



HAL
open science

Contributions à l'étude de schémas numériques de type Volumes Finis et de leurs applications pratiques.

Jean-Philippe Braeunig

► **To cite this version:**

Jean-Philippe Braeunig. Contributions à l'étude de schémas numériques de type Volumes Finis et de leurs applications pratiques.. Analyse numérique [math.NA]. ENS Paris-Saclay, France, 2018. tel-01918441v1

HAL Id: tel-01918441

<https://hal.science/tel-01918441v1>

Submitted on 11 Nov 2018 (v1), last revised 12 Dec 2018 (v2)

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES
École Doctorale de l'ENS Paris-Saclay

Présentée par

Jean-Philippe BRAEUNIG

en vue d'obtenir le grade de Docteur habilité dans le domaine :
MATHEMATIQUES APPLIQUEES

Sujet du mémoire :

**Contributions à l'étude de schémas numériques de type Volumes
Finis et de leurs applications pratiques.**

Habilitation soutenue à Cachan le 19 octobre 2018 devant le jury composé de :

Rémi ABGRALL	Professeur, ETH Zurich	Rapporteur
Daniel BOUCHE	Directeur de Recherche, CEA	Examineur
Florian DE VUYST	Professeur, UTC Compiègne	Président
Michael DUMBSER	Professeur, Univ. Trento	Rapporteur
Jean-Michel GHIDAGLIA	Professeur, ENS Paris Saclay	Garant
Hervé GUILLARD	Directeur de Recherche, INRIA Sophia	Rapporteur
Pierre-Henri MAIRE	Directeur de Recherche, CEA	Examineur

Centre de Mathématiques et de Leurs Applications
(ENS Paris Saclay/CNRS/UMR 8536)
61, avenue du Président Wilson, 94235 CACHAN CEDEX (France)

Contributions à l'étude de schémas numériques de type Volumes Finis et de leurs applications pratique.

Résumé :

Le contexte de ces travaux est la mise au point de schémas numériques pour l'hydrodynamique compressible multi-matériaux et pour les phases dispersées. En particulier, les sujets d'étude proviennent de difficultés étant apparues dans l'utilisation pratique de ces schémas *via* des codes de calcul industriels du CEA exploitants des supercalculateurs. En effet, ceux-ci visent à simuler des écoulements réels, i.e. des équations d'état raides, des configurations complexes de matériaux et des écoulements compressibles violents, conditions difficiles qui peuvent faire sortir les méthodes numériques du cadre théorique pour lequel elles ont été conçues. Il est particulièrement visé d'obtenir des schémas robustes, mais précis et convergents pour exploiter à bon escient le raffinement des maillages que va permettre la puissance des futurs supercalculateurs de classe exascale.

Mots Clefs :

Hydrodynamique, fluides compressibles, schéma numérique, reconstruction d'interfaces, phase dispersée.

Remerciements :

La décision de mettre en ordre les travaux réalisés ces dix dernières années pour réaliser ce mémoire et cette soutenance a été aidée par l'incitation de ma hiérarchie au CEA, de collègues en interne et Universitaires que je côtoie depuis un temps certains maintenant. Il s'est avéré que la prise de recul qu'impose cet exercice a été utile et agréable, en particulier grâce à ces personnes qui m'ont accompagné et que je tiens à remercier collectivement ici.

Je souhaite cependant saluer individuellement les personnes qui ont directement contribué à cette HDR. Jean-Michel Ghidaglia, qui après m'avoir dirigé en thèse, a encore accepté de se porter garant pour cette HDR. Une fois de plus son énergie et sa bienveillance m'auront fait avancer et c'est l'occasion de lui renouveler mon amitié et mon respect. Renaud Motte a joué un rôle déterminant, pour avoir soutenu l'ensemble de mes travaux, pour avoir encadré des étudiants et lancé des projets avec moi, et je l'en remercie chaleureusement. Raphaël Loubère, un vieux complice de bancs d'école, entre autres, dont les conversations et collaborations ont grandement contribué à mes travaux. Daniel Bouche et Stéphane Bernard, qui m'ont aidé à plusieurs stades de ma carrière, et encouragé à passer cette HDR.

Je remercie Rémi Abgrall, Michael Dumbser et Hervé Guillard, rapporteurs de ce mémoire, Florian De Vuyst, président du Jury, et Pierre-Henri Maire, dont j'ai beaucoup suivi les travaux ces dernières années. Je suis honoré qu'ils aient accepté de se pencher sur mes travaux et les aient approuvés.

Merci sincèrement à tous mes collègues du CEA, et c'est là néanmoins que je ne vais citer aucun nom pour éviter d'oublier trop de personnes, à ceux d'"hier" à DCSA pour l'impulsion et l'émulation de ces dernières années et à ceux d'"aujourd'hui" au DASE pour la nouveauté et la stimulation quotidienne. Merci aussi aux étudiants de qualité avec qui j'ai eu l'occasion de travailler.

Merci enfin à ma famille, à ma femme Marie, mon grand Edgar et ma petite Valentine.

Table des matières

1	Introduction	7
1.1	Historique professionnel	7
1.2	Thématiques abordées	8
1.3	Contenu du mémoire	10
2	La méthode VFFC-NIP pour l'hydrodynamique	13
2.1	Robustesse du modèle de mailles mixtes NIP	14
2.2	Amélioration du suivi d'interfaces	22
2.2.1	Amélioration de la précision du suivi d'interfaces	22
2.2.2	Traitement d'un nombre arbitraire de matériaux	23
2.3	Parallélisation de la méthode VFFC-NIP	24
3	Schémas Lagrange-Projection pour l'hydrodynamique	27
3.1	Schéma colocalisé	31
3.2	Réduction de la production d'entropie	32
3.2.1	Réduction par un formalisme de type pseudo-viscosité	32
3.2.2	Réduction par substitution d'un flux isentropique	33
3.3	Projection utilisant MOOD	33
4	Simulation de phases dispersées	35
4.1	Plasmas dans les tokamaks	37
4.2	Sprays de gouttelettes dans un gaz	37
5	Annexes	41
5.1	Articles en Hydrodynamique	41
5.2	Articles sur les phases dispersées	50

Chapitre 1

Introduction

1.1 Historique professionnel

Un projet en tant que Stagiaire (Service) Militaire en 1999-2000 avec B. Dubroca au CEA CESTA a été l'opportunité d'une première expérience dans la recherche, en contribuant à un code d'aérothermique [27]. Après avoir été Ingénieur Calcul en bureau d'étude dans une PME dans le domaine de la pyrotechnie (PyroAlliance), j'ai ensuite intégré le CEA DAM Ile de France en fin 2001. J'y ai d'abord travaillé sur des codes de calcul massivement parallèles en hydrodynamique et en turbulence. En 2007, j'ai soutenu une Thèse de Doctorat [22], dirigée par B. Desjardins et J.-M. Ghidaglia. L'objet de celle-ci était de proposer un schéma numérique eulérien pour l'hydrodynamique compressible multi-matériaux, alternatif aux méthodes de type Lagrange-Projection classiquement utilisées dans ce contexte.

Dans la période 2008-2011, en détachement au Centre INRIA Nancy-Grand Est dans l'équipe-projet CALVI dirigée par E. Sonnendrücker, j'ai participé aux études pour la simulation de la Fusion par Confinement Magnétique dans le contexte du projet ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor). L'occasion m'a été donnée de travailler sur des méthodes numériques pour des modèles gyrocinétiques de type Vlasov représentatifs de la turbulence à cœur dans les tokamaks. Il s'agit de modèles cinétiques décrivant le mouvement de particules chargées dans un champ magnétique intense, employés dans le code GYSELA 5D, développé à ce moment-là principalement par V. Grandgirard avec l'équipe de X. Garbet au CEA Cadarache avec qui nous collaborions.

De retour au CEA DAM Ile de France en 2011, une réflexion collective était menée sur les méthodes numériques existantes en regard des futurs supercalculateurs Exascale et des choix pertinents possibles. Dans ce cadre, j'ai participé à des groupes de réflexion impliquant des ingénieurs CEA et des collaborateurs extérieurs, proposé des contrats de recherche avec des partenaires académiques et encadré des étudiants. Plusieurs publications ont découlé de ces travaux, principalement sur les schémas Lagrange-Projection colocalisés et sont présentées dans ce manuscrit.

En octobre 2016, j'ai été nommé responsable d'un Laboratoire au sein du Département Analyse Surveillance Environnement du CEA DAM DIF, où l'on traite de problématiques de génération et de propagation d'ondes acoustiques dans l'atmosphère ou d'ondes sismiques dans la Terre, ainsi que de problèmes d'hydrodynamique compressible et d'élastodynamique. Dans ce cadre, je m'implique dans le fonctionnement du LRC LETMA (Université Pierre et Marie Curie, Ecole Centrale de Lyon, CEA DAM) traitant principalement de la propagation d'ondes acoustiques dans l'atmosphère, du LRC MESO (CEA DAM, CMLA, ENS Paris Saclay) pour l'hydrodynamique et la quantification d'incertitudes, et dans des collaborations en cours avec notamment l'Institut de Physique du Globe de Paris et l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées. Je poursuis une activité de recherche sur la thématique de l'hydrodynamique compressible et participe à l'encadrement scientifique d'étudiants.

1.2 Thématiques abordées

Les thèmes dans lesquels je me suis particulièrement investi après ma thèse sont les suivants :

Extension et exploitation de VFFC-NIP

Le schéma VFFC-NIP (Natural Interface Positionning) issu de la thèse [22] a fait l'objet d'extensions complémentaires avec plusieurs collègues, collaborateurs universitaires et étudiants, Loubère et al [93], [33], Champmartin et al [15], Blais et al [16], d'extensions à d'autres physiques via la Thèse de D. Chauveheid [41] dont la diffusion radiative, la tension de surface [42] et les bas nombres de Mach [26]), et Peybernes *et al* [108] pour la parallélisation

informatique HPC.

Des travaux de simulation ont été menés sur le phénomène de “sloshing” (impact de vagues dans une cuve) avec la société GTT [32, 34]. Il s’agissait en particulier de valider par la simulation des lois de similitudes entre un impact de vague de méthane liquide sur la paroi d’une cuve de méthanier et des impacts de vagues d’un autre liquide à l’échelle d’un laboratoire.

L’hydrodynamique compressible

Dans le cadre de la résolution numérique des équations d’Euler pour l’hydrodynamique compressible multi-matériaux, les questions posées par l’arrivée de supercalculateurs toujours plus puissants sont principalement la convergence en maillage, la robustesse et la capacité de ces méthodes à être parallélisées efficacement pour tirer au mieux parti de la puissance de calcul des machines. Un choix possible est d’utiliser des schémas lagrangiens colocalisés, qui sont robustes et écrits sous forme conservative, par exemple les schémas GLACE par Després *et al* [56, 44] ou EUCCLHYD par Maire *et al* [97]. En particulier, ces schémas dissipent intrinsèquement de l’entropie par l’utilisation de problèmes de Riemann acoustiques. Associés à une phase de Projection conservative, nous obtenons des schémas eulérien de type Lagrange-Projection qui entrent dans le cadre plus général de l’ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian), qui fait l’objet de nombreux travaux [43, 40, 3, 94, 17, 9, 81, 86, 101]. Par ailleurs, la colocalisation des variables du modèle et l’utilisation de schémas de projection adaptés comme décrit dans [24] doit pouvoir procurer des codes efficaces en termes de simplicité algorithmique et de parallélisation informatique, comme le montrent De Vuyst *et al* dans [60, 61]. Cependant, il apparaît deux difficultés lors de l’expérimentation de ces schémas colocalisés. La première est la dissipation d’entropie excessive en particulier dans les détentes ou celle-ci devrait être nulle. Outre le ralentissement de la convergence de la solution dans certains cas raides, cette erreur peut conduire localement à un chauffage excessif, ce qui peut être problématique dans le cadre de modèles de matériaux réels (changement de phase, élasto-plasticité) ou de fluides réactifs (taux de réaction dépendant de la température). Une amélioration tendant à réduire cette production excessive d’entropie est proposée dans [23]. Une seconde difficulté se situe dans la phase de projection, par une méthode d’ordre élevé en espace, dès l’ordre deux. Lorsqu’on projette de manière conservative l’énergie totale, l’énergie interne (et donc la température) peut subir une erreur importante du fait de

sa projection conjointe avec l'énergie cinétique, et éventuellement mener à la ruine des simulations. Ce problème et une proposition d'amélioration ont été décrits dans [24]. Par ailleurs cette difficulté apparaît sous une autre forme dans les schéma non-colocalisés, que Debar évoque dans [55].

Les phases dispersées

Dans le cadre de la simulation de plasmas magnétisés dans les tokamaks, une difficulté réside dans les temps caractéristiques longs pendant lesquels les particules se déplacent sur de grandes distances dans le vide, comme cela est décrit par exemple dans Brizzard et Hahm [36]. Des schémas numériques d'ordre élevé sont nécessaires pour capturer les petites structures de l'écoulement et éviter leur dissipation prématurée, mais au prix de difficultés de robustesse, voir Sonnendrücker et al [52], Braeunig et al [28] et les rapports [29, 30, 77]. D'autre part, ces simulations de type DNS (Direct Numerical Simulation) sont une gageure en termes de calcul haute performance, car il faut paralléliser un code de calcul gyrocinétique 5D de manière extrêmement performante pour atteindre une résolution suffisante afin de traiter les échelles pertinentes de l'écoulement.

Cette précédente thématique et celle des phases dispersées de type sprays, fins ou épais, de particules de fluide évoluant dans un gaz, laisse le choix entre deux grandes familles de méthodes numériques. Une première est lagrangienne pour les particules, dans les méthodes de type Monte Carlo PIC (Particle-In-Cell), où le trajet d'un ensemble de particules numériques est calculé avec collisions entre elles, donnant une représentation numérique du spray réel. Une seconde est déterministe par un calcul statistique de fonctions de probabilité de présence des particules (pdf) et de leur évolution par une équation de transport. Cette dernière est plus coûteuse mais converge mieux que les méthodes de type Monte Carlo. Elle pourrait également être mieux conditionnée vis-à-vis du couplage entre les phases gaz et particules, comme cela est abordé dans Bernard-Champmartin et al [14].

1.3 Contenu du mémoire

Ce mémoire d'HDR est structuré en trois chapitres. Les deux premiers traitent de l'hydrodynamique compressible multi-matériaux, où sont décrits les travaux d'amélioration et d'extension de la méthode directe VFFC-NIP,

puis les travaux sur la mise au point d'un schéma eulérien de type Lagrange-Projection. Le troisième chapitre traite de la simulation d'écoulements raréfiés ou de sprays nécessitant une description cinétique des particules de fluide. Dans les deux thématiques évoquées dans ce mémoire, on s'emploie à étudier les problèmes numériques émergeant dans des simulations réalistes et à adapter la méthode numérique choisie. Ceci conduit à la question suivante : s'il y a des problèmes à régler avec une méthode numérique, pourquoi ne pas en choisir une autre ? Je réponds humblement que je n'ai pas connaissance de méthode qui n'ait pas pu être mise en défaut sur des cas pratiques.

Chapitre 2

La méthode VFFC-NIP pour l'hydrodynamique

La méthode VFFC-NIP a été introduite dans la thèse de Braeunig [22] [31] pour simuler les écoulements compressibles multi-matériaux. Il s'agit d'un schéma Volumes Finis direct, au sens où l'on n'utilise pas de splitting d'opérateurs entre les termes acoustique et convectif des équations d'Euler. Il a été développé pour des applications présentant des chocs forts et de grandes distorsions des interfaces entre des matériaux ayant des caractéristiques très différentes, entre de l'eau et de l'air par exemple. Dans ce cadre, une modélisation des interfaces non-diffusive¹ dans des volumes dits "partiels" est souhaitable et a été développée, avec une condition de glissement parfait entre les matériaux. Le choix est de positionner des segments de droite dans les mailles mixtes à la manière de Youngs [130] et de les faire évoluer par le schéma. La représentation de l'interface est donc discontinue par morceaux sur le maillage. De plus, ce modèle de sous-maille suppose que chaque matériau ne peut apparaître qu'une seule fois dans une maille mixte, donc par exemple les volumes des gouttelettes d'un spray dans une maille sont rassemblés en un seul volume partiel. Les maillages employés sont cartésiens orthogonaux et le schéma monofluide employé pour les mailles pures, i.e. un seul matériau présent, est VFFC (Volumes Finis à Flux Caractéristiques) de *Ghidaglia et al* [68, 69]. Pour les mailles dites mixtes, i.e. plusieurs matériaux présents, une stratégie de splitting directionnel est employée pour faire évoluer les

1. c'est-à-dire une reconstruction explicite de l'interface séparant hermétiquement les matériaux

interfaces reconstruites par un schéma en une dimension d'espace, mais prenant en compte des informations géométriques multi-dimensionnelles. Sous cette forme, le schéma ne peut pas être étendu à des maillages quelconques. L'intérêt principal de cette méthode est de définir un flux aux interfaces, considérées lagrangiennes par le biais d'une étape utilisant un objet appelé "condensat", où l'on agglomère des éléments de volumes partiels des mailles mixtes, voir figure 2.1. Ceci permet d'imposer la condition de contact entre les matériaux qui dans le cadre strict des équations d'Euler, modèle ne contenant ni diffusion ni frottement, doit être du type glissement parfait. Cette propriété aux interfaces a été la raison pour laquelle la société GTT, qui s'intéresse aux impacts de vagues de gaz liquéfiés dans les réservoirs des méthaniers qu'elle conçoit, a souhaité utiliser le code développé dans ce cadre [32] [34]. Dans des développements ultérieurs réalisés par D. Chauveheid [41], ce formalisme a permis d'introduire très naturellement une force de tension de surface qui respecte au repos l'équilibre avec le gradient de pression [42]. Cette propriété est importante pour éviter un artefact numérique dénommé "courants parasites" dans la littérature [21, 109] et qui peut déstabiliser la solution.

D'autre part, cette méthode a été étendue à la géométrie axi-symétrique, au sens où les maillages sont toujours cartésiens orthogonaux, mais de révolution autour d'un axe z . Ceci a été réalisé de manière générique et a été validé sur des cas académiques [15].

2.1 Robustesse du modèle de mailles mixtes NIP

Les études applicatives autour du sloshing (impact de vagues) avec la société GTT [32] qui ont montré des lacunes de robustesse du modèle de mailles mixtes NIP et ont permis de mettre au point des modifications ayant amélioré ce point, sont présentées dans l'article [33]. Cependant, la méthode numérique finalement adoptée pour faire évoluer les interfaces, en particulier pour les développements postérieurs décrits dans les articles [93] et [15] [16], va ici être décrite, car elle n'a pas jusqu'ici été publiée.

On rappelle que la méthode NIP utilise un *splitting* directionnel, donc le schéma est monodimensionnel par direction sur un maillage cartésien orthogonal. Pour chaque direction, les groupes de mailles mixtes successives

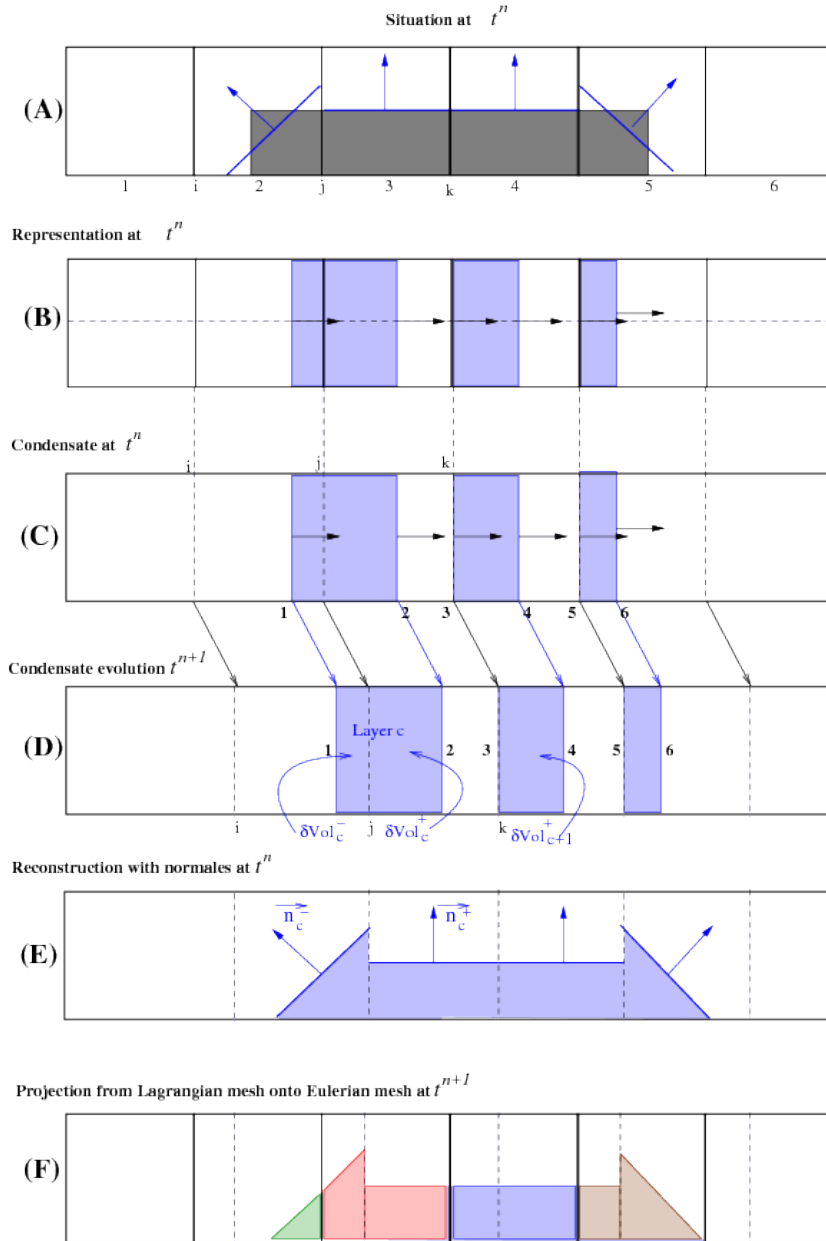


FIGURE 2.1 – Description des étapes permettant le calcul de l'évolution des interfaces et des grandeurs dans les mailles mixtes, via une étape dite de "condensat".

sont identifiés, voir étape (A) figure 2.1. On ordonne les fragments (volumes partiels ou mailles pures) de matériau dans chaque groupe en fonction des normales aux interfaces, étape (B), et on considère ces fragments comme des “couches” de matériau. Deux couches successives du même matériau sont agglomérées en une seule, étape (C). Cet ensemble résultant est appelé “condensat” dont l’évolution va être calculée en écrivant les lois de conservation sur chaque couche, étape (D). L’interface entre deux couches est mobile avec une vitesse associée et un flux lagrangien y est défini. Les faces extrêmes du condensat sont immobiles et correspondent aux faces des mailles pures agglomérées, et un flux eulérien y est calculé à l’aide du schéma VFFC [68], identique à celui employé entre deux mailles pures. Les nouveaux états et positions des couches calculés sont alors projetés sur le maillage eulérien initial, et les normales aux interfaces dans chaque maille mixte sont recalculées en fonction du taux de présence des matériaux dans les mailles voisines.

La difficulté est de définir un schéma robuste, résolvant au mieux les lois de conservation du système d’Euler sur les couches de volumes Vol_k dans un condensat, qui peuvent être arbitrairement petites si par exemple deux interfaces se rapprochent. Dans le cas des équations d’Euler, un schéma explicite impose classiquement une condition de type CFL pouvant alors rendre le pas de temps arbitrairement petit :

$$\Delta t < CFL \frac{Vol_k}{|\lambda_k|A}. \quad (2.1)$$

avec Vol_k le volume de la couche, A l’aire transverse à la direction de calcul du condensat, λ_k la plus grande valeur propre du système d’Euler dans k . Dans l’article [33], nous avons pris le parti de calculer l’évolution des grandeurs dans le condensat en contrôlant l’évolution de la pression. Cependant, c’est bien cette contrainte incontournable (2.1) qui est l’origine des problèmes de robustesse. Nous avons finalement eu l’idée de modifier le schéma pour être robuste sous une autre condition CFL, acceptable celle-ci, lorsque (2.1) n’est pas vérifiée. Nous suggérons donc un schéma stable sous une contrainte liée au volume total de la maille mixte i dont est issu le volume partiel k plutôt qu’à son volume Vol_k , de manière identique à la condition CFL sur une maille pure équivalente :

$$\Delta t < CFL \frac{Vol_i}{|\lambda_k|A}. \quad (2.2)$$

Bien évidemment, nous commettons ici une erreur de consistance. L’hypothèse admise ici est que les volumes partiels impliqués et subissant cette

modification de schéma sont suffisamment petits pour n'impacter que très marginalement et très localement l'écoulement. D'autre part, nous allons assurer la conservation des invariants que sont la masse, la quantité de mouvement et l'énergie totale. Sans pouvoir le prouver autrement que via des tests de validation numérique, il semble alors que cette inconsistance locale le reste au cours des itérations, comme une erreur de localisation de l'information qui en moyenne reste proche de la solution. Cependant, seuls les tests numériques de validation et la comparaison à des solutions de référence à convergence nous ont permis de vérifier qu'en effet, cette approche est valide.

Pour cette nouvelle méthode, nous allons donc procéder en deux étapes :

- écrire un schéma stable sous la condition CFL (2.2) même pour des couches dont le volume Vol_k tend vers zéro, quitte à commettre une erreur ;
- utiliser l'algorithme défini dans [33], pour retrouver une solution conservative à l'échelle du condensat, la plus proche possible de la solution stable de l'étape précédente.

L'hypothèse concernant la robustesse faite ici est qu'étant donné un pas de temps satisfaisant la contrainte (2.2) pour une couche k , la maille pure i de volume Vol_i ayant les mêmes caractéristiques (vitesse du son, vitesse, densité,...) a une évolution robuste, au sens de la non divergence de la valeur calculée, puisque sa contrainte CFL (2.2) est satisfaite. Un schéma volumes finis approchant les équations d'Euler dans une couche k s'écrit :

$$m_k^{n+1}V_k^{n+1} = m_k^nV_k^n - \Delta t A(\phi_{k+1/2} - \phi_{k-1/2}) \quad (2.3)$$

avec $V = (1, u, E)^t$ le vecteur des variables, E l'énergie totale, $\phi_{k+1/2}$ le flux entre les couches k et $k + 1$, avec n_d le vecteur unitaire dans la direction de calcul :

- Si $k + 1/2$ est une interface interne du condensat, donc mobile, le flux lagrangien s'écrit :

$$\phi_{k+1/2} = (0, p n_d, p(u \cdot n_d))_{k+1/2}^t$$

avec $u_{k+1/2}$ la vitesse et $p_{k+1/2}$ la pression définies comme solution du problème de Riemann acoustique [73], voir l'article de présentation de la méthode [31, 93] pour les détails.

- Si $k + 1/2$ est la première ou la dernière face du condensat, donc confondue avec une face du maillage et immobile, un flux eulérien y

est calculé via le schéma VFFC [68] :

$$\phi_{k+1/2} = (\rho(u \cdot n_d), \rho u(u \cdot n_d) + pn_d, (\rho E + p)(u \cdot n_d))_{k+1/2}^t$$

En introduisant $\theta_k = m_k^n / m_k^{n+1}$ indépendante de Vol_k^n puisque la masse des couches n'évolue que par des flux de masse, le schéma (2.3) s'écrit :

$$\frac{V_k^{n+1}}{\theta_k} = V_k^n - \frac{\Delta t A}{\rho_k^n Vol_k^n} (\phi_{k+1/2} - \phi_{k-1/2}) \quad (2.4)$$

Il est proposé de modifier ce schéma dans la première étape menant à l'état V_k^{NC} , en remplaçant dans le schéma le volume Vol_k de la couche k par celui de la maille entière Vol_i :

$$\frac{V_k^{NC}}{\theta_k} = V_k^n - \frac{\Delta t A}{\rho_k^n Vol_i^n} (\phi_{k+1/2} - \phi_{k-1/2}) \quad (2.5)$$

Ce schéma d'évolution est stable au sens où la CFL (2.2) est satisfaite. Cependant, la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale est perdue à ce stade dans le condensat.

Remarque 1. *Etudions l'effet de cette modification non conservative V_k^{NC} (2.5) par rapport à (2.4) dans le cas d'une couche entre deux interfaces en 1D où $Vol_k = \Delta x_k$. On considère en particulier la composante vitesse u du vecteur des variables $V = (1, u, E)^t$, dont la composante de flux associée $\phi = (0, p, pu)^t$ est p . La pression définie à l'interface est donnée par le solveur de Godunov acoustique :*

$$p_{k+1/2}^* = \frac{\alpha_k p_{k+1} + \alpha_{k+1} p_k}{\alpha_k + \alpha_{k+1}} - \frac{\alpha_k \alpha_{k+1}}{\alpha_k + \alpha_{k+1}} (u_{k+1} - u_k) = \bar{p}_{k+1/2} - \frac{\tilde{\alpha}_{k+1/2}}{2} (u_{k+1} - u_k)$$

avec $\alpha = \rho c$ et $\bar{p}_{k+1/2}$, $\tilde{\alpha}_{k+1/2}$ les moyennes implicitement définies, alors (2.5) devient :

$$\begin{aligned} \frac{u_k^{n+1}}{\theta_k} &= u_k^n - \frac{\Delta t}{\rho_k^n \Delta x_i^n} (p_{k+1/2}^* - p_{k-1/2}^*) \\ &= u_k^n - \frac{1}{\rho_k^n} \frac{\Delta t}{\Delta x_i^n} \frac{\Delta x_k^n}{\Delta x_k^n} \left(\frac{\bar{p}_{k+1/2} - \bar{p}_{k-1/2}}{\Delta x_k^n} \right) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\rho_k^n} \left(\frac{\tilde{\alpha}_{k+1/2} \Delta x_i^n (u_{k+1}^n - u_k^n) - \tilde{\alpha}_{k-1/2} \Delta x_i^n (u_k^n - u_{k-1}^n)}{2 (\Delta x_i^n)^2} \right) \end{aligned}$$

La substitution de (2.4) par (2.5) dans l'algorithme a pour effet évident d'empêcher l'explosion des termes de gradient et de diffusion lorsque $\Delta x_k \rightarrow 0$. L'hypothèse, vérifiée en pratique, est que cette manipulation (2.5) rend la diffusion numérique prépondérante dans l'évolution de la vitesse, et de la même façon pour la pression, du fait des termes visqueux du solveur de Godunov acoustique lorsque le volume partiel $\Delta x_k \rightarrow 0$. En effet, cette manipulation utilisant (2.5) peut également être vue comme un remplacement du pas de temps Δt par $\Delta t \Delta x_k / \Delta x_i$ pouvant tendre vers zero avec Δx_k . Cela revient à diminuer d'autant le coefficient CFL localement à la couche k , menant à favoriser la diffusion numérique. Ce comportement excessivement diffusif de la vitesse et de la pression est souhaitable lors la dégénérescence d'une couche vers un volume nul, car le schéma tend à la rendre similaire à une interface de type discontinuité de contact au travers de laquelle la pression et la vitesse doit être continue. Il est évident par ailleurs que lorsque ce volume devient vraiment trop petit, il est supprimé de la simulation et le seuil adopté est $Vol_k < 10^{-5} Vol_i$.

Pour l'évolution du volume des couches du condensat, les valeurs des vitesses d'interface proviennent du solveur de Riemann acoustique :

$$u_{k+1/2}^* = \frac{\alpha_k u_k + \alpha_{k+1} u_{k+1}}{\alpha_k + \alpha_{k+1}} - \frac{p_{k+1} - p_k}{\alpha_k + \alpha_{k+1}}$$

et les volumes sont calculés de façon à limiter l'évolution relative de la densité ρ_k dans le volume partiel k , lorsque le pas de temps ne satisfait pas la condition (2.4) :

$$\begin{aligned} Vol_k^{NC} &= Vol_k^n + \Delta t A (u_{k+1/2}^* - u_{k-1/2}^*) \\ \text{si} \quad |\tau_\rho| &= \left| \frac{\rho_k^{NC} - \rho_k^n}{\rho_k^n} \right| = \left| \frac{\theta_k Vol_k^{NC} - Vol_k^n}{Vol_k^n} \right| \leq \varepsilon_\rho \quad (2.6) \\ \text{sinon} \quad \theta_k Vol_k^{NC} &= Vol_k^n (1 + \varepsilon \text{sign}(\tau_\rho)) \end{aligned}$$

Remarque 2. Considérons une équation d'état pour la pression de la forme $p(\rho, e)$ et cherchons à borner l'évolution relative de la pression entre les temps t^n et t^{n+1} par une valeur ε :

$$\left| \frac{p_k^{n+1} - p_k^n}{p_k^n} \right| < \varepsilon.$$

Si l'on ne considère que la dépendance de la pression à l'évolution relative de la densité ρ , à énergie interne e constante, il est évalué dans l'article [33] que celle-ci doit être bornée par :

$$\left| \frac{\rho_k^{n+1} - \rho_k^n}{\rho_k^n} \right| < \varepsilon_\rho = \frac{\varepsilon}{\frac{\rho_k^n (c_k^n)^2}{p_k^n} + \Gamma_k^n \varepsilon}$$

avec c la vitesse du son et Γ le coefficient de Grüneisen, et typiquement $\varepsilon \approx 0.1$ pour maintenir une évolution contrôlée de la pression dans couches de très petits volumes, au sens où le schéma peut réagir à une évolution brusque de la pression dans cette couche en quelques itérations, de l'ordre de 10 avec $\varepsilon \approx 0.1$.

Il s'agit maintenant de revenir à une solution conservative dans le condensat, i.e. l'ensemble des mailles mixtes et pures agglomérées, à partir de l'état des couches V_k^{NC} calculé par l'évolution (2.5) et Vol_k^{NC} par (2.6). La stratégie est de trouver des flux ϕ^{NC} entre les couches du condensat amenant à des états thermodynamiques V_k^{n+1} conservatifs et les plus proches possibles des états Vol_k^{NC} et V_k^{NC} . La solution V_k^{n+1} est calculée à partir de ces flux ϕ_k^{NC} , conservative construction, du fait de ce schéma Volumes Finis :

$$m_k^{n+1} V_k^{n+1} = m_k^n V_k^n - \Delta t A(\phi_{k+1/2}^{NC} - \phi_{k-1/2}^{NC}).$$

Pour déterminer la vitesse $u_{k+1/2}^{NC}$ et la pression $p_{k+1/2}^{NC}$ à l'interface $k+1/2$, on utilise les relations de conservation du volume et de la quantité de mouvement dans le condensat C :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{N_k} Vol_k^{n+1} &= \sum_{k=1}^{N_k} Vol_k^n && \neq \sum_{k=1}^{N_k} Vol_k^{NC} \\ \sum_{k=1}^{N_k} m_k^{n+1} u_k^{n+1} &= \sum_{k=1}^{N_k} m_k^n u_k^n - \Delta t A(\phi_{Cg}^{mu} + \phi_{Cd}^{mu}) && \neq \sum_{k=1}^{N_k} m_k^{NC} u_k^{NC} \end{aligned} \quad (2.7)$$

On montre dans l'article [33] que les équations de conservation (2.7) pour la vitesse en particulier peuvent se réécrire :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{N_k} (Vol_k^{n+1} - Vol_k^n) &= 0 \\ \sum_{k=1}^{N_k} m_k^{n+1} \left(u_k^{n+1} - u_k^n + \frac{\varphi}{m_C^{n+1}} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (2.8)$$

avec $m_C^{n+1} = \sum_{k=1}^{N_k} m_k^{n+1}$ et $\varphi = \Delta t A(\phi_{C_g}^m + \phi_{C_d}^m - u_1^n \phi_{C_g}^{mu} - u_{N_k}^n \phi_{C_d}^{mu})$, ϕ_{C_g} et ϕ_{C_d} étant les flux eulériens gauche et droit aux extrémités du condensat, les exposants m et mu désignant respectivement leurs composantes masse et quantité de mouvement. L'article [33] détaille cette démarche.

On se propose de trouver des suites de coefficients C_k^{Vol} et C_k^{mu} telles que

$$Vol_k^{n+1} - Vol_k^n = C_k^{Vol} (Vol_k^{NC} - Vol_k^n)$$

$$m_k^{n+1} \left(u_k^{n+1} - u_k^n + \frac{\varphi}{m_C^{n+1}} \right) = C_k^{mu} m_k^{n+1} \left(u_k^{NC} - u_k^n + \frac{\varphi}{m_C^{n+1}} \right)$$

de sorte que les relations (2.8) soient satisfaites avec Vol_k^{n+1} et u_k^{n+1} ainsi calculés.

Remarque 3. *Les coefficients C_k^{Vol} et C_k^{mu} doivent être proches de 1 pour limiter l'écart entre Vol_k^{n+1} et Vol_k^{NC} , et u_k^{n+1} et u_k^{NC} , pour rester proche de la solution stable mais non-conservative NC.*

Définissant de plus $q_k^{Vol} = Vol_k^{NC} - Vol_k^n$ et $q_k^{mu} = m_k^{n+1} \left(u_k^{NC} - u_k^n + \frac{\varphi}{m_C} \right)$, on obtient alors deux relations de la forme générique suivante pour $q_k = (q_k^{Vol}, q_k^{mu})$:

$$\sum_{k=1}^{N_k} C_k q_k = 0 \quad (2.9)$$

Après analyse, un choix simple et expérimentalement suffisamment robuste pour déterminer C_k est donné par l'algorithme suivant, identique à celui dans l'article [33] :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{N_k} C_k q_k &= \sum_{k=1, q_k > 0}^{N_k} C^+ q_k + \sum_{k=1, q_k < 0}^{N_k} C^- q_k \\ &= C^+ S^+ - C^- S^- = 0 \end{aligned}$$

avec les sommes des termes q_k positifs $S^+ > 0$ et négatifs $S^- > 0$ définis naturellement et

$$C_k = C^+ \text{ si } q_k > 0,$$

$$C_k = C^- \text{ si } q_k < 0.$$

Les valeurs de C^+ et C^- doivent être les plus proches de 1 possible, voir remarque 3, et le meilleur choix dans ce contexte est alors :

- Si $\frac{S^+}{S^-} < 1$ alors $C^+ = 1$ et $C^- = \frac{S^+}{S^-}$,
- Si $\frac{S^-}{S^+} < 1$ alors $C^- = 1$ et $C^+ = \frac{S^-}{S^+}$,
- Si $S^\pm = 0$ alors $C^\pm = 1$ et $C^\mp = 0$.

On obtient donc les valeurs respectant les lois de conservation (2.7) suivantes, solutions de la méthode au temps $n + 1$:

$$Vol_k^{n+1} = C_k^{Vol} Vol_k^{NC} + (1 - C_k^{Vol}) Vol_k^n$$

$$u_k^{n+1} = C_k^{mu} u_k^{NC} + (1 - C_k^{mu}) u_k^n + (1 - C_k^{mu}) \frac{\varphi}{m_C^{n+1}}$$

L'énergie totale E^{n+1} est calculée à partir des vitesses $u_{k+1/2}$ et pressions $p_{k+1/2}$ aux interfaces menant aux valeurs Vol_k^{n+1} (ne dépend que de $u_{k+1/2}$) et u_k^{n+1} (ne dépend que de $p_{k+1/2}$). La conservation de l'énergie totale est assurée par le schéma sous forme conservative employé, dont les flux aux interfaces du condensat sont $p_{k+1/2} u_{k+1/2}$, voir l'article [33] pour plus de détails.

S'il a été possible d'obtenir des coefficients C_k proches de 1, la solution à $n + 1$ est proche de la solution stable NC , qui elle-même est proche de la solution des équations d'Euler si le volume de la couche permet de respecter la condition CFL sur le pas de temps. Sinon, la solution est une moyenne de l'état au temps n et de la solution stable NC , ce qui dans les volumes partiels petits doit empêcher une explosion de la solution. En pratique, cet algorithme a permis de stabiliser la méthode NIP dans une large gamme de problèmes très raides, voir les articles [93] et [16].

2.2 Amélioration du suivi d'interfaces

2.2.1 Amélioration de la précision du suivi d'interfaces

A l'issue de la thèse [22], la méthode VFFC-NIP souffrait d'une mauvaise qualité du suivi géométrique des interfaces, car le splitting directionnel ne prenant pas en compte la normale à l'interface y introduisait des instabilités. L'article présentant la méthode ENIP[93] (Enhanced Natural Interface Positioning) décrit une manière de supprimer ces instabilités en améliorant la

précision du suivi des interfaces. Le *splitting* directionnel pour l'évolution de l'interface est conservé, mais l'étape de "condensation" des volumes partiels est améliorée, car prenant en compte explicitement la normale à l'interface. L'amélioration réalisée entre NIP et ENIP est tout à fait semblable à la différence entre SLIC [104] (Simple Line Interface Capturing) et PLIC (Piecewise Linear Interface Capturing) [130, 88], puisque il s'agit dans les deux cas d'employer une information multidimensionnelle dans une méthode qui initialement n'était que purement 1D. La méthode ENIP résultante permet d'exploiter pleinement la condition de contact de glissement entre les matériaux, ce qui a amélioré fortement la pertinence de la méthode par exemple pour une interface entre de l'eau et de l'air, ce qui est illustré dans la publication [93].

La publication concernée peut être trouvée dans l'annexe Hydrodynamique 5.1 de ce manuscrit :

[93] R. Loubère, J.-P. Braeunig, J.-M. Ghidaglia, A totally Eulerian finite volume solver for multi-material fluid flows : Enhanced Natural Interface Positioning ENIP, *European Journal of Mechanics B/Fluids*, Vol 31, p. 1-11 (2010).

2.2.2 Traitement d'un nombre arbitraire de matériaux

Une autre restriction de la méthode NIP était de ne pouvoir traiter que deux matériaux. Dans ce cas, il ne peut exister qu'une seule interface dans une maille mixte, et la connaissance de sa normale et de la fraction volumique des matériaux est suffisante pour positionner une interface rectiligne de manière unique. L'extension à des mailles mixtes à plus de deux matériaux pose la question du positionnement des interfaces, car même si chaque matériau n'apparaît qu'une seule fois dans la maille, les interfaces linéaires entre eux peuvent se croiser. Une hypothèse supplémentaire est posée : l'écoulement simulé dispose d'un maillage suffisamment fin pour capturer les plus petites structures d'intérêt. Cela suppose que l'on ne souhaite pas capturer des structures de taille caractéristique plus petite qu'une maille, telles que des filaments, des gouttelettes, des structures stratifiées, etc... Il n'est cependant pas exclu de simuler des fragments de matériaux plus petits que la maille, qu'ils aient une origine physique ou numérique. D'autre part, cette hypothèse suggère que le nombre de mailles à plus de deux matériaux est faible par rapport au nombre total, puisque le nombre de points triple, quadruple, etc dans

la géométrie est restreint si celle-ci est suffisamment bien discrétisée. Après avoir étudié des modèles existants dans la littérature, très élaborés [66, 47, 117] ou simples [104, 102] de reconstruction à N matériaux, nous avons choisi l'approche simple et très répandue, de type dit "pelure d'oignon", où toutes les interfaces sont parallèles dans une maille et leur normale commune est calculée selon un ordre des matériaux présents défini par l'utilisateur. Cette méthode comporte une part d'arbitraire, mais puisqu'elle n'impacte que très peu de mailles, elle a finalement peu d'influence en pratique dans les cas réalistes que nous avons étudiés. Le principal défaut de ce choix, et qui n'est résolu qu'en mettant en œuvre des méthodes complexes reconstruisant explicitement les points triples, est la possible génération d'origine numérique de fragments de matériaux, voir par exemple le cas "vortex" à quatre matériaux dans l'article Blais et al [16].

La publication concernée peut être trouvée dans l'annexe Hydrodynamique 5.1 de ce manuscrit :

[16] B. Blais, J.-P. Braeunig, D. Chauveheid, J.-M. Ghidaglia, R. Loubere, Dealing with more than two materials in the FVCF-ENIP method, *European Journal Mechanics B/Fluids*, Vol 42, 1–9 (2013).

2.3 Parallélisation de la méthode VFFC-NIP

Étant donné que la méthode VFFC-NIP emploie une méthode de splitting directionnel, il est bien évident que cette propriété importante de l'algorithme doit être prise en compte dans la parallélisation. C'est le cas également dans le contexte de simulations gyrocinétiques de plasmas magnétisés, où la parallélisation proposée par E. Sonnendrücker et al [79] a inspiré ce travail. En effet, chaque étape directionnelle fait évoluer les colonnes ou les lignes de mailles (en 2D) de manière indépendante les unes des autres. Ceci permet donc de découper un domaine carré en tranches rectangulaires de lignes ou colonnes selon la direction de calcul. Chaque tranche est traitée par un processeur ayant sa mémoire propre, de manière indépendante des autres tranches. Il s'agit d'une parallélisation à mémoire distribuée où les communications sont assurées par la librairie MPI (Message Passing Interface). L'avantage du splitting directionnel est qu'il n'y a donc pas de communications nécessaires entre les processeurs pendant une étape calcul dans une direction. Cependant, l'alternance des étapes directionnelles du splitting (tranches selon x

ou y) nécessite d'importantes communications pour transposer les données, pour mettre à jour les tranches entre deux étapes.

De plus, les processeurs actuels sont constitués de plusieurs coeurs de calcul ayant tous accès à une mémoire commune, donnant la possibilité d'un niveau de parallélisation supplémentaire dit à mémoire partagée. Les lignes de mailles sont traitées de manière indépendante au sein d'une tranche du domaine. Comme l'ensemble des données de la tranche est contenu en mémoire du processeur, chaque coeur de calcul peut être chargé d'un sous-groupe de lignes de maillage. Ce mode de calcul par sous-découpage de tâches au sein d'un même processeur constitue une parallélisation à mémoire partagée utilisant par exemple la librairie OpenMP.

Un troisième niveau de parallélisation existe, la vectorisation, qui utilise la capacité des coeurs de calcul à effectuer des opérations sur des vecteurs à la même vitesse que sur des scalaires. Ce niveau de parallélisation peut demander une analyse fine des algorithmes et des structures de données pour favoriser ces opérations vectorielles, en particulier les opérations simples qui sont réalisées en un cycle de calcul, mais nous n'avons pas particulièrement étudié cet aspect.

Ce schéma de parallélisation n'est sans doute pas optimal, mais il donne des résultats de scalabilité tout à fait corrects jusqu'à quelques milliers de coeurs de calcul, comme cela est illustré dans l'article [108]. Il permet surtout un découplage total des phases de calcul et de communications parallèles, ce qui est très confortable à gérer dans un code de calcul.

La publication concernée peut être trouvée dans l'annexe Hydrodynamique 5.1 de ce manuscrit :

[108] M. Peybernes, J.-P. Braeunig, J.M. Ghidaglia, Hybrid Parallelization of a Pure Eulerian Finite Volume Solver for Multi-Material Fluid Flows, Computer Engineering and Applied Computing, *Proceeding of the 2012 World Congress in Computer Science*, Las Vegas, Page 3 (2012).

Chapitre 3

Schémas Lagrange-Projection pour l'hydrodynamique

Le type de schéma eulérien étudié dans ce paragraphe est dénommé Lagrange-Projection, car deux phases y sont distinguées : une première phase lagrangienne résolvant l'acoustique avec mouvement explicite du maillage, puis une seconde phase de projection de la solution du maillage déformé sur le maillage initial. Cette méthode numérique, qui appartient naturellement au formalisme plus général ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian, [13, 94, 86, 44, 101, 81, 17, 18]) est très populaire en dynamique rapide, car elle bénéficie de tout l'héritage scientifique des méthodes lagrangiennes développées depuis les tous débuts du calcul numérique [126, 127, 112] et en particulier des extensions de ces méthodes à des physiques couplées entre hydrodynamique et élasto-plasticité [127, 99] ou physique des plasmas [35, 101] par exemple. Il existe un débat sur l'opportunité ou non de ce que l'on peut appeler *splitting d'opérateur*, entre acoustique et convection [49, 130, 62, 53], ou de manière similaire en hydrodynamique incompressible [88]. D'une part, on pourrait considérer en effet que ces deux phases sont distinctes et successives, et que cela doit être dommageable à la qualité de la solution. D'autre part, on pourrait se dire qu'il s'agit d'un solveur lagrangien, qui intègre bien le mouvement de convection par le mouvement du maillage en même temps que la résolution des ondes acoustiques, tout comme un schéma direct (Godunov [73], Roe [114], VFFC [68]), mais que cette solution est représentée sur le maillage initial via une interception de maillages, sans évolution temporelle. Deux avantages existent à cette dernière démarche. Le premier est la résolution lagrangienne 2D/3D directe, au sens où les points du maillage

peuvent bouger dans toutes les directions dans cette phase. Sur un maillage régulier orthogonal par exemple, la méthode de projection a des directions privilégiées en terme de diffusion numérique, mais l’empreinte du maillage est moins marquée pour ces schémas que pour des schémas directs. D’autre part, des défauts de type carbuncle ou “odd even decoupling” [110, 74] se développent moins pour les schémas Lagrange-Projection, du fait de l’aspect multidimensionnel du calcul lagrangien et de la diffusion transverse au maillage associée. Le second avantage est l’extension relativement aisée à d’autres phénomènes physiques. En effet, beaucoup de modèles couplés à l’hydrodynamique ont une discrétisation lagrangienne assez naturelle [58] et les couplages sont souvent plus aisés à écrire dans le référentiel lagrangien où en particulier la masse évolue spatialement mais est conservée dans une maille. Les algorithmes peuvent être programmés de façon relativement modulaire dans ce cadre, alors que dans un schéma direct de type volumes finis, il faut considérer le système couplé dans son ensemble, où la discrétisation des modèles physiques est très imbriquée. Cette question est d’ailleurs à l’origine du développement du schéma VFFC qui peut s’écrire de manière générique pour différents modèles tels que l’hydrodynamique radiative [41], la tension de surface [42], la magnétohydrodynamique [70] ou l’hydrodynamique bifuide [69] [116].

Lorsqu’on réfléchit aux méthodes numériques en vue de concevoir des codes de calcul d’hydrodynamique adaptés aux supercalculateurs, dont la puissance permet de raffiner les maillages et donc d’améliorer la précision des simulations, un certain nombre de contraintes relevant de la maîtrise des incertitudes se posent pour réellement améliorer la pertinence des simulations. En premier lieu, la robustesse des méthodes numériques doit être évaluée, car les méthodes d’ordre de précision $N > 1$ ne satisfont pas de critères de positivité ou de principes du maximum, qui peuvent mener à des difficultés lorsque des gradients forts apparaissent dans l’écoulement, par exemple en utilisant des équations d’état “raides”, au sens d’une faible compressibilité ou en présence de changements de phase. Ceci est particulièrement important à vérifier pour les méthodes d’ordre N élevé, car les termes d’erreur de discrétisation à l’ordre $N + 1$, obtenus par le développement de Taylor en espace et en temps du schéma, donnant les équations équivalentes [20] réellement résolues par schéma, peuvent introduire des fragilités de type dispersion ou over/undershoots. Il est probablement souhaitable pour la robustesse de s’assurer que la diffusion numérique domine ces termes parasites durant la convergence, mais cette analyse peut s’avérer très complexe pour des ordres

de précision $N > 2$.

L'incertitude de modèle peut également devenir importante du fait du changement d'échelle de précision spatiale : les gradients plus forts dans l'écoulement, les fermetures des modèles statistiques et le caractère bien posé ou non du modèle numérique peuvent empêcher la convergence vers une solution plus réaliste que sur un maillage plus grossier. Un exemple simple est la convergence d'une simulation d'une instabilité hydrodynamique considérant le modèle des équations d'Euler, qui n'est pas assurée puisque des perturbations de l'écoulement peuvent apparaître et se développer jusqu'à des échelles spatiales infiniment petites. Le modèle de Navier-Stokes doit dans ce cas être envisagé, introduisant une diffusion physique (moléculaire, turbulente, etc...) agissant comme une coupure des échelles les plus fines et rendant possible la convergence.

Enfin, l'incertitude liée au schéma numérique, qui au-delà de la taille finie des mailles est liée à la consistance du schéma. Ceci est également un point important, puisqu'il serait bien dommage en utilisant des maillages très fins rendant les simulations très coûteuses que la solution à convergence ne soit pas la bonne. Si l'évaluation de la consistance et de l'ordre de précision d'un schéma sur des solutions continues est bien claire, ce point est plus sujet à controverse pour la capture de solutions discontinues, en présence de chocs forts en particulier. Certains chercheurs s'appuieront sur la précision d'ordre très élevé de leur schéma [50, 51, 7, 17], qui devrait faire diminuer l'erreur de consistance, l'effet des limiteurs, ainsi que les inévitables artefacts numériques avec la diminution de la taille des mailles. Le danger est ici que des termes d'erreur d'ordre élevé se révèlent non négligeables à convergence en présence de gradients forts ou d'évolutions rapides de l'écoulement. D'autres considéreront la conservation d'invariants du système résolu comme prioritaire. Par exemple, pour les équations d'Euler et la capture correcte à convergence de la position des chocs, les conditions de Rankine-Hugoniot doivent être satisfaites au niveau discret, avec la condition nécessaire de conservation en masse, quantité de mouvement et énergie totale. La notion elle-même de conservation du schéma doit alors être précisée, car en effet, certains schémas sont sous forme conservative [73, 114], d'autres sont conservatifs localement à un noeud du maillage [44] [97] (un équivalent de la forme conservative sur maillage dual), d'autres encore sont globalement conservatifs sur l'ensemble du domaine. Et pour finir, la définition même de la quantité de mouvement ($m u$) ou de l'énergie totale ($m E = m (e + u^2)/2$) à conserver peut être discutée si la masse m , la vitesse u et l'énergie interne e ne sont pas colocalisées.

En effet, si m et e sont localisées au centre des mailles et u aux noeuds ou aux faces, une moyenne de la vitesse au centre de la maille est à définir pour parler de conservation de $m u$ ou $m E$ sur un domaine.

Le principal Théorème sur le sujet est celui de Lax-Wendroff [89], qui indique que *si un schéma sous forme conservative converge, alors c'est vers une solution faible du système de lois de conservation résolu*. Il est clairement admis qu'un schéma non-conservatif ne converge pas vers la bonne solution [83, 118, 90]. Cependant, il faut noter également qu'une "forme conservative" du schéma doit exister pour appliquer ce Théorème, i.e. les grandeurs sont conservées localement aux mailles et évoluent par échanges de flux aux faces. Bien qu'il ne soit pas prouvé que l'absence d'une forme conservative d'un schéma empêche sa convergence vers une solution faible du système, beaucoup d'auteurs se contraignent à ce cadre strict ou démontrent la propriété de convergence vers une solution faible pour les schémas numériques qu'ils proposent [118] [87] [1]. Quoiqu'il en soit, la convergence des schémas numériques doit être vérifiée expérimentalement et au delà des tests sur des solutions continues, qui servent à valider et mesurer l'ordre de convergence théorique de la méthode. Des solutions discontinues doivent également être intégrées à ces tests et dans le régime physique visé pour l'application, pour s'assurer du bon comportement de la méthode en pratique.

Le choix d'une méthode numérique ou d'une autre est donc très lié aux contraintes de l'application visée et aux outils informatiques que l'on souhaite utiliser. Ainsi, la voie que nous avons explorée ces dernières années est guidée par quelques considérations simples. Dans le contexte de la simulation d'écoulements compressibles, multimatériaux, avec de grandes déformations, nous considérons des équations d'état réalistes (air, eau, solide, etc...). La méthode numérique doit être robuste et doit pouvoir être parallélisée de manière massive pour exploiter des supercalculateurs. La précision du schéma doit être au moins d'ordre 2 en espace, car l'ordre 1 nécessiterait un nombre de mailles trop important pour accéder à une solution précise et se heurterait à la taille mémoire limitée des noeuds de calculateurs. Un ordre $N > 2$ est souhaitable car le surcroît d'efficacité, en terme de ratio précision sur temps de calcul, des schémas d'ordre très élevé est prouvé [65, 18, 17] [65] [51] [53, 54], mais la robustesse de ceux-ci doit encore être démontrée pour les applications complexes visées, comme par exemple un choc fort dans l'eau interagissant avec une bulle d'air ou un choc dans l'air avec une goutte [80, 103, 93, 85], ou encore un front de détonation dans un tube de métal [125].

Nous allons présenter quatre publications récentes qui traitent chacune de problématiques intervenant dans les schémas Lagrange-Projection colocalisés, au sens où toutes les grandeurs physiques sont localisées au centre des mailles. Tout en ayant le souci de pouvoir étendre les résultats en 3D et sur des maillages généraux, nous nous sommes restreints à des maillages 2D cartésiens orthogonaux, ce qui a permis aux différents étudiants de prendre en main rapidement le code de recherche SHY dans lequel ces méthodes ont été développées, et de se concentrer sur les aspects numériques.

3.1 Schéma colocalisé

Dans cette publication, nous avons décrit un schéma colocalisé eulérien de type Lagrange-Projection, basé sur le schéma lagrangien EUCCLHYD [97]. Ce schéma est robuste et construit de manière à être conservatif localement aux noeuds et entropique ; il a donc des propriétés de convergence satisfaisantes. La phase de projection est particulièrement étudiée, sur les aspects suivi d’interfaces matérielles de type PLIC (Piecewise Linear Interface Capturing [130] [88]) et splitting directionnel de la projection. En effet, un schéma de projection direct est proposé, i.e. sans splitting directionnel, car algorithmiquement il nécessite moins de communications parallèles, donc devrait être plus efficace sur un grand nombre de coeurs de calcul [60, 61]. Ce schéma direct est de type volumes finis, dont l’hypothèse de base est une intégration sur la maille faisant apparaître des flux normaux aux faces de celle-ci. Or ceci constitue une approximation particulièrement grossière d’une projection d’un maillage sur un autre, puisque sur un maillage 2D constitué de mailles carrées, aucune information n’est transmise en diagonale du maillage, sur une itération en temps. De manière caricaturale, on pourrait dire qu’un noeud du maillage commun à quatre mailles, ne “voit” l’information que de trois de ces mailles (pas celle voisine en diagonale de la maille projetée). L’information manquante est dénommée flux de coin, que l’on s’attache à définir dans cette étude. La montée à l’ordre deux en espace de la projection est aussi présentée, en étudiant la question de la projection en énergie totale qui peut induire au niveau discret une violation du Second Principe de la Thermodynamique, sous la forme d’un terme source négatif d’énergie interne [55, 24].

La publication concernée peut être trouvée dans l’annexe Hydrodynamique 5.1 de ce manuscrit :

[24] J.-P. Braeunig, B. Chaudet, Study of a collocated Lagrange-Remap scheme for multimaterial flows adapted to HPC, Proceedings of the conference MULTIMAT 2015, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol 83, 8, p. 664-678 (2016).

3.2 Réduction de la production d'entropie

3.2.1 Réduction par un formalisme de type pseudo-viscosité

Cette publication se concentre sur la phase Lagrangienne du schéma, où nous présentons d'abord une montée à l'ordre deux en espace du schéma EUCCLHYD, via une classique méthode MUSCL mais basée sur une reconstruction multidimensionnelle [124, 37]. Ensuite, nous proposons de limiter la production d'entropie des schémas utilisant le célèbre solveur de Riemann acoustique introduit par Godunov [73], dont EUCCLHYD. En effet, si ces schémas produisent de l'entropie dans les chocs de manière satisfaisante, cette production existe malheureusement aussi dans les écoulements isentropiques dont les détenteurs. En effet, dès que la vitesse ou la pression sont inhomogènes, l'entropie augmente numériquement alors que physiquement elle devrait rester constante. Outre l'erreur numérique par rapport au modèle physique, il en résulte un amortissement de l'écoulement par perte d'énergie cinétique au profit de l'énergie interne, favorisant la robustesse mais nuisant à la précision de la simulation. La stratégie employée est basée sur le concept de pseudo-viscosité, qui sert habituellement à ajouter une dissipation d'entropie à un schéma isentropique [127, 126]. Dans cette étude, nous proposons d'évaluer la production d'entropie du schéma EUCCLHYD par les flux aux faces des mailles et d'introduire un flux correctif à ces faces pour diminuer cette production.

La publication concernée peut être trouvée dans l'annexe Hydrodynamique 5.1 de ce manuscrit :

[23] J.-P. Braeunig, Reducing the entropy production in a collocated Lagrange-Remap scheme, *J. Comp. Phys.*, Vol 314, p127-144 (2016).

3.2.2 Réduction par substitution d'un flux isentropique

Dans ce travail, nous avons pris le parti de combiner le schéma Lagrangien EUCCLHYD pour traiter les compressions, avec un schéma de type volumes finis pour les détentes et dont les flux assurent une production d'entropie nulle. Ce schéma que l'on nomme "schéma isentropique" provient d'une étude de Tadmor [122] reprise par Maire [106]. Nous avons repris ces résultats à notre compte et remarqué que l'on pouvait le retrouver et l'interpréter à partir d'outils développés dans l'article précédent [23] et le rapprocher du solveur EUCCLHYD selon des critères de robustesse que nous nous donnons.

La publication concernée peut être trouvée dans l'annexe Hydrodynamique 5.1 de ce manuscrit :

[105] C. Paulin, J.-P. Braeunig, R. Motte, Isentropic correction for collocated Lagrange-Remap scheme, *Computer and Mathematics with Applications*, in press July 2018.

3.3 Projection utilisant MOOD

Enfin, cet article propose d'employer pour la phase projection la méthode de montée en ordre *a posteriori* MOOD [65]. En particulier, il s'agit de comparer et d'évaluer l'intérêt de cette méthode par rapport aux techniques de montée en ordre traditionnelles par des reconstructions et des limitations de pente *a priori*, et ce à l'ordre deux en espace pour les deux approches. Il s'avère que MOOD procure à la fois un gain de robustesse et de précision, ce qui par ailleurs encourage à l'employer également pour la montée en ordre de la phase lagrangienne, dans des travaux à l'avenir.

La publication concernée peut être trouvée dans l'annexe Hydrodynamique 5.1 de ce manuscrit :

[25] J.-P. Braeunig, R. Loubère, R. Motte, M. Peybernes, R. Poncet, a posteriori limiting for 2D Lagrange plus Remap schemes solving the hydrodynamics system of equations, *Computer & Fluids*, Vol 169, p249–262 (2018).

Chapitre 4

Simulation de phases dispersées

Un fluide ne peut plus être considéré comme un milieu continu, lorsque les interactions entre ses particules sont trop peu nombreuses. On parle alors de milieu raréfié ou de spray, où la trajectoire des particules doit être prise en compte explicitement, mais du fait du nombre très important de degrés de libertés que cela implique, on utilise en général des descriptions statistiques par probabilité de présence (méthodes déterministes) ou par des particules numériques (méthodes stochastiques, Monte Carlo, Particles In Cell). La limite entre milieu continu et raréfié est déterminée par le nombre de *Knudsen*, rapport entre le libre parcours moyen l , distance moyenne parcourue en vol libre par une particule sans interaction avec une autre, et une échelle caractéristique L de l'écoulement macroscopique considéré, telle que la taille du système contenant les particules ou d'une capsule spatiale entrant dans une atmosphère raréfiée par exemple. Il est admis que au delà d'un *Knudsen* $K_n = l/L > 10^{-3}$, l'écoulement est considéré comme raréfié. On parle aussi de sprays denses, épais ou dilués, suivant les caractéristiques moyennes de l'écoulement de particules. Notons bien qu'employer un modèle macroscopique tel que les équations de Navier-Stokes pour un écoulement raréfié conduit à une erreur de modélisation et donc de simulation importante, en aérothermique [27] ou dans les tokamaks [64] par exemple. Il existe donc différents régimes qui conduisent à utiliser différents modèles physiques dits cinétiques, où la position et la vitesse des particules sont décrites ainsi que les interactions entre particules. Le modèle de référence est l'équation de Boltzmann pour décrire le mouvement des particules, en fonction d'une force \mathcal{F} leur étant appliquée et d'un terme de collision Q qui décrit les changements

de vitesses lors de leurs interactions :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \mathcal{F} \cdot \nabla_v f = Q(f)$$

avec $f(x, v, t)$ la fonction de distribution de particules au point x de vitesse v et au temps t . Des intégrales de f donnent accès aux moments, à savoir les quantités physiques macroscopiques de l'écoulement (densité, quantité de mouvement, énergie,...), dont le nombre et la nature dépend en particulier du modèle de collision, qui peut être relativement complexe [8, 107] ou simplifié suivant le besoin pour l'application, par exemple en aérothermique raréfiée [27] [82].

Un autre modèle, employé en particulier pour décrire les plasmas et en cosmologie est dénommé Vlasov, où les collisions entre particules peuvent être négligées :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \mathcal{F} \cdot \nabla_v f = 0.$$

Bien qu'étant une simple équation d'advection, sa résolution est complexe du fait de ses six dimensions d'espace (trois en position et trois en vitesse) et des non-linéarités pouvant apparaître dans les couplages avec d'autres équations nécessaires au calcul des forces \mathcal{F} . De plus, un principe du maximum sur f peut exister dans le cas d'un modèle conservatif au sens de la condition $\nabla_{(x,v)^t} \cdot (v, \mathcal{F})^t = 0$, qui peut se révéler difficile à assurer lorsqu'on souhaite utiliser une discrétisation d'ordre élevé [29].

Les variantes Vlasov-Maxwell [19, 84] (couplage de particules chargées du champ electro-magnétique) ou Vlasov-Poisson [45, 52] (couplage avec un champ électrique ou gravitationnel), modèle gyrocinétique [36, 78, 79] (particules chargées dans un champ magnétique intense) par exemple, ne se distinguent formellement concernant le mouvement des particules que par le calcul de la force \mathcal{F} via des modèles couplés différents (Maxwell, Poisson sur le potentiel électrique ou gravitationnel). On peut citer également le couplage avec les équations d'Euler pour le cas d'un spray de particules dans un gaz [115], par exemple dans le cas d'un nuage dans l'atmosphère ou de particules de carburant dans un moteur de voiture ou de fusée. La force \mathcal{F} est dans ce cas liée à une force de traînée, action à la fois du gaz sur le mouvement de la particule et de la particule sur la dynamique locale du gaz [8, 59].

4.1 Plasmas dans les tokamaks

Le contexte est la simulation de la turbulence à coeur dans les tokamaks, étudiée en particulier par l'IRFM au CEA Cadarache avec le code de calcul gyrocinétique 5D GYSELA par Grandgirard et al [78] et en collaboration avec l'ancienne équipe INRIA Calvi, dont j'ai fait partie en détachement dans la période 2008-2011. Afin de limiter la diffusion numérique dans les simulations, il s'agit ici [28] d'une étude de faisabilité pour adapter le maillage aux lignes de champ, qui sont les directions privilégiées de déplacement des particules chargées dans un champ magnétique intense. Remarquons que les tokamaks ont des géométries de type toroïdal à section non circulaire et même singulière pour le cas d'ITER, ce qui rend complexe leur maillage et *a fortiori* leur adaptation aux lignes de champ.

Dans le même cadre, les rapports [30, 77] décrivent des études menées sur le schéma semi-lagrangien conservatif PSM de Sonnendrücker et al [52], et en particulier concernant sa précision et sa stabilité vis-à-vis de la condition de conservation existante $\nabla_{(x,v)^t} \cdot (v, \mathcal{F})^t = 0$ pour les modèles gyrocinétiques et des limiteurs de pente nécessaires pour une reconstruction des grandeurs sur une base de splines cubiques.

Les publications concernées peuvent être trouvée dans l'annexe Phases Dispersées 5.2 de ce manuscrit :

[28] J.-P. Braeunig, N. Crouseilles, M. Mehrenberger, E. Sonnendrücker, Guiding-Center simulations on curvilinear meshes, *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S*, Vol. 5, 2, p.271-282 (2012).

[29] J.-P. Braeunig, N. Crouseilles, M. Mehrenberger, V. Grandgirard, G. Latu, E. Sonnendrücker, Some numerical aspects of the conservative PSM scheme in a 4D drift kinetic code, *INRIA Report RR-7109 (2009)* et preprint arxiv soumis mais non publié.

4.2 Sprays de gouttelettes dans un gaz

Dans le cadre de la simulation d'un spray de particules évoluant dans un gaz, cette étude visait à tester l'emploi de méthodes numériques déterministes de type semi-lagrangiennes pour le mouvement des particules, plutôt que l'approche stochastique classiquement utilisée dans cette situation : la méthode Particle-In-Cell (PIC). L'enjeu est d'imposer numériquement la conservation

de la masse de chaque phase et de la quantité de mouvement globalement pour les deux phases. Pour cela, les schémas numériques employés pour les deux phases sont de formes conservatives et leur couplage préserve la conservation globale. Différentes bases de fonctions sont utilisées pour discrétiser l'équation de Vlasov et les résultats des schémas sont comparés entre eux et à des solutions de référence.

La publication concernée peut être trouvée dans l'annexe Phases Dispersées 5.2 de ce manuscrit :

[14] A. Bernard-Champmartin, J.-P. Braeunig, C. Fochesato, T. Goudon, A semi-Lagrangian approach for dilute non-collisional fluid-particle flows, *Communication in Computational Physics*, Vol 19, 3, p.801-844 (2016).

Conclusion

Dans ce mémoire, les thématiques de la simulation de l'hydrodynamique compressible multimatériaux et des phases dispersées ont été abordées, utilisant principalement des techniques de type Volumes Finis. Le choix de ce cadre formel provient du souci d'obtenir des méthodes numériques localement conservatives, ce qui s'avère indispensable pour la précision et la convergence correcte des simulations, que ce soit pour des ondes de choc dans un fluide, pour un nuage de particules évoluant dans un gaz ou en temps longs dans un tokamak. Cependant, d'autres méthodes sont conservatives et cette propriété ne suffit évidemment pas à résoudre toutes les difficultés. En effet, les schémas colocalisés en hydrodynamique souffrent souvent d'une production d'entropie excessive. De même, les méthodes conservatives pour les méthodes cinétiques peuvent se révéler plus diffusives que d'autres schémas. Nous avons montré que des améliorations peuvent être trouvées pour contrôler ces défauts, sans perdre leur conservativité et leur robustesse. Dans le cadre de la simulation parallèle haute performance HPC, permettant le raffinement des maillages ou l'augmentation du nombre de particules, il est important de conserver des bases théoriques solides au sens de la convergence et de la stabilité numérique des méthodes. Sinon, le risque est que l'augmentation future des ressources de calcul ne permette pas d'en tirer le bénéfice attendu, à savoir une meilleure précision ou prédictibilité des résultats de simulation. A titre d'illustration, cela reviendrait à avoir un écran (la simulation) dont les pixels sont plus fins, sans que l'image devienne plus proche de la réalité, car la source (le schéma) serait erronée aux petites échelles. Les méthodes doivent donc être maîtrisées théoriquement, comprises très finement, en portant une grande attention à la montée en ordre des schémas, pour éviter que des termes numériques négligeables sur des maillages grossiers ne viennent biaiser les résultats sur maillage fin. En effet, l'erreur et l'ordre de précision des schémas numériques sont bien maîtrisés pour des solutions continues. Ce-

pendant, quand des gradients forts apparaissent dans l'écoulement, ils sont assimilables numériquement à des discontinuités. Ceci a lieu dans des simulations où l'on raffine les maillages et pour des écoulements complexes, dont la précision effective des résultats peut fortement varier entre différents schémas d'ordre identique formellement. Dans ce mémoire, ceci a été présenté lorsqu'on cherche à limiter l'erreur de production d'entropie en hydrodynamique [23], lorsqu'on compare de classiques limiteurs de pente *a priori* à la limitation *a posteriori* MOOD [25], ou lorsqu'on compare des limiteurs pour des écoulement complexes [29]. Ceci illustre qu'il est bien difficile de prévoir la qualité des résultats d'un schéma numérique sans son expérimentation sur des cas réalistes et que des modifications pouvant relever de "l'art de l'ingénieur", de "Numerical Receptions" (recettes numériques), ou dans le pire des cas du pragmatique "quick and dirty" (rapide et sale), se révèlent souvent nécessaires pour adapter la théorie à la pratique.

Les travaux présentés dans ce mémoire vont donc dans le sens de proposer des améliorations de schémas ayant des bases théoriques solides, dans des contextes simplifiés tels que pour des maillages cartésiens orthogonaux, des grilles régulières et des équations d'état stylisées (gaz parfait et stiffened gas). Il est clair qu'il reste à tester ces propositions par exemple dans le cadre plus général de l'ALE, en géométrie tridimensionnelle et avec couplage aux physiques nécessaires pour les applications visées. Ce programme de travail est tout à fait réaliste, puisque ces propositions ont été pensées autant que possible sans restriction quant à ces évolutions.

Chapitre 5

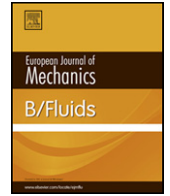
Annexes

5.1 Articles en Hydrodynamique

Dans cette annexe sont fournis les articles suivant, dans l'ordre :

- [93] R. Loubère, J.-P. Braeunig, J.-M. Ghidaglia, A totally Eulerian finite volume solver for multi-material fluid flows : Enhanced Natural Interface Positioning ENIP, *European Journal of Mechanics B/Fluids*, Vol 31, p. 1-11 (2010).
- [16] B. Blais, J.-P. Braeunig, D. Chauveheid, J.-M. Ghidaglia, R. Loubere, Dealing with more than two materials in the FVCF-ENIP method, *European Journal Mechanics B/Fluids*, Vol 42, 1-9 (2013).
- [108] M. Peybernes, J.-P. Braeunig, J.M. Ghidaglia, Hybrid Parallelization of a Pure Eulerian Finite Volume Solver for Multi-Material Fluid Flows, Computer Engineering and Applied Computing, *Proceeding of the 2012 World Congress in Computer Science*, Las Vegas, Page 3 (2012).
- [24] J.-P. Braeunig, B. Chaudet, Study of a collocated Lagrange-Remap scheme for multimaterial flows adapted to HPC, Proceedings of the conference MULTIMAT 2015, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol 83, 8, p. 664-678 (2016).
- [23] J.-P. Braeunig, Reducing the entropy production in a collocated Lagrange-Remap scheme, *J. Comp. Phys.*, Vol 314, p127-144 (2016).
- [105] C. Paulin, J.-P. Braeunig, R. Motte, Isentropic correction for collocated Lagrange-Remap scheme, *Computer and Mathematics with Applications*, in press July 2018.
- [25] J.-P. Braeunig, R. Loubère, R. Motte, M. Peybernes, R. Poncet, a poste-

riori limiting for 2D Lagrange plus Remap schemes solving the hydrodynamics system of equations, *Computer & Fluids*, Vol 169, p249–262 (2018).



A totally Eulerian finite volume solver for multi-material fluid flows: Enhanced Natural Interface Positioning (ENIP)

Raphaël Loubère^a, Jean-Philippe Braeunig^b, Jean-Michel Ghidaglia^{c,*}

^a CNRS et Université de Toulouse IMT (Institut de Mathématiques de Toulouse), 31062 Toulouse, France

^b INRIA Nancy Grand-Est 615 rue du Jardin Botanique 54600 Villers-lès-Nancy and CEA DAM DIF, F-91297 Arpajon, France

^c CMLA, CNRS et ENS de Cachan, 61 Av. du Président Wilson, Cachan Cedex 94235, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 19 October 2010

Received in revised form

18 July 2011

Accepted 19 July 2011

Available online 30 July 2011

Keywords:

Multi-material fluid flow

Finite volume

Natural Interface Positioning

ABSTRACT

This work concerns the simulation of compressible multi-material fluid flows and follows the method FVCF-NIP described in the former paper (Braeunig et al., 2009 [7]). This cell-centered finite volume method is totally Eulerian since the mesh is not moving and a sharp interface, separating two materials, evolves through the grid. A sliding boundary condition is enforced at the interface, and mass, momentum and total energy are conserved. Although this former method performs well on 1D test cases, the interface reconstruction suffers of poor accuracy in conserving shapes for instance in linear advection. This situation leads to spurious instabilities of the interface. The Enhanced-NIP method presented in the present paper provides a solution to an inconsistency in the former NIP method. This solution strikingly improves the numerical results. It takes advantage of a more consistent description of the interface in the numerical scheme. Results for linear advection and compressible Euler equations for inviscid fluids are presented to assess the benefits of this new method.

© 2011 Published by Elsevier Masson SAS.

1. Introduction

The two-material compressible hydrodynamics equations (Euler equations) are considered in this work. The flow regime is such that molecular viscosity within materials is neglected: materials are supposed to be immiscible and separated by sharp interfaces, with perfect sliding between materials. Each material is characterized by its own equation of state (EOS).

The formalism of finite volume methods is close to the mechanical viewpoint, and generic for different types of physical models. Thus, it is easier to add other physical phenomena like surface tension or turbulent diffusion for instance. The discretization order is limited, but this method is accurate to simulate hydrodynamic shock waves, because of the consistency between numerical treatment and mechanics.

The extension of Eulerian schemes to multi-material fluid flows can be obtained by various techniques. One is to introduce the cell mass fraction c_α of material α and let it evolve according to material velocity. The cell is called pure if a material α satisfies $c_\alpha = 1$ and is called mixed if $c_\alpha \in]0, 1[$. Pure cells filled by

material α are calculated in the same manner as for the single material method. Mixed cell evolution is computed using a mixing equation of state that takes into account material mass fractions; see e.g. [1]. One drawback of this approach is the numerical diffusion of the interface. It turns out that for some applications, this drawback is not acceptable since the diffusion of one material into another one will correspond to a different physics. For example, the two materials could react when a molecular mixture is formed. Moreover, the mixing equation of state itself may lead to difficulties concerning physics and robustness.

In the case of sharp interface capturing methods, the interface is approximated in a mixed cell by a segment by most authors. However, more complex curves than straight line or more complex theory (see [2] for instance) might be used. A famous method using sharp interface reconstruction is the Eulerian as Lagrange plus Remap finite volume scheme, initiated in [3] and further improved in [4]. It belongs to the family of the so called Volume of Fluid (VOF) methods. The first step of this method is a Lagrangian scheme, resulting in a mesh displacement with material velocity. The second step is a multi-material remapping of Lagrangian mesh onto the original Eulerian mesh, by exchanging volume fluxes between cells related to the Lagrangian motion of cell edges. The new interface position in mixed cells is determined using the partial volumes of the materials and the interface normal vector. The latter is calculated using volume fractions from neighboring cells. Thus the ratio of each material in volume fluxes is deduced from the multi-material remapping. Some methods with the same

* Corresponding author.

E-mail addresses: raphael.loubere@math.univ-toulouse.fr (R. Loubère), braeunig@math.u-strasbg.fr (J.-P. Braeunig), jmg@cmla.ens-cachan.fr, ejmb@ghidaglia.net (J.-M. Ghidaglia).



Dealing with more than two materials in the FVCF–ENIP method



Bruno Blais^{a,b}, Jean-Philippe Braeunig^{c,b}, Daniel Chauveheid^{c,b}, Jean-Michel Ghidaglia^{d,b}, Raphaël Loubère^{e,*}

^a Research Unit for Industrial Flow Processes (URPEI), Department of Chemical Engineering, Ecole Polytechnique de Montreal, P. O. Box 6079, Station CV, Montreal, H3C 3A7, QC, Canada

^b LRC MESO, ENS de Cachan, CEA DAM, 61 avenue du Président Wilson, F-94235 Cachan Cedex, France

^c CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

^d Centre de Mathématiques et de Leurs Applications, Ecole Normale Supérieure de Cachan and CNRS UMR8536, 61, Avenue du Président Wilson, F-94235, Cachan Cedex, France

^e CNRS et Université de Toulouse, IMT (Institut de Mathématiques de Toulouse), Route de Narbonne, Toulouse, F-31062, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 7 November 2012

Received in revised form

6 May 2013

Accepted 7 May 2013

Available online 24 May 2013

Keywords:

Multimaterial fluid flow

Finite volume

Natural Interface Positioning

ABSTRACT

This work concerns the simulation of compressible multimaterial fluid flows and follows up the method Finite Volume with Characteristics Flux for two materials described in paper [R. Loubère, J.P. Braeunig, J.-M. Ghidaglia, A totally Eulerian finite volume solver for multimaterial fluid flows: enhanced Natural Interface Positioning (ENIP), *Eur. J. of Mech. B Fluids*, 31 (4) (2012) 1–11, <http://doi:10.1016/j.euromechflu.2011.07.005>]. The interface reconstruction method was designed to deal with only two materials. In this paper we present the generalisation of the method to more than two materials. The design principles remain the same as for the two material method. Nevertheless some specific treatments have been added, like an automatic order of treatment of materials using material centres of mass in the so-called condensate. Interestingly the method can accept any interface reconstruction method. For simplicity, the crude onion skin approach with unique material normal has been chosen. The entire scheme has been tested on the four material disc embedded into a reversible incompressible velocity field test case for which numerical error can be computed. Then several more demanding hydrodynamics impacts of droplets on thin film have been simulated to show the ability of the method to qualitatively capture three material complex behaviours (sliding, impact).

© 2013 Elsevier Masson SAS. All rights reserved.

1. Introduction

Dealing with multiple materials in computational fluid dynamics (CFD) is nowadays a pressing necessity. As a matter of fact, the increase of complexity in physics modelling associated to even bigger computer resources has led to a tremendous need for multimaterial friendly numerical methods. Almost any modern Initial Fusion Confinement (ICF) computation, astrophysical simulation or biology or material models involve two or more interacting materials, with possibly different physics modelling or mechanical behaviour. However the extension of a single material numerical method into a multimaterial one is usually not a trivial task, but, unavoidably, each will have to endure this evolution to deal with realistic simulations in these fields.

In [1] the authors have developed a Finite Volume with Characteristics Flux (FVCF) scheme for single material flows simulation. A two material extension has been proposed and validated in [2–4]. Since 2008 two materials flow simulations have been run, but for physics related applications this restriction on the number of materials had to be removed.

Consequently we develop in this paper an extension of FVCF that deals efficiently with an arbitrary number of materials to simulate genuine physical situations.

In Section 2 we briefly present the former FVCF numerical scheme in its two material version. Then in Section 3 we revamp the scheme to deal with more than two materials. The original scheme treats mixed cells (where two materials coexist) using the so-called “condensate” data structure. This notion is therefore extended to accept the occurrence of an arbitrary number of materials. The original interface reconstruction method was based on Youngs’ algorithm [5,6] which has not been initially designed for more than two materials. Consequently we adopt the simplest multimaterial interface reconstruction method, called by Youngs the “onion skin” approach [5], which is a good compromise between ease of implementation and quality of results. More

* Corresponding author. Tel.: +33 561557652.

E-mail addresses: bruno.blais@polymtl.ca (B. Blais),

jean-philippe.braeunig@cea.fr (J.-P. Braeunig),

daniel.chauveheid@cmla.ens-cachan.fr (D. Chauveheid), jmg@cmla.ens-cachan.fr

(J.-M. Ghidaglia), raphael.loubere@math.univ-toulouse.fr (R. Loubère).

Hybrid MPI+OpenMP parallelization of a pure Eulerian finite volume solver for multi-material fluid flows

J.-Ph. Braeunig^a, J. Costes^{b,c}, J.M. Ghidaglia^b, M. Peybernes^{a,*}

^a*CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon Cedex, France*

^b*CMLA, ENS Cachan, 61, Avenue du Président Wilson, 94235 Cachan Cedex, France*

^c*EUROBIOS, 86, Avenue Lénine, 94250 Gentilly, France*

Abstract

The FVCF-NIP method has been developed (Braeunig *et al.* [1]) for compressible multi-material fluid flows simulation. The main properties of this pure Eulerian method are the conservation of mass, momentum, total energy and the sliding condition at the interface between materials, which is an improvement in the consistency of the discretization with respect to the Euler equations model. In this paper, we propose a parallelization of this method using a spatial domain decomposition in slices associated with a transposition using MPI communications, and not in blocks as in usual techniques. This is a convenient choice for this totally directionally split method. Then a hybrid parallel algorithm is introduced using multithreading (with OpenMP) into each slice (MPI process) for an efficient use of recent hybrid architectures. We show the advantage of this hybrid parallelization compared to the pure MPI one especially for complex applications and a large number of computational cores (up to 5 000 cores).

Keywords:

Finite volume, Multi-material, parallel computing, MPI, OpenMP

*Phone Number: (+33)1 69 26 50 38 (M. Peybernes)

Email address: mathieu.peybernes@cea.fr (M. Peybernes)

Study of a collocated Lagrange-remap scheme for multi-material flows adapted to HPC

Jean-Philippe Braeunig^{*,†} and Bastien Chaudet

CEA/DAM/DIF F-91297 Arpajon, France

SUMMARY

This paper describes a collocated numerical scheme for multi-material compressible Euler equations, which attempts to suit to parallel computing constraints. Its main features are conservativity of mass, momentum, total energy and entropy production, and second order in time and space. In the context of a Eulerian Lagrange-remap scheme on planar geometry and for rectangular meshes, we propose and compare remapping schemes using a finite volume framework. We consider directional splitting or fully multi-dimensional remaps, and we focus on a definition of the so-called corner fluxes. We also address the issue of the internal energy behavior when using a conservative total energy remap. It can be perturbed by the duality between kinetic energy obtained through the conservative momentum remap or implicitly through the total energy remap. Therefore, we propose a kinetic energy flux that improves the internal energy remap results in this context. Copyright © 2016 John Wiley & Sons, Ltd.

Received 23 February 2016; Accepted 18 July 2016

KEY WORDS: Eulerian; finite volume; Lagrangian; collocation; compressible flow; free surface; parallelization; thermodynamics

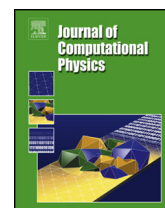
1. INTRODUCTION

The goal of this study is to propose a multi-material Eulerian scheme solving the compressible Eulerian equations suitable for multi-physics HPC (High Performance Computing) hydrocodes. The methods presented in this paper are developed in the SHY (Scalable HYdrodynamics) code platform dedicated to research in HPC (High Performance Computing) and numerics at CEA DIF (French Atomic Energy Commission). As conduct lines for the design of this scheme, we obviously anticipate that meshes will be refined thanks to the increase of computational power, thus, the scheme should be robust and at least second order in time and space. Moreover, the scheme should be conservative of mass, momentum, total energy and entropy to converge to the right solution. For the sake of making easy multi-physics extension of the scheme, we have chosen to investigate Lagrange-remap schemes. They consist during a one-time step in a Lagrangian phase in which quantities evolve on a moving grid, then, they are remapped on the initial mesh, like in the Arbitrary Lagrangian Eulerian (ALE) framework. Another constraint is to allow a proper scalability of the code when using supercomputers with many cores, thus, the number of MPI (Message Passing Interface) parallel synchronizations in the algorithm should be limited, and remap should be generic to allow Open Multi-Processing parallel loops and vectorization.

We choose a collocated Lagrangian scheme [1–4] because it provides conservativity, robustness, and simple data structures because all quantities are located at cell centers. They are thoroughly investigated these days, and we choose the EUCCLHYD Lagrangian scheme [2, 17, 18] as the basis for this Eulerian scheme, because it has good properties and has existing extensions to multi-physics like elasto-plastic flows [5], cylindrical geometries [6], coupling with a diffusion scheme [7], and

*Correspondence to: Jean-Philippe Braeunig, CEA/DAM/DIF F-91297 Arpajon, France.

†E-mail: jpbraeunig@yahoo.fr



Reducing the entropy production in a collocated Lagrange–Remap scheme



Jean-Philippe Braeunig

CEA/DAM/DIF, F-91297, Arpajon, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 2 December 2015

Received in revised form 5 February 2016

Accepted 3 March 2016

Available online 9 March 2016

Keywords:

Collocated scheme

Lagrange–Remap

Entropy production

Artificial viscosity

Isentropic flows

Shock waves

ABSTRACT

The Eulerian scheme described in this article aims to perform efficient and accurate compressible multimaterial fluid flows simulations. We use a second order Collocated Lagrange–Remap scheme based on the EUCCLHYD Lagrangian scheme (Maire et al., 2007, [26]) which is conservative and uses acoustic Riemann solvers. The entropy production is studied and a correction is proposed to improve accuracy in isentropic flows by adding correction fluxes. The scheme is thus kept conservative in mass, momentum and total energy. A VOF PLIC interface reconstruction is added to the scheme. Results are presented that assess the dissipation reduction.

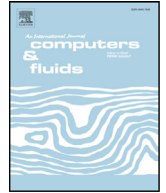
© 2016 Elsevier Inc. All rights reserved.

Introduction

With the computational power provided by current and future computers, academics and industrial researchers tend to refine the grids to obtain more resolved simulations and to access to more details. For instance, Direct Numerical Simulation of turbulence to feed turbulence models, ICF (Inertial Confinement Fusion) to obtain fusion reactions by capsules compression with high energy lasers or highly compressed flows induced by fast traveling explosive detonation waves. All these applications are strongly challenging for numerical schemes, that should be conservative, consistent, convergent, entropy dissipative to obtain the right solution when refining the meshes.

Classical staggered schemes, i.e. velocity is not cell centered as thermodynamical quantities, like VNR [31], Wilkins [32], Youngs [33] are extremely efficient considering their very light computational cost, the accurate solutions with low dissipation obtained by writing isentropic equations added with a so called artificial viscosity in case of shocks. The drawback that is arising these days by refining grids is that the non-conservative form of these schemes for momentum and total energy can make the convergence to the solution difficult, since the Lax–Wendroff Theorem does not apply. However, more recent studies and schemes have improved symmetry preservation and conservations, and give correct solutions. Without being exhaustive, we can cite the work of Burton et al. [11], Caramana et al. [12], Barlow [2], Love and Scovazzi [23], Kenamond et al. [19]. The results obtained by schemes using artificial viscosity are naturally depending on its nature, scalar, tensorial, edge, on the chosen coefficients, and then the entropy production is modeled and added to the underlying isentropic scheme. Moreover, in the context of ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) or Lagrange–Remap schemes, the momentum remap for staggered schemes needs a specific scheme on the dual mesh, what increases the algorithm complexity.

E-mail address: jpbraeunig@yahoo.fr.



A posteriori limiting for 2D Lagrange plus Remap schemes solving the hydrodynamics system of equations

Jean-Philippe Braeunig^b, Raphaël Loubère^{a,*}, Renaud Motte^b, Mathieu Peybernes^c,
Raphaël Poncet^d

^a CNRS and Institut de Mathématiques de Bordeaux (IMB) Université de Bordeaux, Talence, France

^b CEA-DAM-DIF, 91297 Arpajon, France

^c CEA Saclay, DEN, 91191 Gif-sur-Yvette, France

^d CCG, 27 avenue Carnot, 91300 Massy, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 28 February 2017

Revised 1 July 2017

Accepted 7 August 2017

Available online 30 August 2017

Keywords:

Remapping

Polynomial reconstruction

A posteriori limiting

High accuracy

Robustness

Lagrange plus remap

Slope limiting

ABSTRACT

In this article we show the gain in accuracy and robustness brought by the use of a *a posteriori* MOOD limiting in replacement of the classical slope limiter employed in the remap phase of a legacy second-order Lagrange+Remap scheme solving the Euler system of equations. This simple substitution ensures extended robustness property, better accuracy and ability to capture physical phenomena. Numerical tests in 2D assess those improvements and the relative low cost of this *a posteriori* approach by reporting the number of troubled cells which demand re-computation. Situations like the occurrence of Not-a-Number, negative density and spurious numerical oscillations can therefore be cured.

© 2017 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The history of Lagrange-Remap schemes solving the hydrodynamics system of conservation laws dates back to the observation of the limits of Lagrangian schemes *à la* von Neumann [18,21,22] in the sixties [27]. The large deformation of the mesh flowing with the gas and the somewhat clumsy derivation of the operators made the original staggered Lagrangian schemes fragile. Consequently, to render the scheme more robust, engineers soon after started to manipulate the positions of the mesh points after the Lagrangian step to avoid mesh tangling. This mesh rezoning stage must be coupled with a remap stage which transfers the data from the Lagrangian mesh onto this rezoned one. This was the birth of so-called indirect Arbitrary-Lagrangian-Eulerian schemes (ALE) [13]. Because the rezoned mesh may be geometrically difficult, computationally expensive and mathematically unclear to determine, some researchers have proposed to consider the initial mesh as the rezoned one for each time step. This procedure thus

remaps the rezoned mesh on the initial mesh after each Lagrangian stage, leading, *de facto*, to an equivalent Eulerian as Lagrange-plus-Remap scheme. Several such schemes were developed in the seventies [1,7,20,26,31,32,34] and are still in use today, for instance for turbulence modeling [33].

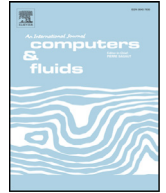
Classical 2D Lagrange+Remap schemes solving the hydrodynamics system of conservation laws are therefore based on

- a Lagrangian scheme solving velocity and internal energy evolution on a staggered moving grid: velocity is located at mesh points, whereas density and specific internal energy are located at cell centers. Artificial viscosity is employed to make the Lagrangian stage robust to the presence of steep gradients. No mass flux is allowed between neighbor cells, but the cell shapes and volumes evolve with time, leading to a time evolving density computed as mass divided by volume.
- a Remap – or Advection, or Projection – scheme, which transfers the mass, momentum and energy back onto the initial mesh after piecewise linear reconstructions of the variables of choice. Slope limiting is employed to make the remap stage robust and essentially non-oscillatory.

The time discretization is classically made with a second-order accurate Runge–Kutta scheme, also referred to as a predictor–corrector scheme. As such, the nominal accuracy of the method is

* Corresponding author.

E-mail addresses: jean-philippe.braeunig@cea.fr (J.-P. Braeunig), raphael.loubere@u-bordeaux.fr (R. Loubère), renaud.poncet@cea.fr (R. Motte), mathieu.peybernes@cea.fr (M. Peybernes), raphael.poncet@gcc.fr (R. Poncet).



A posteriori limiting for 2D Lagrange plus Remap schemes solving the hydrodynamics system of equations

Jean-Philippe Braeunig^b, Raphaël Loubère^{a,*}, Renaud Motte^b, Mathieu Peybernes^c,
Raphaël Poncet^d

^a CNRS and Institut de Mathématiques de Bordeaux (IMB) Université de Bordeaux, Talence, France

^b CEA-DAM-DIF, 91297 Arpajon, France

^c CEA Saclay, DEN, 91191 Gif-sur-Yvette, France

^d CCG, 27 avenue Carnot, 91300 Massy, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 28 February 2017

Revised 1 July 2017

Accepted 7 August 2017

Available online 30 August 2017

Keywords:

Remapping

Polynomial reconstruction

A posteriori limiting

High accuracy

Robustness

Lagrange plus remap

Slope limiting

ABSTRACT

In this article we show the gain in accuracy and robustness brought by the use of a *a posteriori* MOOD limiting in replacement of the classical slope limiter employed in the remap phase of a legacy second-order Lagrange+Remap scheme solving the Euler system of equations. This simple substitution ensures extended robustness property, better accuracy and ability to capture physical phenomena. Numerical tests in 2D assess those improvements and the relative low cost of this *a posteriori* approach by reporting the number of troubled cells which demand re-computation. Situations like the occurrence of Not-a-Number, negative density and spurious numerical oscillations can therefore be cured.

© 2017 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The history of Lagrange-Remap schemes solving the hydrodynamics system of conservation laws dates back to the observation of the limits of Lagrangian schemes *à la* von Neumann [18,21,22] in the sixties [27]. The large deformation of the mesh flowing with the gas and the somewhat clumsy derivation of the operators made the original staggered Lagrangian schemes fragile. Consequently, to render the scheme more robust, engineers soon after started to manipulate the positions of the mesh points after the Lagrangian step to avoid mesh tangling. This mesh rezoning stage must be coupled with a remap stage which transfers the data from the Lagrangian mesh onto this rezoned one. This was the birth of so-called indirect Arbitrary-Lagrangian-Eulerian schemes (ALE) [13]. Because the rezoned mesh may be geometrically difficult, computationally expensive and mathematically unclear to determine, some researchers have proposed to consider the initial mesh as the rezoned one for each time step. This procedure thus

remaps the rezoned mesh on the initial mesh after each Lagrangian stage, leading, *de facto*, to an equivalent Eulerian as Lagrange-plus-Remap scheme. Several such schemes were developed in the seventies [1,7,20,26,31,32,34] and are still in use today, for instance for turbulence modeling [33].

Classical 2D Lagrange+Remap schemes solving the hydrodynamics system of conservation laws are therefore based on

- a Lagrangian scheme solving velocity and internal energy evolution on a staggered moving grid: velocity is located at mesh points, whereas density and specific internal energy are located at cell centers. Artificial viscosity is employed to make the Lagrangian stage robust to the presence of steep gradients. No mass flux is allowed between neighbor cells, but the cell shapes and volumes evolve with time, leading to a time evolving density computed as mass divided by volume.
- a Remap – or Advection, or Projection – scheme, which transfers the mass, momentum and energy back onto the initial mesh after piecewise linear reconstructions of the variables of choice. Slope limiting is employed to make the remap stage robust and essentially non-oscillatory.

The time discretization is classically made with a second-order accurate Runge–Kutta scheme, also referred to as a predictor–corrector scheme. As such, the nominal accuracy of the method is

* Corresponding author.

E-mail addresses: jean-philippe.braeunig@cea.fr (J.-P. Braeunig), raphael.loubere@u-bordeaux.fr (R. Loubère), renaud.poncet@cea.fr (R. Motte), mathieu.peybernes@cea.fr (M. Peybernes), raphael.poncet@gcc.fr (R. Poncet).

5.2 Articles sur les phases dispersées

Dans cette annexe sont fournis les articles suivant, dans l'ordre :

- [28] J.-P. Braeunig, N. Crouseilles, M. Mehrenberger, E. Sonnendrücker, Guiding-Center simulations on curvilinear meshes, *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S*, Vol. 5, 2, p.271-282 (2012).
- [29] J.-P. Braeunig, N. Crouseilles, M. Mehrenberger, V. Grandgirard, G. Latu, E. Sonnendrücker, Some numerical aspects of the conservative PSM scheme in a 4D drift kinetic code, *INRIA Report RR-7109 (2009)* et preprint soumis mais non publié.
- [14] A. Bernard-Champmartin, J.-P. Braeunig, C. Fochesato, T. Goudon, A semi-Lagrangian approach for dilute non-collisional fluid-particle flows, *Communication in Computational Physics*, Vol 19, 3, p.801-844 (2016).

Guiding-Center simulations on curvilinear meshes.

J.-P. BRAEUNIG^{1 2 3}, NICOLAS CROUSEILLES^{1 2},
MICHEL MEHRENBERGER^{2 1}, ERIC SONNENDRÜCKER^{2 1}.

Abstract

The purpose of this work is to design simulation tools for magnetised plasmas in the ITER project framework. The specific issue we consider is the simulation of turbulent transport in the core of a Tokamak plasma, for which a 5D gyrokinetic model is generally used, where the fast gyromotion of the particles in the strong magnetic field is averaged in order to remove the associated fast time-scale and to reduce the dimension of 6D phase space involved in the full Vlasov model. Very accurate schemes and efficient parallel algorithms are required to cope with these still very costly simulations. The presence of a strong magnetic field constrains the time scales of the particle motion along and across the magnetic field line, the latter being at least an order of magnitude slower. This also has an impact on the spatial variations of the observables. Therefore, the efficiency of the algorithm can be improved considerably by aligning the mesh with the magnetic field lines. For this reason, we study the behavior of semi-Lagrangian solvers in curvilinear coordinates. Before tackling the full gyrokinetic model in a future work, we consider here the reduced 2D Guiding-Center model. We introduce our numerical algorithm and provide some numerical results showing its good properties.

1 Introduction

In a Tokamak the plasma is kept out of the vessel walls by a magnetic field whose lines have a specific helicoidal geometry. Turbulence develops in the plasma and leads to thermal transport which decreases the confinement efficiency. The characteristic mean free path is large, even compared with the vessel size, therefore a kinetic description of particles is required, see *Dimits* [4]. Therefore, one should use a 6D Vlasov-Poisson model for both ions and electrons to properly describe the plasma evolution. However, the plasma flow in the presence of a strong magnetic field has features that allow some physical assumptions to reduce the model, in particular it is

¹INRIA Nancy-Grand Est, 615 rue du Jardin Botanique, 54600 Villers-lès-Nancy

²IRMA, Université de Strasbourg, 7 rue René-Descartes, 67084 Strasbourg Cedex

³CEA/DIF Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon Cedex

Some numerical aspects of the conservative PSM scheme in a 4D drift-kinetic code

Jean-Philippe Braeunig^{a,b,d,*}, Nicolas Crouseilles^{a,d}, Virginie Grandgirard^c,
Guillaume Latu^c, Michel Mehrenberger^{d,a}, Eric Sonnendrücker^{d,a}

^a*INRIA Nancy Grand-Est, Equipe CALVI, 615 rue du Jardin Botanique F-54600
Villers-lès-Nancy, France*

^b*CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France*

^c*CEA Cadarache, IRFM, F-13108 St Paul-lez-Durance Cedex, France*

^d*IRMA, Université de Strasbourg, 7 rue René-Descartes, F-67084 Strasbourg Cedex,
France*

Abstract

The purpose of this work is simulation of magnetised plasmas in the ITER project framework. In this context, kinetic Vlasov-Poisson like models are used to simulate core turbulence in the tokamak in a toroidal geometry. This leads to heavy simulations because a 6D dimensional problem has to be solved, even if reduced to a 5D in so called gyrokinetic models. Accurate schemes, parallel algorithms need to be designed to bear these simulations. This paper describes the numerical studies to improve robustness of the conservative PSM scheme in the context of its development in the GYSELA code. In this paper, we only consider the 4D drift-kinetic model which is the backbone of the 5D gyrokinetic models and relevant to build a robust and accurate numerical method.

Keywords: numerical simulation, conservative scheme, maximum principle, plasma turbulence

2010 MSC: 65M08, 76M12, 76N99

*Corresponding author

Email address: braeunig@unistra.fr (Jean-Philippe Braeunig)

A Semi-Lagrangian Approach for Dilute Non-Collisional Fluid-Particle Flows

Aude Bernard-Champmartin¹, Jean-Philippe Braeunig^{2,3},
Christophe Fochesato^{2,3} and Thierry Goudon^{1,4,*}

¹ *Inria, Sophia Antipolis Méditerranée Research Centre, Project COFFEE.*

² *CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France.*

³ *LRC MESO, ENS Cachan, 61, avenue du Président Wilson, 94235 Cachan cedex, France*

⁴ *Univ. Nice Sophia Antipolis, CNRS, Labo J.-A. Dieudonné, UMR 7351 Parc Valrose, F-06108 Nice, France.*

Received 18 March 2015; Accepted (in revised version) 11 September 2015

Abstract. We develop numerical methods for the simulation of laden-flows where particles interact with the carrier fluid through drag forces. Semi-Lagrangian techniques are presented to handle the Vlasov-type equation which governs the evolution of the particles. We discuss several options to treat the coupling with the hydrodynamic system describing the fluid phase, paying attention to strategies based on staggered discretizations of the fluid velocity.

AMS subject classifications: 82C40, 82C80, 65M08

Key words: Semi-Lagrangian methods, particulate flows.

1 Introduction

This paper is concerned with the numerical simulation of dilute suspensions. This study is motivated by many applications ranging from industrial processes to natural flows. For instance, such flows are involved in internal combustion engines and the improvement of their performance need both modeling and computational efforts [50, 56, 71]. The problem is also relevant to fluidized beds [6] where particles are suspended in the fluid stream, in order to promote contacts and exchanges between the particles and the fluid. Similar questions arise from nuclear energy security, and weapons physics purposes [3, 54]. Other applications cover the dynamics of biomedical sprays [3, 4, 30, 55], environmental studies on pollutant transport [27, 57, 58, 61, 69], the formation of sandstorms,

*Corresponding author. *Email addresses:* achampmartin@gmail.com (A. Bernard-Champmartin), jean-philippe.braeunig@cea.fr (J.-P. Braeunig), christophe.fochesato@cea.fr (C. Fochesato), thierry.goudon@inria.fr (T. Goudon)

Bibliographie

- [1] R. Abgrall, K. Mer-Nkonga, B. Nkonga, A Lax-Wendroff type theorem for residual schemes. In M. M. Hafez and J.-J. Chattot, editors, Innovative Methods for Numerical Solutions of Partial Differential Equations, World Scientific, Singapore, p. 243-266 (2002).
- [2] R. Abgrall, R. Loubère, J. Ovadia, A lagrangian Discontinuous Galerkin-type method on unstructured meshes to solve hydrodynamics problems, *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 44, p. 645-663, (2004).
- [3] F. Alauzet, P.J. Frey, Estimateur d'erreur géométrique et métriques anisotropes pour l'adaptation de maillage. Partie 1 : aspects théoriques, *Rapport de recherche RR-4759*, INRIA, (2003).
- [4] W.F. Ames, Numerical Method for Partial Differential Equations, Section 1.6 *Academic Press*, New York, (1977).
- [5] D.M. Anderson, G.B. McFadden, A.A. Wheeler, A Diffuse-Interface Methods in Fluid Mechanics, *Ann. Rev. Fluid Mech.* Vol. 30, p. 139-165, (1998).
- [6] I. Babuska, The finite element method with lagrange multipliers, *Numerische Mathematik*, 20, 179-192, (1973).
- [7] D. S. Balsara, C.-W. Shu, Monotonicity preserving Weighted Essentially non-oscillatory schemes with increasingly high order of accuracy, *J. Comput. Phys.*, 160 (2000), p. 405-452.
- [8] C. Baranger, Modeling of oscillations, breakup and collisions for droplets : the establishment of kernels for T.A.B. model, *Math. Models Methods Appl. Sci.*, Vol. 14, 5, p. 775-794 (2004).
- [9] A.J. Barlow, A compatible finite element multi-material ALE hydrodynamics algorithm, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 56 (2008), p. 953-964.

- [10] A.J. Barlow, P.L. Roe, A cell centred Lagrangian Godunov scheme for shock hydrodynamics, *Comp. & Fluids*, 46 (2011), p. 133-136.
- [11] T. Barth, Numerical Methods for Conservation Laws on Structured and Unstructured Meshes. VKI Lecture Series, (2003).
- [12] D.J. Benson, Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 99, p. 235–394 (1992).
- [13] D.J. Benson, An efficient, accurate, simple ALE method for non-linear finite element programs, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol.72 n.3, p.305–350, (1989).
- [14] A. Bernard-Champmartin, J.-P. Braeunig, C. Fochesato, T. Goudon, A semi-Lagrangian approach for dilute non-collisional fluid-particle flows, *Communication in Computational Physics*, Vol 19, 3, p.801-844 (2016).
- [15] A. Bernard-Champmartin, J.-P. Braeunig, J.-M. Ghidaglia, An Eulerian finite volume solver for multi-material fluid flows with cylindrical symmetry, *Computer & Fluids*, Vol 83, p.170-176 (2013).
- [16] B. Blais, J.-P. Braeunig, D. Chauveheid, J.-M. Ghidaglia, R. Loubere, Dealing with more than two materials in the FVCF–ENIP method, *European Journal Mechanics B/Fluids*, Vol 42, 1–9 (2013).
- [17] W. Boscheri, M. Dumbser, A direct Arbitrary-Lagrangian-Eulerian ADER-WENO Finite Volume scheme on unstructured tetrahedral meshes for conservative and nonconservative hyperbolic systems in 3D, *J. Comput. Phys.*, 275 (2014), p. 484-523.
- [18] W. Boscheri, R. Loubère, and M. Dumbser. Direct arbitrary-lagrangian-eulerian ader-mood finite volume schemes for multidimensional hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, p. 56–87, 2015.
- [19] A. Bottino, E. Sonnendrücker, Monte Carlo particle-in-cell methods for the simulation of the Vlasov-Maxwell gyrokinetic equations, *J. Plasma Phys.*, Vol 81, 5 (2015).
- [20] D. Bouche, G. Bonnaud, D. Ramos, Comparison of numerical schemes for solving the advection equation, *App. Math. Letters*, Vol 16, 2, p. 147–154 (2003).

- [21] J.U. Brackbill, D. Jamet, D. Torres, On the theory and computation of surface tension : the elimination of parasitic currents through energy conservation in the second-gradient method, *J. Comput. Phys.* Vol. 182, Issue 1, p. 262–276, (2002).
- [22] J.-P. Braeunig, Sur la simulation d'écoulements multi-matériaux par une méthode eulérienne directe avec capture d'interfaces en dimensions 1, 2 et 3, *Thèse de Doctorat*, Ecole Normale Supérieure de Cachan, 2007.
- [23] J.-P. Braeunig, Reducing the entropy production in a collocated Lagrange-Remap scheme, *J. Comp. Phys.*, Vol 314, p127-144 (2016).
- [24] J.-P. Braeunig, B. Chaudet, Study of a collocated Lagrange-Remap scheme for multimaterial flows adapted to HPC, Proceedings of the conference MULTIMAT 2015, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol 83, 8, p. 664-678 (2016).
- [25] J.-P. Braeunig, R. Loubère, R. Motte, M. Peybernes, R. Poncet, a posteriori limiting for 2D Lagrange plus Remap schemes solving the hydrodynamics system of equations, *Computer & Fluids*, Vol 169, p249–262 (2018).
- [26] J.-P. Braeunig, D. Chauveheid, J.-M. Ghidaglia, A totally Eulerian finite volume solver for multi-material fluid flows III : The low Mach number case, *Europ. J. Mech. B/Fluids*, 42, 10–19 (2013).
- [27] J.-P. Braeunig, J.-F. Bourgat, P. Charrier, F. Coatanea, B. Dubroca, G. Duffa, P. Le Tallec, L. Mieussens, B. Perthame, Comparison of discrete velocity and random particles methods for rarified reentry flows, 11th Congress AIAA/AAAF Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies, Orleans, France, *AIAA Paper* 2002-5180 (2002).
- [28] J.-P. Braeunig, N. Crouseilles, M. Mehrenberger, E. Sonnendrücker, Guiding-Center simulations on curvilinear meshes, *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S*, Vol. 5, 2, p.271-282 (2012).
- [29] J.-P. Braeunig, N. Crouseilles, M. Mehrenberger, V. Grandgirard, G. Latu, E. Sonnendrücker, Some numerical aspects of the conservative PSM scheme in a 4D drift kinetic code, *INRIA Report* RR-7109 (2009) et preprint soumis mais non publié.

- [30] J.-P. Braeunig, N. Crouseilles, M. Mehrenberger, V. Grandgirard, G. Latu, E. Sonnendrücker, Some numerical aspects of the conservative PSM scheme in a 4D drift-kinetic code, Arxiv :1303.2238, (2011).
- [31] J.-P. Braeunig, B. Desjardins, J.-M. Ghidaglia, A totally Eulerian finite volume solver for multi-material fluid flows, *Europ. J. Mech. B/Fluids*, Vol 28, p.475-486 (2009).
- [32] J.-P. Braeunig, L. Brosset, F. Dias, J.-M. Ghidaglia, Phenomenological Study of Liquid Impacts through 2D Compressible Two-fluid Numerical Simulations, *Proceedings ISOPE the International Offshore and Polar Engineering Conference*, Osaka, Japan (2009).
- [33] J.-P. Braeunig, An algorithm to control the pressure evolution for the FVCF-NIP method for compressible multi-material fluid flows, *Int. J. Finite Volumes*, Vol 7, p. 101-132 (2010).
- [34] J.-P. Braeunig, L. Brosset, F. Dias, J.-M. Ghidaglia, On the effect of phase transition on impact pressures due to sloshing, *Proceedings ISOPE the International Offshore and Polar Engineering Conference*, Beijing, China (2010).
- [35] J. Breil, P.-H. Maire, A cell-centered diffusion scheme on two-dimensional unstructured meshes, *J. Comput. Phys.*, 224 (2007), p. 785-823.
- [36] A. J. Brizard and T. S. Hahm, Foundations of nonlinear gyrokinetic theory, *Rev. Mod. Phys.* 79, 421 (2007).
- [37] T. Buffard, S. Clain, Monoslope and multislope MUSCL methods for unstructured meshes, *J. Comput. Phys.*, 229 (2010), p. 3745-3776.
- [38] D.E. Burton, N.R. Morgan, T.C. Carney, M.A. Kenamond, Reduction of dissipation in Lagrange cell-centered hydrodynamics (CCH) through corner gradient reconstruction (CGR), *J. Comput. Phys.*, 299 (2015), 229.
- [39] D.E. Burton, T.C. Carney, N.R. Morgan, S.K. Sambasivan, M.J. Shashkov, A cell-centered Lagrangian Godunov-like method for solid dynamics, *Comp. & Fluids*, 83 (2013), p. 33-47.
- [40] D.E. Burton, Exact conservation of energy and momentum in staggered-grid hydrodynamics with arbitrary connectivity, *Ad-*

- vances in the Free Lagrange Method*, Springer-Verlag, New-York (1990).
- [41] D. Chauveheid, Ecoulements multi-matériaux et multi-physiques : solveur volumes finis eulérien co-localisé avec capture d’interfaces, analyse et simulations. Thèse de Doctorat, Ecole Normale Supérieure de Cachan, 2012.
 - [42] D. Chauveheid, A new algorithm for surface tension forces in the framework of the FVCF-ENIP method, *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 50, 175–186 (2015).
 - [43] E. J. Caramana, E.D. Burton, M. J. Shashkov, P.P. Whalen, The construction of compatible hydrodynamics algorithms utilizing conservation of total energy, *J. Comput. Phys.*, 146 (1998), p. 227-262.
 - [44] G. Carré, S. Del Pino, B. Després, E. Labourasse, A Cell-Centered Lagrangian Hydrodynamics Scheme on General Unstructured Meshes in arbitrary Dimension, *J. Comput. Phys.*, 228 (2009), p. 5160-5183.
 - [45] C.Z. Cheng, G. Knorr, The integration of the Vlasov equation in configuration space, *J. Comput. Phys.* 22, pp. 330-351 (1976).
 - [46] J. Cheng, C.-W. Shu, A high order ENO conservative Lagrangian type scheme for the compressible Euler equations, *J. Comput. Phys.*, 227 (2007), p. 1567-1596.
 - [47] B.Y. Choi, M. Bussmann, A piecewise linear approach to volume tracking a triple point, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 53 (6) (2007) 1005–1018.
 - [48] P. Colella, P.R. Woodward, The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations, *J. Comp. Phys.*, Vol. 54, p. 174–201, (1984).
 - [49] P. Colella, P.R. Woodward, The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks, *J. Comp. Phys.*, Vol. 54, p. 115–173, (1984).
 - [50] A. W. Cook, Enthalpy diffusion in multicomponent flows, *Phys. of Fluids*, 21 (2009).
 - [51] W. H. Cabot, A. W. Cook, Reynolds number effects on Rayleigh-Taylor instability with possible implications for type-Ia supernovae, *Nature*, Vol 2, p. 562–568 (2006).

- [52] N. Crouseilles, M. Mehrenberger, E. Sonnendrücker, Conservative semi-Lagrangian schemes for the Vlasov equation, *J. Comput. Phys.* 229, p. 1927-1953 (2010).
- [53] G. Dakin, B. Després, S. Jaouen, Inverse Lax-Wendroff boundary treatment for compressible Lagrange-Remap hydrodynamics on Cartesian grids, *J. Comp. Phys.* 353, p. 228–257 (2018).
- [54] G. Dakin, H. Jourden, High order accurate Lagrange-remap hydrodynamic schemes on staggered cartesian grids, *C. R. Acad. Sci. Paris*, Ser. I, 354 (2016), p. 211–217.
- [55] R. B. DeBar. Fundamentals of the kraken code. *Technical report*, Lawrence Livermore Laboratory (1974).
- [56] B. Després, C. Mazeran, Lagrangian gas dynamics in two dimensions and lagrangian schemes, *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 178 (2005), p. 327-371.
- [57] B. Després, C. Mazeran, Symmetrization of Lagrangian gas dynamics in dimension two and multidimensional solvers, *C.R. Mécanique* 331, p. 475–480, (2003).
- [58] B. Desjardins, J. Franciscatto, J.-M. Ghidaglia, A Multidimensional Multiphase Flow Finite Volume Solver using a Lagrangian Step and a Projection Technique, *Int. J. Finite Volumes*, (2007).
- [59] L. Desvillettes, J. Mathiaud, Some aspects of the asymptotics leading from gas-particles equations toward multiphase flows equations, *J. Stat. Phys.*, Vol 141, 1, p. 120–141 (2010).
- [60] F. De Vuyst, T. Gasc, R. Motte, M. Peybernes, R. Poncet, Lagrange-Flux Schemes : Reformulating second-order accurate lagrange-remap schemes for better node-based HPC performance, *Oil Gas Sci. Technol*, 71, 64 (2016).
- [61] T. Gasc, F. De Vuyst, M. Peybernes, R. Poncet, R. Motte, Building a more efficient lagrange-remap scheme thanks to performance modeling, *ECCOMAS Congress 2016*, VII European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, M. Papadrakakis et al editors, p. 1-14 (2016).
- [62] F. De Vuyst, Lagrange-Flux schemes and entropy property, *International Conference on Finite Volumes for Complex Applications*, p. 235-243 (2017).

- [63] F. De Vuyst, J.-M. Ghidaglia, G. Le Coq, On the numerical simulation of multiphase water flows with changes of phase and strong gradients using the Homogeneous Equilibrium Model, *Int. J. Finite Volumes*, (2005)
- [64] A. M. Dimits et al, Comparisons and physics basis of tokamak transport models and turbulence simulations, *Phys. Plasmas*, 7, 969 (2000).
- [65] S. Diot, R. Loubère, and S. Clain. The MOOD method in the three-dimensional case : Very-high-order finite volume method for hyperbolic systems. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 73 :362–392, (2013).
- [66] V. Dyadechko, M. Shashkov, Moment of fluid interface reconstruction, *Los Alamos report LA-UR-05-7571*, January 25, (2006).
- [67] S. Galera, P.-H. Maire, J. Breil. A two-dimensional unstructured cell-centered multimaterial ALE scheme using VOF interface reconstruction, *J. Comput. Phys.*, 229 (2010), p. 5755-5787.
- [68] J.-M. Ghidaglia, A. Kumbaro, G. Le Coq, Une méthode volumes finis à flux caractéristiques pour la résolution numérique des systèmes hyperboliques de lois de conservation, *C.R. Acad. Sc. Paris*, Vol. 322, I, p. 981–988, (1996).
- [69] J.-M. Ghidaglia, A. Kumbaro, G. Le Coq, On the numerical solution to two fluid models via a cell centered finite volume method, *Eur. J. Mech. B-Fluids*, Vol. 20, No 6, p.841–867, (2001).
- [70] J.-M. Ghidaglia, F. Pascal, Flux boundary conditions for hyperbolic systems of conservations laws in the finite volume framework. In R. Herbin and D. Kroner, editors, *Finite Volumes for complex applications III, Problems and Perspectives*, 809-816 (2002).
- [71] J. Glimm, J.W. Grove, X.L. Li, K.-M. Shyue, Y. Zeng, Q. Zhang, Three Dimensional Front Tracking, *SIAM Journal on Scientific Computing* (1995).
- [72] R. Glowinski, P. Le Tallec, M. Ravachol, V. Tsikkinis, Numerical solution of the Navier Stokes equations modelling the flow of two incompressible non miscible viscous fluids. *Finite Element in Fluids*, Vol. 8, p. 137–163, (1992).

- [73] S.K. Godunov, A finite difference method for the numerical computation and discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics, Vol.47, p. 271-306, (1959).
- [74] J. Gressier, J.-M. Moschetta, Robustness versus accuracy in shock-wave computations, *Int. j. numer. methods fluids*, (1999).
- [75] D. Gueyffier, J. Li, R. Scardovelli, S. Zaleski, Volume of fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three dimensional flows, *J. Comput. Phys.*, 152 (1999), p. 423-456.
- [76] H. Guillard, R. Abgrall, Modélisation numérique des fluides compressibles, Series in applied mathematics, P.-G. Ciarlet, P.-L. Lions, (2001).
- [77] J. Guterl, J.-P. Braeunig, N. Crouseilles, M. Mehrenberger, V. Grandgirard, G. Latu, E. Sonnendrücker, Test of some numerical limiters for the conservative PSM scheme in a 4D drift kinetic code, *INRIA Report RR-7467* (2010).
- [78] V. Grandgirard, Y. Sarazin, P. Angelino, A. Bottino, N. Crouseilles, G. Darmet, G. Dif-Pradalier, X. Garbet, Ph. Ghendrih, S. Joliet, G. Latu, E. Sonnendrücker, L. Villard, Global full-f gyrokinetic simulations of plasma turbulence, *Plasma Phys. Control. Fus.*, Volume 49B, pp. 173–182 (december 2007).
- [79] V. Grandgirard, M. Brunetti, P. Bertrand, N. Besse, X. Garbet, P. Ghendrih, G. Manfredi, Y. Sarazin, O. Sauter, E. Sonnendrücker, J. Vaclavik, L. Villard, A drift-kinetic Semi-Lagrangian 4D code for ion turbulence simulation, *J. Comput. Physics*, Vol. 217, No. 2, pp. 395-423 (2006)
- [80] J.-F. Haas, B. Surtevant, Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities. *J. Fluid Mech.*, Vol. 181, p. 41–76 (1987).
- [81] P. Hoch, E. Labourasse, A frame invariant and maximum principle enforcing second-order extension for cell-centered ALE schemes based on local convex hull preservation, *Int. J. for Num. Meth. in Fluids* (2014), 76, 12, 1043.
- [82] L. H. Holway, Kinetic theory of shock structure using an ellipsoidal distribution function, Rarefied Gas Dynamics, Vol I, *Proc. Fourth Internat. Sympos.*, Academic Press, New York, p. 193–215 (1966).

- [83] T. Y. Hou, P. G. Le Floch, Why nonconservative schemes converge to wrong solutions : error analysis. *Mathematics of Computation*, Vol. 62, 206, p. 497-530 (1994).
- [84] F. Huot, A. Ghizzo, P. Bertrand, E. Sonnendrücker, O. Coulaud, Instability of the time splitting scheme for the one-dimensional and relativistic Vlasov-Maxwell system, *J. Comp. Phys.*, Vol 185, 2 (2003).
- [85] D. Igra, K. Takayama, A high resolution upwind scheme for multi-component flows, International journal for numerical methods in fluids *Int. j. numer. methods fluids* ISSN 0271-2091, vol. 38, No 10, p. 985–1007, (2002).
- [86] M. Kenamond, N.R. Morgan, T.C. Carney, M. Shahskov, Compatible, total energy conserving and symmetry conserving arbitrary Lagrangian-Eulerian hydrodynamics in 2D rz - Cylindrical coordinates, *J. Comput. Phys.*, 268 (2014), p. 154-185.
- [87] D. Kröner, M. Rokyta, M. Wierse, A Lax-Wendroff type theorem for upwind finite volume schemes in 2D. *East-West J. Numer. Math.* 4, 279-292 (1996).
- [88] B. Lafaurie C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, G. Zanetti, Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *J. Comput. Phys.*, Vol. 113, no. 1, p. 134–147, (1994).
- [89] P. Lax, B. Wendroff, Systems of conservation laws, *Comm. Pure Appl. Math*, 13, 217-237, (1960).
- [90] R.J. LeVeque, Numerical Methods for Conservation Laws, Birkhäuser, (1990).
- [91] R. Liska, B. Wendroff, Comparison of several difference schemes on 1D and 2D test problems for the Euler equations, *SIAM J. Sci. Comput.* Vol. 25, No. 3, p. 995–1017, (2003).
- [92] W. Liu, J. Cheng, C.-W. High order conservative Lagrangian schemes with Lax-Wendroff type time discretization for the compressible Euler equations, *J. Comput. Phys*, 228 (2009), p. 8872-8891.
- [93] R. Loubère, J.-P. Braeunig, J.-M. Ghidaglia, A totally Eulerian finite volume solver for multi-material fluid flows : Enhanced Natural Interface Positioning ENIP, *European Journal of Mechanics B/Fluids*, Vol 31, p. 1-11 (2010).

- [94] R. Loubère and M.J. Shashkov, A subcell remapping method on staggered polygonal grids for arbitrary-Lagrangian-Eulerian methods, *J. Comput. Phys.*, Vol. 209, 1, p. 105–138, (2005).
- [95] R. Loubère, Une méthode particulière Lagrangienne de type Galerkin Discontinu. Application à la Mécanique des Fluides et à l'Interaction Laser/Plasma, *Thèse de Doctorat*, Université Bordeaux 1, (2002).
- [96] E. Love, G. Scovazzi, On the angular momentum conservation and incremental objectivity properties of predictor/multi-corrector method for Lagrangian shock hydrodynamics, *Comp. Meth. Applied Mech. Eng.*, 198 (2009), p. 3207-3213.
- [97] P.-H. Maire, R. Abgrall, J. Breil, J. Ovadia, A Cell-Centered Lagrangian Scheme for Two-Dimensional Compressible Flow Problems, *SIAM J. on Scientific Computing*, Vol. 29 (2007), No. 4, p. 1781-1824.
- [98] P.-H. Maire, B. Nkonga, Multi-scale Godunov-type method for cell-centered discrete Lagrangian hydrodynamics, *J. Comput. Phys.*, 228 (2009), p. 799-821.
- [99] P.-H. Maire, R. Abgrall, J. Breil, R. Loubere, B. Rebourcet, A nominally second-order cell-centered Lagrangian scheme for simulating elastic-plastic flows on two-dimensional unstructured grids, *J. Comput. Phys.*, 235 (2013), p. 626.
- [100] P.-H. Maire, A high-order cell-centered Lagrangian scheme for compressible fluid flows in two-dimensional cylindrical geometry, *J. Comput. Phys.*, 228 (2009), p. 6882-6915.
- [101] P.-H. Maire, J. Breil, S. Galera, A cell-centred arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) method, *Int. J. Numer. Meth. Fluids* (2007).
- [102] S. Mosso, S. Clancy, A geometrically derived priority system for young's interface reconstruction. *Technical Report LA-CP-95-0081*, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, 1995.
- [103] R.Motte, J.-P. Braeunig, M. Peybernes, Une méthode eulérienne directe pour la simulation des écoulements compressibles multi-matériaux avec glissement, *Revue Chocs Avancées 2012*, publication CEA DAM ISENDé (2013).
- [104] W.F. Noh, P. Woodward, SLIC (Simple Line Interface Calculation), Lectures notes in Physics 59. *Editions Springer*, Berlin,(1976).

- [105] C. Paulin, J.-P. Braeunig, R. Motte, Isentropic correction for collocated Lagrange-Remap scheme, *Computer and Mathematics with Applications*, in press July 2018.
- [106] S. Peluchon, G. Gallice, P.-H. Maire, Some acoustic-transport splitting schemes for two-phase compressible flows, in *ECCOMAS Congress* (2016).
- [107] B. Perthame, Boltzmann-type schemes for gas dynamics and the entropy property, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol 27, 6, p. 1405–1421 (1990).
- [108] M. Peybernes, J.-P. Braeunig, J.M. Ghidaglia, Hybrid Parallelization of a Pure Eulerian Finite Volume Solver for Multi-Material Fluid Flows, *Computer Engineering and Applied Computing, Proceeding of the 2012 World Congress in Computer Science*, Las Vegas, Page 3 (2012).
- [109] S. Popinet, S. Zaleski, A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 30 (1999), p. 775-793.
- [110] J.J. Quirk, A contribution to the great Riemann solver debate, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 18, p. 555–574, (1994).
- [111] P.-A. Raviart, J.-M. Thomas, Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles, Masson, (1983).
- [112] R.D. Richtmyer, K.W. Morton, Difference methods for initial-value problems, John Wiley, (1967).
- [113] W. J. Rider, D. B. Kothe, Reconstructing Volume Tracking, *J. Comput. Phys.*, 141 (1998), p. 112-152.
- [114] P.L. Roe, Characteristic-based schemes for the Euler equations, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 18, p. 337, (1986).
- [115] X. Rogue, Rodriguez, J.-F. Haas, and R. Saurel, Experimental and numerical investigation of the shock-induced fluidization of a particle bed, *Shock Waves*, Vol. 8, 29–45, (1998).
- [116] J.-M. Rovarch, Solveurs tri-dimensionnels pour les écoulements de fluides diphasiques avec transferts d'énergie, *Thèse de Doctorat*, ENS de Cachan, (2003).

- [117] C. D. Sijoy, S. Chaturvedi, Volume-of-fluid algorithm with different modified dynamic material ordering methods and their comparisons, *J. Comp. Phys.*, Vol. 229, 10, p. 3848–3863 (2010).
- [118] C. Shi, C.-W. Shu, On local conservation of numerical methods for conservation laws. (2017).
- [119] C.W. Shu, S. Osher, Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, *J. Comput. Phys.*, Vol. 2, p. 439–471, (1988).
- [120] P. Smereka, J.A. Sethian, Level Set Methods for Fluid Interfaces, *Annual Review of Fluid Mechanics* Vol. 35, p. 341–372 (2003).
- [121] M. Sussman, P. Smereka, S. Osher, A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow, *Journal of Computational Physics*, Vol. 114, p. 146–159 (1994).
- [122] E. Tadmor, Entropy stability theory for difference approximations of nonlinear conservation laws and related time-dependent problems, *Acta Numerica* 12 (2003) 451–512.
- [123] E.F. Toro, Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics, *Springer*, Berlin (1999).
- [124] B. Van Leer, Towards the ultimate conservative difference scheme : IV. A new approach to numerical convection, *J. Comput. Phys.*, vol. 23, p. 276–299 (1977).
- [125] C. Voltz, J.-M. Lagrange, G. Besnard, B. Etchessahar, Application of ultra-high-speed optical observations and high-speed x-ray radiography measurements to the study of explosively driven copper tube expansion, *Int. Congress on High-Speed Imaging and Photonics*, Proc. of SPIE, Vol. 71261M (2009).
- [126] J. Von Neumann, R.D. Richtmyer, A method for the numerical simulation of hydrodynamics shocks, *J. Appl. Phys.*, 21 (1950).
- [127] M.L. Wilkins, Calculation of elastic plastic flow methods, *Comp. Physics*, 3 (1964).
- [128] D.L. Youngs, A Numerical Technique for 2D Compressible Multi-phase Flow *Paper presented at the workshop Numerical methods for multimaterial flows*, Paris, September 23-25 (2002).
- [129] D.L. Youngs, Numerical simulation of mixing by Rayleigh-Taylor and Richtmyer-Meshkov instabilities, *Laser and Particle Beams* Vol. 12, p. 725-750 (1994).

- [130] D. L. Youngs, Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion, in K. W. Morton and M. J. Baines (eds), *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Academic, New York (1982), p. 273-285.