



DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

# UNE CLASSE DE SCHÉMAS CONSERVATIFS SUR GRILLES DÉCALÉES POUR LES SYSTÈMES HYPERBOLIQUES

22 Juin 2021

M. Ndjinga, K. Ait Ameer, C. Mounier, CEA Saclay et X-CMAP

DES/ISAS/DM2S/STMF/LMEC

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives - [www.cea.fr](http://www.cea.fr)

Contexte

Problématique bas Mach

Diffusion numérique de schémas classiques

Une nouvelle classe de schémas décalés

Résultats numériques

Conclusion et perspectives

## Contexte

Problématique bas Mach

Diffusion numérique de schémas classiques

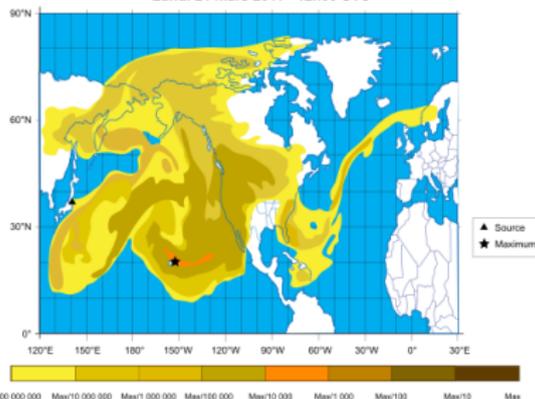
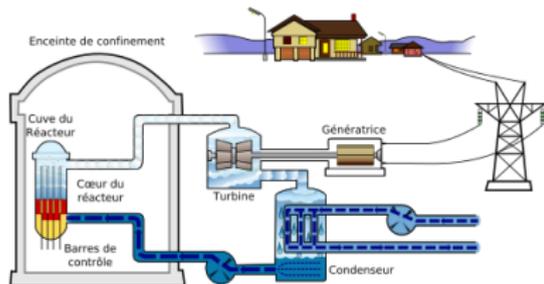
Une nouvelle classe de schémas décalés

Résultats numériques

Conclusion et perspectives



Lundi 21 mars 2011 - 12h00 UTC



Max/100 000 000 Max/10 000 000 Max/1 000 000 Max/100 000 Max/10 000 Max/1 000 Max/100 Max/10 Max

- ▶ Multicomponent flow : liquid, vapor, solid obstacles
- ▶ Stiff source terms (heat source, boiling, singular pressure loss)
- ▶ Flow in subsonic or supersonic regime
  - Note : define the Mach number for two phase flows
- ▶ Specifics of two phase flows
  - non conservative models (e.g. 6 and 7 equation model for two-phase flows)
  - characteristic fields neither GNL neither LD (e.g. 3 equation model with drift)
  - not always admit entropies (e.g. 3 equation model with drift)
  - sonic points in counter-current flows

Conséquence : la structure mathématique et le comportement numérique sont TRES DIFFERENTS du cas des écoulements monophasiques

Contexte

Problématique bas Mach

Diffusion numérique de schémas classiques

Une nouvelle classe de schémas décalés

Résultats numériques

Conclusion et perspectives

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \mu \Delta \mathbf{u} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\rho H \mathbf{u}) = \lambda \Delta T \end{array} \right. \quad (1)$$

- ▶  $\rho$ ,  $\mathbf{u}$ ,  $p$  may have very different magnitudes
- ▶ Use reference length  $L_{ref}$ , velocity  $u_{ref}$ , pressure  $p_{ref}$  to scale the equations
- ▶ Dimensionless numbers characterise the flow regimes
- ▶ Recover the low Mach asymptotic

New variables  $\rho := \frac{\rho}{\rho_{ref}}$ ,  $p := \frac{p}{p_{ref}}$ ,  $\mathbf{u} := \frac{\mathbf{u}}{u_{ref}}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \frac{1}{M^2} \nabla p = \frac{1}{\text{Re}} \Delta \mathbf{u} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\rho H \mathbf{u}) = \frac{1}{\text{Pe}} \Delta T \end{array} \right. \quad (2)$$

$$M = \frac{u_{ref}}{c_{ref}}, \quad \text{Re} = \frac{L_{ref} u_{ref}}{\frac{\mu}{\rho_{ref}}}, \quad \text{Pe} = \frac{L_{ref} u_{ref}}{\frac{\lambda}{\rho_{ref} c_p}}$$

- ▶ In a nuclear reactor,  $\text{Re} \gg 1$ ,  $\text{Pe} \gg 1$ ,  $M \ll 1$  ( $\|\mathbf{u}\| \ll c$ )
- ▶ We need more precision on  $p$  than on other variables

Note : the Mach number is not clearly defined in two-phase flow

For well prepared initial data ( $M \ll 1$  initially)

$$\begin{cases} \rho(\vec{x}, t = 0) = \rho_* + O(M)(\vec{x}) \\ p(\vec{x}, t = 0) = p_* + O(M^2)(\vec{x}) \\ u(\vec{x}, t = 0) = u_*(\vec{x}) + O(M)(\vec{x}) \end{cases}$$

the solution  $(\rho, p, u)(t, \vec{x})$  to the **compressible Euler equations** takes the form

$$\begin{cases} \rho(\vec{x}, t) = \rho_* + O(M)(\vec{x}, t) \\ p(\vec{x}, t) = p_* + O(M^2)(\vec{x}, t) \\ u(\vec{x}, t) = \tilde{u}(\vec{x}, t) + O(M)(\vec{x}, t) \end{cases}$$

where  $\tilde{u}$  is the solution of the **incompressible Euler equations** with initial data  $\tilde{u}(\vec{x}, 0) = u_*(\vec{x})$

- Numerical schemes should preserve this asymptotics

- ▶ Upwind based FV colocated methods (Godunov, Roe, ...)
  - do not satisfy the low Mach asymptotics ✗
- ▶ Centered FV colocated methods
  - satisfy the low Mach asymptotics... ✓

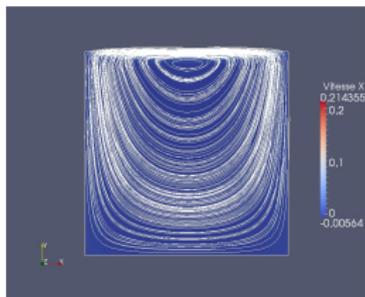


Figure: Implicit **upwind** scheme (Lid driven cavity)

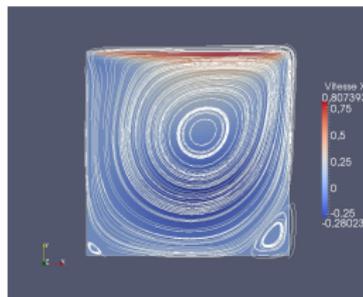
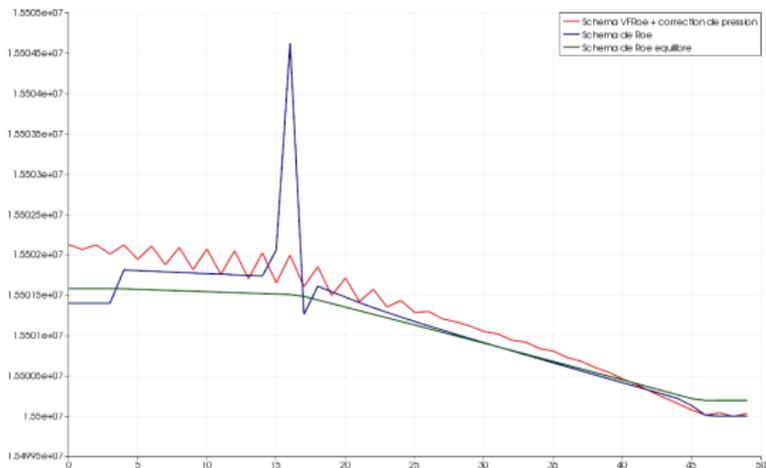


Figure: Implicit **centered** scheme (Lid driven cavity)

- but generate spurious **checkerboard** oscillations ✗

- ▶ Modèle diphasique à 4 équations
- ▶ Canal 1D Chauffé
- ▶ Termes sources raides : puissance de chauffage, changement de phase
- ▶ Comparaison des schémas VF colocalisés avec et sans traitement spécifique du terme source

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi\rho\vec{V}) = 0, \\ \frac{\partial(\phi\rho C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi\rho C\vec{V} + \phi\rho C(1-C)\vec{V}_r) = \nabla \cdot (\phi K_{cv}\nabla C) + \phi\Gamma_v, \\ \frac{\partial(\phi\rho\vec{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi\rho\vec{V} \otimes \vec{V} + \phi\rho C(1-C)\vec{V}_r \otimes \vec{V}_r + \phi P\mathbb{I}_d) = P\nabla\phi + \nabla \cdot (\phi\vec{\sigma}) + \phi\vec{\tau} + \phi\rho\vec{g} \\ \frac{\partial(\phi\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi\rho H\vec{V} + \phi\rho C(1-C)(H_v - H_l)\vec{V}_r) = \phi\rho\vec{g} \cdot \vec{V} + \phi Q + \nabla \cdot (\phi\vec{q}) \end{array} \right. \quad (3)$$



- ▶ La pression doit être décroissante
- ▶ Schéma upwind → Oscillations parasites ✗
- ▶ Schéma centré → Oscillations parasites ✗
- ▶ Schéma upwind + traitement spécifique du terme source ✓

Observation empirique :

- ▶ **Solveurs VF colocalisés** → oscillations parasites et/ou pb de précision à faible nombre de Mach
  - Solveurs de Riemann basés sur la théorie des systèmes hyperboliques de lois de conservation
  - Solveurs de pression colocalisés inspirés du cas incompressible (méthodes de projection)
  - Oscillations d'autant plus importantes qu'un terme source est présent
- ▶ **Solveurs VF décalés** → plus robustes aux termes sources mais
  - Souvent basé sur des formulations non conservatives
  - Extension aux maillages généraux délicate

Nécessité d'un cadre théorique permettant la construction et l'analyse de schémas décalés stables.

Contexte

Problématique bas Mach

**Diffusion numérique de schémas classiques**

Une nouvelle classe de schémas décalés

Résultats numériques

Conclusion et perspectives

Soit une EDP non linéaire

$$\partial_t U + A(U) \partial_x U = 0. \quad (4)$$

Pour une semi-discrétisation *disc* à 2 points donnée

$$\partial_t U_i + A_{disc}^+ \frac{U_i - U_{i-1}}{\Delta x} + A_{disc}^- \frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x} = 0. \quad (5)$$

on trouve lorsque  $\Delta x \rightarrow 0$  :

$$\partial_t U + A \partial_x U = \mathcal{D}(U, \Delta x) + o(\Delta x) \quad (6)$$

$$= -\Delta x D_{disc} \partial_{xx} U + o(\Delta x). \quad (7)$$

où

- ▶  $A = A_{disc}^+ + A_{disc}^-$  (consistance de (5) avec (4))
- ▶  $D = A_{disc}^+ - A_{disc}^-$  représente la diffusion/dissipation numérique  $\rightarrow$  stabilité et précision du schéma.

On néglige le terme  $q^2/\rho = \rho u^2$  dans les équations d'Euler:

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x q = 0 \\ \partial_t q + c^2 \partial_x \rho = 0 \end{cases}$$

C'est un système hyperbolique linéaire de valeurs propres  $\pm c$ .

Discrétisation centrée :

$$\begin{cases} \partial_t \rho_i + \frac{q_{i+1} - q_{i-1}}{2\Delta x} = 0 \\ \partial_t q_i + c^2 \frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{2\Delta x} = 0 \end{cases}$$

- ▶  $D_{centre} = 0$  (schéma d'ordre 2)
- ▶  $D_{centre}$  est diagonalisable
- ▶ Découplage pair/impair des cellules

## Discrétisation upwind

$$\begin{cases} \partial_t \rho_i + \frac{q_{i+1} - q_{i-1}}{2\Delta x} = c \frac{\rho_{i+1} - 2\rho_i + \rho_{i-1}}{\Delta x} \\ \partial_t q_i + c^2 \frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{2\Delta x} = c \frac{q_{i+1} - 2q_i + q_{i-1}}{\Delta x} \end{cases}$$

Matrice de diffusion numérique associée :

$$D_{upwind} = |A_{wave}| = \begin{pmatrix} c & 0 \\ 0 & c \end{pmatrix}, \quad A_{wave} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ c^2 & 0 \end{pmatrix}.$$

- ▶ On applique la même dissipation numérique aux deux équations.
- ▶ la matrice de diffusion numérique  $D_{upwind}$  est diagonalisable sur  $\mathbb{R}$

### Discrétisation décalée “simple”

$$\begin{cases} \partial_t \rho_i + \frac{q_{i+1/2} - q_{i-1/2}}{\Delta x} = 0 \\ \partial_t q_{i+1/2} + c^2 \frac{\rho_{i+1} - \rho_i}{\Delta x} = 0 \end{cases}, \quad U_i = \begin{pmatrix} \rho_i \\ q_{i+1/2} \end{pmatrix}.$$

Matrice de diffusion numérique associée :

$$D_{stag} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -c^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_{wave} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ c^2 & 0 \end{pmatrix}.$$

- ▶ L'essentiel de la diffusion numérique porte sur la deuxième équation.
- ▶ la matrice de diffusion numérique  $D_{stag}$  n'est pas diagonalisable sur  $\mathbb{R}$

## Discrétisation décalée de la littérature (plus complexe)

$$\begin{cases} \partial_t \rho_i + \frac{1}{\Delta x} (\rho_{i+\frac{1}{2}}^{up} u_{i+\frac{1}{2}} - \rho_{i-\frac{1}{2}}^{up} u_{i-\frac{1}{2}}) = 0 \\ \partial_t \left( \bar{\rho}_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2}} \right) + c^2 \frac{1}{\Delta x} (\rho_{i+1} - \rho_i) = 0, \end{cases} \quad (8)$$

avec

$$\begin{cases} \rho_{i+\frac{1}{2}}^{up} = \frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \text{sign}(u_{i+\frac{1}{2}}) \frac{\rho_i - \rho_{i+1}}{2}, \\ \bar{\rho}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\rho_i + \rho_{i+1}). \end{cases} \quad (9)$$

$$\mathcal{D}(U, \Delta x) = \Delta x \begin{pmatrix} \text{sign}(u) & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \partial_x \left[ \begin{pmatrix} u & 0 \\ c^2 & 0 \end{pmatrix} \partial_x \begin{pmatrix} \rho \\ q \end{pmatrix} \right]. \quad (10)$$

- ▶ Si  $\text{sign}(u)$  est constant le schéma est linéarisable et stable
- ▶ Si  $\text{sign}(u)$  varie le schéma n'est pas linéarisable

Pour un **système conservatif** d'EDPs

$$\partial_t U + \partial_x F(U) = 0 \quad \text{forme conservative}$$

un **schéma conservatif** prend la forme

$$\partial_t U_i + \frac{F_{i,i+1} - F_{i-1,i}}{\Delta x} = 0 \quad (11)$$

On peut écrire les **flux numériques**  $F_{ij}$  comme la somme d'une partie centrée et d'une partie décentrée

$$F_{i,j} = \frac{F(U_i) + F(U_j)}{2} + D \frac{U_i - U_j}{2}, \quad (12)$$

Lorsque  $\Delta x \rightarrow 0$ , (11) donne

$$\partial_t U + \partial_x F(U) = \Delta x D \partial_{xx} U + \mathcal{O}((\Delta x)^2).$$

- Pour un opérateur  $D$  donné, il existe un schéma conservatif ayant pour diffusion numérique  $D$

Contexte

Problématique bas Mach

Diffusion numérique de schémas classiques

**Une nouvelle classe de schémas décalés**

Résultats numériques

Conclusion et perspectives

Après linéarisation, on s'intéresse au système hyperbolique

$$\partial_t U + A \partial_x U = 0, \quad F(U) = AU$$

A doit être diagonalisable  $\Rightarrow$  symétrisation possible

$$S = P^{-1}AP, \quad {}^tS = S$$

- ▶ changement de variables  $\bar{U} = PU$  :

$$\partial_t \bar{U} + S \partial_x \bar{U} = 0$$

- ▶ En variables “symétrisantes”, l'énergie reste constante

$$\partial_t \int_{\mathbb{R}} \|\bar{U}\|^2 dx = 0.$$

- ▶ D'où la stabilité en continu pour un système hyperbolique:

$$\|\bar{U}(\cdot, t)\|_{L^2} = \|\bar{U}_0\|_{L^2}.$$

- 1 On considère un schéma de diffusion numérique  $D$
- 2 On calcule l'évolution de la norme dans la base symétrisante

$$\partial_t \int_{\mathbb{R}} \|\bar{U}_h\|^2 dx = -h \int {}^t(\partial_x \bar{U}_h)(\bar{D} + {}^t\bar{D})(\partial_x \bar{U}_h) + o(h).$$

- 3 On conclut que
  - le schéma sera stable si

$$\boxed{\bar{D} + {}^t\bar{D} \geq 0}$$

$$\Rightarrow \|\bar{U}_h(\cdot, t)\|_{L^2} \leq \|\bar{U}_{h0}\|_{L^2}. \quad (13)$$

- le taux de dissipation est lié au spectre de  $\bar{D} + {}^t\bar{D}$

► Le schéma upwind :

$$D_{upwind} = c\mathbb{I}_d, \quad \bar{D}_{upwind} = c\mathbb{I}_d, \quad \bar{D}_{upwind} + {}^t\bar{D}_{upwind} = c\mathbb{I}_d.$$

- Fort couplage entre cellules ✓
- Diffusion numérique trop forte si  $c \gg \|u\|$  ✗

► Le schéma centré :

$$D_{centered} = 0, \quad \bar{D}_{centered} = 0, \quad \bar{D}_{centered} + {}^t\bar{D}_{centered} = 0.$$

- Diffusion numérique nulle ✓
- Découplage des cellules paires et impaires ✗

► Le schéma décalé :

$$D_{stag} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -c^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{D}_{stag} = \begin{pmatrix} 0 & c \\ -c & 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{D}_{stag} + {}^t\bar{D}_{stag} = 0.$$

- Diffusion numérique nulle ✓
- Fort couplage entre cellules ✓

- 1 Déterminer une matrice  $D$  vérifiant les critères de stabilité ET de précision
  - $\bar{D} + {}^t\bar{D} \geq 0$  (stabilité)
  - $\bar{D} + {}^t\bar{D}$  ne contient pas la vitesse du son  $c$  (precision)
- 2 calculer les flux entre cellules à partir de l'expression :

$$F_{i,j} = \frac{F(U_i) + F(U_j)}{2} + D \frac{U_i - U_j}{2}$$

Remarques :

- ▶ Le schéma peut être colocalisé comme décalé, one step ou multistep
- ▶ Le schéma est en général implicite si  $Sp(\bar{D}) \subset i\mathbb{R}$
- ▶ On peut avoir une dissipation nulle  $\|\bar{U}_h(\cdot, t)\|_{L^2} = \|\bar{U}_{h0}\|_{L^2}$  et un décentrement  $\bar{D}$  non nul

We consider the following Euler equations :

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (14)$$

$$\partial_t(\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p = 0 \quad (15)$$

$$\partial_t(\rho(e + \frac{1}{2} \|\vec{u}\|^2)) + \nabla \cdot ((\rho e + \frac{1}{2} \rho \|\vec{u}\|^2 + p) \vec{u}) = 0 \quad (16)$$

Symmetrisation with  $\left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_e$ ,  $\left. \frac{\partial p}{\partial e} \right|_\rho$  not appearing on the diagonal :

$$S = \begin{pmatrix} u & \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_e} & 0 \\ \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_e} & u & \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial e} \right|_\rho} \frac{p}{\rho^2} \\ 0 & \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial e} \right|_\rho} \frac{p}{\rho^2} & u \end{pmatrix}.$$

Dans la base symétrisante :

$$\bar{D}_{Stag} = \begin{pmatrix} |u| & \sqrt{\frac{\partial p}{\partial \rho}}|_e & 0 \\ -\sqrt{\frac{\partial p}{\partial \rho}}|_e & |u| & -\sqrt{\frac{\partial p}{\partial e}}|_\rho \frac{p}{\rho^2} \\ 0 & \sqrt{\frac{\partial p}{\partial e}}|_\rho \frac{p}{\rho^2} & |u| \end{pmatrix}$$

Dans la base physique :

$$D_{Stag} = \begin{pmatrix} |u| - u & 1 & 0 \\ -\frac{\partial p}{\partial \rho}|_e - u^2 + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial e}|_\rho \left(\frac{u^2}{2} - e\right) & u + |u| - \frac{u}{\rho} \frac{\partial p}{\partial e}|_\rho & \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial e}|_\rho \\ -u \left(c^2 + E - \frac{p}{\rho} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{u^2}{2} - e\right) \frac{\partial p}{\partial e}|_\rho\right) & E - \frac{p}{\rho} - \frac{u^2}{\rho} \frac{\partial p}{\partial e}|_\rho & \frac{1}{\rho} \left(u \frac{\partial p}{\partial e}|_\rho + |u| \rho\right) \end{pmatrix}$$

Contexte

Problématique bas Mach

Diffusion numérique de schémas classiques

Une nouvelle classe de schémas décalés

**Résultats numériques**

Conclusion et perspectives

## Problèmes de Riemann difficiles

- ▶ Evaluation de la Tests robustesse de méthodes numériques
- ▶ Solutions exactes disponibles → évaluation de la précision
- ▶ Evaluation des méthodes numériques en présence d'ondes de choc et de contact
- ▶ La loi d'état est celle d'un gaz parfait

Test	$\rho_L$	$u_L$	$p_L$	$\rho_R$	$u_R$	$p_R$
Toro1	1	0.75	1	0.125	0	0.1
Toro2	1	-2	0.4	1	2	0.4
Toro3	1	0	1000	1	0	0.01
Toro4	5.99924	19.5975	460.894	5.99242	-6.19633	46.0950
Toro5	1	-19.5975	1000	1	-19.59745	0.01
Toro6	1.4	0	1	1.4	0	1
Toro7	1.4	0.1	1	1	0.1	1

**Table:** Initial data for the seven tests Toro1, ... , Toro7

- ▶ Convergence de 6 tests sur 7
- ▶ Echec du test Toro2 (densité négative car régime proche du vide)

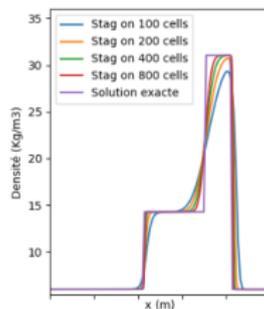
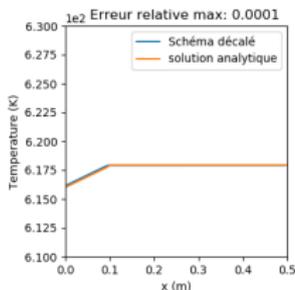
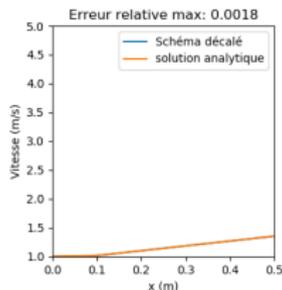
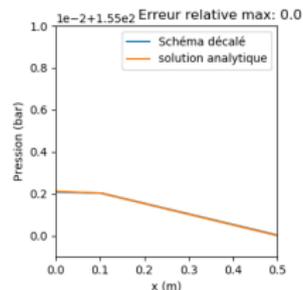
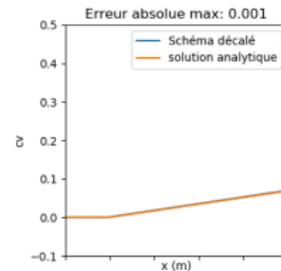
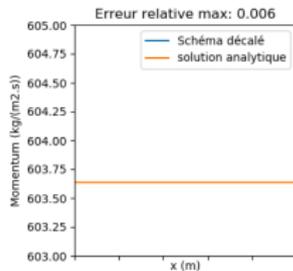
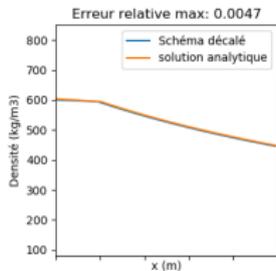


Figure: Densité du test Toro4

Nécessité d'un benchmark similaire diphasique  
Benchmark 2D et/ou avec termes source pour vérification des  
codes de calcul

- ▶ Canal 1D
- ▶ chauffage
- ▶ changement de phase



Contexte

Problématique bas Mach

Diffusion numérique de schémas classiques

Une nouvelle classe de schémas décalés

Résultats numériques

**Conclusion et perspectives**

Avec le nouveau schéma décalé (grille cartésienne)

- ▶ Simulation d'ondes de choc
- ▶ Simulation du chauffage
- ▶ Simulation du changement de phase
- ▶ Simulation d'une perte de charge singulière

Convergence vers la solution analytique (sauf proximité du vide).

Nous pouvons à présent étudier

- ▶ Des modèles diphasiques plus complexes (e.g. avec dérive)
- ▶ Analyse précise du bilan d'entropie
- ▶ Analyse précise du bilan du caractère TVD
- ▶ Extension aux maillages quelconques



**Thanks! Any questions?**