

# Extension des schémas CSTS (Conservative Space- and Time-Staggered) à la géométrie axisymétrique et à l’ALE

A. Marboeuf<sup>†‡</sup>, A. Claisse<sup>†</sup>, P. Le Tallec<sup>‡</sup> and A. Llor<sup>†</sup>

<sup>†</sup>CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

<sup>‡</sup>École Polytechnique, Laboratoire de Mécanique des Solides, 91128 Palaiseau, France

**Keywords** : hydrodynamique, schémas saute-mouton, CSTS, ALE, géométrie axisymétrique

## ABSTRACT

## 1 Introduction

On considère des écoulements à dynamique rapide multi-matériaux hautement énergétiques dominés par un fort transfert entre énergies cinétique et interne. Dans ce cadre, qui peut être approché par la résolution des équations d’Euler compressibles en formulation lagrangienne, les schémas décalés en temps et en espace (STS pour Space- and Time-Staggered) sont tout indiqués. Ils offrent en effet un bon contrôle de l’entropie et permettent d’avoir un accès fiable au transport et aux déformations (voir [1] pour l’extension en 2D et pour des comportements élasto-plastiques). Ce type de schémas trouve son origine au début des années 50, grâce au travail de von Neumann et Richtmyer [2]. Écrit en 1D et couramment désigné par « VNR », l’algorithme mis en place dans [2] possède les propriétés suivantes : (i) la masse et la quantité de mouvement sont conservées ; (ii) l’équation d’évolution est explicite pour la quantité de mouvement et semi-implicite pour l’énergie interne ; (iii) la précision est à l’ordre 2 en temps et en espace et est obtenue naturellement par un décalage de type « saute-mouton » (« leap-frog » en anglais) sur les variables discrètes ; (iv) l’énergie cinétique est une forme quadratique définie positive des vitesses ; et (v) la dissipation, nécessaire pour la capture des chocs, est apportée par l’ajout d’un terme de pseudo-viscosité dans les équations d’Euler. Les schémas ainsi construits sont simples et robustes, ce qui a fortement contribué à leur succès malgré l’absence de conservation stricte de l’énergie totale [3]. Ce dernier point est crucial pour la capture des chocs forts : des erreurs à l’ordre du schéma sur l’énergie totale peuvent en effet amener à des erreurs d’ordre zéro sur les relations d’Hugoniot et donc sur la magnitude et la position de l’onde de choc. Les schémas STS ont été reconnus pendant longtemps comme ne pouvant pas être corrigés pour retrouver une stricte conservation tout en gardant intactes toutes les propriétés citées précédemment.

Il a donc fallu attendre les années 90 pour voir apparaître les schémas conservatifs CSTS (Conservative Space- and Time-Staggered) avec une première solution apportée par Burton [4]. Cependant, lorsque le pas de temps n’est pas constant, le schéma de Burton diffère des schémas STS par le choix non usuel de centrage des positions par rapport aux vitesses. Ceci peut impacter négativement la robustesse dans certains cas. Beaucoup plus récemment, A. Llor *et al.* [5] proposent alors, dans un contexte lagrangien et en géométrie plane, de retrouver une stricte conservation de l’énergie totale en ajoutant des termes correctifs (correspondant à des résidus à l’ordre du schéma) dans l’équation d’énergie interne. Ces corrections sont déterminées par une nouvelle approche dite de « flux en temps ».

Nous travaillons à l’extension du schéma CSTS de [5] à une géométrie axisymétrique ce qui conduit à un certain nombre de difficultés de formulation, que ce soit pour le calcul des masses nodales ou l’adaptation conservative à entropie contrôlée. Les équations discrètes ainsi que la définition des masses nodales et des termes correctifs sont donc revues (section 2). Des résultats numériques viennent ensuite illustrer ce travail (section 3). L’extension du schéma CSTS à l’ALE conclut l’exposé (section 4). Pour

les raisons évoquées au début de cette introduction, nos extensions doivent respectées un cahier des charges bien précis : (i) robustesse ; (ii) stricte conservation de l'énergie totale ; (iii) cohérence thermodynamique ; et (iv) précision à l'ordre 2 en temps et en espace *via* une discrétisation « saute-mouton » des quantités.

## 2 Le schéma à masses nodales variables

### 2.1 Le cadre général

Toute la démarche part de l'application du principe de moindre action à une intégrale d'action  $\mathcal{A}$  discrétisée en temps et en espace

$$\mathcal{A}[\{\mathbf{x}_p^n\}, \{\mathbf{u}_p^{n+1/2}\}] = \sum_n \left\{ \sum_p \frac{1}{2} m_p \left( \mathbf{u}_p^{n+1/2} \right)^2 \Delta t^{n+1/2} - \sum_c m_c e_c^n \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} \right\}. \quad (1)$$

Cette formulation (1) traduit le double décalage en temps et en espace entre le terme d'énergie cinétique, défini aux nœuds et au demi-pas de temps, et le terme d'énergie interne, calculé aux mailles et au pas de temps entier. Les nœuds sont notés  $p$  tandis que les mailles sont désignées par  $c$ . L'ensemble des mailles partageant un même nœud  $p$  est noté  $C(p)$ . L'ensemble des nœuds d'une même maille  $c$  est noté  $P(c)$ . Les nœuds  $q$  reliés à un même nœud  $p$  par une arête ou par une maille appartiennent à l'ensemble  $Q(p)$ . Les quantités nodales sont indicées par  $p$  tandis que les quantités centrées aux mailles sont indicées par  $c$ . Le pas de temps entre deux temps entiers est noté  $\Delta t^{n+1/2}$ , autrement dit  $\Delta t^{n+1/2} = t^{n+1} - t^n$ . L'exposant  $n$  indique que la quantité est définie au temps  $t^n$  tandis que  $n + 1/2$  signifie que la quantité est décalée ; elle est donc définie au temps  $t^{n+1/2} = t^n + \frac{1}{2}\Delta t^{n+1/2}$ .

### 2.2 Masses nodales et termes correctifs

La construction de l'énergie cinétique dans (1) travaille sur une forme diagonale de la matrice de masse obtenue par intégration sur un maillage dual. Dans ce cas, les masses nodales sont variables en temps en géométrie axisymétrique. Les mailles duales n'ont en effet aucune raison d'être lagrangiennes. On utilise alors une combinaison linéaire des masses variables « Médiane » [6], notées  $\tilde{m}$ , et des masses constantes « Wilkins » [1], notées  $\hat{m}$ .

$$m_p = m_p^{n+1/2} = \frac{2}{3} \tilde{m}_p^{n+1/2} + \frac{1}{3} \hat{m}_p. \quad (2)$$

La définition (2) précédente permet de corriger les fortes singularités du maillage sur l'axe dues à la dépendance radiale des forces [7, 8] mais elles créent des flux de quantité de mouvement non pris en compte dans les schémas (C)STS usuels [4]. En raison de la conservation de l'énergie totale, les termes dus aux masses variables peuvent également briser la cohérence thermodynamique [9]. L'utilisation du principe de moindre action permet d'y remédier en faisant apparaître le terme nécessaire dans notre équation de quantité de mouvement (4).

Par ailleurs, en hydrodynamique lagrangienne, des modes de vitesses parasites peuvent apparaître sur des grilles sous-contraintes 2D ou 3D lorsqu'une intégration à un point des forces de pression est effectuée [10, 11]. Ces modes ne faisant pas travailler la pression moyenne de chaque maille, aucune force de restauration ne s'oppose à leurs développements. Ils peuvent ainsi causer une sévère dégradation du maillage, voir un arrêt prématuré des calculs, et doivent donc être supprimés ou au moins limités. Des corrections, sous forme de forces  $\mathbf{f}_{cp}$ , sont alors ajoutées au schéma discret. Bien que de nombreuses

définitions pour les forces  $\mathbf{f}_{cp}$  existent, une correction spécifique, appelée « filtrage inertiel », a été développée dans ce travail afin de respecter toutes les exigences fixées en introduction. Cette correction est donnée par

$$\mathbf{f}_{cp} = \frac{\partial Q_c}{\partial \mathbf{u}_p}, \quad (3)$$

où  $Q_c$  est un potentiel de dissipation construit à partir des masses nodales et des écarts à la vitesse linéaire. Contrairement aux solutions proposées dans [10, 11, 12], le filtrage inertiel permet d'obtenir une précision à l'ordre 2 à moindre coût de calcul.

### 2.3 Équation de quantité de mouvement

Dans le cadre de la sous-section précédente 2.2 (masses nodales variables en temps et introduction du filtrage inertiel), l'application du principe de moindre action sur l'intégrale d'action discrète  $\mathcal{A}$  donne

$$\begin{aligned} m_p^{n+1/2} \mathbf{u}_p^{n+1/2} - m_p^{n-1/2} \mathbf{u}_p^{n-1/2} &= \sum_{c \in C(p)} \left[ (p_c^n + q_c^n) \frac{\partial V_c}{\partial \mathbf{x}_p} \Big|^n + \mathbf{f}_{cp}^n \right] \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} \\ &+ \sum_{q \in Q(p)} \frac{1}{4} (\mathbf{u}_q^{n-1/2})^2 \frac{\partial m_q}{\partial \mathbf{x}_p} \Big|^{n-1/2} \Delta t^{n-1/2} + \sum_{q \in Q(p)} \frac{1}{4} (\mathbf{u}_q^{*n+1/2})^2 \frac{\partial m_q}{\partial \mathbf{x}_p} \Big|^{n+1/2} \Delta t^{n+1/2}. \quad (4) \end{aligned}$$

On fait quelques remarques sur l'équation (4) : (i) l'équation de quantité de mouvement déduite de l'application du principe de moindre action est en réalité implicite en vitesse ; (ii) ce caractère implicite est levé grâce à un processus de prédiction-corrrection calculant une vitesse prédite  $\mathbf{u}_q^{*n+1/2}$ , qui est une approximation de  $\mathbf{u}_q^{n+1/2}$  à l'ordre 2 en temps ; (iii) le terme  $q_c^n$  correspond à la pseudo-viscosité assurant la dissipation ; et (iv) la force  $\mathbf{f}_{cp}^n$  correspond au filtrage inertiel, évoqué dans la sous-section 2.2 précédente.

### 2.4 Équation d'énergie cinétique

On multiplie l'équation (4) par  $\frac{1}{2}(\mathbf{u}_p^{n+1/2} + \mathbf{u}_p^{n-1/2})$  pour en déduire l'évolution de l'énergie cinétique (5) du schéma, où  $\mathcal{K}_p^{n+1/2} = \frac{1}{2} m_p^{n+1/2} (\mathbf{u}_p^{n+1/2})^2$ .

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_p^{n+1/2} - \mathcal{K}_p^{n-1/2} &= \sum_{c \in C(p)} \left[ (p_c^n + q_c^n) \frac{\partial V_c}{\partial \mathbf{x}_p} \Big|^n + \mathbf{f}_{cp}^n \right] \cdot \frac{\mathbf{u}_p^{n+1/2} + \mathbf{u}_p^{n-1/2}}{2} \frac{\Delta t^{n+1/2} + \Delta t^{n-1/2}}{2} \\ &+ \sum_{q \in Q(p)} \frac{1}{4} (\mathbf{u}_q^{n-1/2})^2 \frac{\partial m_q}{\partial \mathbf{x}_p} \Big|^{n-1/2} \cdot \frac{\mathbf{u}_p^{n+1/2} + \mathbf{u}_p^{n-1/2}}{2} \Delta t^{n-1/2} \\ &+ \sum_{q \in Q(p)} \frac{1}{4} (\mathbf{u}_q^{*n+1/2})^2 \frac{\partial m_q}{\partial \mathbf{x}_p} \Big|^{n+1/2} \cdot \frac{\mathbf{u}_p^{n+1/2} + \mathbf{u}_p^{n-1/2}}{2} \Delta t^{n+1/2} \\ &- \frac{1}{2} (m_p^{n+1/2} - m_p^{n-1/2}) \mathbf{u}_p^{n+1/2} \cdot \mathbf{u}_p^{n-1/2}. \quad (5) \end{aligned}$$



FIGURE 1 – Maillages avec zoom sur la discontinuité de contact et sur le choc dans le cas test de Sod en géométrie axisymétrique : (a) masses nodales variables (2) et (b) masse nodale constante « Wilkins ».

## 2.5 Conservation de l'énergie totale et équation d'énergie interne

L'équation d'évolution de l'énergie interne est construite à partir de l'équation d'évolution de l'énergie cinétique (5) afin de strictement conserver l'énergie totale. Étant donné que les énergies interne et cinétique ne sont pas définies au même instant, un terme de « flux en temps »  $\phi_{cp}^{n+1} - \phi_{cp}^n$  apparaît naturellement lorsque l'on somme leur variation :

$$\sum_p \left[ \mathcal{K}_p^{n+1/2} - \mathcal{K}_p^{n-1/2} \right] + \sum_c m_c (e_c^{n+1} - e_c^n) = \sum_p \sum_{c \in C(p)} (\phi_{cp}^{n+1} - \phi_{cp}^n). \quad (6)$$

L'équation d'énergie interne est donc simplement obtenue par une localisation sur chaque maille  $c$  de

$$\sum_c m_c (e_c^{n+1} - e_c^n) = - \sum_p \left[ \mathcal{K}_p^{n+1/2} - \mathcal{K}_p^{n-1/2} \right] + \sum_p \sum_{c \in C(p)} (\phi_{cp}^{n+1} - \phi_{cp}^n).$$

## 3 Illustrations numériques des choix réalisés

### 3.1 Importance du choix des masses nodales en géométrie axisymétrique

Les premiers calculs montrent l'importance du choix des masses nodales en géométrie axisymétrique. La figure 1 illustre le phénomène « d'enfoncement polaire » sur le cas test de Sod [13] en géométrie axisymétrique. C'est à partir de ce cas que la combinaison linéaire (2) a été déduite. À  $t = 0$ , une discontinuité en pression et densité génère trois ondes planes qui se propagent dans la direction axiale sans aucun mouvement radial. Les masses constantes « Wilkins » brisent la symétrie plane de la solution physique (figure 1(b)) contrairement aux masses variables (2) (figure 1(a)).

### 3.2 Corrections d'anti-dérive

Nous comparons ensuite notre filtrage inertiel aux corrections classiquement utilisées. L'impact de la précision sur le maillage est illustré sur la figure 2. Le filtrage inertiel et une correction existante appelée « correction en force » sont comparés sur le cas test de Kidder [14] en géométrie axisymétrique avec un maillage initialement perturbé. Le maillage le plus régulier est clairement obtenu pour le filtrage inertiel.

### 3.3 Conservation de l'énergie totale

On considère le cas test de Sedov [15] en géométrie axisymétrique où une onde de choc infiniment forte, sphérique et divergente est formée à  $t = 0$  par un dépôt ponctuel d'énergie à l'origine. Le dépôt

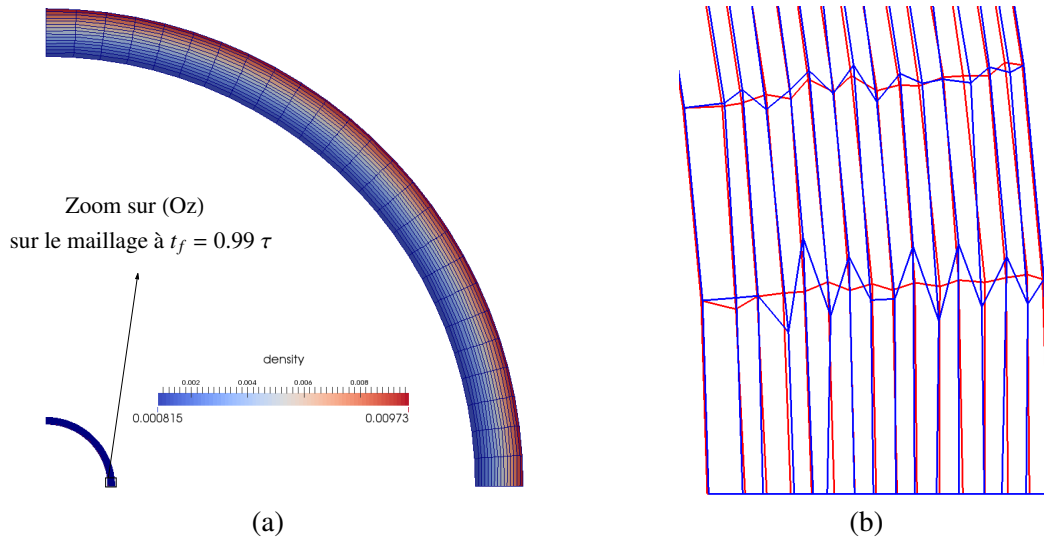


FIGURE 2 – Comparaison de corrections d’anti-dérive sur la compression isentropique de Kidder en géométrie axisymétrique : (a) maillages perturbés initial et final avec carte de densité et (b) maillages finaux avec zoom sur l’axe de symétrie pour le **filtrage inertiel** et les **correction en force**.

d’énergie est déterminé de façon à ce que l’onde de choc atteigne un rayon sphérique  $r^s$  égal à 1 à  $t = 1$ . Dans la figure 3(b), on compare, à la solution de référence, les profils de densité pour le schéma conservatif CSTS et le schéma non conservatif STS. Le schéma CSTS capture mieux la position du choc sur le maillage  $100 \times 100$  par rapport à STS qui produit une erreur d’environ 1.5 % sur la valeur analytique  $r^s = 1$ .

### 3.4 Robustesse et cohérence thermodynamique

La cohérence thermodynamique joue un rôle important dans la robustesse du schéma. L’utilisation du principe de moindre action nous assure une cohérence à l’ordre 1 au minimum en prenant en compte naturellement les flux de quantité de mouvement dus aux masses nodales variables [9]. Cependant, une cohérence à l’ordre 1 n’est pas suffisante dans certains cas. On reprend le cas test de Sedov [15] de la sous-section précédente. Dans le cas d’une cohérence à l’ordre 1, la crédibilité physique des calculs peut être remise en question en raison d’une pression négative apparaissant dans les premières mailles et dans les premiers instants (où les déformations sont les plus importantes). Des précautions ont donc été prises en amont de la dérivation du schéma présenté dans la section précédente pour obtenir une cohérence à l’ordre 2. Les calculs peuvent alors se poursuivre jusqu’au temps final  $t = 1$  sec. sans valeur physiquement non admissible.

## 4 Méthodologie ALE

Afin de pouvoir simuler des écoulements avec de fortes déformations (vorticité), il est nécessaire de permettre aux nœuds du maillage de se déplacer à une vitesse arbitraire (plus nécessairement la vitesse de la matière). C’est l’objet des techniques ALE [16]. On décompose ici l’algorithme ALE en 3 phases distinctes : (i) une phase lagrangienne où le maillage évolue avec l’écoulement ; (ii) une phase de régularisation du maillage dans les zones fortement distordues ; et (iii) une phase de projection  $L^2$

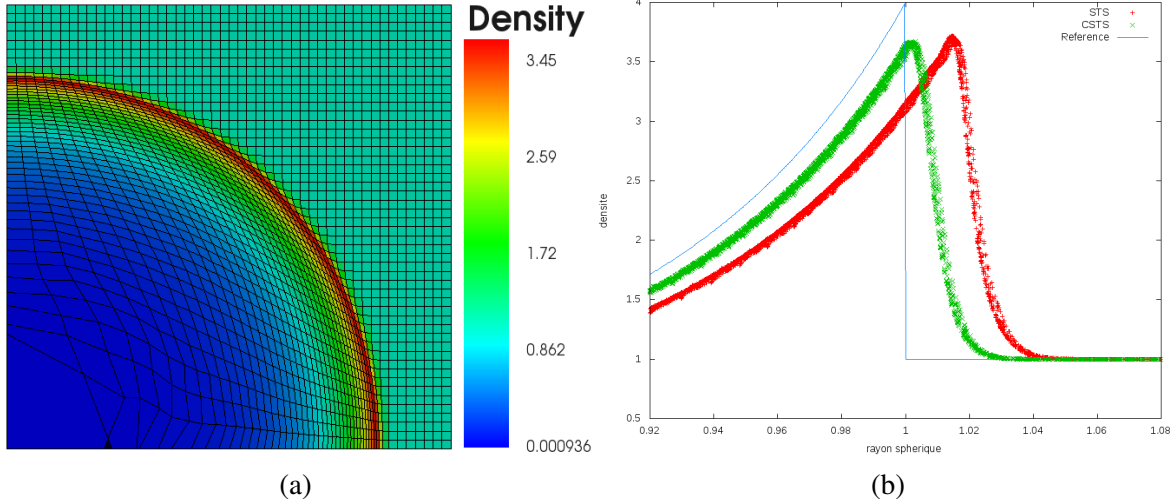


FIGURE 3 – Onde de choc de Sedov en géométrie axisymétrique au temps final  $t = 1$  : (a) maillage  $50 \times 50$  et carte de densité et (b) profils de densité en fonction du rayon sphérique  $r^s$  pour les schémas conservatif CSTS et non conservatif STS obtenus sur un maillage  $100 \times 100$  avec solution de référence.

(par calcul d’intersections exactes) des quantités du maillage lagrangien au maillage lissé. Une dernière phase lagrangienne de  $n + 1/2$  à  $n + 1$  est finalement nécessaire afin de définir nos quantités thermodynamiques au pas de temps entier  $n + 1$ . Les différentes étapes de notre algorithme ALE sont résumées dans la figure 4. Le défi est de savoir réaliser une étape de projection conservant l’énergie totale tout en contrôlant la création d’entropie. Ceci impacte le choix des variables et des volumes de base utilisés dans la projection.

## Références

- [1] M.L. Wilkins. “Calculation of elastic-plastic flow”. in *B.J. Alder, S. Fernbach, M. Rotenberg, Methods in computational physics : advances in research and applications. Vol. 3, Fundamental methods in hydrodynamics, Academic Press* (1964).
- [2] J. Von Neumann and R. D. Richtmyer. “A Method for the Numerical Calculation of Hydrodynamic Shocks”. *Journal of Applied Physics* 21.3 (1950), pp. 232–237.
- [3] J.G. Trulio and K.R. Trigger. “Numerical solution of the one-dimensional Lagrangian hydrodynamic equations”. *UC-URL, Report UCLR-6522* (1961).
- [4] D. E. Burton. “Exact conservation of energy and momentum in staggered-grid hydrodynamics with arbitrary connectivity”. *Lect. Notes Phys.* 395 (1991), p. 9.
- [5] A. Llor, A. Claisse, and C. Fochesato. “Energy preservation and entropy in Lagrangian space- and time-staggered hydrodynamic schemes”. *Journal of Computational Physics* 309 (2016), pp. 324–349.
- [6] E.J. Caramana and M. Shashkov. “Elimination of artificial grid distortion and hourglass-type motions by means of Lagrangian subzonal masses and pressures”. *J. Comp. Phys.* 142 (1998).
- [7] A. Claisse. “Conservative axisymmetric space- and time-staggered hydrodynamic schemes”. *Multimat (Würzburg, Germany), présentation orale* (2015).

- **Phase lagrangienne de  $n - 1/2$  à  $n + 1/2$**  —————
- Calcul de la vitesse  $\mathbf{u}_p^{n+1/2}$  avec un processus de prédiction/correction
  - Calcul de l'énergie interne décalée  $e_c^{n+1/2}$  en utilisant le flux en temps
- **Régularisation et projection en  $n + 1/2$**  —————
- Définition de la géométrie au demi-pas de temps
- $$\mathbf{x}_p^{n+1/2} = \mathbf{x}_p^n + \mathbf{u}_p^{n+1/2} \frac{\Delta t^{n+1/2}}{2}$$
- Régularisation de  $\mathbf{x}_p^{n+1/2}$  :  $\mathbf{x}_p^{n+1/2}$
  - Projection  $L^2$  des quantités sur cette nouvelle géométrie :  $e_c^{n+1/2}$ ,  $\mathbf{u}_p^{n+1/2}$ ,  $m_c$ ,  $\dots$
- **Phase lagrangienne de  $n + 1/2$  à  $n + 1$**  —————
- Calcul de l'énergie interne au pas de temps entier  $e_c^{n+1}$
- $$m_c e_c^{n+1} = m_c e_c^{n+1/2} + \text{flux en temps}$$
- Appel à l'équation d'état pour le calcul de  $p_c^{n+1}$

FIGURE 4 – Algorithme ALE pour le schéma CSTS de la section 2. Code couleur : quantités définies sur le maillage lagrangien en bleu ou sur le maillage régularisé en rouge.

- [8] A. Marboeuf. “Axisymmetric extension of Lagrangian conservative space- and time-staggered hydrodynamic scheme”. *Eccomas* (Crete, Greece), présentation orale (2016).
- [9] A. Marboeuf. “Numerical study of dissipative terms in the Lagrangian conservative space- and time-staggered hydrodynamic scheme”. *Multimat* (Würzburg, Germany), poster (2015).
- [10] R.K.C Chan. “A generalized arbitrary Lagrangian-Eulerian method for incompressible flows with sharp interfaces”. *J. Comp. Phys.* 17 (1975).
- [11] D.P. Flanagan and T. Belytschko. “A uniform strain hexahedron and quadrilateral with orthogonal hourglass control”. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 17 (1981).
- [12] P. Matejovic and V. Adamik. “A one-point integration quadrilateral with hourglass control in axisymmetric geometry”. *Comput. Meth. in App. Mech. and Eng.* (1988).
- [13] E.F. Toro. “Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics” (1999).
- [14] R.E. Kidder. “Theory of homogeneous isentropic compression and its application to laser fusion”. *Nuclear Fusion*, 14 (1974).
- [15] L.I. Sedov. “Similarity and dimensional methods in mechanics”. *Academic Press, New York* (1959).
- [16] C.W Hirt, A.A Amsden, and J.L Cook. “An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds”. *Journal of Computational Physics* 14.3 (1974), pp. 227–253.