

10 JUIN 2025

DÉVELOPPEMENT DE MÉTHODES DE RÉSOLUTION INNOVANTES POUR LES SIMULATIONS CFD EN SÛRETÉ NUCLÉAIRE

Aubin Brunel et Laura Gastaldo

Vers des schémas à mailles décalées sur maillages généraux

Contexte

Mailles décalées et notations

Opérateur de convection

Opérateur de diffusion

Des schémas numériques pour la simulation de l'explosion

Modèle physique

Discrétisation spatiale

Schéma "implicite"

Schéma explicite

Résultats numériques

Vers des schémas à mailles décalées sur maillages généraux

Contexte

Mailles décalées et notations

Opérateur de convection

Opérateur de diffusion

Des schémas numériques pour la simulation de l'explosion

Modèle physique

Discrétisation spatiale

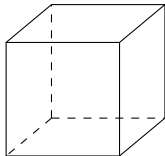
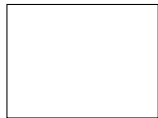
Schéma "implicite"

Schéma explicite

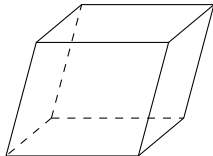
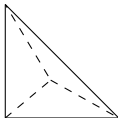
Résultats numériques

CONTEXTE

Maillages structurés :
Schéma MAC



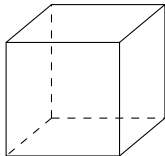
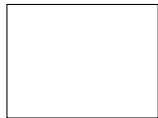
Maillages non-structurés :
Crouzeix-Raviart / Rannacher-Turek



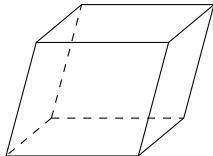
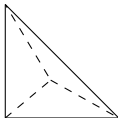
Quadrilatères et hexaèdres réguliers Triangles et tétraèdres / Quadrilatères et hexaèdres généraux

CONTEXTE

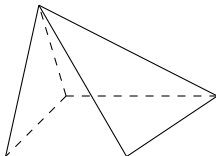
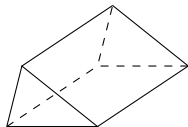
Maillages structurés :
Schéma MAC



Maillages non-structurés :
Crouzeix-Raviart / Rannacher-Turek



Maillages non-structurés généraux :



Quadrilatères et hexaèdres réguliers

Triangles et tétraèdres / Quadrilatères et hexaèdres généraux

Prismes et pyramides

OPÉRATEURS

$$\partial_t(\rho) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0,$$

$$\partial_t(\rho u_i) + \operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u}) - \mu \Delta u_i + \partial_i p = \mathbf{f}_i, \quad 1 \leq i \leq d,$$

Bilan de masse

Bilan de quantité de mouvement

Opérateur de convection : méthodes "volumes finis"

Opérateur de diffusion : méthode éléments finis

Méthode de bas degrés, discrétisation à mailles décalées

Vers des schémas à mailles décalées sur maillages généraux

Contexte

Mailles décalées et notations

Opérateur de convection

Opérateur de diffusion

Des schémas numériques pour la simulation de l'explosion

Modèle physique

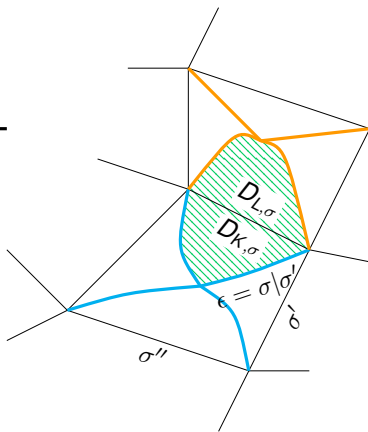
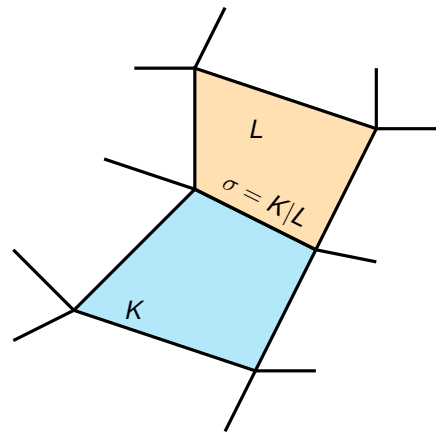
Discrétisation spatiale

Schéma "implicite"

Schéma explicite

Résultats numériques

MAILLES DÉCALÉES : NOTATIONS



Maillage primal

K, L : mailles primales

σ : face primale

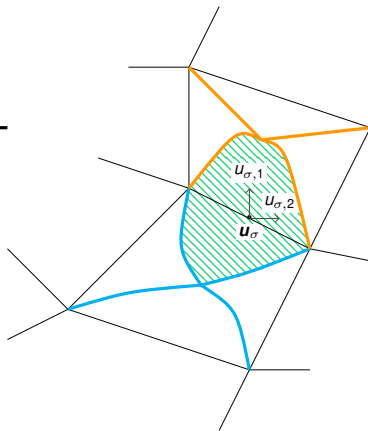
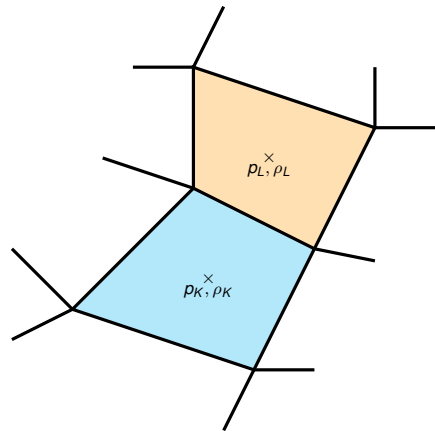
Maillage dual

$D_{K,\sigma}$: demi-maille duale

D_σ : maille duale

ϵ : face duale

MAILLES DÉCALÉES : INCONNUES



Maillage primal

Inconnue(s) scalaire(s) :

$$\rho_K, \rho_K, \dots$$

Maillage dual

Inconnues de vitesse :

$$\mathbf{u}_\sigma = (u_{\sigma,1}, \dots, u_{\sigma,d})$$

Vers des schémas à mailles décalées sur maillages généraux

Contexte

Mailles décalées et notations

Opérateur de convection

Opérateur de diffusion

Des schémas numériques pour la simulation de l'explosion

Modèle physique

Discrétisation spatiale

Schéma "implicite"

Schéma explicite

Résultats numériques

UN OPÉRATEUR DE CONVECTION...

$$\mathcal{C}(\rho, u_i) = \partial_t(\rho u_i) + \operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u}) \quad \rightarrow \quad C(\rho, u)_{\sigma,i}^{n+1} = \frac{1}{\delta t}(\rho_{D_\sigma}^{n+1} u_{\sigma,i}^{n+1} - \rho_{D_\sigma}^n u_{\sigma,i}^n) + \boxed{\operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u})_\sigma^*}.$$

UN OPÉRATEUR DE CONVECTION...

$$\mathcal{C}(\rho, u_i) = \partial_t(\rho u_i) + \operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u}) \quad \rightarrow \quad C(\rho, u)_{\sigma,i}^{n+1} = \frac{1}{\delta t}(\rho_{D_\sigma}^{n+1} u_{\sigma,i}^{n+1} - \rho_{D_\sigma}^n u_{\sigma,i}^n) + \boxed{\operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u})_\sigma^*}.$$

Rappel :

$$\frac{1}{|D_\sigma|} \int_{D_\sigma} \operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u}) d\mathbf{x}$$

UN OPÉRATEUR DE CONVECTION...

$$\mathcal{C}(\rho, u_i) = \partial_t(\rho u_i) + \operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u}) \quad \rightarrow \quad \mathcal{C}(\rho, u)_{\sigma,i}^{n+1} = \frac{1}{\delta t}(\rho_{D_\sigma}^{n+1} u_{\sigma,i}^{n+1} - \rho_{D_\sigma}^n u_{\sigma,i}^n) + \boxed{\operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u})_\sigma^*}.$$

Rappel :

$$\frac{1}{|D_\sigma|} \int_{D_\sigma} \operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u}) d\mathbf{x} = \frac{1}{|D_\sigma|} \sum_{\epsilon \in \mathcal{E}(D_\sigma)} \int_\epsilon \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{\sigma,\epsilon} u_i d\gamma(\mathbf{x})$$

UN OPÉRATEUR DE CONVECTION...

$$\mathcal{C}(\rho, u_i) = \partial_t(\rho u_i) + \operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u}) \quad \rightarrow \quad \mathcal{C}(\rho, u)_{\sigma,i}^{n+1} = \frac{1}{\delta t}(\rho_{D_\sigma}^{n+1} u_{\sigma,i}^{n+1} - \rho_{D_\sigma}^n u_{\sigma,i}^n) + \boxed{\operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u})_\sigma^*}.$$

Rappel :

$$\frac{1}{|D_\sigma|} \int_{D_\sigma} \operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u}) d\mathbf{x} = \frac{1}{|D_\sigma|} \sum_{\epsilon \in \mathcal{E}(D_\sigma)} \int_\epsilon \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{\sigma,\epsilon} u_i d\gamma(\mathbf{x}) \simeq \frac{1}{|D_\sigma|} \sum_{\epsilon \in \mathcal{E}(D_\sigma)} \left(\int_\epsilon \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{\sigma,\epsilon} d\gamma(\mathbf{x}) \right) \widetilde{u}_{\epsilon,i}$$

UN OPÉRATEUR DE CONVECTION...

$$\mathcal{C}(\rho, u_i) = \partial_t(\rho u_i) + \operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u}) \quad \rightarrow \quad C(\rho, u)_{\sigma,i}^{n+1} = \frac{1}{\delta t}(\rho_{D_\sigma}^{n+1} u_{\sigma,i}^{n+1} - \rho_{D_\sigma}^n u_{\sigma,i}^n) + \boxed{\operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u})_\sigma^*}.$$

Rappel :

$$\frac{1}{|D_\sigma|} \int_{D_\sigma} \operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u}) d\mathbf{x} = \frac{1}{|D_\sigma|} \sum_{\epsilon \in \mathcal{E}(D_\sigma)} \int_\epsilon \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{\sigma,\epsilon} u_i d\gamma(\mathbf{x}) \simeq \frac{1}{|D_\sigma|} \sum_{\epsilon \in \mathcal{E}(D_\sigma)} \left(\int_\epsilon \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{\sigma,\epsilon} d\gamma(\mathbf{x}) \right) \widetilde{u}_{\epsilon,i}$$

Méthode "volumes finis" :

$$\operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u})_\sigma^* = \frac{1}{|D_\sigma|} \sum_{\epsilon \in \mathcal{E}(D_\sigma)} \overbrace{F_{\sigma,\epsilon}^n u_{\epsilon,i}^*}^{\text{flux de masse dual}}$$

"interpolation" de la vitesse à l'interface

...CONSTRUIT PAR UNE MÉTHODE VOLUMES FINIS "ALGÈBRIQUE"

Une construction algébrique... :

- $u_{\epsilon,i}^*$: upwind, centré, MUSCL-like algébrique : pas de construction de pentes (difficile sur mailles générales) !

...CONSTRUIT PAR UNE MÉTHODE VOLUMES FINIS "ALGÈBRIQUE"

Une construction algébrique... :

- $u_{\epsilon,i}^*$: upwind, centré, MUSCL-like algébrique : pas de construction de pentes (difficile sur mailles générales) !
- $F_{\sigma,\epsilon}^n$: combinaison linéaire des flux primaux du bilan de masse, ne dépend que du type de maille !

...CONSTRUIT PAR UNE MÉTHODE VOLUMES FINIS "ALGÈBRIQUE"

Une construction algébrique... :

- $u_{\epsilon,i}^*$: upwind, centré, MUSCL-like algébrique : pas de construction de pentes (difficile sur mailles générales) !
- $F_{\sigma,\epsilon}^n$: combinaison linéaire des flux primaux du bilan de masse, ne dépend que du type de maille !

... adaptée aux maillages généraux

- Garanties théoriques : bilan d'énergie cinétique, consistance à la Lax-Wendroff
- Facilité d'implémentation : peu différent du cas structuré/non structuré sur tétraèdres et hexaèdres
- Résultats numériques concluants

CHOC À MACH= 10 SUR UNE COLONNE

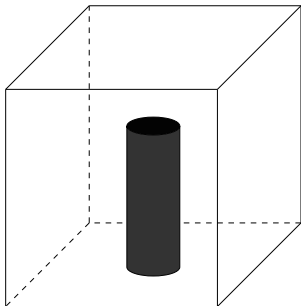


Figure: Domaine Ω

$$\mathbf{w}_R = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_R = (0, 0, 0)^t \\ \rho_R = 1.4 \\ p_R = 1 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{w}_L = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_L = (8.25, 0, 0)^t \\ \rho_L = 8 \\ p_L = 116.5 \end{bmatrix}.$$

CHOC À $MACH=10$ SUR UNE COLONNE

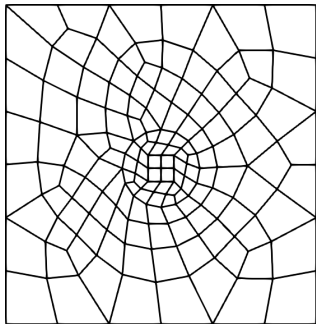


Figure: Maillage grossier 2D

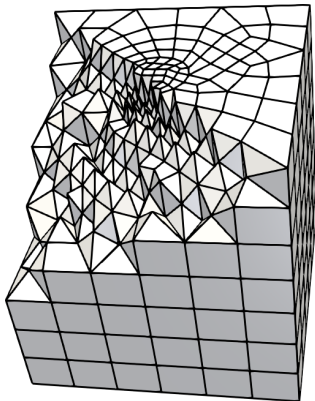


Figure: Maillage grossier pyramidale

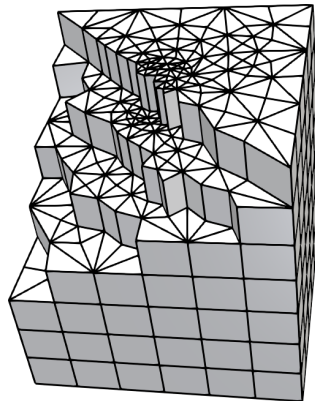


Figure: Maillage grossier prismatique

CHOC SUR UNE COLONNE : MASSE VOLUMIQUE À $t = 0.026$

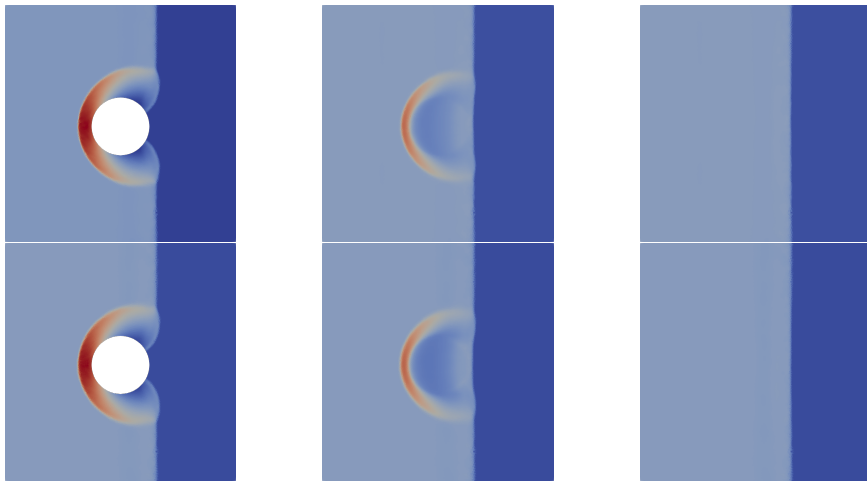


Figure: De gauche à droite : pied de la colonne, sommet de la colonne, sommet du domain. Maillage pyramidal (en haut) et prismatique (en bas)

Vers des schémas à mailles décalées sur maillages généraux

Contexte

Mailles décalées et notations

Opérateur de convection

Opérateur de diffusion

Des schémas numériques pour la simulation de l'explosion

Modèle physique

Discrétisation spatiale

Schéma "implicite"

Schéma explicite

Résultats numériques

OPÉRATEUR DE DIFFUSION

$$-\mu(\Delta \mathbf{u}) \quad \rightarrow \quad -\mu(\Delta \mathbf{u})_{\sigma,i} = \frac{1}{|D_\sigma|} \sum_{K \in \mathcal{M}} \int_K \mu \nabla \mathbf{u}_\mathcal{M} : \nabla \varphi_\sigma^{(i)} \mathrm{d}\mathbf{x}.$$

OPÉRATEUR DE DIFFUSION

$$-\mu(\Delta \mathbf{u}) \quad \rightarrow \quad -\mu(\Delta \mathbf{u})_{\sigma,i} = \frac{1}{|D_\sigma|} \sum_{K \in \mathcal{M}} \int_K \mu \nabla \mathbf{u}_\mathcal{M} : \nabla \varphi_\sigma^{(i)} \mathrm{d}\mathbf{x}.$$

Espace discret : $\mathbf{u}_\mathcal{M} = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \sum_{i=1}^d u_{i,\sigma} \varphi_\sigma^{(i)}$ avec $\varphi_\sigma^{(i)}$ les fonctions de forme de $\mathbf{X}_\mathcal{M} = (X_\mathcal{M})^d$ où :

$$X_\mathcal{M} := \{u \in P_K \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad m_\sigma(u|_K) = m_\sigma(u|_L) \quad \forall \sigma = K|L \in \mathcal{E}_{\text{int}}\},$$

avec $\mathbb{P}_1(K) \subset P_K \subset \mathbb{P}_2(K)$ et m_σ : moyenne sur la face σ . $\triangle$ Non-conforme !

OPÉRATEUR DE DIFFUSION

$$-\mu(\Delta \mathbf{u}) \quad \rightarrow \quad -\mu(\Delta \mathbf{u})_{\sigma,i} = \frac{1}{|D_\sigma|} \sum_{K \in \mathcal{M}} \int_K \mu \nabla \mathbf{u}_\mathcal{M} : \nabla \varphi_\sigma^{(i)} \mathrm{d}\mathbf{x}.$$

Espace discret : $\mathbf{u}_\mathcal{M} = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \sum_{i=1}^d u_{i,\sigma} \varphi_\sigma^{(i)}$ avec $\varphi_\sigma^{(i)}$ les fonctions de forme de $\mathbf{X}_\mathcal{M} = (X_\mathcal{M})^d$ où :

$$X_\mathcal{M} := \{u \in P_K \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad m_\sigma(u|_K) = m_\sigma(u|_L) \quad \forall \sigma = K|L \in \mathcal{E}_{\text{int}}\},$$

avec $\mathbb{P}_1(K) \subset P_K \subset \mathbb{P}_2(K)$ et m_σ : moyenne sur la face σ . $\triangle$ Non-conforme !

Exemples : Crouzeix-Raviart (simplexes) et Rannacher-Turek (quadrilatères, hexaèdres).

OPÉRATEUR DE DIFFUSION

$$-\mu(\Delta \mathbf{u}) \quad \rightarrow \quad -\mu(\Delta \mathbf{u})_{\sigma,i} = \frac{1}{|D_\sigma|} \sum_{K \in \mathcal{M}} \int_K \mu \nabla \mathbf{u}_\mathcal{M} : \nabla \varphi_\sigma^{(i)} \mathrm{d}\mathbf{x}.$$

Espace discret : $\mathbf{u}_\mathcal{M} = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \sum_{i=1}^d u_{i,\sigma} \varphi_\sigma^{(i)}$ avec $\varphi_\sigma^{(i)}$ les fonctions de forme de $\mathbf{X}_\mathcal{M} = (X_\mathcal{M})^d$ où :

$$X_\mathcal{M} := \{u \in P_K \quad \forall K \in \mathcal{M}, \quad m_\sigma(u|_K) = m_\sigma(u|_L) \quad \forall \sigma = K|L \in \mathcal{E}_{\text{int}}\},$$

avec $\mathbb{P}_1(K) \subset P_K \subset \mathbb{P}_2(K)$ et m_σ : moyenne sur la face σ . $\triangle$ Non-conforme !

Exemples : Crouzeix-Raviart (simplexes) et Rannacher-Turek (quadrilatères, hexaèdres).

Mailles générales : Construction ? Analyse d'erreur ?

ANALYSE D'ERREUR

$$\text{Erreur globale} \leq \text{erreur de consistance} + \text{erreur d'interpolation}$$

ANALYSE D'ERREUR

Erreur globale $\leq$ erreur de consistance + erreur d'interpolation

Erreur de consistance :

$$-\int_K \Delta \mathbf{u} \phi d\mathbf{x} = \int_K \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \phi d\mathbf{x} - \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} \int_{\sigma} \phi \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} d\gamma(\mathbf{x}),$$

ANALYSE D'ERREUR

Erreur globale $\leq$ erreur de consistance + erreur d'interpolation

Erreur de consistance :

$$-\int_K \Delta \mathbf{u} \phi d\mathbf{x} = \int_K \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \phi d\mathbf{x} - \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} \int_{\sigma} \phi \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} d\gamma(\mathbf{x}),$$

Theorem (Erreur de consistance)

Soient $v \in X_{\mathcal{M}}$ et $\mathbf{u} \in H^2(\Omega)$. Si $\int_{\sigma} [v \mathbf{n}_{\sigma}] d\gamma(\mathbf{x}) = 0$ pour tout $\sigma \in \mathcal{E}$ (faces planes); on a :

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} \int_{\sigma} v \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} d\gamma(\mathbf{x}) \leq C_{side} h |\mathbf{u}|_{H^2(\Omega)} |v|_{1,\mathcal{M}},$$

où $C_{side} \in \mathbb{R}_+$ ne dépend que de la régularité du maillage.

ANALYSE D'ERREUR

$$\text{Erreur globale} \leq \text{erreur de consistance} + \text{erreur d'interpolation}$$

Erreur de consistance :

$$-\int_K \Delta \mathbf{u} \phi d\mathbf{x} = \int_K \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \phi d\mathbf{x} - \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} \int_{\sigma} \phi \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} d\gamma(\mathbf{x}),$$

Theorem (Erreur de consistance)

Soient $v \in X_{\mathcal{M}}$ et $\mathbf{u} \in H^2(\Omega)$. Si $\int_{\sigma} [v \mathbf{n}_{\sigma}] d\gamma(\mathbf{x}) = 0$ pour tout $\sigma \in \mathcal{E}$ (faces planes); on a :

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} \int_{\sigma} v \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} d\gamma(\mathbf{x}) \leq C_{side} h |\mathbf{u}|_{H^2(\Omega)} |v|_{1,\mathcal{M}},$$

où $C_{side} \in \mathbb{R}_+$ ne dépend que de la régularité du maillage.

Problème ouvert: faces non planes ? Terme correctif de type DG ? Inf-sup ?

ANALYSE D'ERREUR

Erreur d'interpolation :

Theorem (Erreur d'interpolation locale)

Pour $u \in H^2(\Omega)$, pour $K \in \mathcal{M}$, si $\mathbb{P}_1(K) \subset P_K$ alors

$$\|u - \Pi u\|_{L^2(K)} + h |u - \Pi u|_{H^1(K)} \leq Ch^2 |u|_{H^2(B_K)},$$

où $C \in \mathbb{R}_+$ ne dépend que de la régularité du maillage.

ANALYSE D'ERREUR

Erreur d'interpolation :

Theorem (Erreur d'interpolation locale)

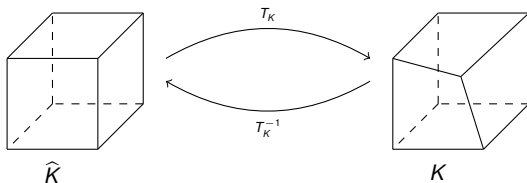
Pour $u \in H^2(\Omega)$, pour $K \in \mathcal{M}$, si $\mathbb{P}_1(K) \subset P_K$ alors

$$\|u - \Pi u\|_{L^2(K)} + h |u - \Pi u|_{H^1(K)} \leq Ch^2 |u|_{H^2(B_K)},$$

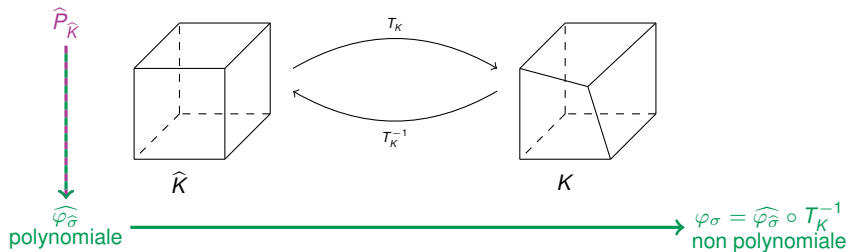
où $C \in \mathbb{R}_+$ ne dépend que de la régularité du maillage.

Conséquence : $\mathbb{P}_1(K) \subset P_K$ est nécessaire pour avoir une convergence optimale.

CONSTRUCTION LOCALE DES ESPACES DISCRETS

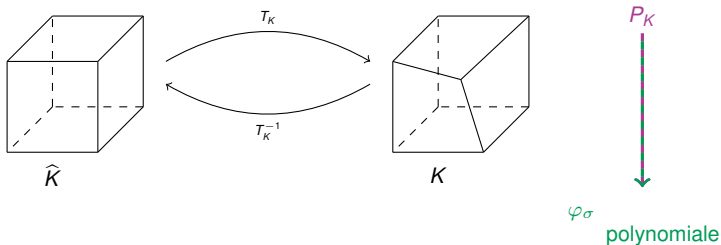


CONSTRUCTION LOCALE DES ESPACES DISCRETS



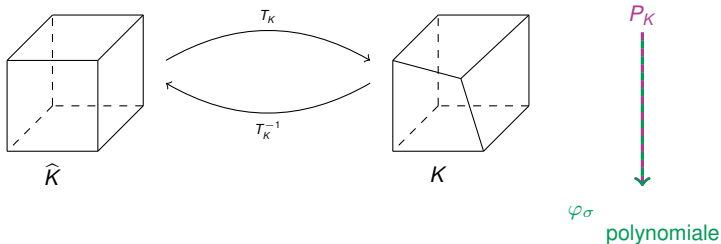
- EF paramétriques : ☒ coût informatique faible, ☒ erreur d'interpolation majorée par $Ch(h + \alpha)$

CONSTRUCTION LOCALE DES ESPACES DISCRETS



- EF paramétriques : ☒ coût informatique faible, ☒ erreur d'interpolation majorée par $Ch(h + \alpha)$
- EF non-paramétriques : ☒ coût informatique plus important, ☒ erreur d'interpolation majorée par Ch^2

CONSTRUCTION LOCALE DES ESPACES DISCRETS



- EF paramétriques : ☒ coût informatique faible, ☒ erreur d'interpolation majorée par $Ch(h + \alpha)$
- EF non-paramétriques : ☒ coût informatique plus important, ☒ erreur d'interpolation majorée par Ch^2

Application à des géométries complexes $\implies$ version **non-paramétrique**.

CONSTRUCTION DE P_K

$K \in \mathcal{M}$ d'élément de référence $\hat{K}$. $\mathbb{P}_1 \subset P_K$?

Éléments non-paramétriques :

Calcul des fonctions de base sur K pour avoir $\mathbb{P}_1 \subset P_K$.

CONSTRUCTION DE P_K

$K \in \mathcal{M}$ d'élément de référence $\hat{K}$. $\mathbb{P}_1 \subset P_K$?

Éléments non-paramétriques :

Calcul des **fonctions de base** sur K pour avoir $\mathbb{P}_1 \subset P_K$. Unisolvence pour $(m_\sigma)_\sigma$?

CONSTRUCTION DE P_K

$K \in \mathcal{M}$ d'élément de référence $\hat{K}$. $\mathbb{P}_1 \subset P_K$?

Éléments non-paramétriques :

Calcul des fonctions de base sur K pour avoir $\mathbb{P}_1 \subset P_K$. Unisolvence pour $(m_\sigma)_\sigma$?

Exemple ($\mathbb{Q}_1$ tourné de Rannacher-Turek) :

$K = [0, 1]^2$, $\mathbb{Q}_1 := \text{vect}\{1, x, y, xy\}$ pas unisolvent, $\mathbb{Q}_{1,rot} := \text{vect}\{1, x, y, x^2 - y^2\}$ unisolvent.

CONSTRUCTION DE P_K

$K \in \mathcal{M}$ d'élément de référence $\hat{K}$. $\mathbb{P}_1 \subset P_K$?

Éléments non-paramétriques :

Calcul des fonctions de base sur K pour avoir $\mathbb{P}_1 \subset P_K$. Unisolvence pour $(m_\sigma)_\sigma$?

Exemple ($\mathbb{Q}_1$ tourné de Rannacher-Turek) :

$K = [0, 1]^2$, $\mathbb{Q}_1 := \text{vect}\{1, x, y, xy\}$ pas unisolvent, $\mathbb{Q}_{1,rot} := \text{vect}\{1, x, y, x^2 - y^2\}$ unisolvent.

Rotation de 45° de K ?

CONSTRUCTION DE P_K

$K \in \mathcal{M}$ d'élément de référence $\hat{K}$. $\mathbb{P}_1 \subset P_K$?

Éléments non-paramétriques :

Calcul des fonctions de base sur K pour avoir $\mathbb{P}_1 \subset P_K$. Unisolvence pour $(m_\sigma)_\sigma$?

Exemple ($\mathbb{Q}_1$ tourné de Rannacher-Turek) :

$K = [0, 1]^2$, $\mathbb{Q}_1 := \text{vect}\{1, x, y, xy\}$ pas unisolvent, $\mathbb{Q}_{1,rot} := \text{vect}\{1, x, y, x^2 - y^2\}$ unisolvent.
Rotation de 45° de K ? $\mathbb{Q}_{1,rot}$ n'est plus unisolvent.

CONSTRUCTION DE P_K

$K \in \mathcal{M}$ d'élément de référence $\hat{K}$. $\mathbb{P}_1 \subset P_K$?

Éléments non-paramétriques :

Calcul des fonctions de base sur K pour avoir $\mathbb{P}_1 \subset P_K$. Unisolvence pour $(m_\sigma)_\sigma$?

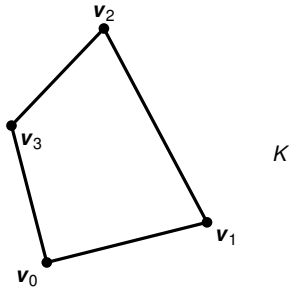
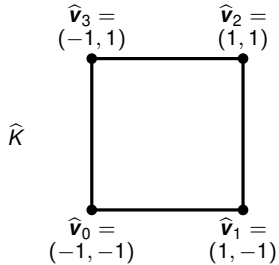
Exemple ($\mathbb{Q}_1$ tourné de Rannacher-Turek) :

$K = [0, 1]^2$, $\mathbb{Q}_1 := \text{vect}\{1, x, y, xy\}$ pas unisolvent, $\mathbb{Q}_{1,rot} := \text{vect}\{1, x, y, x^2 - y^2\}$ unisolvent.
Rotation de 45° de K ? $\mathbb{Q}_{1,rot}$ n'est plus unisolvent.

Idée :

Construire les fonctions de base grâce à $R_K : \hat{K} \rightarrow \tilde{K}$ affine.

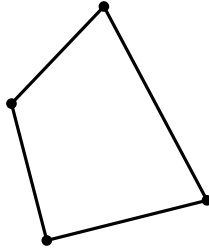
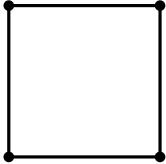
EXEMPLE SUR DES MAILLES QUADRILATÉRALES



EXEMPLE SUR DES MAILLES QUADRILATÉRALES

$$\hat{P}_{\hat{K}} := \text{vect}\{1, \hat{x}, \hat{y}, \hat{x}^2 - \hat{y}^2\}$$

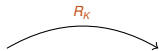
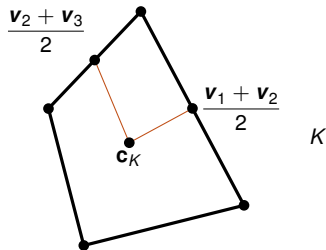
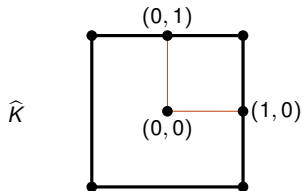
$\hat{K}$



K

EXEMPLE SUR DES MAILLES QUADRILATÉRALES

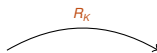
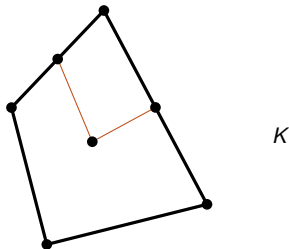
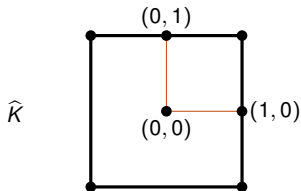
$$\hat{P}_{\hat{K}} := \text{vect}\{1, \hat{x}, \hat{y}, \hat{x}^2 - \hat{y}^2\}$$



EXEMPLE SUR DES MAILLES QUADRILATÉRALES

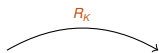
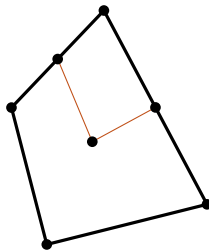
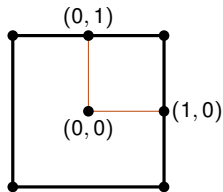
$$\hat{P}_{\hat{K}} := \text{vect}\{1, \hat{x}, \hat{y}, \hat{x}^2 - \hat{y}^2\}$$

$$P_K \sim \text{vect}\left\{1, x, y, \left(R_K^{-1} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right)_1^2 - \left(R_K^{-1} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right)_2^2\right\}$$



EXEMPLE SUR DES MAILLES QUADRILATÉRALES

$$:= \text{vect}\{1, \hat{x}, \hat{y}, \hat{x}^2 - \hat{y}^2\}$$

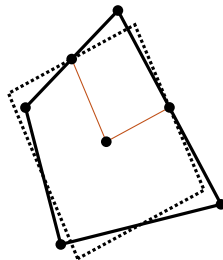
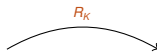
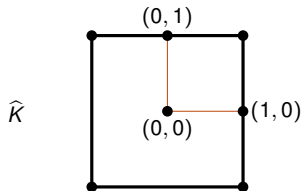


$$P_K \sim \text{vect}\left\{1, x, y, \left(R_K^{-1} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right)_1^2 - \left(R_K^{-1} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right)_2^2\right\}$$

$$(\varphi_\sigma)_{\sigma \in K}$$

EXEMPLE SUR DES MAILLES QUADRILATÉRALES

$$\hat{P}_{\hat{K}} := \text{vect}\{1, \hat{x}, \hat{y}, \hat{x}^2 - \hat{y}^2\}$$



K et $\tilde{K}$

$(\varphi_\sigma)_{\sigma \in K}$

$$P_K \sim \text{vect}\left\{1, x, y, \left(R_K^{-1} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right)_1^2 - \left(R_K^{-1} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right)_2^2\right\}$$

ÉLÉMENTS FINIS POUR PRISMES ET PYRAMIDES

$$\hat{P}_{\hat{K}} := \text{vect} \{ 1, x, y, z, x^2 - y^2 \}$$

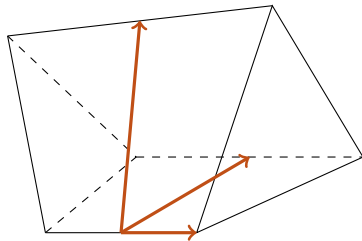


Figure: Prisme

ÉLÉMENTS FINIS POUR PRISMES ET PYRAMIDES

$$\hat{P}_{\hat{K}} := \text{vect} \{ 1, x, y, z, x^2 - y^2 \}$$

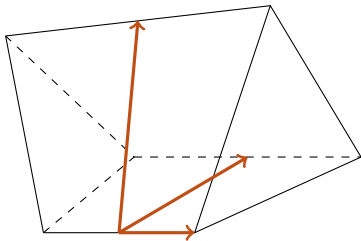


Figure: Prisme

$$\hat{P}_{\hat{K}} := \text{vect} \{ 1, x, y, z, x^2 - y^2 \}$$

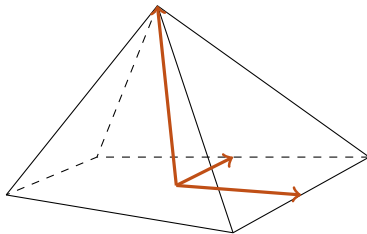
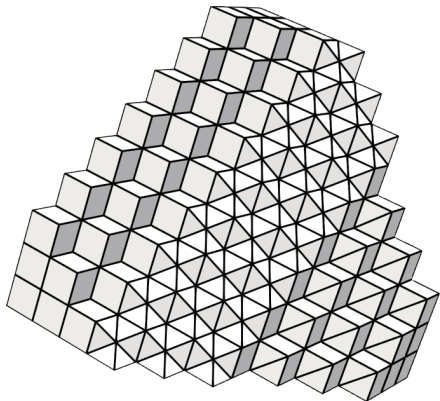


Figure: Pyramide

RÉSULTATS NUMÉRIQUES : ANALYSE DE CONVERGENCE

$$\Omega = [0, 1]^d$$

Maillages hybrides (hexaèdres + prismes + pyramides)
réguliers et déformés



$$\begin{aligned} -\Delta \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{f} && \text{sur } \Omega, \\ \operatorname{div}(\mathbf{u}) &= 0 && \text{sur } \Omega, \\ \mathbf{u} &= 0 && \text{sur } \delta\Omega \end{aligned}$$

$$\mathbf{u}(x, y, z) = \operatorname{rot} \Psi(x, y, z),$$

$$\Psi(x, y, z) = (\Psi_1(x, y, z), \Psi_2(x, y, z), \Psi_3(x, y, z))^t,$$

$$\Psi_i(x, y, z) = (\sin(\pi x) \sin(\pi y) \sin(\pi z))^2, \quad 1 \leq i \leq d,$$

$$p(x, y, z) = \cos(\pi x) \cos(\pi y) \cos(\pi z),$$

RÉSULTATS NUMÉRIQUES : ANALYSE DE CONVERGENCE

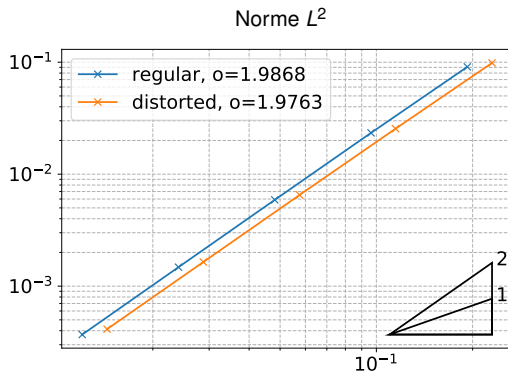
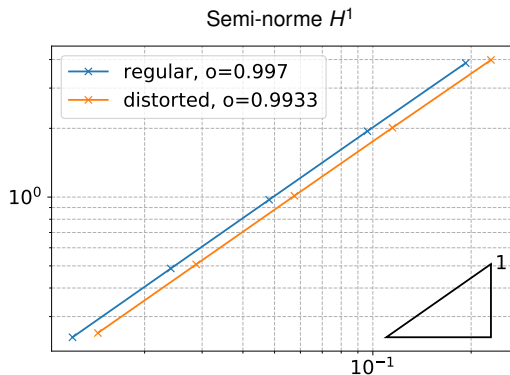


Figure: Ordres de convergence pour la vitesse sur une suite de maillages hybrides

RÉSULTATS NUMÉRIQUES : ANALYSE DE CONVERGENCE

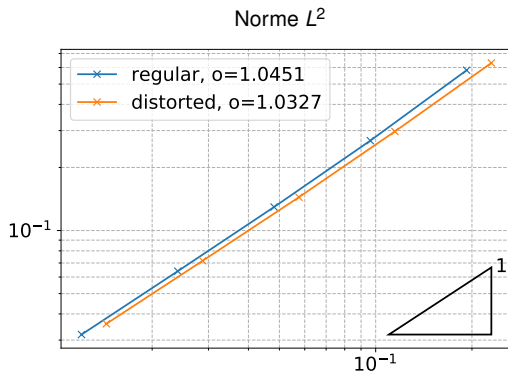


Figure: Ordre de convergence pour la pression sur une suite de maillages hybrides

Vers des schémas à mailles décalées sur maillages généraux

Contexte

Mailles décalées et notations

Opérateur de convection

Opérateur de diffusion

Des schémas numériques pour la simulation de l'explosion

Modèle physique

Discrétisation spatiale

Schéma "implicite"

Schéma explicite

Résultats numériques

Vers des schémas à mailles décalées sur maillages généraux

Contexte

Mailles décalées et notations

Opérateur de convection

Opérateur de diffusion

Des schémas numériques pour la simulation de l'explosion

Modèle physique

Discrétisation spatiale

Schéma "implicite"

Schéma explicite

Résultats numériques

PARTIE HYDRODYNAMIQUE

Equations de Navier Stokes pour les écoulements compressibles :

conservation de la masse : $\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0$

conservation de la q.d.m. : $\partial_t(\rho \mathbf{v}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla p + \operatorname{div}(\tau(\mathbf{v}))$

conservation de l'énergie : $\partial_t(\rho E) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} E) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = \operatorname{div}(\tau(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v}) - \operatorname{div} \mathbf{q}$

loi d'état : $E = \frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 + e, \quad p = \varrho(\rho, E)$

$$\tau(\mathbf{v}) = \mu \left(\nabla \mathbf{v} + \nabla^t \mathbf{v} \right) - \frac{1}{3} \mu \operatorname{div}(\mathbf{v}) \mathbf{I}$$

- Conditions initiales : $\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho_0(\mathbf{x}) > 0, \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}), \forall \mathbf{x} \in \Omega$
- Conditions au bord : $\mathbf{v} = 0$, sur $\partial\Omega$
- Propriétés physiques : $\rho > 0$

PARTIE CHIMIQUE



conservation des espèces : $\partial_t(\rho Y_i) + \text{div}(\rho Y_i \mathbf{v}) - \text{div}(j_i) = \dot{\omega}_i$, pour $i \in \{F, N, O, P\}$

$$|\dot{\omega}_i| = \zeta_i \nu_i W_i \dot{\omega} \text{ avec } \zeta_F = \zeta_O = -1, \zeta_P = 1, \zeta_N = 0 \rightarrow \sum_i \dot{\omega}_i = 0$$

PARTIE CHIMIQUE



conservation des espèces : $\partial_t(\rho Y_i) + \text{div}(\rho Y_i \mathbf{v}) - \text{div}(\mathbf{j}_i) = \dot{\omega}_i$, pour $i \in \{F, N, O, P\}$

$$|\dot{\omega}_i| = \zeta_i \nu_i W_i \dot{\omega} \text{ avec } \zeta_F = \zeta_O = -1, \zeta_P = 1, \zeta_N = 0 \rightarrow \sum_i \dot{\omega}_i = 0$$

conservation de l'énergie : $\partial_t(\rho E) + \text{div}(\rho \mathbf{v} E) + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = \text{div}(\boldsymbol{\tau}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v}) - \text{div} \mathbf{q}$

$$E = \frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 + e + \sum_i \Delta h_{f,i}^0 Y_i, \quad \mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_i h_i \mathbf{j}_i$$

PARTIE CHIMIQUE



conservation des espèces : $\partial_t(\rho Y_i) + \text{div}(\rho Y_i \mathbf{v}) - \text{div}(j_i) = \dot{\omega}_i$, pour $i \in \{F, N, O, P\}$

$$|\dot{\omega}_i| = \zeta_i \nu_i W_i \dot{\omega} \text{ avec } \zeta_F = \zeta_O = -1, \zeta_P = 1, \zeta_N = 0 \rightarrow \sum_i \dot{\omega}_i = 0$$

conservation de l'énergie : $\partial_t(\rho E) + \text{div}(\rho \mathbf{v} E) + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = \text{div}(\boldsymbol{\tau}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v}) - \text{div} \mathbf{q}$

$$E = \frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 + e + \sum_i \Delta h_{f,i}^0 Y_i, \quad \mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_i h_i j_i$$

$$\hookrightarrow \partial_t(\rho e) + \text{div}(\rho e \mathbf{v}) + \rho \text{div}(\mathbf{v}) = \dot{\omega}_T + \boldsymbol{\tau}(\mathbf{v}) : \nabla \mathbf{v} + \text{div}(\mathbf{q})$$

$$\dot{\omega}_T = - \sum_i \Delta h_{f,i}^0 \dot{\omega}_i$$

PARTIE CHIMIQUE



conservation des espèces : $\partial_t(\rho Y_i) + \text{div}(\rho Y_i \mathbf{v}) - \text{div}(j_i) = \dot{\omega}_i$, pour $i \in \{F, N, O, P\}$

$$|\dot{\omega}_i| = \zeta_i \nu_i W_i \dot{\omega} \text{ avec } \zeta_F = \zeta_O = -1, \zeta_P = 1, \zeta_N = 0 \rightarrow \sum_i \dot{\omega}_i = 0$$

conservation de l'énergie : $\partial_t(\rho E) + \text{div}(\rho \mathbf{v} E) + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = \text{div}(\boldsymbol{\tau}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v}) - \text{div} \mathbf{q}$

$$E = \frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 + e + \sum_i \Delta h_{f,i}^0 Y_i, \quad \mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_i h_i j_i$$

$$\hookrightarrow \partial_t(\rho e) + \text{div}(\rho e \mathbf{v}) + \rho \text{div}(\mathbf{v}) = \dot{\omega}_T + \boldsymbol{\tau}(\mathbf{v}) : \nabla \mathbf{v} + \text{div}(\mathbf{q})$$

$$\dot{\omega}_T = - \sum_i \Delta h_{f,i}^0 \dot{\omega}_i$$

+ autres équations selon le modèle de combustion choisi

PARTIE CHIMIQUE



conservation des espèces : $\partial_t(\rho Y_i) + \text{div}(\rho Y_i \mathbf{v}) - \text{div}(\mathbf{j}_i) = \dot{\omega}_i$, pour $i \in \{F, N, O, P\}$

$$|\dot{\omega}_i| = \zeta_i \nu_i W_i \dot{\omega} \text{ avec } \zeta_F = \zeta_O = -1, \zeta_P = 1, \zeta_N = 0 \rightarrow \sum_i \dot{\omega}_i = 0$$

conservation de l'énergie : $\partial_t(\rho E) + \text{div}(\rho \mathbf{v} E) + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = \text{div}(\boldsymbol{\tau}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v}) - \text{div}(\mathbf{q})$

$$E = \frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 + e + \sum_i \Delta h_{f,i}^0 Y_i, \quad \mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_i h_i \mathbf{j}_i$$

$$\hookrightarrow \partial_t(\rho e) + \text{div}(\rho \mathbf{e} \mathbf{v}) + \rho \text{div}(\mathbf{v}) = \dot{\omega}_T + \boldsymbol{\tau}(\mathbf{v}) : \nabla \mathbf{v} + \text{div}(\mathbf{q})$$

$$\dot{\omega}_T = - \sum_i \Delta h_{f,i}^0 \dot{\omega}_i$$

+ autres équations selon le modèle de combustion choisi

- Conditions initiales : $Y_i(\mathbf{x}, 0) = Y_{i,0}(\mathbf{x})$, with $Y_{i,0} \in [0, 1]$, and $\sum_i Y_{i,0} = 1, \forall \mathbf{x} \in \Omega$ $e(\mathbf{x}, 0) = e_0(\mathbf{x}) > 0$
- Conditions au bord : $\mathbf{j}_i \cdot \mathbf{n} = 0$, $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$ sur $\partial\Omega$

PARTIE CHIMIQUE



conservation des espèces : $\partial_t(\rho Y_i) + \text{div}(\rho Y_i \mathbf{v}) - \text{div}(j_i) = \dot{\omega}_i$, pour $i \in \{F, N, O, P\}$

$$|\dot{\omega}_i| = \zeta_i \nu_i W_i \dot{\omega} \text{ avec } \zeta_F = \zeta_O = -1, \zeta_P = 1, \zeta_N = 0 \rightarrow \sum_i \dot{\omega}_i = 0$$

conservation de l'énergie : $\partial_t(\rho E) + \text{div}(\rho \mathbf{v} E) + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = \text{div}(\boldsymbol{\tau}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v}) - \text{div} \mathbf{q}$

$$E = \frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 + e + \sum_i \Delta h_{f,i}^0 Y_i, \quad \mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_i h_i j_i$$

$$\hookrightarrow \partial_t(\rho e) + \text{div}(\rho e \mathbf{v}) + \rho \text{div}(\mathbf{v}) = \dot{\omega}_T + \boldsymbol{\tau}(\mathbf{v}) : \nabla \mathbf{v} + \text{div}(\mathbf{q})$$

$$\dot{\omega}_T = - \sum_i \Delta h_{f,i}^0 \dot{\omega}_i$$

+ autres équations selon le modèle de combustion choisi

- Propriétés physiques : $Y_F \in [0, \bar{Y}_{F,0}]$, $Y_O \in [0, \bar{Y}_{O,0}]$, $Y_P \in [\underline{Y}_{P,0}, 1]$, $Y_N \in [\underline{Y}_{N,0}, \bar{Y}_{N,0}]$, $\sum_i Y_i = 1$
 $e > 0$

Vers des schémas à mailles décalées sur maillages généraux

Contexte

Mailles décalées et notations

Opérateur de convection

Opérateur de diffusion

Des schémas numériques pour la simulation de l'explosion

Modèle physique

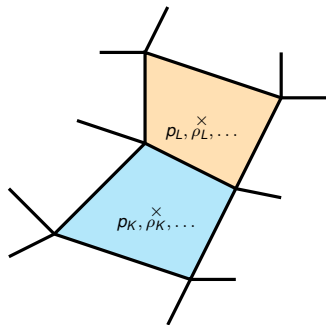
Discrétisation spatiale

Schéma "implicite"

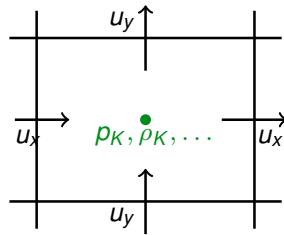
Schéma explicite

Résultats numériques

DISCRÉTISATION SPATIALE



unstructured mesh



structured mesh

Vers des schémas à mailles décalées sur maillages généraux

Contexte

Mailles décalées et notations

Opérateur de convection

Opérateur de diffusion

Des schémas numériques pour la simulation de l'explosion

Modèle physique

Discrétisation spatiale

Schéma "implicite"

Schéma explicite

Résultats numériques

SCHÉMA "IMPLICITE"

- **Partie chimique** : $\forall K \in \mathcal{M}, \forall i \in \{F, O, N, P\}$

$$\frac{1}{\delta t}(\rho_K^n Y_{i,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1} Y_{i,K}^n) + \text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^k) - \text{div}(J_i^{n+1})_K = \dot{\omega}_{i,K}^{n+1}$$

$$\triangleright \text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^k) = \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma=K|L} F_{K,\sigma}^n Y_{i,\sigma}^k \text{ avec } k = n+1 \rightarrow \text{upwind}, k = n \rightarrow \text{MUSCL-like}$$

SCHÉMA "IMPLICITE"

- Partie chimique : $\forall K \in \mathcal{M}, \forall i \in \{F, O, N, P\}$

$$\frac{1}{\delta t}(\rho_K^n Y_{i,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1} Y_{i,K}^n) + \operatorname{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^k) - \operatorname{div}(J_i^{n+1})_K = \dot{\omega}_{i,K}^{n+1}$$

▷ $\operatorname{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^k) = \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma=K|L} F_{K,\sigma}^n Y_{i,\sigma}^k$ avec $k = n+1 \rightarrow \text{upwind}$, $k = n \rightarrow \text{MUSCL-like}$

SCHÉMA "IMPLICITE"

- Partie chimique : $\forall K \in \mathcal{M}, \forall i \in \{F, O, N, P\}$

$$\frac{1}{\delta t}(\rho_K^n Y_{i,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1} Y_{i,K}^n) + \text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^k) - \text{div}(\mathbf{j}_i^{n+1})_K = \dot{\omega}_{i,K}^{n+1}$$

▷ $\text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^k) = \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma=K|L} F_{K,\sigma}^n Y_{i,\sigma}^k$ avec $k = n+1 \rightarrow \text{upwind}$, $k = n \rightarrow \text{MUSCL-like}$

▷ $\mathbf{j}_i = \alpha \nabla Y_i \rightarrow \text{cas structuré} : -\text{div}(\alpha_{i,k}^{n+1} \nabla Y_i^{n+1})_K = \sum_{\sigma=K|L} \alpha_{i,\sigma}^{n+1} \frac{|\sigma|}{d_\sigma} (Y_{i,K}^{n+1} - Y_{i,L}^{n+1})$

cas non structuré : schéma SUSCHI

[“A formally second order cell centered scheme for convection-diffusion equations on general grids”, Int. J. Numer. Methods Fluids, 2013]

SCHÉMA "IMPLICITE"

- **Partie chimique** : $\forall K \in \mathcal{M}, \forall i \in \{F, O, N, P\}$

$$\frac{1}{\delta t}(\rho_K^n Y_{i,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1} Y_{i,K}^n) + \text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^k) - \text{div}(\mathbf{j}_i^{n+1})_K = \dot{\omega}_{i,K}^{n+1}$$

▷ $\text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^k) = \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma=K|L} F_{K,\sigma}^n Y_{i,\sigma}^k$ avec $k = n+1 \rightarrow \text{upwind}$, $k = n \rightarrow \text{MUSCL-like}$

▷ $\mathbf{j}_i = \alpha \nabla Y_i \rightarrow \text{cas structuré} : -\text{div}(\alpha_{i,k}^{n+1} \nabla Y_i^{n+1})_K = \sum_{\sigma=K|L} \alpha_{i,\sigma}^{n+1} \frac{|\sigma|}{d_\sigma} (Y_{i,K}^{n+1} - Y_{i,L}^{n+1})$

cas non structuré : schéma SUSCHI

["A formally second order cell centered scheme for convection-diffusion equations on general grids", Int. J. Numer. Methods Fluids, 2013]

- **Partie hydrodynamique** : schéma de correction de pression

Dans la suite on suppose que les familles $(\rho_K^n, F_{K,\sigma}^n)_{n \in [0,N]}^{K \in \mathcal{M}}$ vérifient : $\frac{1}{\delta t}(\rho_K^n - \rho_K^{n-1}) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^{n+1} = 0$

Lemma

Soit $\bar{Y}_F = \max_{K \in \mathcal{M}} (Y_F)_K^n$. On suppose $0 \leq Y_{F,K}^n \leq \bar{Y}_F, \forall K \in \mathcal{M}$. Alors le système :

$$\frac{1}{\delta t}(\rho_K^n Y_{F,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1} Y_{F,K}^n) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_{F,\sigma}^{n+1} - \text{div}(\mathbf{j}_F^{n+1})_K = \dot{\omega}_{F,K}^{n+1}$$

admet une solution $Y_{F,K}^{n+1} \in [0, \bar{Y}_F] \forall K \in \mathcal{M}$

Lemma

Soit $\bar{Y}_F = \max_{K \in \mathcal{M}} (Y_F)_K^n$. On suppose $0 \leq Y_{F,K}^n \leq \bar{Y}_F, \forall K \in \mathcal{M}$. Alors le système :

$$\frac{1}{\delta t} (\rho_K^n Y_{F,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1} Y_{F,K}^n) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_{F,\sigma}^{n+1} - \text{div}(\mathbf{j}_F^{n+1})_K = \dot{\omega}_{F,K}^{n+1}$$

admet une solution $Y_{F,K}^{n+1} \in [0, \bar{Y}_F] \forall K \in \mathcal{M}$

Proof :

$$\delta Y_{F,K}^{n+1} = Y_{F,K}^{n+1} - \bar{Y}_F \leq 0 :$$

$$\underbrace{\delta Y_{F,K}^{n+1} \left(\frac{1}{\delta t} \rho_K^n + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma=K|L} F_{K,\sigma}^+ + \frac{|\sigma|}{d_\sigma} \alpha_{F,\sigma}^{n+1} \right)}_{A_{KK}} - \underbrace{\delta Y_{F,L}^{n+1} \left(\frac{1}{|K|} \sum_{\sigma=K|L} F_{K,\sigma}^- + \frac{|\sigma|}{d_\sigma} \alpha_{F,\sigma}^{n+1} \right)}_{A_{KL}} = \underbrace{\frac{1}{\delta t} \rho_K^{n-1} \delta Y_{F,K}^n + \dot{\omega}_{F,K}^{n+1}}_{\leq 0}$$

La matrice associée A est une M-Matrice et le second membre est négatif $\rightarrow \delta Y_{F,K}^{n+1} \leq 0$

Lemma

Soit $\bar{Y}_F = \max_{K \in \mathcal{M}} (Y_F)_K^n$. On suppose $0 \leq Y_{F,K}^n \leq \bar{Y}_F, \forall K \in \mathcal{M}$. Alors le système :

$$\frac{1}{\delta t} (\rho_K^n Y_{F,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1} Y_{F,K}^n) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_{F,\sigma}^{n+1} - \operatorname{div}(\mathbf{j}_F^{n+1})_K = \dot{\omega}_{F,K}^{n+1}$$

admet une solution $Y_{F,K}^{n+1} \in [0, \bar{Y}_F] \forall K \in \mathcal{M}$

Proof :

$$\delta Y_{F,K}^{n+1} = Y_{F,K}^{n+1} - \bar{Y}_F \leq 0 : \text{OK}$$

$Y_{F,K}^{n+1} \geq 0$: on multiplie par $-(Y_{F,K}^{n+1})^-$ et on somme sur $\mathcal{M}$

$$- \sum_{K \in \mathcal{M}} (Y_{F,K}^{n+1})^- \left[\frac{1}{\delta t} (\rho_K^n Y_{F,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1} Y_{F,K}^n) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_{F,\sigma}^{n+1} \right] + \mathcal{R} = 0$$

$$0 \leq \frac{1}{2} \sum_{K \in \mathcal{M}} \frac{1}{\delta t} \left[\rho_K^n ((Y_{F,K}^{n+1})^-)^2 - \rho_K^{n-1} ((Y_{F,K}^n)^-)^2 \right] \leq 0 \rightarrow (Y_{F,K}^{n+1})^- = 0$$

["A formally second order cell centered scheme for convection-diffusion equations on general grids", Int. J. Numer. Methods Fluids, 2013]

Lemma

Soit $\bar{Y}_F = \max_{K \in \mathcal{M}} (Y_F)_K^n$. On suppose $0 \leq Y_{F,K}^n \leq \bar{Y}_F, \forall K \in \mathcal{M}$. Alors le système :

$$\frac{1}{\delta t} (\rho_K^n Y_{F,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1} Y_{F,K}^n) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_{F,\sigma}^{n+1} - \operatorname{div}(\mathbf{j}_F^{n+1})_K = \dot{\omega}_{F,K}^{n+1}$$

admet une solution $Y_{F,K}^{n+1} \in [0, \bar{Y}_F] \forall K \in \mathcal{M}$

Proof :

$$\delta Y_{F,K}^{n+1} = Y_{F,K}^{n+1} - \bar{Y}_F \leq 0 : \text{OK}$$

$$Y_{F,K}^{n+1} \geq 0 : \text{OK}$$

Existence : soit $\beta \in [0, 1]$

$$\frac{1}{\delta t} (\rho_K^n Y_{F,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1} Y_{F,K}^n) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_{F,\sigma}^{n+1} - \operatorname{div}(\mathbf{j}_F^{n+1})_K = \beta \dot{\omega}_{K,F}^{n+1}$$

On conclut avec un argument de degré topologique

Lemma

Soit $\bar{Y}_F = \max_{K \in \mathcal{M}} (Y_F)_K^n$. On suppose $0 \leq Y_{F,K}^n \leq \bar{Y}_F, \forall K \in \mathcal{M}$. Alors le système :

$$\frac{1}{\delta t} (\rho_K^n Y_{F,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1} Y_{F,K}^n) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_{F,\sigma}^{n+1} - \operatorname{div}(\mathbf{j}_F^{n+1})_K = \dot{\omega}_{F,K}^{n+1}$$

admet une solution $Y_{F,K}^{n+1} \in [0, \bar{Y}_F] \forall K \in \mathcal{M}$

Proof :

$$\delta Y_{F,K}^{n+1} = Y_{F,K}^{n+1} - \bar{Y}_F \leq 0 : \text{OK}$$

$$Y_{F,K}^{n+1} \geq 0 : \text{OK}$$

Existence : OK

↪ De la même façon on prouve que : $Y_{O,K}^{n+1} \in [0, \bar{Y}_O], \quad Y_{P,K}^{n+1} \in [\underline{Y}_P, 1] \quad Y_{N,K}^{n+1} \in [\underline{Y}_N, \bar{Y}_N], \quad \sum_i Y_{i,K}^{n+1} = 1$

Vers des schémas à mailles décalées sur maillages généraux

Contexte

Mailles décalées et notations

Opérateur de convection

Opérateur de diffusion

Des schémas numériques pour la simulation de l'explosion

Modèle physique

Discrétisation spatiale

Schéma "implicite"

Schéma explicite

Résultats numériques

SCHÉMA EXPLICITE

Partie chimique : algorithme de Strang $\forall i \in \mathcal{I} = \{F, O, N, P\}$

- Première étape de transport : calcul de $\tilde{Y}_{i,K}^{n+1/2}$

$$\frac{1}{\delta t/2} (\rho_K^{n-1/2} \tilde{Y}_{i,K}^{n+1/2} - \rho_K^{n-1} Y_{i,K}^n) + \text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^n) - \text{div}(\mathbf{j}_i^n)_K = 0$$

- Etape réactive : calcul de $Y_{i,K}^{n+1/2}$ $\frac{1}{\delta t} \rho_K^{n-1/2} [Y_K^{n+1/2} - \tilde{Y}_K^{n+1/2}] = \dot{\omega}_{i,K}^{n+1/2}$

- Deuxième étape de transport : calcul de $Y_{i,K}^{n+1}$

$$\frac{1}{\delta t/2} (\rho_K^n Y_{i,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1/2} Y_{i,K}^{n+1/2}) + \text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^n) - \text{div}(\mathbf{j}_i^n)_K = 0$$

SCHÉMA EXPLICITE

Partie chimique : algorithme de Strang $\forall i \in \mathcal{I} = \{F, O, N, P\}$

- Première étape de transport : calcul de $\tilde{Y}_{i,K}^{n+1/2}$

$$\frac{1}{\delta t/2} (\rho_K^{n-1/2} \tilde{Y}_{i,K}^{n+1/2} - \rho_K^{n-1} Y_{i,K}^n) + \text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^n) - \text{div}(\mathbf{j}_i^n)_K = 0$$

- Etape réactive : calcul de $Y_{i,K}^{n+1/2}$ $\frac{1}{\delta t} \rho_K^{n-1/2} [Y_K^{n+1/2} - \tilde{Y}_K^{n+1/2}] = \dot{\omega}_{i,K}^{n+1/2}$

- Deuxième étape de transport : calcul de $Y_{i,K}^{n+1}$

$$\frac{1}{\delta t/2} (\rho_K^n Y_{i,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1/2} Y_{i,K}^{n+1/2}) + \text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^n) - \text{div}(\mathbf{j}_i^n)_K = 0$$

Densité au temps $n - 1/2$: $\rho_K^{n-1/2} = \frac{1}{2}(\rho_K^n + \rho_K^{n-1})$

SCHÉMA EXPLICITE

Partie chimique : algorithme de Strang $\forall i \in \mathcal{I} = \{F, O, N, P\}$

- Première étape de transport : calcul de $\tilde{Y}_{i,K}^{n+1/2}$

$$\frac{1}{\delta t/2} (\rho_K^{n-1/2} \tilde{Y}_{i,K}^{n+1/2} - \rho_K^{n-1} Y_{i,K}^n) + \text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^n) - \text{div}(\mathbf{j}_i^n)_K = 0$$

- Etape réactive : calcul de $Y_{i,K}^{n+1/2}$ $\frac{1}{\delta t} \rho_K^{n-1/2} [Y_K^{n+1/2} - \tilde{Y}_K^{n+1/2}] = \dot{\omega}_{i,K}^{n+1/2}$

- Deuxième étape de transport : calcul de $Y_{i,K}^{n+1}$

$$\frac{1}{\delta t/2} (\rho_K^n Y_{i,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1/2} Y_{i,K}^{n+1/2}) + \text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^n) - \text{div}(\mathbf{j}_i^n)_K = 0$$

Densité au temps $n - 1/2$: $\rho_K^{n-1/2} = \frac{1}{2}(\rho_K^n + \rho_K^{n-1})$

Termes de convection : $\text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^n) = \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_{i,\sigma}^n$ interpolation "MUSCL-like"

SCHÉMA EXPLICITE

Partie chimique : algorithme de Strang $\forall i \in \mathcal{I} = \{F, O, N, P\}$

- Première étape de transport : calcul de $\tilde{Y}_{i,K}^{n+1/2}$

$$\frac{1}{\delta t/2} (\rho_K^{n-1/2} \tilde{Y}_{i,K}^{n+1/2} - \rho_K^{n-1} Y_{i,K}^n) + \text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^n) - \text{div}(\mathbf{j}_i^n)_K = 0$$

- Etape réactive : calcul de $Y_{i,K}^{n+1/2}$ $\frac{1}{\delta t} \rho_K^{n-1/2} [Y_K^{n+1/2} - \tilde{Y}_K^{n+1/2}] = \dot{\omega}_{i,K}^{n+1/2}$

- Deuxième étape de transport : calcul de $Y_{i,K}^{n+1}$

$$\frac{1}{\delta t/2} (\rho_K^n Y_{i,K}^{n+1} - \rho_K^{n-1/2} Y_{i,K}^{n+1/2}) + \text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^n) - \text{div}(\mathbf{j}_i^n)_K = 0$$

Densité au temps $n - 1/2$: $\rho_K^{n-1/2} = \frac{1}{2}(\rho_K^n + \rho_K^{n-1})$

Termes de convection : $\text{div}_K(\rho^n \mathbf{v}^n Y_i^n) = \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_{i,\sigma}^n$ interpolation "MUSCL-like"

Partie hydrodynamique : schéma explicite

On suppose que les familles $(\rho_K^n, F_{K,\sigma}^n)_{n \in [0,N]}^{K \in \mathcal{M}}$ vérifient : $\frac{1}{\delta t}(\rho_K^n - \rho_K^{n-1}) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n = 0$

Lemma

On suppose que $Y_i^n \geq 0$ pour $i \in \mathcal{I}$, $\rho^n > 0$ et $\text{CFL}^n < 1$ alors $\forall K \in \mathcal{M}$:

- $Y_{i,K}^{n+1} \geq 0, \forall i \in \mathcal{I}$
- $Y_{F,K}^{n+1} \leq \bar{Y}_F, Y_{O,K}^{n+1} \leq \bar{Y}_O, Y_{N,K}^{n+1} \in [\underline{Y}_N, \bar{Y}_N]$ et $Y_{P,K}^{n+1} \geq \underline{Y}_P$

Proof :

- Première étape algorithme de Strang :

$$\frac{1}{\delta t/2}(\rho_K^{n-1/2} \tilde{Y}_K^{n+1/2} - \rho_K^{n-1} Y_K^n) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_\sigma^n - \operatorname{div}(\mathbf{j}^n)_K = 0$$

$$\text{avec } \rho_K^{n-1/2} = \frac{1}{2}(\rho_K^n + \rho_K^{n-1}) \rightarrow \begin{cases} \frac{1}{\delta t/2}(\rho_K^{n-1/2} - \rho_K^{n-1}) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n = 0 \\ \frac{1}{\delta t/2}(\rho_K^n - \rho_K^{n-1/2}) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n = 0 \end{cases}$$

Proof :

- Première étape algorithme de Strang :

$$\frac{1}{\delta t/2}(\rho_K^{n-1/2} \tilde{Y}_K^{n+1/2} - \rho_K^{n-1} Y_K^n) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_\sigma^n - \operatorname{div}(\mathbf{j}^n)_K = 0$$

$$\text{avec } \rho_K^{n-1/2} = \frac{1}{2}(\rho_K^n + \rho_K^{n-1}) \rightarrow \frac{1}{\delta t/2}(\rho_K^{n-1/2} - \rho_K^{n-1}) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n = 0$$

$$\begin{aligned} \rho_K^{n-1/2} \tilde{Y}_K^{n+1/2} &= \rho_K^{n-1/2} Y_K^n - \frac{\delta t/2}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} (F_{K,\sigma}^n)^+ (Y_\sigma^n - Y_K^n) + \frac{\delta t/2}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} (F_{K,\sigma}^n)^- (Y_\sigma^n - Y_K^n) \\ &\quad - (\delta t/2) \sum_{\sigma=K|L} \frac{|\sigma|}{d_\sigma} \alpha_\sigma^n (Y_K^n - Y_L^n) \end{aligned}$$

Proof :

- Première étape algorithme de Strang :

$$\frac{1}{\delta t/2} (\rho_K^{n-1/2} \tilde{Y}_K^{n+1/2} - \rho_K^{n-1} Y_K^n) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_\sigma^n - \operatorname{div}(\mathbf{J}^n)_K = 0$$

$$\begin{aligned} \rho_K^{n-1/2} \tilde{Y}_K^{n+1/2} &= \rho_K^{n-1/2} Y_K^n - \frac{\delta t/2}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} (F_{K,\sigma}^n)^+ \underbrace{(Y_\sigma^n - Y_K^n)}_{\beta_K^\sigma (Y_K^n - Y_{M_K^\sigma}^n)} + \frac{\delta t/2}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} (F_{K,\sigma}^n)^- \underbrace{(Y_\sigma^n - Y_K^n)}_{\beta_K^\sigma (Y_{M_K^\sigma}^n - Y_K^n)} \\ &\quad - (\delta t/2) \sum_{\sigma=K|L} \frac{|\sigma|}{d_\sigma} \alpha_\sigma^n (Y_K^n - Y_L^n) \end{aligned}$$

Proof :

- Première étape algorithme de Strang :

$$\frac{1}{\delta t/2} (\rho_K^{n-1/2} \tilde{Y}_K^{n+1/2} - \rho_K^{n-1} Y_K^n) + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} F_{K,\sigma}^n Y_\sigma^n - \operatorname{div}(\mathbf{J}^n)_K = 0$$

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_K^{n+1/2} = & Y_K^n \left(1 - \underbrace{\left[\frac{\delta t/2}{\rho_K^{n-1/2} |K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} \beta_K^\sigma |F_{K,\sigma}^n| + \frac{\delta t/2}{\rho_K^{n-1/2}} \sum_{\sigma=K|L} \frac{|\sigma|}{d_\sigma} \alpha_\sigma^n \right]}_{\text{CFL}^n} \right) \\ & + \frac{\delta t/2}{\rho_K^{n-1/2} |K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}(K)} Y_{M_K^\sigma}^n \beta_K^\sigma |F_{K,\sigma}^n| + \frac{\delta t/2}{\rho_K^{n-1/2}} \sum_{\sigma=K|L} \frac{|\sigma|}{d_\sigma} \alpha_\sigma^n Y_L^n \end{aligned}$$

→ on montre que $\tilde{Y}_K^{n+1/2}$ peut s'écrire comme une combinaison convexe de $\{Y_K^n, Y_L^n, Y_{M_K^\sigma}^n\}$, si $\text{CFL}^n < 1$

Proof :

- Première étape algorithme de Strang : **OK**
- Deuxième étape algorithme de Strang :

$$\frac{1}{\delta t} \rho_K^{n-1/2} \left[Y_{i,K}^{n+1/2} - \tilde{Y}_{i,K}^{n+1/2} \right] = \dot{\omega}_{i,K}^{n+1/2}$$

→ Si $\dot{\omega}_i \neq 0$: par exemple si $i = P$, on réécrit cette étape sous la forme

$$\underbrace{\left(\frac{\rho_K^{n-1/2}}{\delta t} I_K \right)}_{\text{inversible, } >0} Y_P^{n+1/2} = \underbrace{\frac{\rho_K^{n-1/2}}{\delta t} \tilde{Y}_P^{n+1/2} + \dot{\omega}_{P,K}^{n+1/2}}_{\geq 0} \rightarrow Y_P^{n+1/2} \geq 0$$

Proof :

- Première étape algorithme de Strang : OK
- Deuxième étape algorithme de Strang : OK
- Troisième étape algorithme de Strang : même procédure que pour la première étape

Proof :

- Première étape algorithme de Strang : OK
- Deuxième étape algorithme de Strang : OK
- Troisième étape algorithme de Strang : OK

↪ De la même façon on prouve que si on utilise un seul "jeu de coefficients" obtenus par limitation MUSCL pour toutes les espèces, alors : $\sum_{i \in \mathcal{I}} Y_{i,K}^{n+1} = 1, \forall K \in \mathcal{M}$

Vers des schémas à mailles décalées sur maillages généraux

Contexte

Mailles décalées et notations

Opérateur de convection

Opérateur de diffusion

Des schémas numériques pour la simulation de l'explosion

Modèle physique

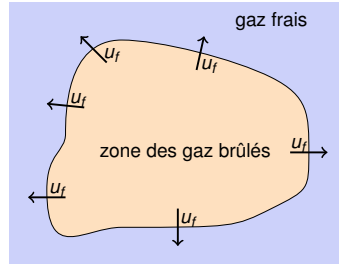
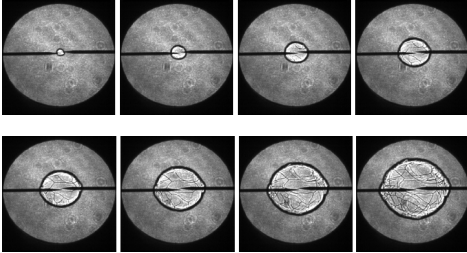
Discrétisation spatiale

Schéma "implicite"

Schéma explicite

Résultats numériques

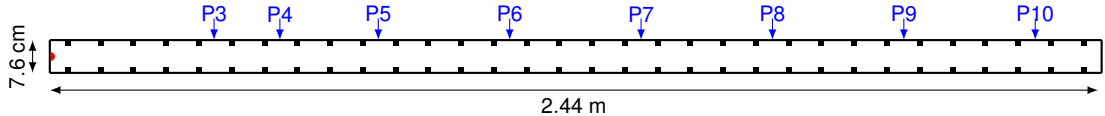
SIMULATION D'UNE DÉFLAGRATION TURBULENTE



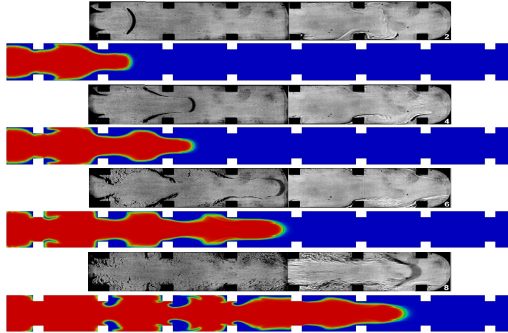
- Une réaction chimique totale et irréversible se produit au niveau du front de flamme
- La zone des gaz brûlés s'étend à une vitesse u_f (par rapport aux gaz frais)
- u_f dépend localement de la turbulence et de la composition du mélange

DISPOSITIF EXPÉRIMENTAL

- Accélération de flamme dans un canal obstrué [Johansen, Ciccarelli, 2009]
- Mélange stœchiométrique de méthane/air, $P_0 = 47$ kPa, $T_0 = 293$ K
- Canal fermé : 2.44 m de long, section carrée de 7.6 cm $\times$ 7.6 cm)
- Taux de blocage : 33%

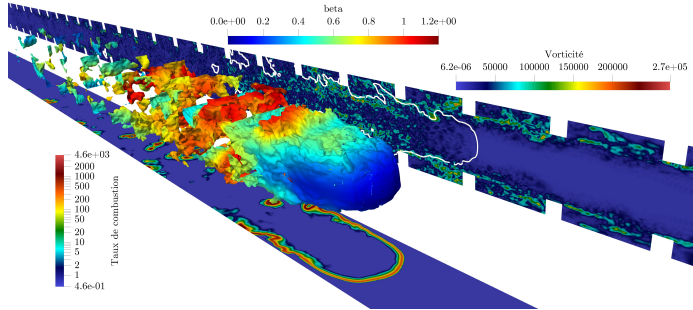


SIMULATION RANS - FRONT DE FLAMME



- Schéma implicite
- Discrétisation MUSCL pour les scalaires
- Maillage structuré 2D - Nombre de mailles : 765000
- $CFL = 2$ par rapport à la vitesse maximum expérimentale (708 m/s)

SIMULATION DES GRANDES ÉCHELLES - FRONT DE FLAMME



- Schéma explicite
- Maillage structuré 3D - Nombre de mailles : 256M
- $CFL = 0.1$ par rapport à la vitesse du son + vitesse maximum expérimentale (708 m/s)
- Simulations effectuées sur le supercalculateur IRENE du CCRT (Centre de Calcul Recherche et Technologie)

Merci pour votre attention
et merci Jean-Claude

