



DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

Schémas implicites semi-lagrangiens pour la dynamique des gaz compressibles en dimension 1

SMAI | <u>Alexiane PLESSIER</u>, Stéphane DEL PINO, Bruno DESPRÉS | Juin 2021

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives - www.cea.fr

Plan

1 Présentation

- Sujet
- Problèmes rencontrés
- Objectifs
- Équations d'Euler
- 2 Schémas
 - Schémas de type prédiction-correction
 - 3 schémas implicites différents
- 3 Outil technique important
 - Formalisation
 - Outil technique
 - Étapes clés de la démonstration

4 Equations d'Euler

- Application aux équations d'Euler
- Propriétés du schéma implicite
- Résultats numériques
- 5 Conclusion



- 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

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x (\rho u) = 0, \\ \partial_t (\rho u) + \partial_x (\rho u^2 + p) = 0, \\ \partial_t (\rho E) + \partial_x ((\rho E + p)u) = 0. \end{cases}$$



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

$$\mathsf{CFL}: c \frac{\Delta t}{\Delta x} \leqslant 1.$$

CFL dans le cas d'une structure solide fine

$$egin{array}{c} \Delta x o 0 \ ext{vitesse du son } c \gg 1 \end{array} \implies \Delta t$$
 très petit.

Stratégie générale :

- Développer un schéma implicite Lagrangien pour la partie fluide [1]
- 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, stable au sens de l'entropie
- . [1] 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 :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x (\rho u) = 0, & \text{entropie} \\ \\ \partial_t (\rho u) + \partial_x (\rho u^2 + p) = 0, & + \\ \\ \partial_t (\rho E) + \partial_x ((\rho E + p)u) = 0. & \partial_t (\rho S) + \partial_x (\rho S u) \ge 0. \end{cases}$$

■ Lagrangien : $D_t := \partial_t + u \partial_x$ où u est la vitesse du fluide.

(1)
$$\begin{cases} \rho D_t \tau - \partial_x u = 0, & \text{entropie} \\ \rho D_t u + \partial_x p = 0, & + \\ \rho D_t E + \partial_x (pu) = 0. & \rho D_t S \ge 0. \end{cases}$$



Méthode :

Phase de prédiction : schéma implicite Lagrangien pour les équations d'Euler isentropiques [1]

(2)
$$\begin{cases} \rho D_t \tau - \partial_x u = 0, & \text{entropie} \\ \rho D_t u + \partial_x p = 0, & + \\ \rho D_t S = 0. & \rho D_t E + \partial_x (pu) \leq 0. \end{cases}$$

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

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

^{. [1]} 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.



Adaptation du schéma Eulérien relaxé de [1]

$$\begin{cases} \overline{\tau_j} = \tau_j^n + \nu_j (\overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}), \\\\ \overline{u_j} = u_j^n + \nu_j (\overline{\Pi_{j-\frac{1}{2}}} - \overline{\Pi_{j-\frac{1}{2}}}), \\\\ \overline{\Pi_j} = \Pi_j^n - \nu_j a^2 (\overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}) \\\\ + \nu_j \lambda \rho_j^n (p_j^n - \overline{\Pi_j}), \\\\ \overline{S_j} = S_j^n. \end{cases}$$
$$\overline{\Pi_j} - \overline{\Pi_{j+\frac{1}{2}}} = (\rho c)_j^n (\overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{u_j}), \ \overline{\Pi_j} - \overline{\Pi_{j-\frac{1}{2}}} = (\rho c)_j^n (\overline{u_j} - \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}). \end{cases}$$

- Analyse théorique incomplète (inégalité d'entropie [9])
- Constatation que Δt ne peut pas être pris très grand

^{. [1]} 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]} N. Seguin, F. Coquel, E. Godlewski. Approximation par relaxation de systèmes hyperboliques, Séminaire d'analyse appliquée, 2008



• Linéarisation de
$$\tau$$
 ($c^2 = -\frac{1}{\rho^2}\partial_{\tau}p$) [4]

$$\begin{cases} \overline{p_j} = p_j^n - \frac{\nu_j}{(\rho_j^n c_j^n)^2} (\overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}), \\\\ \overline{u_j} = u_j^n + \nu_j (\overline{p_{j-\frac{1}{2}}} - \overline{p_{j+\frac{1}{2}}}), \\\\ \overline{S_j} = S_j^n \end{cases}$$
$$\overline{p_j} - \overline{p_{j+\frac{1}{2}}} = \alpha_{j+\frac{1}{2}}^n (\overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{u_j}), \ \overline{p_j} - \overline{p_{j-\frac{1}{2}}} = \alpha_{j-\frac{1}{2}}^n (\overline{u_j} - \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}). \end{cases}$$

- Incapable de prouver la stabilité entropique
- Observation de la non stabilité pour les grands pas de temps

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

^{. [4]} B. Després, Numerical Methods for Eulerian and Lagrangian Conservation Laws, Birkhäuser Basel, 2017



Conserver la structure de (2)

$$\begin{cases} \overline{\tau_j} = \tau_j^n + \nu_j (\overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}), \\\\ \overline{u_j} = u_j^n + \nu_j (\overline{p_{j-\frac{1}{2}}} - \overline{p_{j+\frac{1}{2}}}), \\\\ \overline{S_j} = S_j^n. \end{cases}$$
$$\overline{p_j} - \overline{p_{j+\frac{1}{2}}} = \alpha_{j+\frac{1}{2}}^n (\overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{u_j}), \ \overline{p_j} - \overline{p_{j-\frac{1}{2}}} = \alpha_{j-\frac{1}{2}}^n (\overline{u_j} - \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}). \end{cases}$$

Analyse théorique, et preuve de l'existence et de l'unicité (schéma bien défini)
 Stabilité inconditionnelle (selon les conditions au bord)



Restaurer la conservation de l'énergie totale E

Schéma relaxé

Schéma linéarisé et non linéaire

$$\begin{cases} \tau_{j}^{n+1} = \tau_{j}^{n} + \nu_{j} (\overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}), \\ u_{j}^{n+1} = u_{j}^{n} + \nu_{j} (\overline{\Pi_{j-\frac{1}{2}}} - \overline{\Pi_{j+\frac{1}{2}}}), \\ E_{j}^{n+1} = E_{j}^{n} - \nu_{j} (\overline{\Pi_{j+\frac{1}{2}}} \overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{\Pi_{j-\frac{1}{2}}} \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}), \\ E_{j}^{n+1} = E_{j}^{n} - \nu_{j} (\overline{\Pi_{j+\frac{1}{2}}} \overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{\Pi_{j-\frac{1}{2}}} \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}), \\ E_{j}^{n+1} = E_{j}^{n} - \nu_{j} (\overline{p_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{p_{j+\frac{1}{2}}}), \\ E_{j}^{n+1} = E_{j}^{n} - \nu_{j} (\overline{p_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{p_{j-\frac{1}{2}}} \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}), \\ \overline{\Pi_{j}} - \overline{\Pi_{j+\frac{1}{2}}} = (\rho c)_{j}^{n} (\overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{u_{j}}), \\ \overline{\Pi_{j}} - \overline{\Pi_{j-\frac{1}{2}}} = (\rho c)_{j}^{n} (\overline{u_{j}} - \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}). \\ \end{array}$$

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

$$\begin{cases} \overline{\tau_j} = \tau_j^n + \nu_j (\overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}), \\ \overline{u_j} = u_j^n + \nu_j (\overline{p_{j-\frac{1}{2}}} - \overline{p_{j+\frac{1}{2}}}), \\ \overline{S_j} = S_j^n. \end{cases}$$

$$\overline{p_j} - \overline{p_{j+\frac{1}{2}}} = \alpha_{j+\frac{1}{2}}^n (\overline{u_{j+\frac{1}{2}}} - \overline{u_j}), \ \overline{p_j} - \overline{p_{j-\frac{1}{2}}} = \alpha_{j-\frac{1}{2}}^n (\overline{u_j} - \overline{u_{j-\frac{1}{2}}}).$$



 $J:]-\infty, 0[^{N} \times \mathbb{R}^{N} \to \mathbb{R}, U = ((-\overline{p_{j}})_{j \in \mathcal{M}}, (\overline{u_{j}})_{j \in \mathcal{M}}) \in \mathbb{R}^{N} \times \mathbb{R}^{N}, A \in \mathbb{R}^{2N \times 2N}.$

On peut mettre la phase de prédiction du schéma 3 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 $m \ge 0$ sont deux entiers. Son bord est $\partial \mathcal{D} = \{ V \in \mathbb{R}^{n+m} : \exists j^* \in \{1, ..., n\} \ V_{j^*} = 0, \forall j \ne j^* \in \{1, ..., n\}, \ V_j \le 0 \}.$
- (H2) La fonction $J : U \in \mathcal{D} \to J(U) \in \mathbb{R}$ est \mathcal{C}^2 , strictement convexe et coercive. De plus, pour tout $V \in \partial \mathcal{D}$ il existe une direction unitaire sortante $d \in \mathbb{R}^{n+m}$ telle que $(\nabla J(V \varepsilon d), d) \xrightarrow[V \varepsilon d \in \mathcal{D}]{} +\infty$. Également, pour tout

 $V \in \partial \mathcal{D}$, on a $||\nabla J(W)|| \xrightarrow{W \to V} +\infty$.

■ (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

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

possède une unique solution.



- Démontrer l'unicité,
- 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 [2], [3].

. [3] J.-P. Demailly, Analyse Numérique et Équations Différentielles - 4^{ème}Ed, EDPSciences, 2016.

13/28

^{. [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.

^{. [2]} E. Coddington, N. Levinson, Theory of Ordinary Differential Equations, Tata McGraw-Hill Education, 1955.

cea

avec $C_i =$

Application aux équations d'Euler

 $\nabla J(U) = AU$

 $\boldsymbol{J}: \]-\infty, 0[^{N}\times\mathbb{R}^{N}\to\mathbb{R}, U=((-\overline{p_{j}})_{j\in\mathcal{M}}, (\overline{u_{j}})_{j\in\mathcal{M}})\in\mathbb{R}^{N}\times\mathbb{R}^{N}, A\in\mathbb{R}^{2N\times2N}.$

$$J(U) = \sum_{j=1}^{N} \frac{2M_j}{\Delta t} \left[-C_j \overline{p_j}^{1-\frac{1}{\gamma}} + \tau_j^n \overline{p_j} - u_j^n \overline{u_j} + \frac{\overline{u_j}^2}{2} \right]$$
$$+ \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{\alpha_{j+\frac{1}{2}}} \frac{(\overline{p_{j+1}} - \overline{p_j})^2}{2} + \alpha_{j+\frac{1}{2}} \frac{(\overline{u_j} - \overline{u_{j+1}})^2}{2},$$
$$\gamma(\gamma - 1)^{-1+\frac{1}{\gamma}} \exp\left(\frac{S_j}{C_v}\right)^{\frac{1}{\gamma}} \text{ (gaz parfaits).}$$
$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} 0 & B \\ B & 0 \end{bmatrix} \text{avec } B = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

٠

Phase de prédiction :

Le schéma est conservatif (masse, impulsion, entropie)

$$\overline{S_j} = S_j^n$$
.

- Il existe une unique solution $((\overline{\tau}_j)_{j \in \mathcal{M}}, (\overline{u}_j)_{j \in \mathcal{M}}, (\overline{S}_j)_{j \in \mathcal{M}})$.
- Le schéma satisfait une inégalité d'entropie non triviale

$$\frac{\overline{E_j}-E_j^n}{\Delta t}+\frac{(\overline{pu})_{j+\frac{1}{2}}-(\overline{pu})_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta m}\leqslant 0,$$

 $(\overline{pu})_{j+\frac{1}{2}} = \overline{p_{j+\frac{1}{2}}} \ \overline{u_{j+\frac{1}{2}}}.$

Phase de correction :

Le schéma est conservatif (masse, impulsion, énergie totale)

$$\frac{E_j^{n+1}-E_j^n}{\Delta t}+\frac{(\overline{pu})_{j+\frac{1}{2}}-(\overline{pu})_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta m}=0,$$

 \blacksquare Le schéma satisfait la croissance de l'entropie physique S.

$$\frac{S_j^{n+1}-S_j^n}{\Delta t} \geqslant 0.$$

Preuve de la croissance de l'entropie physique *S* (schéma complet)

Phase de prédiction :
$$r^n := \frac{\overline{E_j} - E_j^n}{\Delta t} + \frac{(\overline{pu})_{j+\frac{1}{2}} - (\overline{pu})_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta m} \leq 0, \quad \overline{S_j} = S_j^n.$$
Phase de correction : $\frac{E_j^{n+1} - E_j^n}{\Delta t} = -\frac{((\overline{pu})_{j+\frac{1}{2}} - (\overline{pu})_{j-\frac{1}{2}})}{\Delta m}.$
 $\frac{E_j^{n+1} - \overline{E_j}}{\Delta t} = \frac{E_j^{n+1} - E_j^n + E_j^n - \overline{E_j}}{\Delta t}$
 $= -\frac{((\overline{pu})_{j+\frac{1}{2}} - (\overline{pu})_{j-\frac{1}{2}})}{\Delta m} - r^n + \frac{((\overline{pu})_{j+\frac{1}{2}} - (\overline{pu})_{j-\frac{1}{2}})}{\Delta m}$
 $= -r^n \ge 0.$

• Comme $u^{n+1} = \overline{u}$ et de = dE - udu, alors

$$\frac{e_j^{n+1}-\overline{e}_j}{\Delta t}=-r^n\geqslant 0.$$

On évalue la variation de S

$$\frac{S_j^{n+1} - S_j^n}{\Delta t} = \frac{S_j^{n+1} - \overline{S}_j}{\Delta t} + \frac{\overline{S}_j - S_j^n}{\Delta t} = \frac{S_j^{n+1} - \overline{S}_j}{\Delta t}$$

D'après la relation de Gibbs $TdS = de + pd\tau$, or $\tau^{n+1} = \overline{\tau}$, donc $S(e, \rho) = S(e)$ et on trouve

$$\frac{S_j^{n+1}-S_j^n}{\Delta t}=\frac{S(e_j^{n+1},\overline{\rho}_j)-S(\overline{e}_j,\overline{\rho}_j)}{\Delta t}\geqslant 0.$$

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives



Schémas :

- explicite : Solveur acoustique lagrangien
- implicite : Schéma 1 (prédiction relaxée) Schéma 2 (prédiction linéarisée) Schéma 3 (prédiction non linéarire)

Comparaisons :

- précision, avec le même pas de temps pour les 4 schémas,
- robustesse, avec des pas de temps de plus en plus grands en implicite.
- différentes conditions au bord

Cas test :

- Tube à choc de Sod
- Tube à choc de Sod avec rebond

Autres



Conditions initiales

$$p_0(x) = egin{cases} 1 & x < 0.5 \ 0.1 & x \geqslant 0.5 \ \end{pmatrix}, \quad
ho_0(x) = egin{cases} 1 & x < 0.5 \ 0.125 & x \geqslant 0.5 \ \end{pmatrix}, \quad u_0(x) = 0.$$

Conditions au bord

- vitesse : $u_{left} = 0$, $u_{right} = 0$.
- pression : $p_{left} = 1$, $p_{right} = 0.1$.
- $\blacksquare \text{ mixtes} : u_{left} = 0, \qquad p_{right} = 0.1.$
- \blacksquare Temps final : 0.2, $\gamma = 1.4$



Maillage de 100 mailles, CFL=1.31.





Maillage de 100 mailles, CFL = 1.52.





20/28

100 cells, for a same CFL=0.4 ($dt = 1.49 \ 10^{-3}$).



Maillage de 100 mailles, CFL=4. Newton : 3 - 5 itérations



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



Maillage de 100 mailles, CFL=80. Newton : 4 - 6 itérations



Étude de la robustesse du schéma de prédiction non linéaire

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





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.

- Stratégie de schéma prédiction-correction basé sur [1]
- 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
- Implémentation et tests sur le schéma implicite pour Euler
- Tests de précision et de robustesse comparés au solveur acoustique explicite [4]
- Article bientôt disponible

Perspectives :

- Passer à un flux à deux états
- Étendre au cas multi-D
- Expliquer la convergence rapide du Newton, et la pression qui reste positive
- Essayer de démontrer la croissance de l'entropie grâce à la formulation $\nabla J(U) = AU$ et à l'analyse convexe

^{. [1]} 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.

^{. [4]} B. Després, Numerical Methods for Eulerian and Lagrangian Conservation Laws, Birkhäuser Basel, 2017

Bibliography



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.



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



Analyse Numérique et Equations Différentielles-4ème Ed. EDP sciences, 2016.



Després, B.

Demailly, J.-P.

Numerical Methods for Eulerian and Lagrangian Conservation Laws. Birkhäuser Basel, 2017.



Hirriart-Urruty, J.-B.

Optimisation et Analyse Convexe. EDP Sciences, 1998.



Hirriart-Urruty, J.-B. and Lemaréchal, C. Fundamentals of Convex Analysis.

Springer-Verlag, 2004.



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.



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.



Seguin, N., Coquel, F., and Godlewski, E. Approximation par relaxation de systèmes hyperboliques.