DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

Schémas implicites semi-lagrangiens pour la dynamique des gaz compressibles

CANUM | Alexiane PLESSIER, Stéphane DEL PINO, Bruno DESPRÉS | Juin 2022

Plan

Sujet

- Modéliser et simuler les interactions fluide-structure. Par exemple la résistance d'un pont face au vent, la circulation sanguine dans les artères, la portance d'un avion...

- En dynamique rapide, on représente la partie fluide compressible à l'aide des équations d'Euler

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{0}, \\ \partial_t (\rho E) + \nabla \cdot ((\rho E + p)\mathbf{u}) = 0. \end{cases}$$

Problèmes rencontrés

- En dynamique des chocs, on utilise principalement des schémas explicites, soumis à une CFL.

$$\text{Condition CFL : } c\frac{\Delta t}{\Delta \mathbf{x}} \leqslant 1.$$

- CFL dans le cas d'une structure solide fine

$$\left.\begin{array}{r} \Delta \mathbf{x} \to 0 \\ \text{vitesse du son } c \gg 1 \end{array}\right\} \Longrightarrow \Delta t \text{ très petit.}$$

Objectifs

Stratégie générale :

- Développer un schéma implicite Lagrangien pour la partie fluide [2]
- Généraliser le schéma au cas des structures élasto-plastique fines [7], [8]
- Coupler le schéma implicite pour la partie solide élastique avec le schéma fluide (explicite et/ou implicite)

Focus de la présentation :

- Utiliser un formalisme Lagrangien (*i.e.* le maillage se déforme selon le fluide)
- Développer un schéma implicite volumes finis Lagrangien, stable au sens de l'entropie

. [2] C.Marmignon, C. Chalons, F. Coquel. Time Implicit Approximation of the Multipressure Gas Dynamics Equations in Several Time Space Dimensions. SIAM, 48 :1678-106, 2010.

. [7] G. Kluth, B. Després. Discretization of Hyperelasticity on Unstructured Mesh with a Cell-centered Lagrangian Scheme. Journal of Computational Physics, 2010.

. [8] P.-H. Maire, R. Abgrall, J. Breil, R. Loubère, B. Rebourcet. A Nominally Sceond-Order Cell-Centered Lagrangian Scheme for SImulating Elastic-Plastic Flows on Two-Dimensional Unstructured Grids. Journal Of Computational Physics, 2013

- Eulérien :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{0}, \\ \partial_t (\rho E) + \nabla \cdot ((\rho E + p)\mathbf{u}) = 0. \end{cases} \quad + \quad \begin{array}{c} \text{entropie} \\ \\ \partial_t (\rho S) + \nabla (\rho S \mathbf{u}) \geqslant 0. \end{array}$$

- Lagrangien : $D_t := \partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla$ où $\mathbf{u}$ est la vitesse du fluide.

$$\begin{cases} \rho D_t \tau - \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \\ \rho D_t u + \nabla p = \mathbf{0}, \\ \rho D_t E + \nabla \cdot (p\mathbf{u}) = 0. \end{cases} \quad + \quad \begin{array}{c} \text{entropie} \\ \\ \rho D_t S \geqslant 0. \end{array} \tag{1}$$

Méthode :

- Phase de prédiction : schéma implicite Lagrangien pour les équations d'Euler isentropiques [2]

$$\begin{cases} \rho D_t \tau - \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \\ \rho D_t u + \nabla p = \mathbf{0}, \\ \rho D_t S = 0. \end{cases} + \begin{matrix} \text{entropie} \\ \\ \rho D_t E + \nabla(p\mathbf{u}) \leqslant 0. \end{matrix} \tag{2}$$

- Phase de correction : retour aux équations d'Euler (1), conservation de l'énergie totale E restaurée, et inégalité d'entropie sur S

. [2] C.Marmignon, C. Chalons, F. Coquel. Time Implicit Approximation of the Multipressure Gas Dynamics Equations in Several Time Space Dimensions. SIAM, 48 :1678-106, 2010.

- Conserver la structure de (2)

$$\forall j \in \mathcal{M}, \begin{cases} \overline{\tau_j} = \tau_j^n + \dfrac{\Delta t}{M_j} \displaystyle\sum_{r \in \mathcal{R}_j} \langle \mathbf{C}_{jr}, \overline{\mathbf{u}_r} \rangle, \\ \overline{\mathbf{u}_j} = \mathbf{u}_j^n - \dfrac{\Delta t}{M_j} \displaystyle\sum_{r \in \mathcal{R}_j} \mathbf{F}_{jr}, \\ \overline{S_j} = S_j^n. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mathbf{F}_{jr} = A_{jr}(\overline{\mathbf{u}_j} - \overline{\mathbf{u}_r}) + \mathbf{C}_{jr}\overline{p_j}, \\ \displaystyle\sum_{j \in \mathcal{J}_r} \mathbf{F}_{jr} = 0, \end{cases} \qquad \begin{cases} \overline{p_{jr}} - \overline{p_j} + \alpha_j \langle \overline{\mathbf{u}_r} - \overline{\mathbf{u}_j}, \dfrac{\mathbf{C}_{jr}}{||\mathbf{C}_{jr}||} \rangle = 0, \\ \displaystyle\sum_{j \in \mathcal{J}_r} \mathbf{C}_{jr}\overline{p_{jr}} = 0. \end{cases}$$

- A_{jr} est symétrique et $\sum_{j \in \mathcal{J}_r} A_{jr}$ est inversible. Ex : $A_{jr} = \alpha_j \frac{\mathbf{C}_{jr} \otimes \mathbf{C}_{jr}}{||\mathbf{C}_{jr}||}$ (GLACE)
- $\forall\ j \in \mathcal{M},\ \forall\ r \in \mathcal{R}_j,\ \mathbf{C}_{jr} = \nabla_{\mathbf{x}_r} V_j$. On a $\sum_{r \in \mathcal{R}_j} \mathbf{C}_{jr} = \mathbf{0}$ et pour tout noeud interne $\sum_{j \in \mathcal{J}_r} \mathbf{C}_{jr} = \mathbf{0}$.

- Restaurer la conservation de l'énergie totale E

$$\begin{cases} \tau_j^{n+1} = \tau_j^n + \dfrac{\Delta t}{M_j} \displaystyle\sum_{r \in \mathcal{R}_j} \langle \mathbf{C}_{jr}, \overline{\mathbf{u}_r} \rangle, \\ \mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n - \dfrac{\Delta t}{M_j} \displaystyle\sum_{r \in \mathcal{R}_j} \mathbf{C}_{jr} \overline{p_{jr}}, \\ E_j^{n+1} = E_j^n - \dfrac{\Delta t}{M_j} \displaystyle\sum_{r \in \mathcal{R}_j} \mathbf{C}_{jr} \overline{\mathbf{u}_r} \ \overline{p_{jr}} \end{cases}$$

$$\forall r \in \mathcal{R} \begin{cases} \forall j \in \mathcal{J}_r, \overline{p_{jr}} - \overline{p_j} + \alpha_j \langle \overline{\mathbf{u}_r} - \overline{\mathbf{u}_j}, \dfrac{\mathbf{C}_{jr}}{||\mathbf{C}_{jr}||} \rangle = 0, \\ \displaystyle\sum_{j \in \mathcal{J}_r} \mathbf{C}_{jr} \overline{p_{jr}} = 0. \end{cases}$$

Propriétés du schéma

- Phase de prédiction :

  Schéma conservatif, et inégalité d'entropie sur l'énergie totale
  $\rightarrow$ 1D : Analyse théorique, et preuve de l'existence et de l'unicité (schéma bien défini),
  Stabilité inconditionnelle (selon les conditions au bord),
  $\rightarrow$ 2D : Travail en cours, démonstration pour des $\mathbf{C}_{jr}$ fixés.

- Phase de correction :

  Schéma conservatif et inégalité d'entropie
  $\rightarrow$ 1D : GCL verifiée,
  $\rightarrow$ 2D : Travail en cours, GCL vérifiée si $\mathbf{C}_{jr} = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_{jr}^{n} + \mathbf{C}_{jr}^{n+1})$.

Pour tout $j \in \mathcal{M}$, où $\mathcal{M}$ est un maillage contenant N cellules, on a

$$\begin{cases} \overline{\tau_j} = \tau_j^n + \dfrac{\Delta t}{M_j} \displaystyle\sum_{r \in \mathcal{R}_j} \langle \mathbf{C}_{jr}, \overline{\mathbf{u}_r} \rangle, \\ \overline{\mathbf{u}_j} = \mathbf{u}_j^n - \dfrac{\Delta t}{M_j} \displaystyle\sum_{r \in \mathcal{R}_j} \mathbf{C}_{jr} \overline{p_{jr}}, \\ \overline{S_j} = S_j^n. \end{cases} \tag{3}$$

$$\forall r \in \mathcal{R} \begin{cases} \forall j \in \mathcal{J}_r, \quad \overline{p_{jr}} - \overline{p_j} + \alpha_j \langle \overline{\mathbf{u}_r} - \overline{\mathbf{u}_j}, \mathbf{n}_{jr} \rangle = 0, \text{ avec } \mathbf{n}_{jr} = \dfrac{\mathbf{C}_{jr}}{||\mathbf{C}_{jr}||}, \\ \displaystyle\sum_{j \in \mathcal{J}_r} \mathbf{C}_{jr} \overline{p_{jr}} = 0. \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \frac{M_j}{\Delta t}(\overline{\tau_j} - \tau_j^n) - \sum_{r \in \mathcal{R}_j} \langle \mathbf{C}_{jr}, A_r^{-1} \sum_{i \in \mathcal{J}_r} \mathbf{C}_{ir} \overline{p_i} \rangle &= \sum_{r \in \mathcal{R}_j} \langle \mathbf{C}_{jr}, A_r^{-1} \sum_{i \in \mathcal{J}_r} A_{ir} \overline{\mathbf{u}_i} \rangle, \\ \frac{M_j}{\Delta t}(\overline{\mathbf{u}_j} - \mathbf{u}_j^n) - \sum_{r \in \mathcal{R}_j} A_{jr} A_r^{-1} \sum_{i \in \mathcal{J}_r} A_{ir} \overline{\mathbf{u}_i} + \sum_{r \in \mathcal{R}_j} A_{jr} \overline{\mathbf{u}_j} &= - \sum_{r \in \mathcal{R}_j} A_{jr} A_r^{-1} \sum_{i \in \mathcal{J}_r} \mathbf{C}_{ir}(-\overline{p_i}). \end{aligned}$$

$$\nabla J(U) = AU$$

$J :]-\infty, 0[^N \times \mathbb{R}^{dN} \to \mathbb{R}$, $U = ((-\overline{p_j})_{j \in \mathcal{M}}, (\overline{\mathbf{u}_j})_{j \in \mathcal{M}}) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^{dN}$, $A \in \mathbb{R}^{N+dN \times N+dN}$.

Outil technique important

On peut mettre la phase de prédiction sous la forme

$$\nabla J(U) = AU,$$

- (H1) Le domaine est $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$. C'est un domaine ouvert convexe : $\mathcal{D} =]-\infty, 0[^n \times \mathbb{R}^m$, où $n > 0$ et $m \geqslant 0$ sont deux entiers. Son bord est $\partial\mathcal{D} = \{V \in \mathbb{R}^{n+m} : \exists\, j^* \in \{1, \dots, n\}\ V_{j^*} = 0, \forall j \neq j^* \in \{1, \dots, n\},\ V_j \leqslant 0\}$.
- (H2) La fonction $J : U \in \mathcal{D} \to J(U) \in \mathbb{R}$ est $\mathcal{C}^3$, strictement convexe et coercive. De plus, pour tout $V \in \partial\mathcal{D}$ il existe une direction unitaire sortante $\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^{n+m}$ telle que $(\nabla J(V - \varepsilon \boldsymbol{d}), \boldsymbol{d}) \xrightarrow[V-\varepsilon \boldsymbol{d} \in \mathcal{D}]{\varepsilon \to 0^+} +\infty$. Également, pour tout $V \in \partial\mathcal{D}$, on a $||\nabla J(W)|| \xrightarrow[W \in \mathcal{D}]{W \to V} +\infty$.
- (H3) La matrice $A \in \mathcal{M}_{n+m}(\mathbb{R})$ est anti-symétrique et satisfait $\ker(A) \cap \mathcal{D} \neq \emptyset$.

Théorème

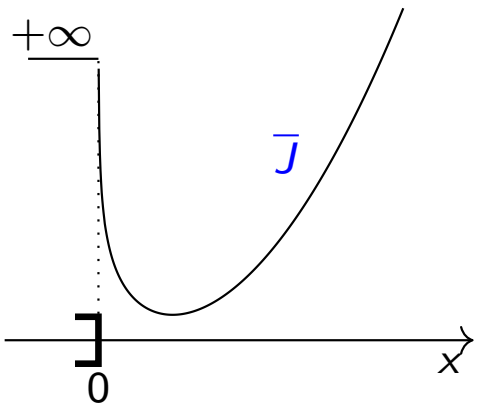
Sous les hypothèses (H1), (H2) et (H3), le problème

$$\begin{cases} \textit{Trouver } U \textit{ dans } \mathcal{D} \textit{ tel que} \\ \nabla J(U) = AU. \end{cases}$$

possède une unique solution.

Etapes clés de la démonstration

- Démontrer l'unicité, avec la monotonie de l'opérateur $\nabla J(U) - AU$ [1],
- Démontrer l'existence dans le cas où $A = 0$, chercher le minimum de J



- Comme J est strictement convexe, utiliser le cadre de l'analyse convexe [5], [6],
- Finir la preuve de l'existence en utilisant des résultats sur les équations différentielles ordinaires [3], [4].

. [1] H. Brezis, Opérateurs Maximaux Monotones et semi-groupes de contractions dans les espaces de Hilbert, Elsevier, 1973.

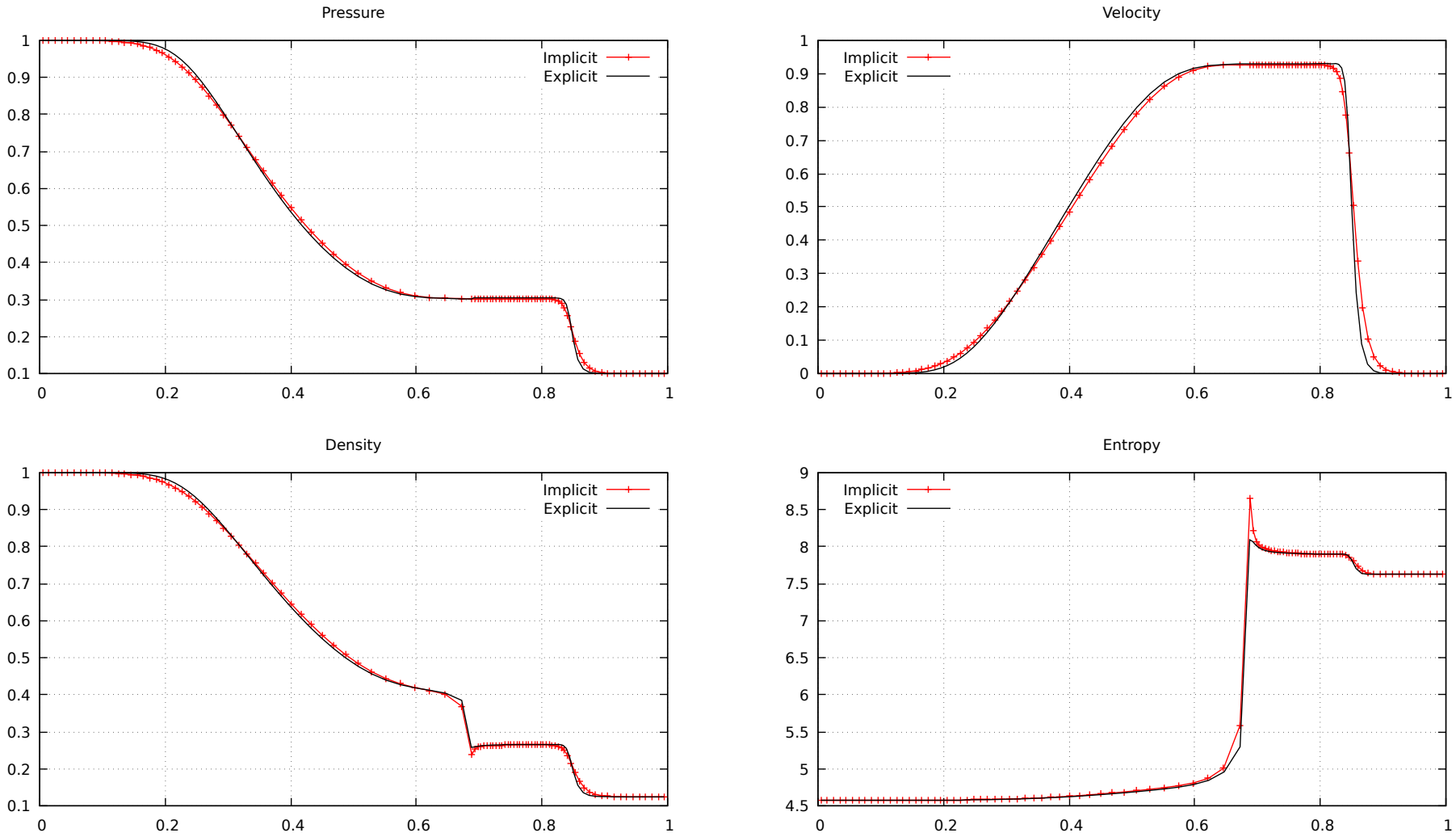
. [5] J.-B. Hirriart-Urruty, Optimisation et Analyse Convexe, EDP Sciences, 1998.

. [6] J.-B. Hirriart-Urruty, C. Lemaréchal, Fundamentals of Convex Analysis,Springer-Verlag, 2004.

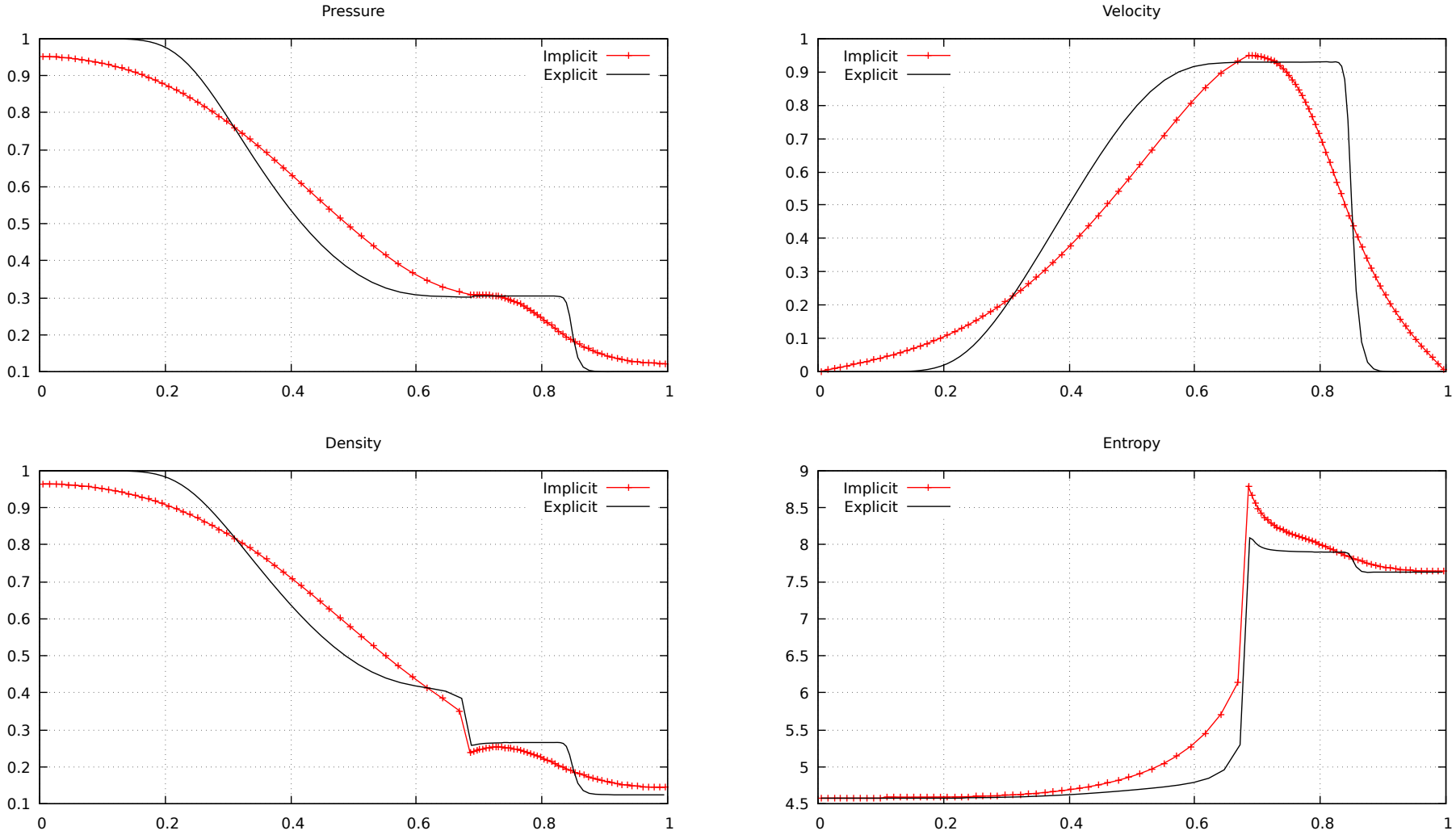
. [3] E. Coddington, N. Levinson,Theory of Ordinary Differential Equations, Tata McGraw-Hill Education, 1955.

. [4] J.-P. Demailly, Analyse Numérique et Équations Différentielles - 4ème Ed, EDP Sciences, 2016.

Tube à choc de Sod sur 100 mailles, même CFL=0.4 ($dt = 1.49\ 10^{-3}$), $t_{final} = 0.2$.

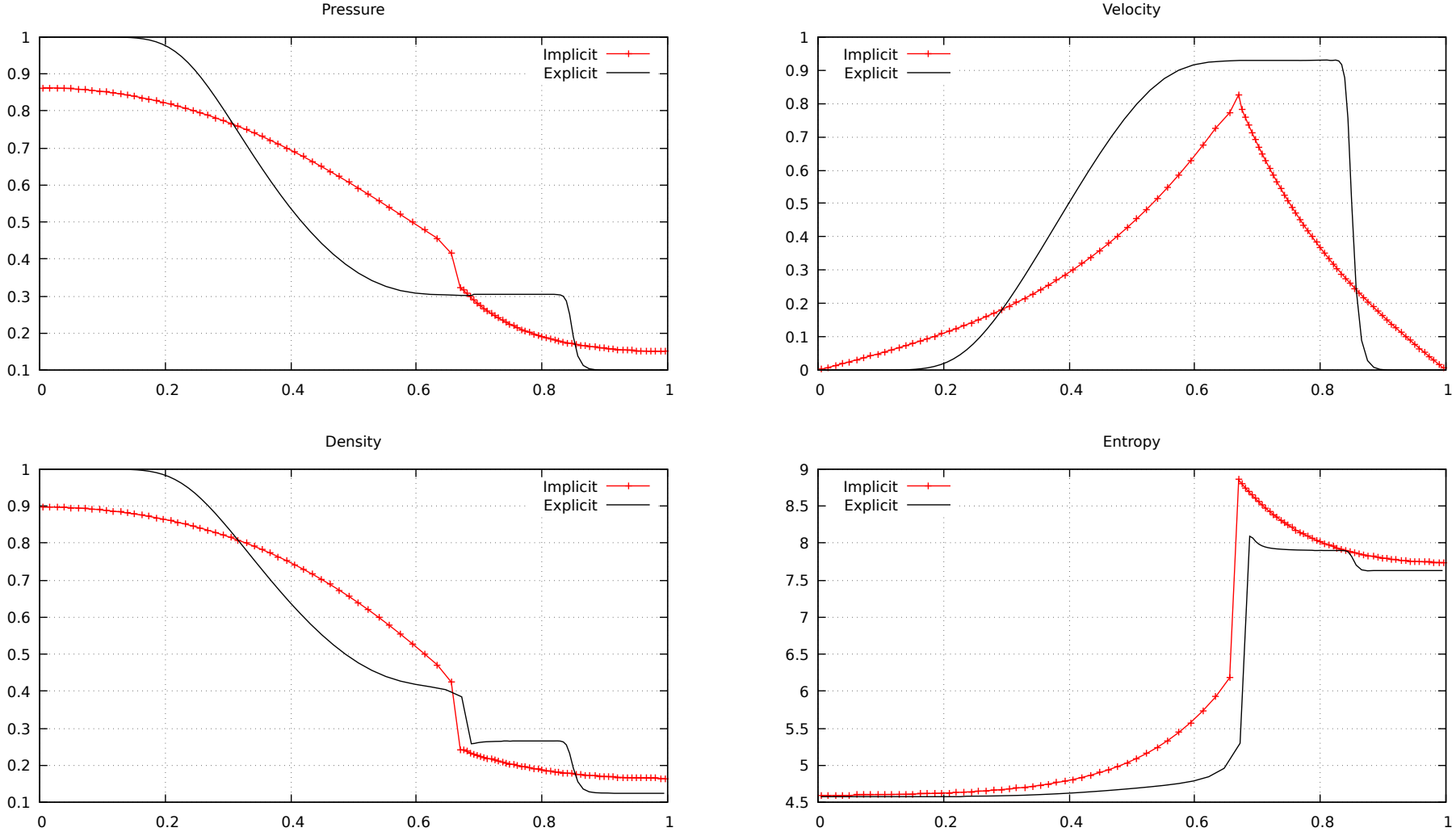


Maillage de 100 mailles, CFL=40.
Newton : 4 - 5 itérations



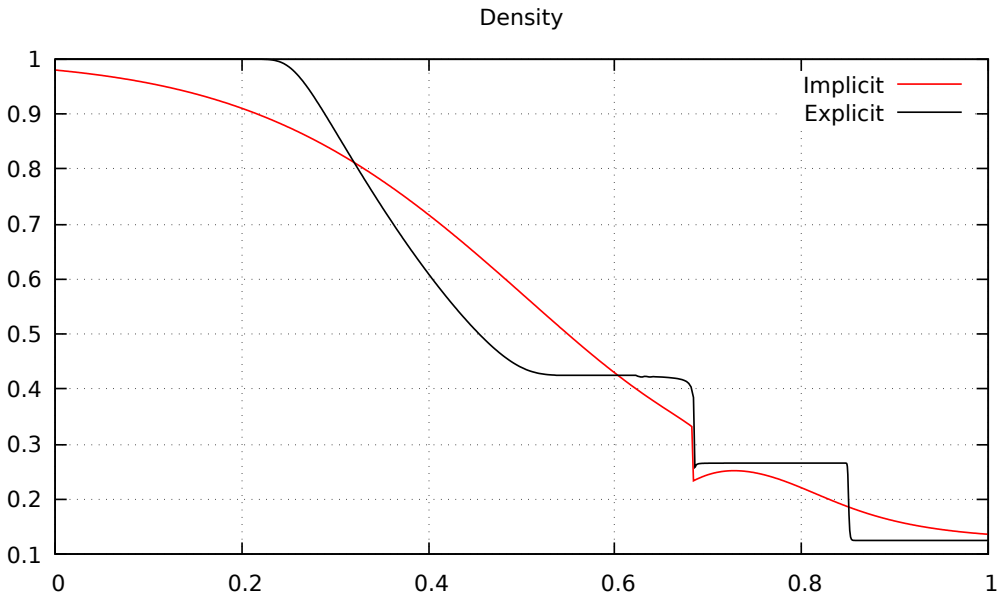
On observe un positionnement parfait de la discontinuité de contact.

Maillage de 100 mailles, $CFL_{\max} = 537$, un seul pas de temps.
Newton : 6 itérations

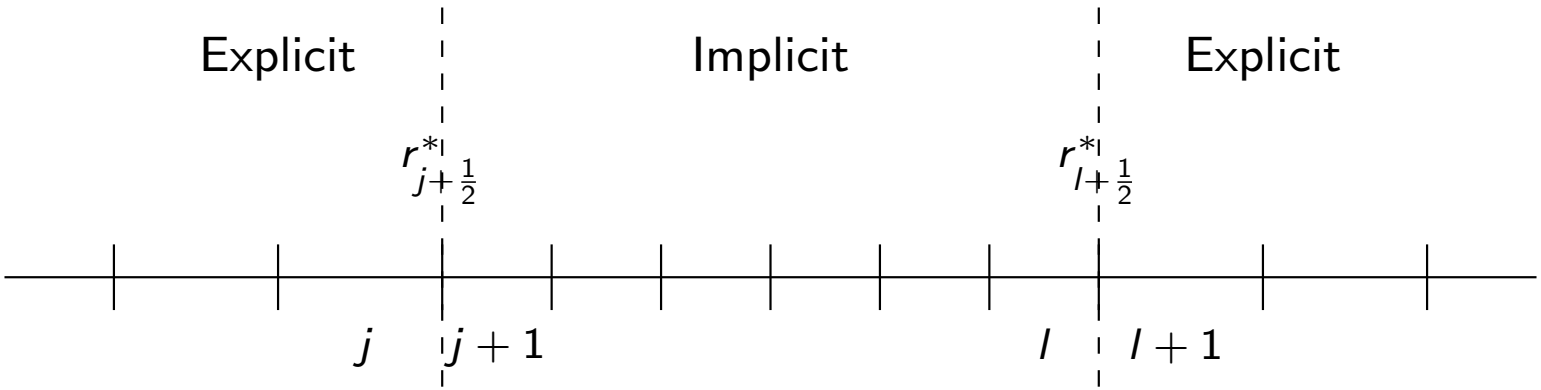


Robustesse inconditionnelle.

Maillage de 9000 mailles sur le domaine $[-4, 5]$, $CFL_{max} = 537$.



Une explication vient de l'analyse du schéma implicite Lagrangien du problème de Riemann.



A l'interface, on souhaite avoir les mêmes valeurs de flux. On les note $p^*_{j+\frac{1}{2}}$ et $u^*_{j+\frac{1}{2}}$.

$$\begin{cases} p_j^n - p^*_{j+\frac{1}{2}} = \alpha_j(u^*_{j+\frac{1}{2}} - u_j^n), \\ \overline{p_{j+1}} - p^*_{j+\frac{1}{2}} = \alpha_{j+1}(\overline{u_{j+1}} - u^*_{j+\frac{1}{2}}). \end{cases}$$

- Le théorème d'existence et d'unicité s'applique dans toute la zone implicite
- Les valeurs à l'interface sont traitées comme des conditions limites

Cas test tiré de l'article d'Abgrall-Saurel [10]

- Conditions initiales :

$$p_0(x) = \begin{cases} 10^9 & x < 0.7 \\ 10^5 & x > 0.7 \end{cases}, \quad \rho_0(x) = \begin{cases} 1000 & x < 0.7 \\ 50 & x > 0.7 \end{cases},$$

$$\gamma_0(x) = \begin{cases} 4.4 & x < 0.7 \\ 1.4 & x > 0.7 \end{cases}, \quad u_0(x) = 0.$$

  La variable π est réglée à $\pi_0(x) = 6 \cdot 10^8$ pour $x < 0.7$.

- Maillage : 1000 mailles

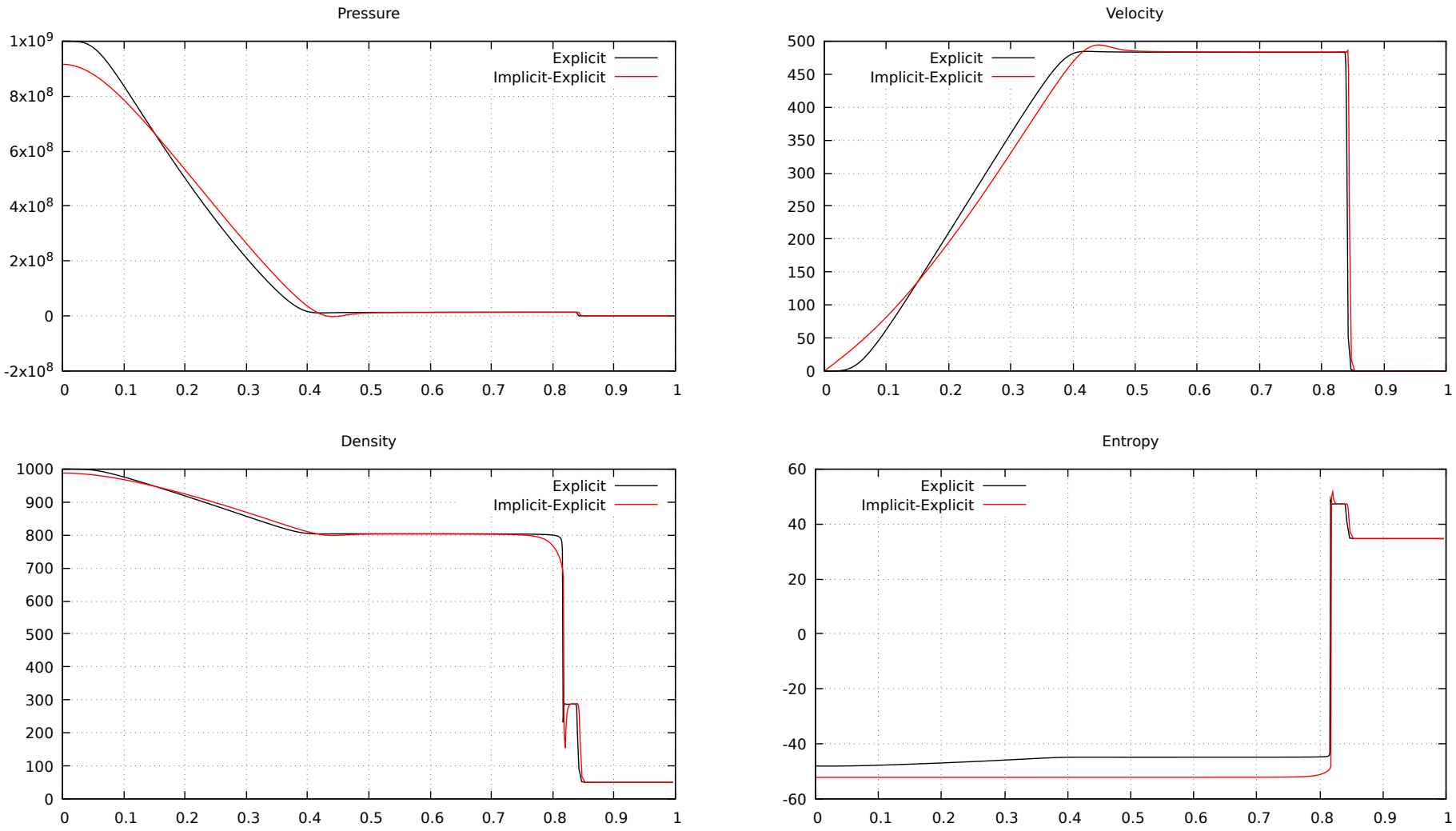
  950 mailles [0,0.7] traitées avec le schéma implicite

  50 mailles [0.7,1] traitées en explicite

- Le théorème d'existence et d'unicité s'applique avec $U = (-(\pi + p), \mathbf{u})$.

. [10] R. Saurel and R. Abgrall. A simple method for compressible multifluid flows. SIAM J. SCI. Comput. 1999

Couplage eau-air



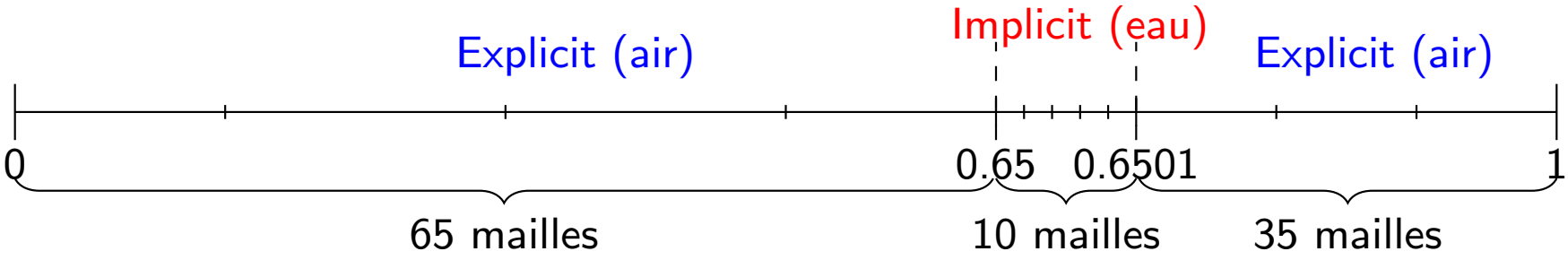
Tube à choc de Sod perturbé par une goutte d'eau

- Conditions initiales

$$p_0(x) = \begin{cases} 10^7 & x < 0.5 \\ 10^6 & x > 0.5 \end{cases}, \quad \rho_0(x) = \begin{cases} 5 & x < 0.5 \\ 1 & 0.5 < x < 0.65 \\ 1000 & 0.65 < x < 6.6501 \\ 1 & x > 0.6501 \end{cases}, \quad u_0(x) = 0,$$

$$\gamma_0(x) = \begin{cases} 1.4 & x < 0.65 \\ 4.4 & 0.65 < x < 0.6501 \\ 1.4 & x > 0.6501 \end{cases}, \quad \pi_0(x) = 6 \cdot 10^8 \quad x \in [0.65, 0.6501]$$

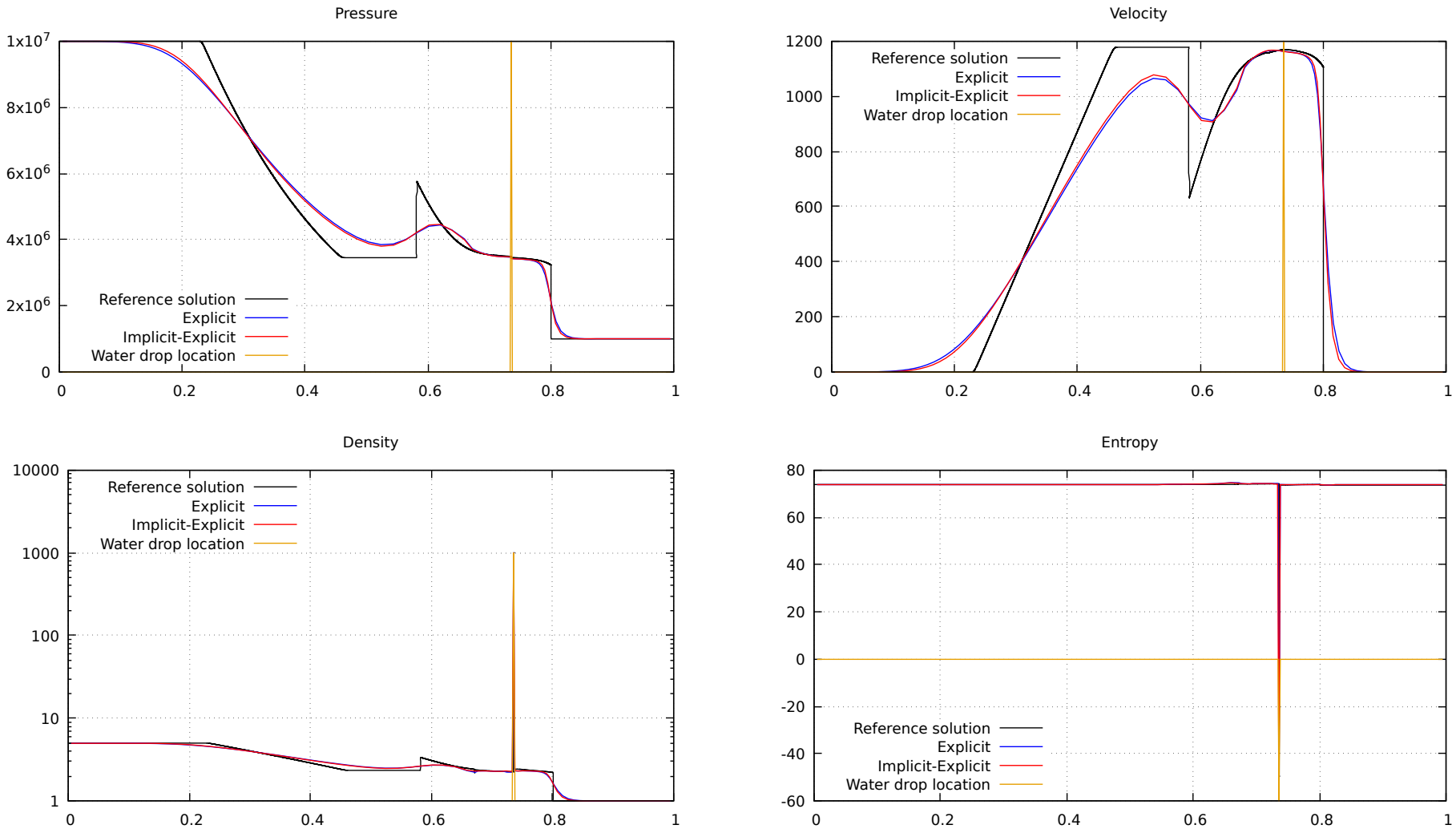
- Maillage : 110 mailles



- Couplage explicite-implicite plus efficace

Explicite : 65 161 itérations en temps, $dt = 2.45 \cdot 10^{-9}$ (76.5s)
Implicite - Explicite : 158 itérations en temps, $dt = 2.58 \cdot 10^{-7}$ (4.5s)

Tube à choc de Sod perturbé par une goutte d'eau



Tube à choc de Sod 2D

- Conditions initiales :

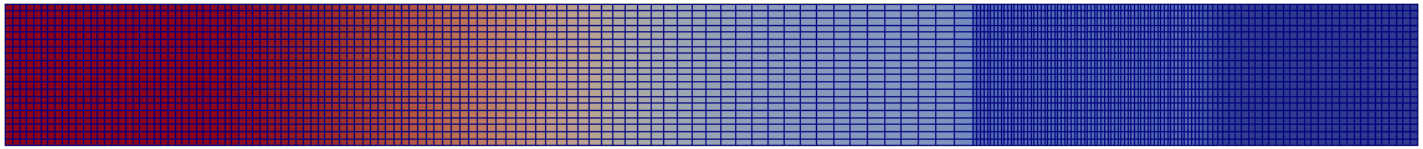
$$p_0(x,y) = \begin{cases} 1 & x < 0.5 \\ 0.1 & x \geqslant 0.5 \end{cases}, \quad \rho_0(x,y) = \begin{cases} 1 & x < 0.5 \\ 0.125 & x \geqslant 0.5 \end{cases},$$

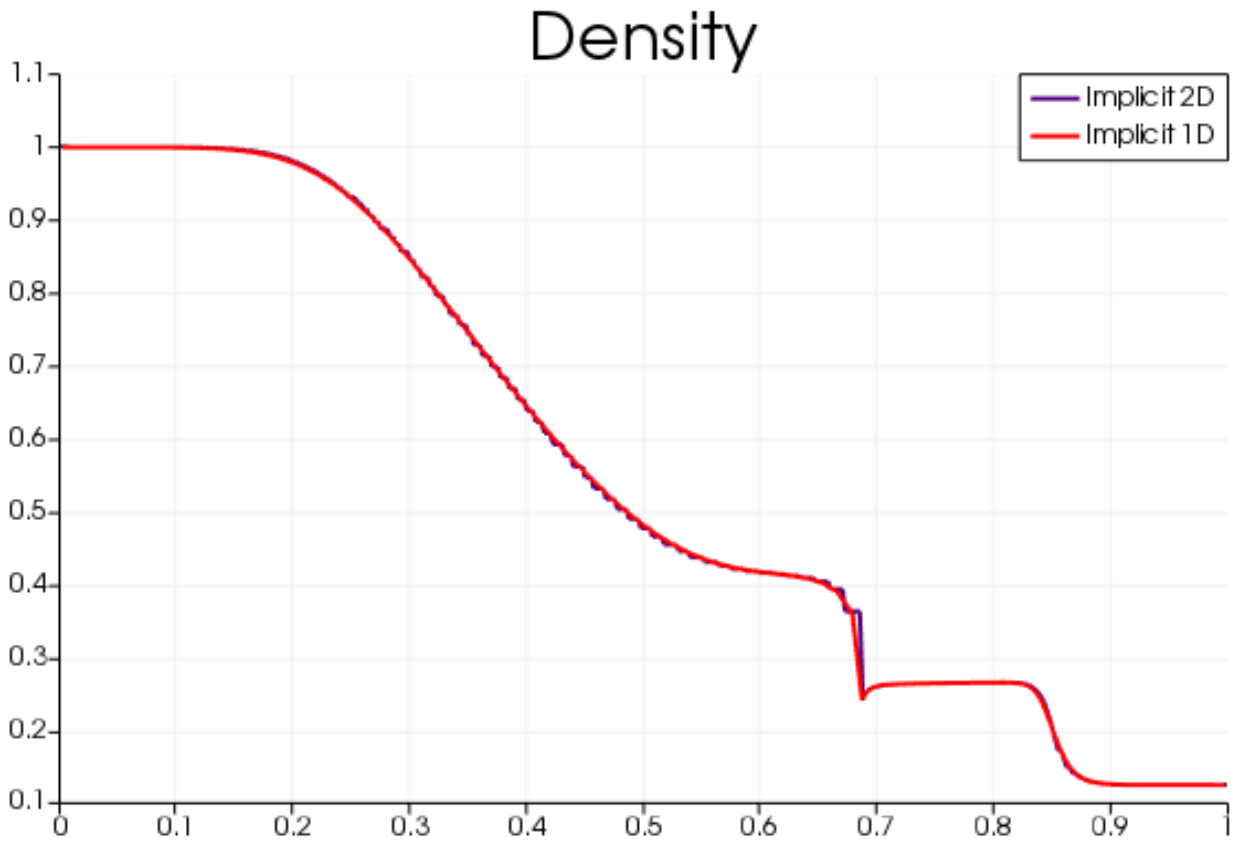
$$u_0(x,y) = 0, \quad \gamma = 1.4.$$

$\forall\ n,\ \langle \mathbf{C}_{jr}^{n+1}, \mathbf{u}_r^{n+1} \rangle = \langle \mathbf{C}_{jr}^{n}, \mathbf{u}_r^{n+1} \rangle.$

- Conditions au bord : symétrie
- CFL explicite : 0.4
- CFL implicite : 2

- Maillage à $t = 0.2$





Conclusion

- Stratégie de schéma de type prédiction-correction basé sur [2]
- Définition d'un cadre abstrait pour l'analyse de certains schémas implicites
- Preuve de l'existence et l'unicité d'une solution pour le schéma non linéaire de prédiction avec flux à deux états, voir preuve complète [9]
- Implémentation et tests numériques

Perspectives :

- Garantir la GCL en utilisant $\mathbf{C}_{jr} = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_{jr}^n + \mathbf{C}_{jr}^{n+1})$, et démontrer la convergence du schéma
- Démontrer la croissance de l'entropie grâce à la formulation $\nabla J(U) = AU$ et à l'analyse convexe

. [2] C.Marmignon, C. Chalons, F. Coquel. Time Implicit Approximation of the Multipressure Gas Dynamics Equations in Several Time Space Dimensions. SIAM, 48 :1678-106, 2010.

. [9] A. Plessier, S. Del Pino, B. Després. Implicit discretization of Lagrangian gas dynamics, soumis.

Bibliographie

[1] Brézis, H. Opérateurs Maximaux Monotones et semi-groupes de contractions dans les espaces de Hilbert. Elsevier, 1973.

[2] Chalons, C., Coquel, F., and Marmignon, C. Time-implicit approximation of the multipressure gas dynamics equations in several space dimensions. SIAM, 48 :1678–1706, 2010.

[3] Coddington, E. and Levinson, N. Theory of Ordinary Differential Equations. Tata McGraw-Hill Education, 1955.

[4] Demailly, J.-P. Analyse Numérique et Equations Différentielles-4ème Ed. EDP sciences, 2016.

[5] Hirriart-Urruty, J.-B. Optimisation et Analyse Convexe. EDP Sciences, 1998.

[6] Hirriart-Urruty, J.-B. and Lemaréchal, C. Fundamentals of Convex Analysis. Springer-Verlag, 2004.

[7] Kluth, G. and Després, B. Discretization of hyperelasticity on unstructured mesh with a cell-centered Lagrangian scheme. Journal of Computational Physics, 229(24) :9092–9118, 2010.

[8] Maire, P.-H., Abgrall, R., Breil, J., Loubère, R., and Rebourcet, B. A nominally sceond-order cell-centered Lagrangian scheme for simulating elastic-plastic flows on two-dimensional unstructured grids. Journal Of Computational Physics, 235 :626–665, 2013.

[9] Plessier, A. and S. Del Pino, B. Després. Implicit discretization of lagrangian gas dynamics. soumis.

[10] Saurel, R. and Abgrall, R. A simple method for compressible multifluid flows. SIAM J. Sci. Comput., 21 :1115–1145, 1999.