

APPLICATION DU PRINCIPE DE MOINDRE ACTION POUR LA SIMULATION D'ÉCOULEMENTS MULTIPHASIQUES COMPRESSIBLES

En dépit des progrès accumulés depuis plus de soixante ans dans le domaine, les schémas numériques pour la simulation d'écoulements hydrodynamiques présentent des limites : au CEA – DAM, les erreurs numériques sur l'entropie ont été identifiées comme étant l'une des sources premières du manque de robustesse.

L'entropie étant une grandeur thermodynamique qui illustre le caractère irréversible des phénomènes physiques, cela a conduit à réanalyser les schémas historiques encore employés, en particulier ici à la lumière du principe de moindre action **1**. Les résultats, très encourageants, conduisent parfois à des algorithmes contre-intuitifs.

Dès les premières études d'armes à Los Alamos en 1944, il est apparu que l'hydrodynamique des matériaux sous haute pression et haute température était un élément critique : il a fallu toute la perspicacité de von Neumann et Richtmyer pour mettre au point les premières simulations à l'aide d'un schéma numérique publié en 1950 **2**. Aujourd'hui, les calculs d'hydrodynamique présentent encore des difficultés. Celles-ci concernent essentiellement l'intégration simultanée de chocs souvent forts et du transport, sur de grandes distances, de fluides d'équations d'état contrastées qui subissent des phases d'évolution isentropes, c'est-à-dire à entropie constante. La contrainte d'isentropie est sans doute l'une des plus fortes, car elle représente l'horizon physiquement admissible qu'impose le second principe de la thermodynamique : en l'absence de tout phénomène dissipatif, un système peut être ramené à son état initial sans dépense d'énergie. Une simulation isentropes revient à suivre cet horizon au plus près, mais les erreurs numériques, toujours présentes, conduisent à le franchir parfois, avec des conséquences d'instabilité et de manque de robustesse des calculs.

Dans la plupart des schémas de calcul modernes **3**, la contrainte isentropie n'est qu'approximativement vérifiée ; cependant, elle l'est d'autant mieux que l'on augmente la précision du schéma (son ordre) et la

résolution des maillages. Pour autant, l'ordre et la résolution finie ne permettent pas de garantir un comportement isentropes stable et rendent ardu le traitement des écoulements multifluides. Dans des travaux antérieurs du CEA – DAM **4**, l'analyse d'un cas test élémentaire mais strictement isentropes, appelé robinet de Ransom, a montré les fragilités de plusieurs de ces schémas usuels.

Cette situation et les évolutions prévues des codes de calcul ont donc motivé une réanalyse des schémas numériques sur la base des principes premiers. L'élément central qui a été dégagé est que le comportement isentropes est géométrique : l'énergie interne d'un système isentropes ne dépend que de la densité qui, elle-même, ne dépend que de la position géométrique des constituants des fluides. Dans ce cas, les équations d'évolution peuvent être construites selon un principe variationnel, dit principe de moindre action. Ce dernier stipule que, pour tout système physique non dissipatif, il existe une fonctionnelle de sa trajectoire, appelée action, dont le minimum fournit la trajectoire physique effective. Ce principe se traduit directement de façon numérique par une simple discrétisation de l'intégrale d'action. Un des avantages majeurs est qu'on ne travaille plus sur des équations différentielles mais sur une forme algébrique,

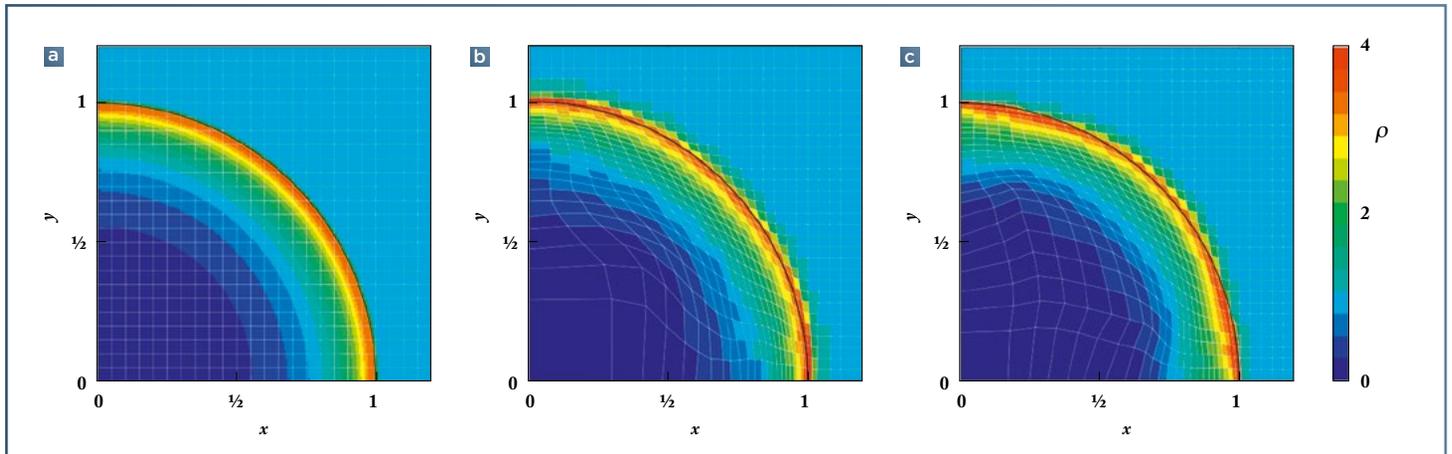


Figure 1

Cartes de densités ρ pour le schéma numérique GEECS (*Geometry, Energy, and Entropy Compatible Scheme*) sur le test de l'explosion de Sedov : un dépôt initial d'énergie interne dans la première maille ($x = y = 0$) crée une onde de choc divergente qui se propage dans un gaz parfait à pression initiale nulle. Trois stratégies de maillage sont représentées : (a) eulérienne, (b) lagrangienne et (c) ALE, pour *Arbitrary Lagrangian-Eulerian*. L'erreur numérique eulérienne est élevée et conduit à employer des maillages fins. Les distorsions de mailles lagrangiennes (à l'origine, c'est-à-dire en bas à gauche) peuvent fragiliser le calcul. La méthode ALE présente donc un compromis satisfaisant entre robustesse et coût de calcul du schéma numérique.

l'intégrale d'action. Ce principe variationnel n'a pas été souvent appliqué à l'hydrodynamique, continue ou discrète, mais il a fait par ailleurs l'objet de très nombreux travaux sur lesquels ce travail s'est appuyé.

Ce travail s'inscrit donc dans une veine plus large où le principe variationnel discret est complété par des contraintes de conservation d'énergie et de positivité des termes dissipatifs : cela constitue la méthode dite GEEC, pour *Geometry, Energy, and Entropy Compatible*. Après une étude préliminaire sur le schéma historique [5] de type lagrangien où le maillage suit la matière, ce travail aborde le cas ALE, pour *Arbitrary Lagrangian-Eulerian*, où le maillage évolue librement selon les prescriptions de l'utilisateur.

Pour notre schéma GEECS, pour GEEC *Scheme*, l'intégrale d'action comporte les termes d'énergie cinétique et interne à l'ordre deux, et un terme de transport par rapport à la grille à l'ordre un. Ce choix est motivé par un besoin de simplicité pour une preuve de concept qui reste néanmoins utilisable lorsque le transport de fluide par rapport au maillage est faible. Il en résulte un algorithme économique et simple, mais comportant une discrétisation du gradient de pression contre-intuitive.

Cet élément est crucial pour assurer les bonnes propriétés entropiques du schéma vérifiées dans des cas tests isentropes.

Le GEECS se comporte de manière satisfaisante et robuste sur l'ensemble des cas tests habituels de la littérature. La figure 1 montre l'explosion de Sedov simulée avec trois stratégies différentes de maillage : Euler, Lagrange et un maillage ALE. Dans ce test, un dépôt initial d'énergie interne dans la première maille crée une onde de choc divergente qui se propage dans un gaz parfait à pression initiale nulle.

Le GEECS permet d'obtenir un résultat stable et robuste, sans déformation critique du maillage, tout en réduisant les erreurs entropiques et en étant moins coûteux en temps de calcul.

Cette nouvelle approche, déjà appliquée aux écoulements multifluides [6] et particules-gaz, sera étendue à d'autres types d'écoulements en collaboration avec des partenaires académiques.

RÉFÉRENCES

- 1 T. VAZQUEZ-GONZALEZ, A. LLOR, C. FOCESATO, "A novel GEEC (Geometry, Energy, and Entropy Compatible) procedure applied to a staggered direct-ALE scheme for hydrodynamics", *Eur. J. Mech. B-Fluids*, **65**, p. 494-515 (2017).
- 2 J. VON NEUMANN, R. D. RICHTMYER, "A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks", *J. Appl. Phys.*, **21**, p. 232-237 (1950).
- 3 B. DESPRÉS, *Numerical Methods for Eulerian and Lagrangian Conservation Laws*, Springer (2017).
- 4 T. VAZQUEZ-GONZALEZ, A. LLOR, C. FOCESATO, "Ransom test results from various two-fluid schemes: Is enforcing hyperbolicity a thermodynamically consistent option?", *Int. J. Multiphase Flow*, **81**, p. 104-112 (2016).
- 5 A. LLOR, A. CLAISSE, C. FOCESATO, "Energy preservation and entropy in Lagrangian space- and time-staggered hydrodynamic schemes", *J. Comput. Phys.*, **309**, p. 324-349 (2016).
- 6 T. VAZQUEZ-GONZALEZ, *Schémas numériques mimétiques et conservatifs pour la simulation d'écoulements multiphasiques compressibles*, Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay, Centrale-Supélec, soutenue le 17 juin 2016.