t \text{ triangle.}$$

Nous constatons que le choix des axes y, z dans le plan de la facette ne joue pas dans les définitions (3.4) à (3.7) des espaces $LS(\sigma, t)$ qui sont invariants par une rotation d'axe Ox .

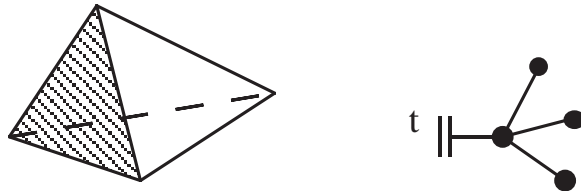


Figure 24 Face triangulaire appartenant au bord d'un tétraèdre.

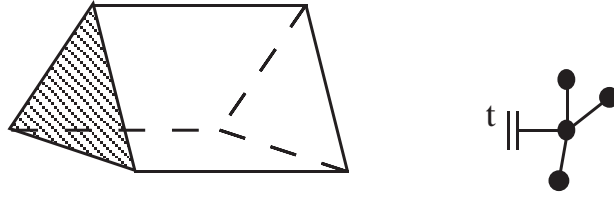


Figure 25 Face triangulaire appartenant au bord d'un prisme.

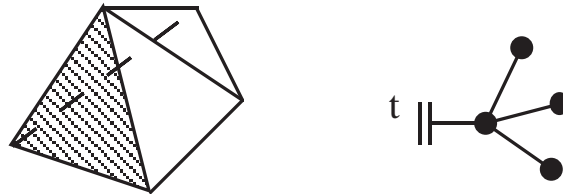


Figure 26 Face triangulaire appartenant au bord d'une pyramide.

• Lorsque la face f est un quadrangle q , avec un choix analogue au précédent en ce qui concerne l'axe Ox , nous fixons une direction y en joignant deux faces opposées de q et nous complétons par un axe Oz de façon que $Oxyz$ soit orthonormé direct. Le choix ci-dessus n'est pas intrinsèque, ce qui constitue à nos yeux un défaut. Lorsque q est au bord du domaine, nous supposons comme pour le cas triangulaire que $\partial\Omega$ est relativement plane, ce qui conduit à un choix naturel pour $B(q, q)$:

$$(3.8) \quad B(q, q) = \{1, y, z, y^2, z^2\}, \quad q \text{ quadrangle sur le bord de } \Omega.$$

Si K désigne un élément du cobord du quadrangle q (K peut être un prisme, une pyramide ou un hexaèdre mais jamais un tétraèdre !), une base $B(K, q)$ est alors donnée "naturellement" en suivant les figures 27 à 29. Nous obtenons :

$$(3.9) \quad B(P, q) = \{1, x, y, z, y^2\}, \quad P \text{ prisme}, \quad q \text{ quadrangle}$$

où y est la direction "quasi" normale aux deux triangles composant le prisme P (figure 3.11),

$$(3.10) \quad B(\Pi, q) = \{1, x, y, z, y^2 + z^2\}, \quad \Pi \text{ pyramide}, \quad q \text{ quadrangle}$$

$$(3.11) \quad B(H, q) = \{1, y, z, y^2, z^2\}, \quad H \text{ hexaèdre}, \quad q \text{ quadrangle.}$$

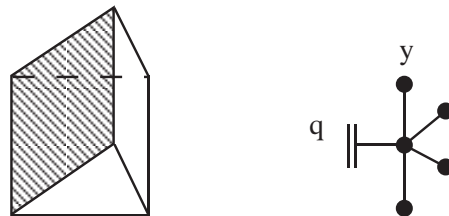


Figure 27 Face quadrangulaire appartenant au bord d'un prisme.

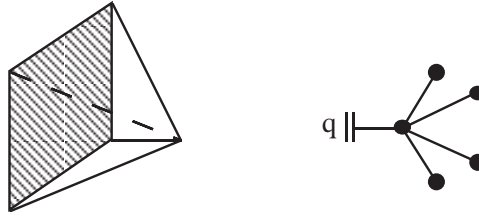


Figure 28 Face quadrangulaire appartenant au bord d'une pyramide.

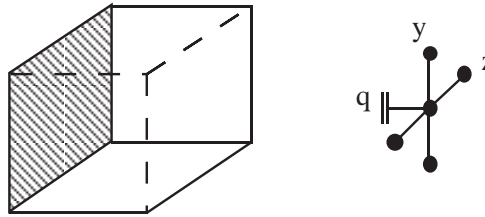


Figure 29 Face quadrangulaire appartenant au bord d'un hexaèdre.

3.3) Mariage des espaces d'interpolation.

• Dans ce paragraphe, nous supposons que le voisinage $V(f)$ obtenu grâce à la réunion ensembliste suivante

$$(3.12) \quad V(f) = V(\sigma_1, f) \cup V(\sigma_2, f), \quad C(f) = \{\sigma_1, \sigma_2\}$$

comporte exactement $\text{Card} V(\sigma_1, f) + \text{Card} V(\sigma_2, f)$ degrés de liberté distincts. Dans ce cas, nous posons

$$(3.13) \quad B(f) = B(\sigma_1, f) \mathcal{M} B(\sigma_2, f).$$

Comme dans le cas bidimensionnel, le produit $B_g \mathcal{M} B_d$ s'obtient par regroupement successif des fonctions de B_d avec celles de B_g grâce à l'algorithme suivant

◊ $B_g^0 = B_g, \quad B_d^0 = B_d$

◊ Etape n° i :

$$B_g^i = (\varphi_1, \dots, \varphi_k), \quad B_d^i = (\psi_1, \dots, \psi_m).$$

Si ψ_1 n'appartient pas à l'espace engendré par $\varphi_1, \dots, \varphi_k$, alors

$$B_g^{i+1} = (\varphi_1, \dots, \varphi_k, \psi_1), \quad B_d^{i+1} = (\psi_2, \dots, \psi_m).$$

Sinon

$$B_g^{i+1} = (\varphi_1, \dots, \varphi_k), \quad B_d^{i+1} = (x\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_m).$$

◊ Passage à l'étape numéro $i+1$.

• Lorsqu'on applique l'algorithme ci-dessus au cas où f est un quadrangle q séparant deux hexaèdres, on trouve :

$$(3.14) \quad B(H_g, q) \mathcal{M} B(H_d, q) = \{1, x, y, z, y^2, z^2, xy, xz, xy^2, xz^2\}$$

ce qui permet, dans le cas où les quadrangles forment un maillage aux différences finies, de retrouver pour le calcul de $\nabla u(f)$ le schéma aux différences bien classiques. Dans les autres cas envisagés plus haut, on obtient :

$$(3.15) \quad B(H_g, q) \mathcal{M} B(P_d, q) = \{1, x, y, z, x^2, y^2, z^2, xy, xz, xy^2\}$$

$$(3.16) \quad B(H_g, q) \mathcal{M} B(\Pi_d, q) = \left\{ \begin{array}{l} 1, x, y, z, \\ x^2, y^2, z^2, xy, xz, x(y^2 + z^2) \end{array} \right\}.$$

Lorsque le quadrangle q appartient à un autre type d'élément qu'un hexaèdre, on trouve :

$$(3.17) \quad B(P_g, q) \mathcal{M} B(P_d, q) = \{1, x, y, z, x^2, y^2, xy, xz, x^3, xy^2\}$$

$$(3.18) \quad B(P_g, q) \mathcal{M} B(\Pi_d, q) = \{1, x, y, z, x^2, y^2, xy, xz, x^3, x(y^2+z^2)\}$$

$$(3.19) \quad B(\Pi_g, q) \mathcal{M} B(\Pi_d, q) = \left\{ \begin{array}{l} 1, x, y, z, x^2, xy, \\ xz, y^2 + z^2, x^3, x(y^2 + z^2) \end{array} \right\}.$$

Lorsque f est un triangle t , on peut encore appliquer l'algorithme de mariage entre deux sous-espaces. On trouve ainsi :

$$(3.20) \quad B(T_g, t) \mathcal{M} B(T_d, t) = \{1, x, y, z, x^2, xy, xz, x^3\}$$

$$(3.21) \quad B(T_g, t) \mathcal{M} B(P_d, t) = \{1, x, y, z, x^2, xy, xz, y^2+z^2\}$$

$$(3.22) \quad B(T_g, t) \mathcal{M} B(\Pi_d, t) = \left\{ \begin{array}{l} B(T_g, t) \mathcal{M} B(T_d, t) \\ = \{1, x, y, z, x^2, xy, xz, x^3\} \end{array} \right\}$$

$$(3.23) \quad B(P_g, t) \mathcal{M} B(P_d, t) = \{1, x, y, z, y^2+z^2, xy, xz, x(y^2+z^2)\}$$

$$(3.24) \quad B(P_g, t) \mathcal{M} B(\Pi_d, t) = \{1, x, y, z, x^2, xy, xz, y^2+z^2\}$$

$$(3.25) \quad B(\Pi_g, t) \mathcal{M} B(\Pi_d, t) = \left\{ \begin{array}{l} B(T_g, t) \mathcal{M} B(\Pi_d, t) \\ = \{1, x, y, z, x^2, xy, xz, x^3\} \end{array} \right\}$$

ce qui achève de décrire tous les cas de figure possibles.

3.4) Conditions aux limites.

• Nous étudions dans cette partie l'adaptation des idées développées dans les précédents paragraphes et précisons les choix des voisinages $V(f)$ et des bases $B(f)$ lorsque f est une face au bord du domaine Ω . Nous devons enrichir le voisinage $V(f)$ lorsque la fonction x^2 (rappelons que l'axe Ox est toujours dirigé selon la normale à la facette f) n'est pas présente initialement, c'est à dire est absente de l'une des relations (3.13) à (3.25). De plus, nous devons réduire le voisinage $V(f)$ ainsi calculé lorsque la géométrie dégénère (arêtes vives, coins, etc...), c'est à dire lorsque la réunion (3.12) est non triviale, *i.e.*

comporte strictement moins de degrés de liberté que la somme des degrés de liberté pour les deux objets du cobord $C(f)$.

- Nous commençons (paragraphe 3.4.1) par décrire complètement le cas d'une face frontière "courante" puis, dans les cas où il y a dégénérescence du voisinage $V(f)$, c'est à dire pour les arêtes et les coins du maillage (paragraphe 3.4.2), nous étudions le cas des faces quadrangulaires touchant un hexaèdre, un prisme ou une pyramide (paragraphe 3.4.2.a) puis celui des faces triangulaires touchant un tétraèdre, un prisme ou une pyramide (paragraphe 3.4.2.b).

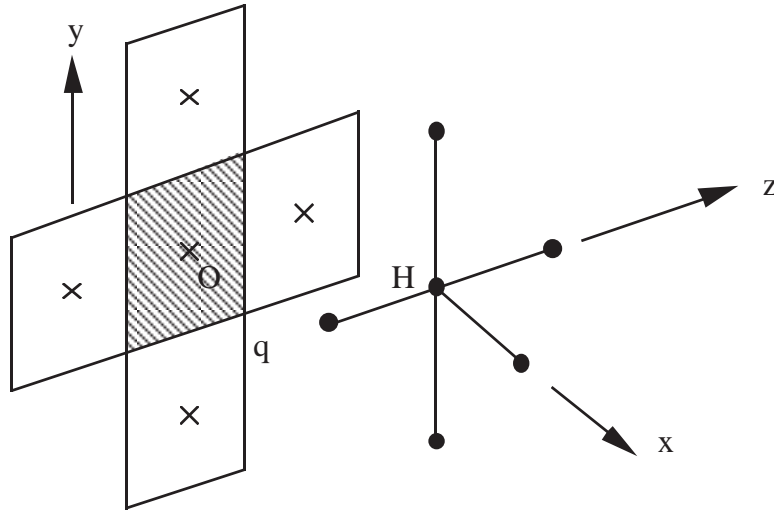


Figure 30 Onze degrés de liberté d'une face quadrangulaire q appartenant au bord du domaine Ω et touchant un hexaèdre H .

3.4.1 Facettes au bord du domaine : cas général

- Nous commençons ce paragraphe par le cas d'un quadrangle q au bord du domaine et contenant un hexaèdre H dans son cobord. Cette situation est *a priori* décrite à la figure 30. Dans ce cas, le mariage $B(q, q) \mathcal{M} B(H, q)$ est décrit par la relation (3.14), donc ne contient pas le polynome x^2 . Nous modifions donc le voisinage $V(H, q)$ initialement donné par la relation (3.3) et posons :

$$(3.26) \quad \begin{cases} V(H, q) = \{ C(g), & g \text{ face du maillage}, & g \subset \partial K, & g \neq f \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, & H \text{ hexaèdre appartenant à } C(q). \end{cases}$$

Le voisinage ainsi obtenu (figure 30) comporte six degrés de liberté au lieu de cinq, ce qui permet de remplacer la base (3.11) par la base suivante :

$$(3.27) \quad \begin{cases} B(H, q) = \{ 1, x, y, z, y^2, z^2 \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, & H \text{ hexaèdre appartenant à } C(q). \end{cases}$$

Le mariage de $B(q, q)$ (relation (3.8)) avec $B(H, q)$ (relation (3.27)) s'écrit simplement ; nous obtenons finalement une base $B(q)$ suivante :

$$(3.28) \quad \begin{cases} B(q) = \{ 1, x, y, z, x^2, xy, yz, y^2, z^2, xy^2, xz^2 \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, H \text{ hexaèdre appartenant à } C(q). \end{cases}$$

On constate que la base (3.28) comporte onze fonctions de base, qui correspondent respectivement aux cinq des degrés de liberté frontière $V(q, q)$ ajoutés aux six que nous venons de définir à la relation (3.26).

- Lorsque le quadrangle q du bord du domaine contient un prisme ou une pyramide, la base associée (*c.f.* les relations (3.5) et (3.7)) contient effectivement le monôme x et il n'y a pas lieu de changer la définition 3.3 du voisinage $V(P, q)$ ou $V(\Pi, q)$ dans ce cas, ni la base $B(q)$ calculée par l'une des relations (3.15) ou (3.16).

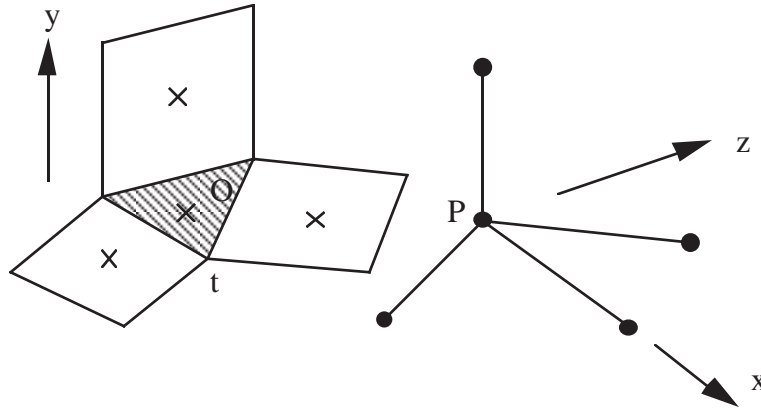


Figure 31 Neuf degrés de liberté d'une face triangulaire t appartenant au bord du domaine Ω et touchant un prisme P .

- Dans le cas où un triangle t est au bord du domaine, nous explicitons simplement la base $B(t)$ issue du mariage (3.13) de la famille (3.4) avec un tétraèdre T , une pyramide Π ou un prisme P . Nous avons :

$$(3.29) \quad B(t, t) \otimes B(T, t) = \{ 1, x, y, z, x^2, xy, xz, y^2+z^2 \}$$

$$(3.30) \quad B(t, t) \otimes B(\Pi, t) = \{ 1, x, y, z, x^2, xy, xz, y^2+z^2 \}$$

$$(3.31) \quad B(t, t) \otimes B(P, t) = \{ 1, x, y, z, xy, xz, y^2+z^2, x(y^2+z^2) \}.$$

Nous remarquons que dans le cas du tétraèdre ou de la pyramide il n'y a rien à faire puisque la fonction de base x^2 est présente dans le membre de droite des relations (3.29) et (3.30). Par contre, le cas d'un prisme touchant la frontière par une face triangulaire ne permet pas d'interpoler des polynômes du second degré

en x (voir par exemple la figure 19). Nous remplaçons dans ce cas la définition classique 3.3 par un analogue de la relation (3.26), c'est à dire :

$$(3.32) \quad \begin{cases} B(P, t) = \{ C(g), & g \text{ face du maillage}, & g \subset \partial K, & g \neq f \} \\ t \text{ triangle du bord } \partial\Omega, & P \text{ prisme appartenant à } C(t). \end{cases}$$

On passe donc d'un voisinage comportant quatre degrés de liberté à un voisinage (3.32) en comportant cinq. Nous remplaçons donc la base $B(P, t)$ de la relation (3.6) par

$$(3.33) \quad \begin{cases} B(P, t) = \{ 1, x, y, z, y^2+z^2 \} \\ t \text{ triangle du bord } \partial\Omega, & P \text{ prisme appartenant à } C(t). \end{cases}$$

Le mariage (3.31) comporte *in fine* neuf degrés de liberté au lieu de huit et la famille $V(t)$ correspondante est illustrée à la figure 31.

$$(3.34) \quad \begin{cases} B(t) = \{ 1, x, y, z, x^2, xy, xz, y^2+z^2, x(y^2+z^2) \} \\ t \text{ triangle du bord } \partial\Omega, & P \text{ prisme appartenant à } C(t). \end{cases}$$

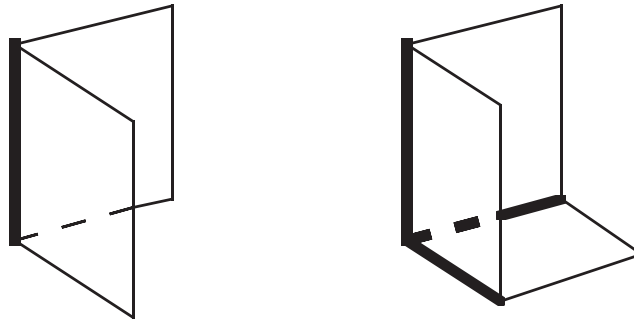


Figure 32 Arête vive (coin bidimensionnel) et coin tridimensionnel.

3.4.2 Facettes au bord du domaine : arêtes vives et coins

• Nous abordons maintenant une succession de cas particuliers qui se produisent à la frontière du domaine de calcul, et plus particulièrement le long d'arêtes vives (coins bidimensionnels) et de coins (tridimensionnels) du maillage, le cas d'un morceau de frontière "plane" ayant été traité plus haut. Une arête du maillage (qui par définition joint deux sommets) est une "arête vive" ou un "coin bidimensionnel" si elle n'appartient qu'à deux faces du maillage. Un coin tridimensionnel est un sommet du maillage qui n'appartient qu'à des arêtes vives (figure 32). Nous envisageons successivement le cas d'une face quadrangulaire puis celui d'une face triangulaire.

3.4.2.a Face quadrangulaire

• Nous étudions une facette q quadrangulaire dont une arête a est une arête vive du maillage. Nous séparons l'étude en trois sous-cas, selon que q appartient à un hexèdre, un prisme ou une pyramide.

• **Face quadrangulaire à la frontière d'un hexaèdre.**

Nous rappelons que l'axe des x est normal à la facette q , et décidons d'aligner l'axe des y avec la direction de l'arête vive a . L'axe Oz se déduit par orthogonalité. Nous avons donc dix degrés de liberté (figure 33) et disposons de onze fonctions de base décrites à la relation (3.28). En imaginant le maillage cartésien, nous disposons de six degrés de liberté dans le plan xOz (voir la figure 33) et de sept fonctions de base, à savoir $\{1, x, z, x^2, z^2, xz, xz^2\}$. Il est clair que la fonction xz^2 n'est pas naturellement représentée par interpolation de Lagrange et nous l'éliminons. Nous avons donc finalement :

$$(3.35) \quad \begin{cases} B(q) = \{1, x, y, z, x^2, xy, xz, y^2, z^2, xy^2\} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, H \text{ hexaèdre appartenant à } C(t), \\ q \text{ contenant une arête vive } a \text{ parallèle à l'axe } y. \end{cases}$$

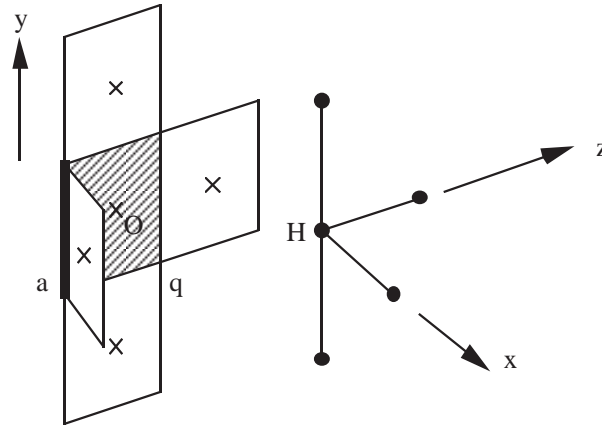


Figure 33 Facette frontière q appartenant à un hexaèdre H et contenant une arête vive a .

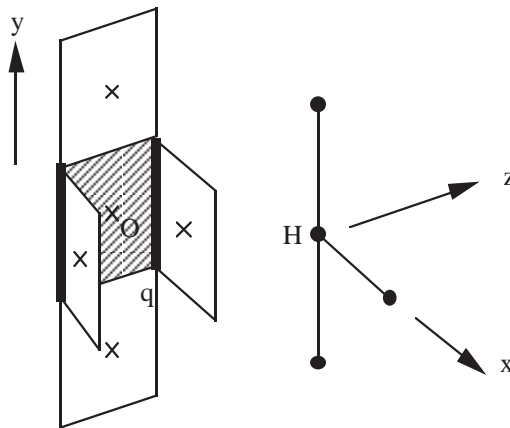


Figure 34 Facette frontière q appartenant à un hexaèdre H et contenant deux arêtes vives sans point d'intersection.

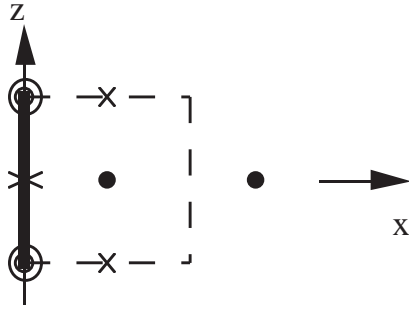


Figure 35 Projection dans le plan xOz de la figure 3.18.

• Nous poursuivons en supposant que la facette q contient deux arêtes vives a_1 et a_2 . Nous commençons par le cas où ces deux arêtes sont “quasi-parallèles”, c’est à dire n’ont pas de sommet commun (figure 34). Ce cas se produit par exemple si l’on utilise le code de calcul tridimensionnel dans une configuration bidimensionnelle avec une seule couche de mailles. Nous disposons de neuf degrés de liberté et de dix fonctions de base issues de la phase précédente (relation (3.35)). Par projection de la figure 34 dans le plan xOz , nous avons cinq degrés de liberté décrits à la figure 35 qui nous conduisent à ne retenir que les fonctions de base $\{1, x, x^2, z, z^2\}$. Nous éliminons donc la fonction xz de la base (3.35), ce qui conduit au choix suivant :

$$(3.36) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(q) = \{1, x, y, z, x^2, xy, y^2, z^2, xy^2\} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, H \text{ hexaèdre appartenant à } C(t), \\ q \text{ contenant deux arêtes vives sans point d'intersection.} \end{array} \right.$$

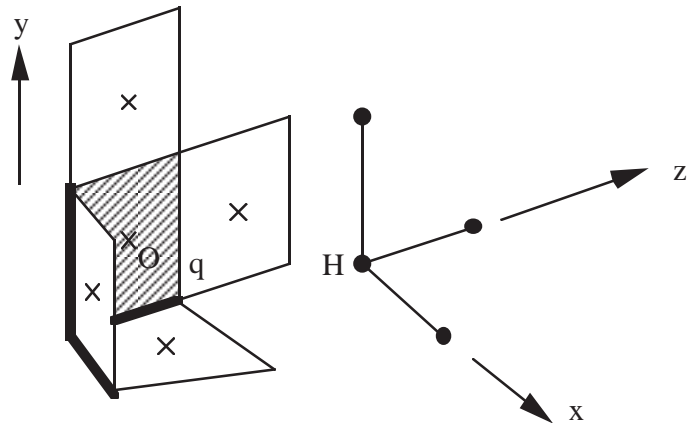


Figure 36 Coin tridimensionnel : facette frontière q appartenant à un hexaèdre H et contenant deux arêtes vives ayant un point d’intersection.

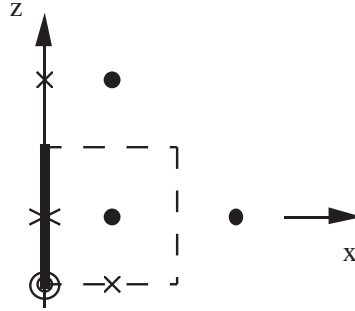


Figure 37 Projection dans le plan xOz de la figure 36.

- Le second cas du même type (neuf degrés de liberté disponibles seulement) est décrit à la figure 36. La facette q est dans un coin du domaine et partant de la relation (3.35), on n'a plus que deux séries de trois degrés de liberté dans la direction y . En effet, en projection dans le plan xOy , on ne dispose que de six degrés de liberté (*c.f.* figure 37), au lieu de sept dans la configuration précédente. Par contre, une interpolation du champ xz est clairement possible, comme le montre la figure 37. Nous choisissons donc comme base $B(q)$ la famille suivante :

$$(3.37) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(q) = \{ 1, x, y, z, x^2, xy, xz, y^2, z^2 \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, H \text{ hexaèdre appartenant à } C(q), \\ q \text{ contenant deux arêtes vives ayant un point d'intersection.} \end{array} \right.$$

- Nous envisageons maintenant le cas où trois arêtes vives appartiennent à la face quadrangulaire q . Géométriquement (voir la figure 38), il s'agit par exemple d'un coin bidimensionnel traité par un maillage tridimensionnel avec une seule couche d'éléments dans la troisième direction. Nous choisissons l'axe Oy dans la direction des deux arêtes vives parallèles pour cette configuration. Nous ne disposons que de huit degrés de liberté et la base $B(q)$ est clairement l'intersection des bases proposées aux relations (3.36) et (3.37), *i.e.*

$$(3.38) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(q) = \{ 1, x, y, z, x^2, xy, xz, y^2, z^2 \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, H \text{ hexaèdre appartenant à } C(q), \\ q \text{ contient trois arêtes vives, l'arête "non vive" est parallèle à } Oz. \end{array} \right.$$

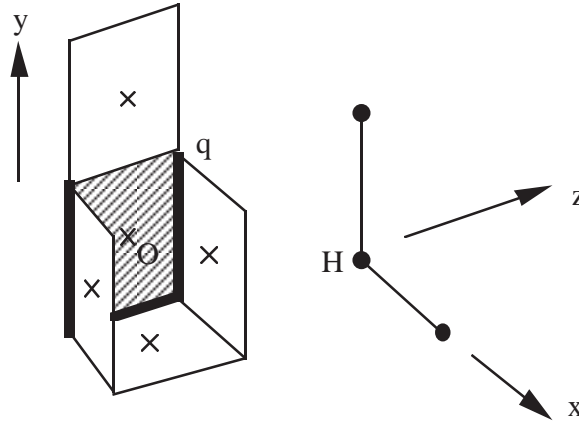


Figure 38 Double coin tridimensionnel : facette frontière q appartenant à un hexaèdre H et contenant trois arêtes vives.

- Le dernier cas, extrême, mais que nous traitons pour être complet, est celui d'une facette quadrangulaire q , contenant l'hexaèdre H dans son cobord, et contenant quatre (!) arêtes vives. Il s'agit d'un quadruple coin tridimensionnel, qui n'a de sens que si l'hexaèdre H modélise une tuyauterie pour laquelle des informations grossières sont utiles (figure 39). Nous disposons de sept degrés de liberté seulement, et la base $B(q)$ finale est très simple :

$$(3.39) \quad \begin{cases} B(q) = \{ 1, x, y, z, x^2, y^2, z^2 \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, \quad H \text{ hexaèdre appartenant à } C(q), \\ q \text{ contient quatre arêtes vives.} \end{cases}$$

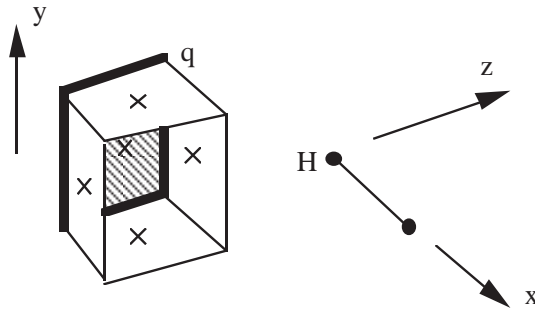


Figure 39 Quadruple coin tridimensionnel : facette frontière q appartenant à un hexaèdre H et contenant quatre arêtes vives.

- **Face quadrangulaire à la frontière d'un prisme.**

Nous supposons toujours que la facette frontière q est un quadrangle, mais que l'élément qui la contient est un prisme. Dans le cas où q contient une seule arête vive a , deux cas de figure se produisent, selon que celle-ci appartient

également à une autre face quadrangulaire ou à l'une des deux faces triangulaires. Nous envisageons d'abord le cas d'une arête vive a appartenant à deux faces quadrangulaires (*c.f.* figure 40).

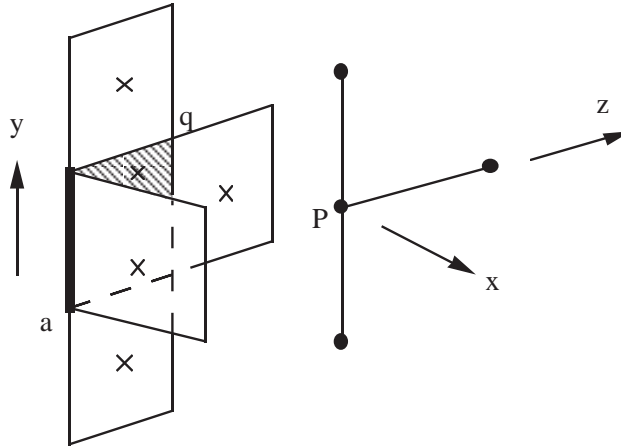


Figure 40 Facette frontière q appartenant à un prisme P , contenant une arête vive appartenant à deux faces quadrangulaires.

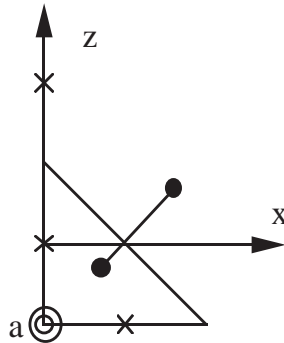


Figure 41 Projection des degrés de liberté de la figure précédente dans le plan xOz .

• Nous disposons de neuf degrés de liberté au lieu de dix dans le cas courant décrit à la relation (3.15). Par projection dans le plan xOz (figure 41), il apparait clairement que nous ne disposons plus que de cinq degrés de liberté alors que six fonctions de base de (3.15) sont de degré zéro par rapport à y , à savoir $\{1, x, z, z^2, xz, x^2\}$. Il est nécessaire d'éliminer la fonction z^2 si l'on veut conserver x^2 dans la direction normale à la facette q . Nous proposons donc la base suivante pour ce cas particulier

$$(3.40) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(q) = \{1, x, y, z, x^2, y^2, xy, xy^2, xz\} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, \quad H \text{ prisme appartenant à } C(q), \\ q \text{ contenant une arête vive qui appartient} \\ \quad \quad \quad \text{à deux quadrangles de la frontière.} \end{array} \right.$$

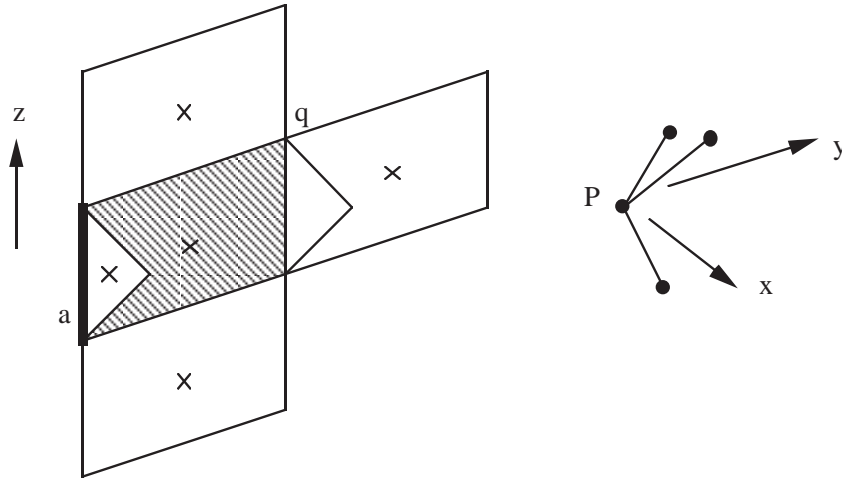


Figure 42 Facette frontière q appartenant à un prisme P , contenant une arête vive appartenant également à une face triangulaire de la frontière.

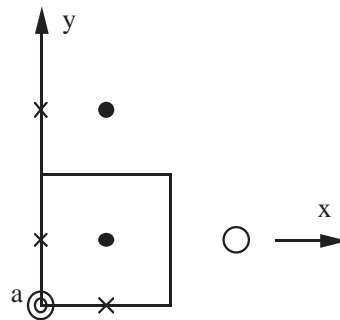


Figure 43 Projection des degrés de liberté de la figure précédente dans le plan xOy .

- Dans le cas où l'unique arête vive du quadrangle appartient à une face triangulaire du prisme (figure 42), nous disposons encore de neuf degrés de liberté, mais c'est la projection dans le plan xOy (figure 43) qui nous indique que parmi les six fonctions de base de la relation (3.15) qui sont de degré zéro en z , c'est à dire $\{1, x, y, y^2, xy, x^2\}$, la fonction xy^2 n'est pas représentable avec les degrés de liberté restants. Nous avons donc pour base $B(q)$ dans ce cas de figure :

$$(3.41) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(q) = \{1, x, y, z, x^2, y^2, z^2, xy, xz\} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, \quad H \text{ prisme appartenant à } C(q), \\ q \text{ contient une arête vive qui appartient également} \\ \quad \quad \quad \text{à un triangle de la frontière.} \end{array} \right.$$

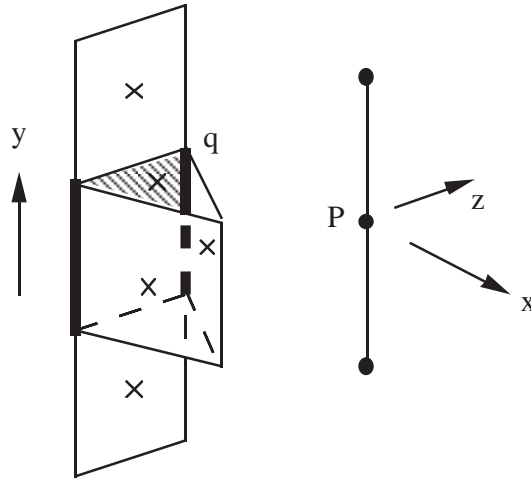


Figure 44 Facette frontière q appartenant à un prisme P , contenant deux arêtes vives appartenant aux trois faces quadrangulaires.

Nous devons encore faire la distinction qui précède si l'on suppose que la facette q contient deux arêtes vives qui ne se rencontrent pas. Dans le premier cas (figure 44), celles-ci appartiennent également à deux facettes quadrangulaires du prisme P . Il convient de retirer une fonction de base du résultat obtenu en (3.40) (une seule arête vive). Le seul choix raisonnable (*c.f.* la figure 45 en projection dans le plan xOz) est d'éliminer le polynome xz . Nous obtenons

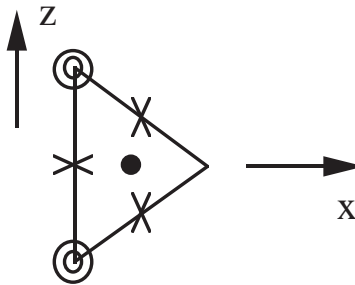


Figure 45 Projection de la figure précédente dans le plan xOz .

- Dans le cas moins improbable où les deux arêtes vives appartiennent également aux deux triangles du prisme (figure 46) comme c'est par exemple le cas pour un maillage bidimensionnel en triangles maillé par une couche de prismes d'épaisseur constante, les huit degrés de liberté ne permettent plus si on les projette sur le plan xOy comme à la figure 47, de représenter la fonction xy et il vient :

$$(3.43) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(q) = \{ 1, x, y, z, x^2, y^2, z^2, xz \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, \quad P \text{ prisme appartenant à } C(q), \\ q \text{ contient deux arêtes vives qui appartiennent} \\ \text{à deux triangles de la frontière.} \end{array} \right.$$

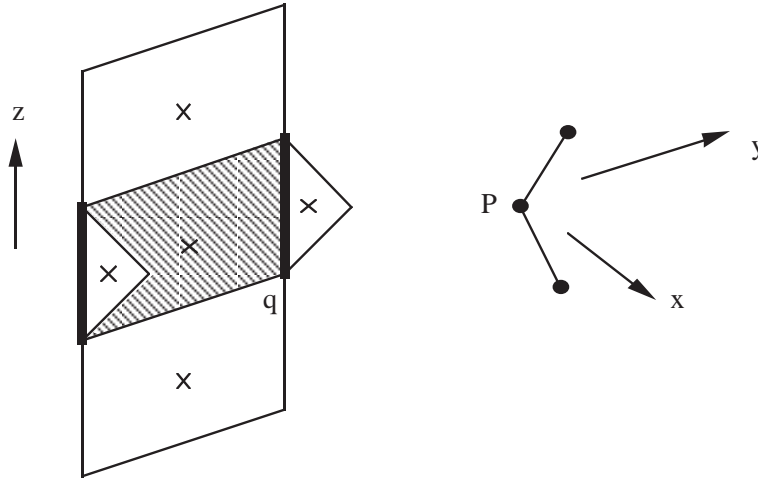


Figure 46 Facette frontière q appartenant à un prisme P , contenant deux arêtes vives appartenant à deux faces triangulaires.

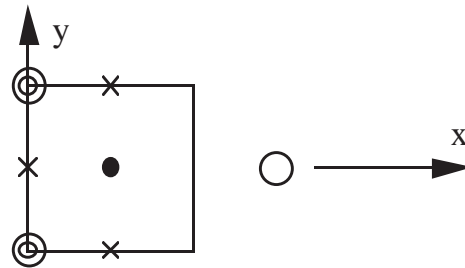


Figure 47 Projection de la figure précédente dans le plan xOy .

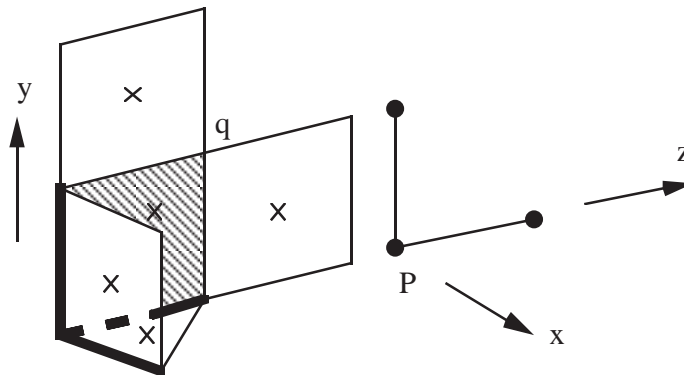


Figure 48 Facette frontière q appartenant à un prisme P , contenant deux arêtes vives ayant un sommet du maillage en commun.

- Enfin, deux arêtes vives du quadrangle q peuvent se rencontrer en un sommet de cette facette comme à la figure 48. Il suffit alors de prendre l'intersection des bases obtenues aux relations (3.40) et (3.41) pour calculer la base $B(q)$ de l'espace d'interpolation recherché. Nous avons :

$$(3.44) \quad \begin{cases} B(q) = \{ 1, x, y, z, x^2, y^2, xy, xz \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, \quad P \text{ prisme appartenant à } C(q), \\ q \text{ contient deux arêtes vives qui se coupent.} \end{cases}$$

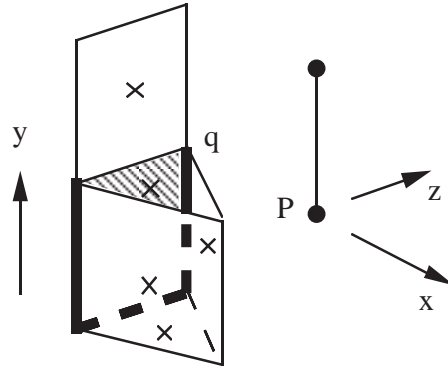


Figure 49 Facette frontière q appartenant à un prisme P , contenant trois arêtes vives et une “non vive” qui appartient à une face triangulaire du prisme.

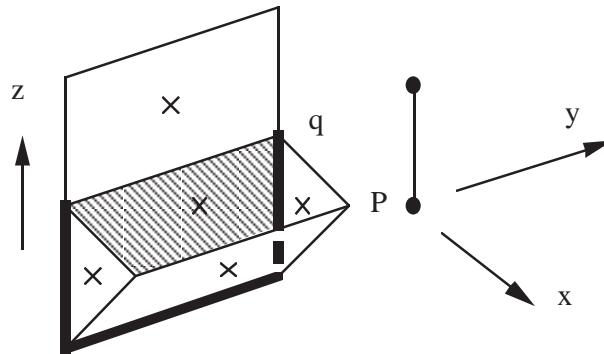


Figure 50 Facette frontière q appartenant à un prisme P , contenant trois arêtes vives et une “non vive” qui appartient à une face quadrangulaire du prisme.

- Nous terminons par des cas sans intérêt en pratique où la face q contient trois arêtes vives. Nous devons détailler deux sous-cas, selon que la seule arête “non vive” appartient à une face triangulaire du prisme (figure 49) ou à une face quadrangulaire du prisme P (figure 50). Dans le premier cas, la base est intersection de (3.37) et (3.42), c'est à dire

$$(3.45) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(q) = \{ 1, x, y, z, x^2, y^2, xy \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, \quad P \text{ prisme appartenant à } C(q), \\ q \text{ contient trois arêtes vives et une "non vive"} \\ \text{qui appartient à une face triangulaire du prisme.} \end{array} \right.$$

Dans le cas où la seule arête "non vive" du quadrangle q appartient à une autre face quadrangulaire du prisme P , la base $B(q)$ pour le calcul du gradient avec les sept degrés de liberté restants est simplement intersection de (3.40) et (3.43) :

$$(3.46) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(q) = \{ 1, x, y, z, x^2, y^2, xz \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, \quad P \text{ prisme appartenant à } C(q), \\ q \text{ contient trois arêtes vives et une "non vive"} \\ \text{qui appartient à une face quadrangulaire du prisme.} \end{array} \right.$$

Le dernier cas d'une facette quadrangulaire d'un prisme dont toutes (!) les arêtes sont vives s'obtient en rabattant la dernière facette de la figure 50. Le maillage ne comporte alors qu'un seul élément (!) et ce cas n'a d'intérêt qu'à titre d'exercice, laissé au lecteur.

• **Face quadrangulaire à la frontière d'une pyramide.**

Nous terminons l'étude des faces quadrangulaires de la frontière en situation exceptionnelle en supposant que la facette q appartient à une pyramide Π . Partant d'une face frontière courante pour laquelle une base de polynômes est donnée à la relation (3.16), nous commençons par le cas où la facette q ne contient qu'une seule arête vive. Par projection dans le plan xOz , nous constatons (figure 52) que la fonction $x(y^2 + z^2)$ ne peut pas être représentée par les six degrés de liberté de la figure 51 si les fonctions $1, x, z, z^2, x^2, xz$ le sont déjà. Nous obtenons donc la base à neuf fonctions suivante :

$$(3.47) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(q) = \{ 1, x, y, z, x^2, y^2, z^2, xy, xz \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, \quad \Pi \text{ pyramide appartenant à } C(q), \\ q \text{ contient une arête vive parallèle à } Oy. \end{array} \right.$$

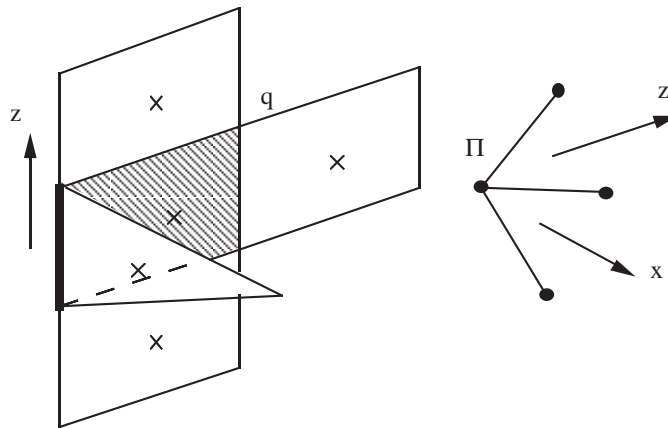


Figure 51 Facette frontière q appartenant à une pyramide Π , contenant une arête vive.

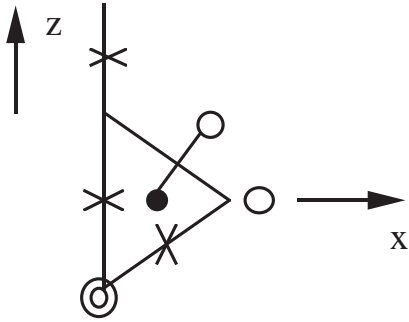


Figure 52 Projection de la figure précédente dans le plan xOz .

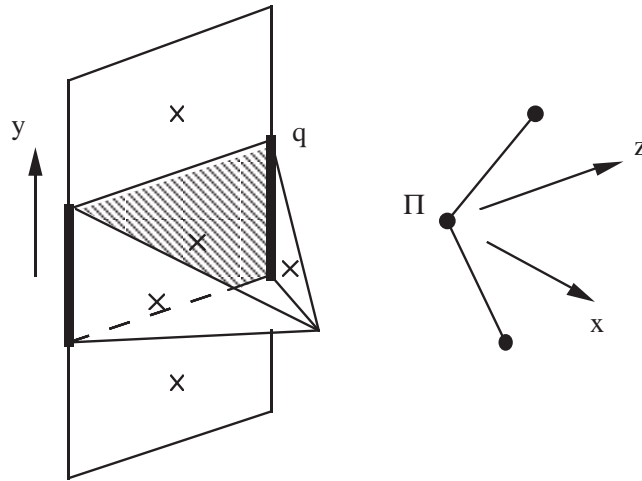


Figure 53 Facette frontière q appartenant à une pyramide Π , contenant deux arêtes vives sans point d'intersection.

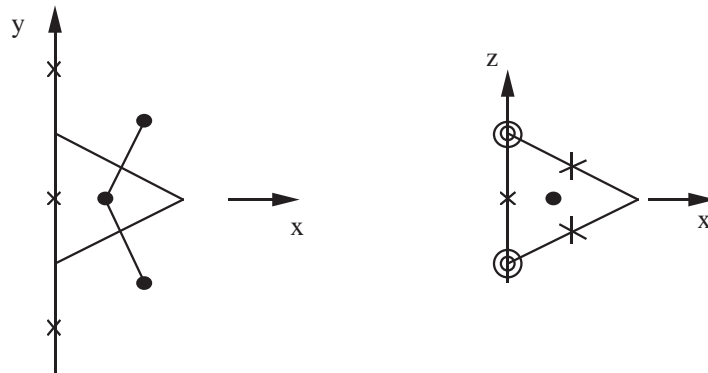


Figure 54 Projection de la figure 53 dans les plans xOy et xOz .

- Si la face quadrangulaire contient deux arêtes vives, elles peuvent être “parallèles”, c’est à dire sans point d’intersection, ou bien sécantes en un sommet du maillage. Dans le premier cas (figure 53), les projections dans les plans xOy

et xOz (figure 54) nous conduisant à penser que la fonction xz est à éliminer. Nous proposons donc :

$$(3.48) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(q) = \{ 1, x, y, z, x^2, y^2, z^2, xy \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, \quad \Pi \text{ pyramide appartenant à } C(q), \\ q \text{ contient deux arêtes vives le long de } Oy \\ \text{ sans point d'intersection.} \end{array} \right.$$

• Si les deux arêtes vives du quadrangle q au bord du domaine se coupent en un sommet du maillage, nous avons une configuration où y et z jouent des rôles analogues. Compte tenu de l'allure de la projection dans le plan xOy , les fonctions y^2 et xy peuvent être interpolées avec les degrés de liberté restants. Le plus simple est donc d'éliminer la fonction x^2 de la relation (3.47), malgré nos réticences motivées par l'annexe B ! Nous obtenons une base de huit fonctions :

$$(3.49) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(q) = \{ 1, x, y, z, y^2, z^2, xy, xz \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, \quad \Pi \text{ pyramide appartenant à } C(q), \\ q \text{ contient deux arêtes vives ayant un sommet} \\ \text{ du maillage comme intersection.} \end{array} \right.$$

• Dans le cas exceptionnel où trois arêtes vives appartiennent à la facette q (figure 55), il ne reste que sept degrés de liberté. Nous décidons d'aligner l'axe Oz avec la seule arête régulière (ou "non vive") de la facette q . Nous éliminons le polynôme xz comme pour construire la relation (3.48), mais de la base (3.49) cette fois. Il vient :

$$(3.50) \quad \left\{ \begin{array}{l} B(q) = \{ 1, x, y, z, y^2, z^2, xy \} \\ q \text{ quadrangle du bord } \partial\Omega, \quad \Pi \text{ pyramide appartenant à } C(q), \\ q \text{ contient trois arêtes vives.} \end{array} \right.$$

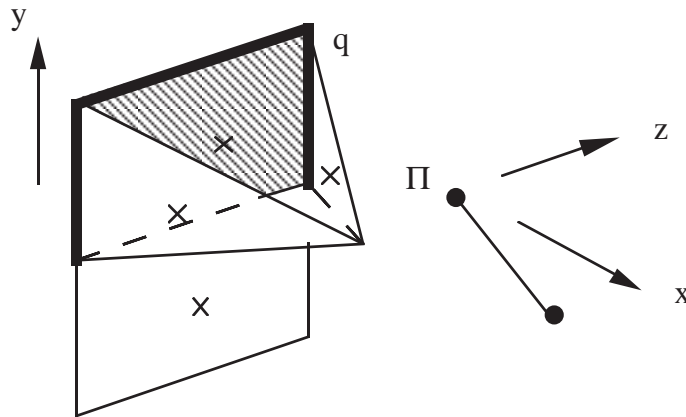


Figure 55 Facette frontière q appartenant à une pyramide Π , contenant trois arêtes vives et une régulière le long de Oz .

3.4.2.b Face triangulaire

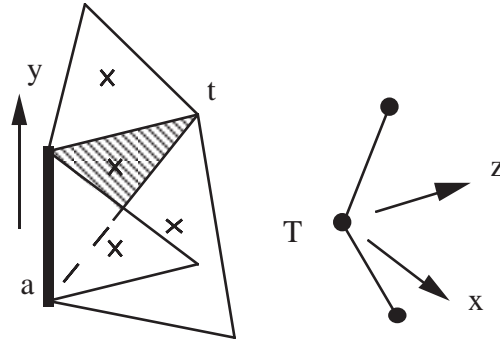


Figure 56 Facette frontière triangulaire t appartenant à un tétraèdre T et contenant une arête vive a .

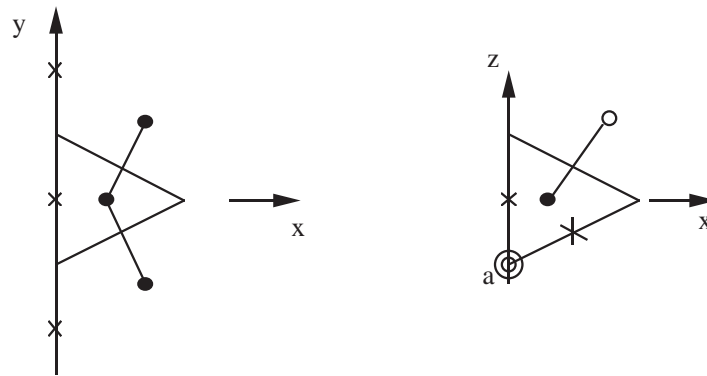


Figure 57 Projection de la figure 56 dans les plans xOy et xOz .

• Nous envisageons maintenant le cas d'un triangle t à la frontière du domaine d'étude Ω , contenant au moins une arête vive, c'est à dire n'appartenant qu'à deux facettes du maillage. Trois cas se présentent, selon que le triangle t considéré appartient à un tétraèdre, une pyramide ou un prisme. Le cas du tétraèdre et de la pyramide sont analogues puisque seules trois faces de celles-ci sont utilisées dans la construction des voisinages comme le montre la relation (3.3) et l'égalité $B(T, t) = B(P, t)$ proposée aux relations (3.5) et (3.7). Nous envisageons donc le cas d'une face triangulaire à la frontière d'un tétraèdre puis d'un prisme.

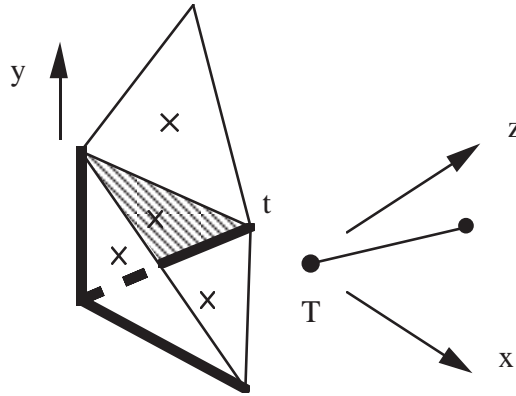


Figure 58 Facette frontière triangulaire t appartenant à un tétraèdre T et contenant deux arêtes vives.

- **Face triangulaire à la frontière d'un tétraèdre.**

Nous supposons pour commencer ce paragraphe que seule une arête du triangle t est une arête vive du maillage ; nous plaçons par convention l'axe Oy le long de cette arête (figure 56). Nous disposons de sept degrés de liberté, alors que la base $B(t)$ calculée à la relation (3.29) issue du mariage de $B(t, t)$ (relation (3.4)) avec $B(T, t)$ (relation (3.5)) comporte huit fonctions de base. En projection sur les plans xOy et xOz (figure 57), il apparaît clairement que la fonction xz est mal représentée par les degrés de liberté (pas de quadrangle dans la projection sur le plan xOz) alors que les fonctions x^2 , y^2 , xy et z^2 peuvent être interpolées avec succès. Nous éliminons donc la fonction xy de la base (3.29) ce qui conduit à la base suivante :

$$(3.51) \quad \begin{cases} B(t) = \{ 1, x, y, z, y^2 + z^2, x^2, xy \} \\ t \text{ triangle du bord } \partial\Omega, \quad T \text{ tétraèdre appartenant à } C(t), \\ t \text{ contient une arête vive.} \end{cases}$$

Dans le cas où deux arêtes vives sont contenues dans le triangle t , nous avons une configuration de coin (voir la figure 58) et, échangeant les rôles des variables y et z , il est naturel d'éliminer la fonction de base xy de la relation (3.51). Il vient :

$$(3.52) \quad \begin{cases} B(t) = \{ 1, x, y, z, x^2, y^2 + z^2 \} \\ t \text{ triangle du bord } \partial\Omega, \quad T \text{ tétraèdre appartenant à } C(t), \\ t \text{ contient deux arêtes vives.} \end{cases}$$

pour les six degrés de liberté présents par exemple à la figure 59. Nous laissons de côté le cas exceptionnel sans intérêt pratique où la facette t contient trois arêtes vives.

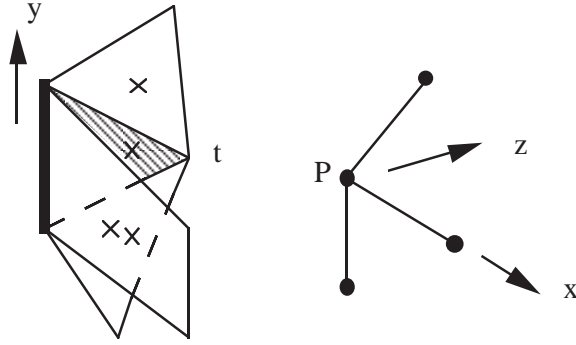


Figure 59 Facette frontière triangulaire t appartenant à un prisme P et contenant une arête vive.

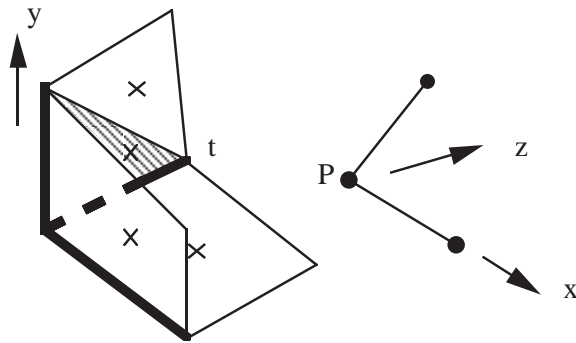


Figure 60 Facette frontière triangulaire t appartenant à un prisme P et contenant deux arêtes vives.

• **Face triangulaire à la frontière d'un prisme.**

Si la face triangulaire t appartient à un prisme P , nous avons ajouté à la relation (3.33) la fonction de base x et le degré de liberté appartenant au cobord de la face triangulaire opposée au triangle t (voir la figure 31). Dans le premier cas où une arête vive appartient à t , nous l'alignons avec l'axe Oy (figure 59). Il est naturel d'éliminer la fonction $x(y^2 + z^2)$, ce qui correspond à une base contenant huit degrés de liberté, c'est à dire :

$$(3.53) \quad \begin{cases} B(t) = \{1, x, y, z, x^2, xy, xz, y^2 + z^2\} \\ t \text{ triangle du bord } \partial\Omega, \quad P \text{ prisme appartenant à } C(t), \\ t \text{ contient une arête vive.} \end{cases}$$

Si deux arêtes vives appartiennent au triangle t , nous sommes au coin du domaine et ne disposons plus que de sept degrés de liberté (voir la figure 60). Il est raisonnable de garder un espace de fonctions tests invariant dans l'échange de y et de z , donc d'éliminer de la relation (3.53) la fonction x^2 . Nous obtenons :

$$(3.54) \quad \begin{cases} B(t) = \{1, x, y, z, xy, xz, y^2 + z^2\} \\ t \text{ triangle du bord } \partial\Omega, \quad P \text{ prisme appartenant à } C(t), \\ t \text{ contient deux arêtes vives.} \end{cases}$$

4) Conclusion.

• Dans ce mémoire, nous avons proposé une méthode nouvelle pour définir un schéma numérique adapté au calcul de phénomènes de diffusion par la méthode des volumes finis. L'idée de base, très simple, est fondée sur les propriétés de linéarité et de localisation spatiale des opérateurs de dérivation. Nous utilisons des propriétés intuitives d'unisolance des degrés de liberté voisins d'une interface donnée, ceci par analogie avec les éléments finis de Lagrange les plus simples. Nous avons envisagé en détail les cas bi et tridimensionnels. Dans ce dernier cas, nous supposons que des hexaèdres, des tétraèdres, des prismes et des pyramides peuvent constituer de façon arbitraire le maillage. Notons qu'une analyse numérique rigoureuse de la méthode des volumes finis telle que nous la pratiquons reste, à notre connaissance, à formaliser mathématiquement, même pour des problèmes modèles de la physique et de la mécanique. Enfin, notons que la méthodologie employée est très générale et peut s'étendre sans difficulté hors du champ des équations de la mécanique des fluides, comme en électromagnétisme par exemple.

5) Annexe A.

Calcul du gradient et interpolation de Lagrange.

• Nous supposons fixés une face f d'un maillage, son voisinage $V(f)$ formé de degrés de liberté σ qui peuvent être du type (A1) ou (A2) suivants :

$$(A1) \quad \sigma(u) = u(K), \quad K \text{ élément du maillage}$$

$$(A2) \quad \sigma(u) = u(f) \quad \text{ou} \quad \frac{\partial u}{\partial n} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial u}{\partial n} + \alpha u(f), \quad f \text{ face du maillage}$$

et un espace de fonctions $LS(f)$ choisis de sorte que la relation constitutive

$$(A3) \quad \nabla u(f) = \sum_{\sigma \in V(f)} \alpha(f, \sigma) \sigma(u)$$

est exacte pour toute fonction u appartenant à $LS(f)$. Nous supposons que l'origine O est au centre de gravité de la face f . Nous supposons réalisée l'unisolance du couple $(V(f), LS(f))$, c'est à dire :

$$(A4) \quad \forall \beta_\sigma, \quad \exists ! \varphi \in LS(f), \quad \sigma(\varphi) = \beta_\sigma, \quad \forall \sigma \in V(f).$$

Dans la suite, le polynôme φ défini à la relation (A4) est appelé polynôme de Lagrange associé aux degrés de liberté σ bien que ceux-ci puissent être non seulement des valeurs nodales (relation (A1)) mais également des dérivées normales (relation (A2)). On a alors

$$(A5) \quad \nabla \varphi(0) = \sum_{\sigma \in V(f)} \alpha(f, \sigma) \beta_\sigma.$$

Nous avons la

• **Proposition 1.**

Le gradient en 0 de l'interpolé de Lagrange φ défini par la relation (A4) est égal au gradient calculé par le schéma (A3).

La preuve est élémentaire. La matrice $\{\sigma(\varphi), \sigma \in V(f), \varphi \in B(f)\}$ (où $B(f)$ est une base de $LS(f)$) est carrée et inversible compte tenu de l'hypothèse d'unisolance. Etant donné une famille β_σ de valeurs numériques pour les degrés de liberté, on peut soit calculer un gradient en 0 compte tenu de la relation (A3), en supposant $\sigma(\varphi) = \beta_\sigma$, pour tout σ appartenant à $V(f)$, soit interpoler ces degrés de liberté à l'aide de la relation (A4). L'égalité (A5) résulte de la définition même des coefficients $\alpha(f, \sigma)$:

$$(A6) \quad \forall \xi \in LS(f), \quad \nabla \xi(0) = \sum_{\sigma \in V(f)} \alpha(f, \sigma) \sigma(\xi)$$

ce qui démontre la proposition 1. □

• La propriété très simple que nous venons d'établir ici en toute généralité a été d'abord démontrée dans une série de cas particuliers par I. Terrasse et J. Mercier [MT89]. Elle permet de mieux comprendre intuitivement l'algorithme de calcul (A3), qui condense en une seule formule compacte interpolation puis dérivation. Remarquons que, compte tenu de la propriété indésirable d'oscillation du polynôme d'interpolation de Lagrange, il importe de ne pas choisir un "stencil" $V(f)$ trop étendu !

6) Annexe B. Condition de Dirichlet et volumes finis.

• Nous exposons ici une remarque très simple que nous avons faite il y a quelque temps (1988) et qui a motivé le remplacement du schéma initialement développé pour le calcul des gradients sur les faces d'un maillage non structuré [Du89c] par la nouvelle approche plus algébrique présentée dans ce mémoire.

• Nous étudions l'équation de Poisson sur le domaine $]0, 1[$:

$$(B1) \quad -\frac{d^2 u}{dx^2} = g$$

avec condition de Dirichlet en $x = 0$:

$$(B2) \quad u(0) = u_0.$$

Nous discrétisons l'équation (B1) par une méthode de volumes finis P_0 formés par les éléments d'un maillage régulier de pas h (figure 61). Nous nous intéressons au bilan de flux dans la première maille $]0, h[$:

$$(B3) \quad \frac{1}{h} \left(\frac{\partial u}{\partial x}(0) - \frac{\partial u}{\partial x}(h) \right) \approx g\left(\frac{h}{2}\right).$$

Nous appliquons, pour calculer le gradient discret aux points $x = 0$ et $x = h$, le schéma à deux points le plus naturel, associé aux voisinages

$$(B4) \quad V(f = \{0\}) = \left\{ 0, \frac{h}{2} \right\}$$

$$(B5) \quad V(f = \{h\}) = \left\{ \frac{h}{2}, 3 \frac{h}{2} \right\}$$

et à l'espace d'interpolation

$$(B6) \quad LS(f) = P1(x).$$

Nous avons alors très simplement

$$(B7) \quad \frac{\partial u}{\partial x}(0) = \frac{1}{h/2} \left(u(h/2) - u(0) \right)$$

$$(B8) \quad \frac{\partial u}{\partial x}(h) = \frac{1}{h} \left(u(3h/2) - u(h/2) \right).$$

Les relations (B7) et (B8), jointes à (B2), définissent un schéma à trois points pour la maille touchant le bord du domaine que l'on peut écrire :

$$(B9) \quad \frac{1}{h^2} \left(-2u_0 + 3u(h/2) - u(3h/2) \right) = g\left(\frac{h}{2}\right).$$

Si nous faisons tendre h vers 0 dans le schéma (B9) ainsi obtenu, nous trouvons une équation équivalente dont le terme de plus bas degré en h conduit à :

$$(B10) \quad -\frac{3}{4} \frac{d^2 u}{dx^2} = g$$

ce qui est inconsistant avec le problème posé (B1) !!

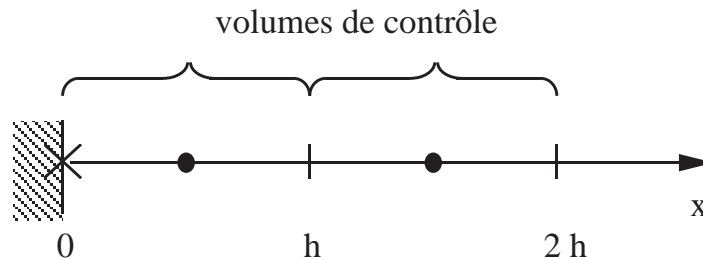


Figure 61 Maillage par volumes finis au bord d'un domaine unidimensionnel.

- Nous modifions donc le voisinage pour la face frontière $f = \{0\}$ et l'espace de polynomes associé. Nous remplaçons le voisinage (B4) par le choix

$$(B11) \quad V(f = \{0\}) = \left\{ 0, \frac{h}{2}, 3 \frac{h}{2} \right\}$$

et l'espace des polynomes de degré 1 par

$$(B12) \quad LS(f = \{0\}) = P_2(x).$$

Nous ne modifions pas le traitement de l'interface $f = \{h\}$. Nous remplaçons en définitive le schéma décentré du premier ordre (B7) pour le calcul du gradient paroi par un schéma décentré qui revient à calculer au point $x = 0$ la dérivée du polynome d'interpolation de Lagrange aux points (B11) (*c.f.* Annexe A) :

$$(B13) \quad \frac{\partial u}{\partial x}(h) = \frac{1}{3h} \left(-8u_0 + 9u(h/2) - u(3h/2) \right).$$

Dans ce cas, on peut voir très simplement que le schéma aux différences obtenu est consistant avec l'équation aux dérivées partielles (B1).

- Notons que les remarques qui précèdent ne mettent aucunement en jeu la notion de maillage non structuré. D'ailleurs, les logiciels fluides qui utilisent des volumes finis structurés proposent classiquement pour le calcul des flux à la paroi un schéma aux différences finies décentré à trois points (voir par exemple Hollanders-Marmignon [HM87]). Enfin, et au risque d'avouer que le débat reste encore ouvert, notons que le passage du schéma (B7) au schéma (B13) pour le calcul des flux visqueux à la paroi n'a finalement rien changé au résultat surprenant (apparition de forte survitesse dans le champ) d'un calcul de résolution numérique des équations de Navier Stokes autour d'une plaque plane à très bas nombre de Reynolds (*c.f.* [Du89c] pour l'utilisation de (B7) et Mercier-Terrasse [MT89] pour le schéma à trois points (B13)) ! En effet, l'inconsistance (B10) n'a lieu que dans la première maille, ce qui rend délicate toute interprétation intuitive.