

Méthode d'ordre optimal pour la simulation du mouvement de particules rigides immergées

B. Fabrèges, L. Gouarin, B. Maury

09 Octobre 2012

Objectif : écoulement fluide/particules

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) - \mu \Delta \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \end{cases}$$

Principe fondamental de la dynamique pour les particules :

$$\begin{cases} m_i \frac{d\mathbf{V}_i}{dt} = - \int_{\gamma_i} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} + \mathbf{F}_i \\ J_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = - \int_{\gamma_i} \mathbf{r}_i \times \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}, \end{cases}$$

avec $\boldsymbol{\sigma} = \mu(\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u}) - p \mathbf{I}$.

Conditions d'adhérence sur les bords γ_i des particules :

$$\mathbf{u} = \mathbf{V}_i + \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{r}_i$$

Stokes

$$\begin{cases} -\nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \end{cases}$$

Équilibre des forces :

$$\begin{cases} 0 = - \int_{\gamma_i} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} + \mathbf{F}_i \\ 0 = - \int_{\gamma_i} \mathbf{r}_i \times \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}, \end{cases}$$

avec $\boldsymbol{\sigma} = \mu(\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u}) - p \mathbf{I}$.

Conditions d'adhérence sur les bords γ_i des particules :

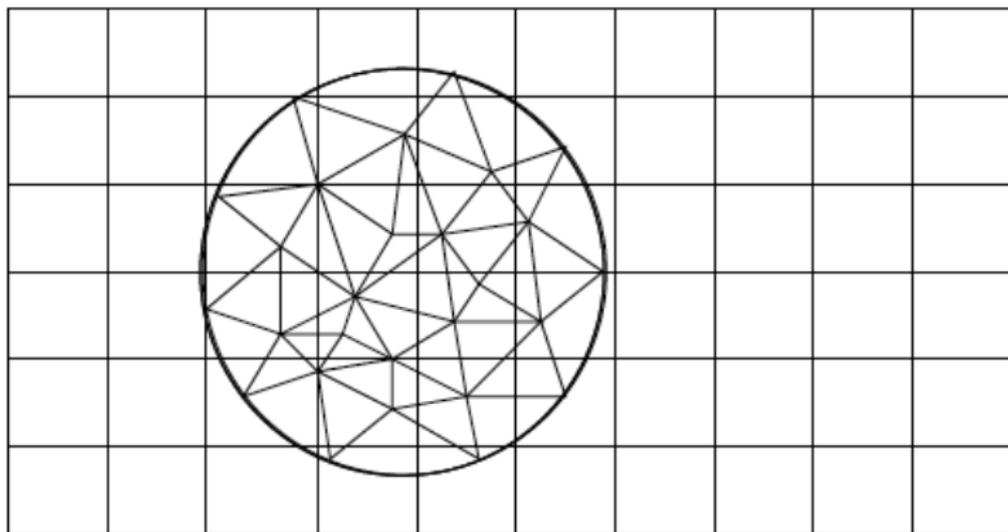
$$\mathbf{u} = \mathbf{V}_i + \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{r}_i$$

Problème jouet

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{dans } \Omega \setminus \bar{B} \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega \\ u = 0 & \text{sur } \partial B \end{cases}$$

$$u = \arg \min_{H_0^1(\Omega \setminus \bar{B})} J, \quad J(v) = \frac{1}{2} \int_{\Omega \setminus \bar{B}} |\nabla v|^2 - \int_{\Omega \setminus \bar{B}} f v$$

Domaine fictif



- Utilisation de solveurs rapides sur maillage cartésien.

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{dans } \Omega \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases}$$

$$u = \arg \min_K J, \quad J(v) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla v|^2 - \int_{\Omega} f v.$$

Espace contraint :

$$K = \{v \in H_0^1(\Omega), v|_B = 0\}$$

Prise en compte de la contrainte

Forme générale : $K = \ker(\mathcal{B})$. Plusieurs possibilités pour \mathcal{B} :

$$\mathcal{B}v = v|_B \in L^2(B) \text{ ou dans } H^1(B), \mathcal{B}v = \left(\nabla v|_B, \int_B v \right).$$

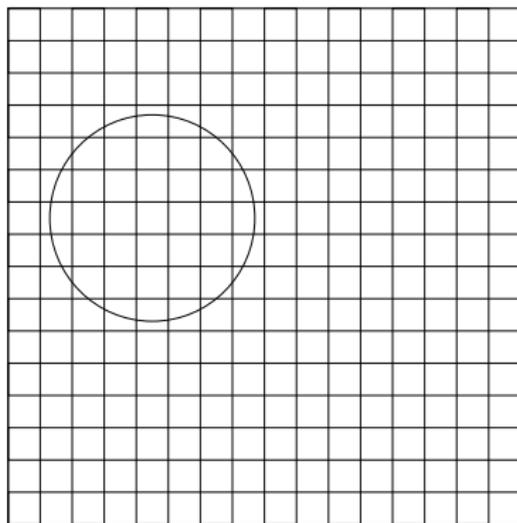
Méthode de pénalisation :

$$J_\varepsilon(v) = \frac{1}{2} \int_\Omega |\nabla v|^2 - \int_\Omega fv + \frac{1}{2\varepsilon} (\mathcal{B}v, \mathcal{B}v).$$

Méthode par multiplicateurs de Lagrange :

$$\begin{cases} \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v + (\lambda, \mathcal{B}v) & = \int_\Omega fv \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \\ (\mu, \mathcal{B}u) & = 0 \quad \forall \mu \in \Lambda \end{cases}$$

Approximation en espace



- Solution prolongée par 0 dans B . Perte de régularité (typiquement $H^{3/2-\varepsilon}$).
- Maillage cartésien, non conforme à la géométrie.

On n'obtient pas l'ordre optimal de 1 (on a $1/2$).

Une méthode d'extension régulière

Idée : Chercher un prolongement régulier de la solution exacte.
Pour le problème jouet : Trouver g dans $L^2(B)$ (prolongé par 0 sur $\Omega \setminus \bar{B}$) qui minimise

$$g \longrightarrow J(g) = \frac{1}{2} \int_{\partial B} |u_g|^2.$$

où u_g est la solution de

$$\begin{cases} -\Delta u_g = f + g & \text{dans } \Omega \\ u_g = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases}$$

Gradient de J

Proposition

Le gradient de

$$g \longrightarrow J(g) = \frac{1}{2} \int_{\partial B} |u_g|^2.$$

est la restriction de la solution w_g à B du problème de Poisson suivant :

$$\begin{cases} -\Delta w_g = u_g \delta_{\partial B} & \text{dans } \Omega \\ w_g = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases}$$

où $u_g \delta_{\partial B}$ est défini de façon faible contre les fonctions $H^1(\Omega)$ par :

$$\langle u_g \delta_{\partial B}, v \rangle = \int_{\partial B} u_g v$$

Preuve

on écrit $u_g = u_0 + \tilde{u}_g$. On a :

$$D_g J(h) = \int_{\partial B} u_g \tilde{u}_h$$

où \tilde{u}_h est donc solution de :

$$\begin{cases} -\Delta \tilde{u}_h = h & \text{dans } \Omega \\ \tilde{u}_h = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases}$$

La solution w_g vérifie

$$\int_{\Omega} \nabla w_g \cdot \nabla v = \int_{\partial B} u_g v \quad \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

Avec $v = \tilde{u}_h$, on a :

$$D_g J(h) = \int_{\Omega} \nabla w_g \cdot \nabla \tilde{u}_h.$$

la solution \tilde{u}_h vérifie :

$$\int_{\Omega} \nabla \tilde{u}_h \cdot \nabla v = \int_{\Omega} h v \quad \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

Avec $v = w_g$, on a :

$$D_g J(h) = \int_{\Omega} w_g h = \int_B w_g h.$$

Algorithmme

Étant donnée une fonction g :

- Résoudre le problème :

$$\begin{cases} -\Delta u_g = f + g & \text{dans } \Omega \\ u_g = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases}$$

- Construire la distribution simple couche $u_g \delta_{\partial B}$.

- Résoudre :

$$\begin{cases} -\Delta w_g = u_g \delta_{\partial B} & \text{dans } \Omega \\ w_g = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases}$$

- Prendre $\nabla J(g) = w_g|_B$

Problème du gradient

On considère le problème suivant :

$$\begin{cases} -\Delta u = \varphi \delta_{\partial B} & \text{dans } \Omega \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases}$$

où φ est dans $H^{-1/2+s}(\partial B)$ avec $0 < s < 1$.

Résolution par élément finis : approcher $\varphi \delta_{\partial B}$ numériquement.

Approximation de la distribution simple couche

Approximation de la distribution simple couche par une combinaison de masses de Dirac :

$$\varphi_h^{\tilde{h}} = \sum_{i=1}^{N_{\tilde{h}}} \lambda_i \delta_{x_i},$$

où

$$\lambda_i = \langle \varphi, \mathbb{1}_{\Gamma_i} \rangle$$

Proposition

Soit $0 < s \leq 1/2$ et $\varphi \in H^{-1/2+s}(\gamma)$. Il existe une constante $C > 0$ telle que :

$$\left| \langle \varphi - \varphi_h^{\tilde{h}}, v_h \rangle \right| \leq C \sqrt{\frac{\tilde{h}}{h}} \tilde{h}^s \|\varphi\|_{-1/2+s, \gamma} |v_h|_{1, \Omega}$$

pour toute fonction test v_h et où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ dénote le crochet de dualité entre $H^{-1/2+s}(\gamma)$ et $H^{1/2-s}(\gamma)$.

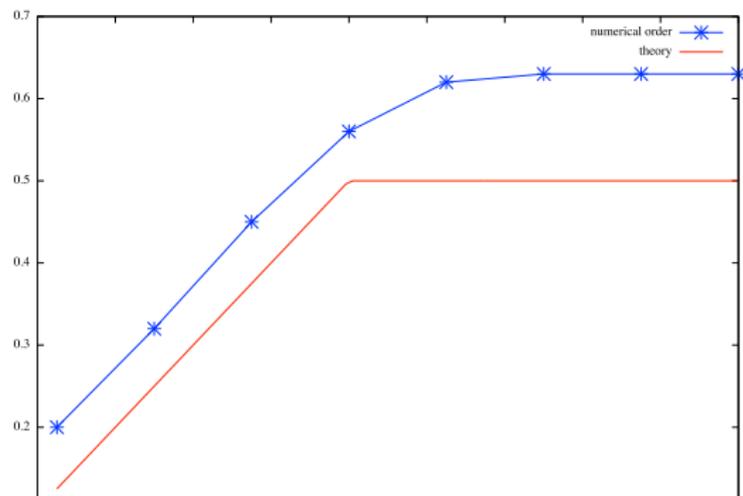
Vérification de l'ordre

On résout un problème du type

$$\begin{cases} -\Delta u = \varphi \delta_\gamma + f & \Omega \\ u = 0 & \partial\Omega \end{cases}$$

avec

$$\varphi = C \sum_{n=1}^N n^{-s} \sin(n\theta)$$



Ordre de la méthode

Problème du gradient :

- Ordre 1/2 en norme H^1 .
- Ordre 1 en norme L^2 si $\tilde{h} = h^{\frac{3}{1+2s}}$ (Aubin-Nitsche).

Premier lemme de Strang :

$$\|u - u_h\| \leq C \left(\inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\| + \sup_{z_h \in V_h} \frac{|(g - g_h, z_h)|}{\|z_h\|} \right)$$

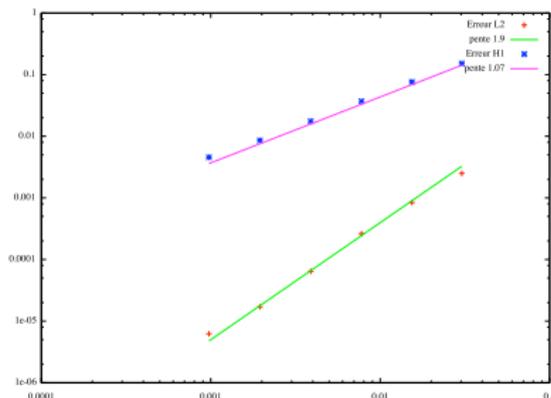
Vérification de l'ordre 1

Soit

$$u_0 = \log\left(\frac{r}{R}\right)$$

la solution exacte du problème suivant :

$$\begin{cases} -\Delta u = 0 & \Omega \setminus \bar{\mathcal{B}} \\ u = 0 & \gamma \\ u = u_0 & \partial\Omega \end{cases}$$

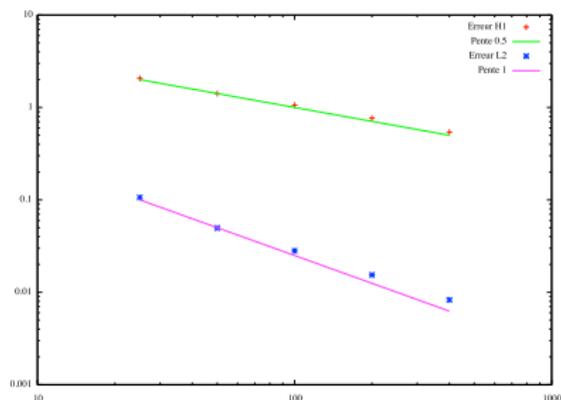


Erreur H^1 d'ordre 1

Erreur avec la pénalisation

Même problème :

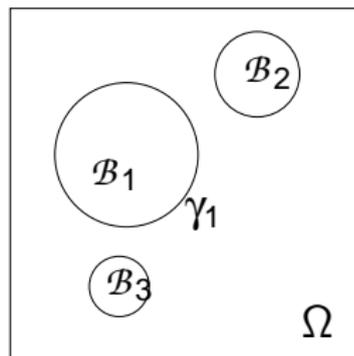
$$\begin{cases} -\Delta u = 0 & \Omega \setminus \bar{\mathcal{B}} \\ u = 0 & \gamma \\ u = u_0 & \partial\Omega \end{cases}$$



Erreur H^1 d'ordre 1

Cas de Stokes

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f} & \text{dans } \Omega \setminus \bar{B} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 & \text{dans } \Omega \setminus \bar{B} \\ \mathbf{u} = 0 & \text{sur } \partial\Omega \\ \mathbf{u} = \mathbf{V}_i + \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{r}_i & \text{sur } \gamma_i \\ \int_{\gamma_i} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_i = \int_{B_i} \mathbf{F}_i \\ \int_{\gamma_i} \mathbf{r}_i \times \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_i = \int_{B_i} \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i \end{array} \right.$$



où :

$$f \in L^2(\Omega \setminus B)$$

$$B = \sqcup_{i=1}^N B_i$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \nu (\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u}) - p \mathbf{I}_d$$

On considère le problème suivant :

$$\begin{cases} -\nu \Delta \mathbf{u}_g + \nabla p_g & = \mathbf{f} + \mathbf{g} + \mathbf{F} \chi_B & \text{dans } \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{u}_g & = 0 & \text{dans } \Omega \\ \mathbf{u}_g & = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases}$$

Trouver \mathbf{g} dans $L^2(B)$ qui minimise

$$\mathbf{g} \longrightarrow J(\mathbf{g}) = \frac{1}{2} \int_{\gamma} |\mathbf{u}_g - \mathcal{R}(\mathbf{u}_g)|^2,$$

où $\mathcal{R}(\mathbf{u}_g)$ est le mouvement rigide sur les bords des particules associé à \mathbf{u}_g .

Équilibre des forces

- L'équation

$$\int_{\gamma_i} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_i = \int_{B_i} \mathbf{F}_i$$

est vérifiée si \mathbf{g} vérifie

$$\int_{B_i} \mathbf{g} = 0$$

- De même, l'équation

$$\int_{\gamma_i} \mathbf{r}_i \times \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_i = \int_{B_i} \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i$$

est vérifiée si \mathbf{g} vérifie

$$\int_{B_i} \mathbf{r}_i \times \mathbf{g} = 0$$

On cherche donc \mathbf{g} dans l'espace

$$K = \left\{ \mathbf{g} \in (L^2(B))^d, \int_{B_i} \mathbf{g} = 0 \text{ et } \int_{B_i} \mathbf{r}_i \times \mathbf{g} = 0 \right\}$$

Gradient de J

Proposition

Soit \mathbf{w}_g la solution du problème suivant :

$$\begin{cases} -\nu \Delta \mathbf{w}_g + \nabla \pi_g & = \varphi_g \delta\gamma & \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{w}_g & = 0 & \Omega \\ \mathbf{w}_g & = 0 & \partial\Omega \end{cases}$$

où φ_g est dans $L^2(\gamma)$ et est définie sur chaque γ_i par :

$$\varphi_g = \mathbf{u}_g|_{\gamma_i} - \frac{1}{|\gamma_i|} \int_{\gamma_i} \mathbf{u}_g - \frac{C_d}{R_i^2 |\gamma_i|} \left(\int_{\gamma_i} \mathbf{r}_i \times \mathbf{u}_g \right) \times \mathbf{r}_i$$

Le gradient de J en \mathbf{g} dans la boule \mathcal{B}_i est alors donné par

$$\nabla J(\mathbf{g})|_{\mathcal{B}_i} = \mathbf{w}_g|_{\mathcal{B}_i} - \frac{1}{|\mathcal{B}_i|} \int_{\mathcal{B}_i} \mathbf{w}_g - \frac{C_d}{\int_{\mathcal{B}_i} r^2} \left(\int_{\mathcal{B}_i} \mathbf{r}_i \times \mathbf{w}_g \right) \times \mathbf{r}_i$$

Algorithme

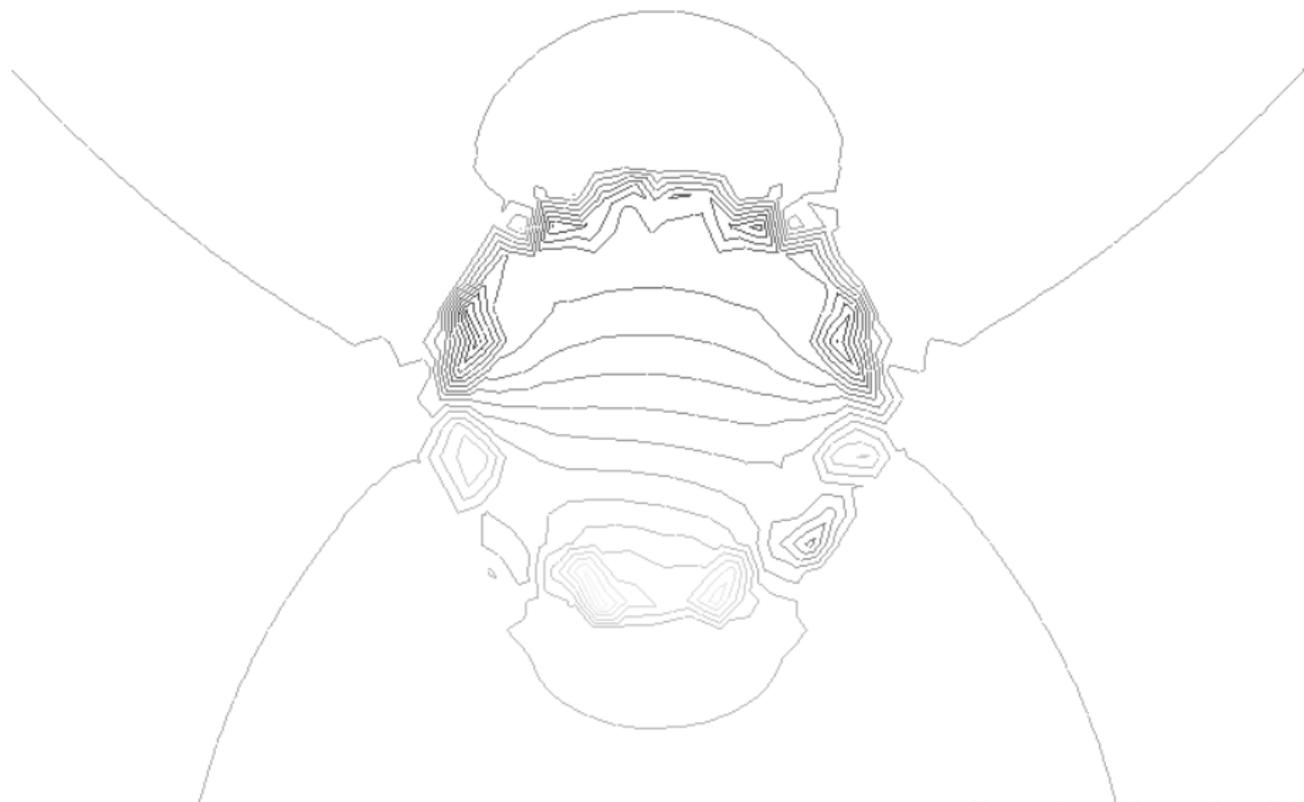
Une itération du gradient s'écrit :

$$\begin{cases} -\nu \Delta \mathbf{u}_g + \nabla p_g = \mathbf{f} + \mathbf{g} + \mathbf{F} \chi_B & \text{dans } \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{u}_g = 0 & \text{dans } \Omega \\ \mathbf{u}_g = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases}$$

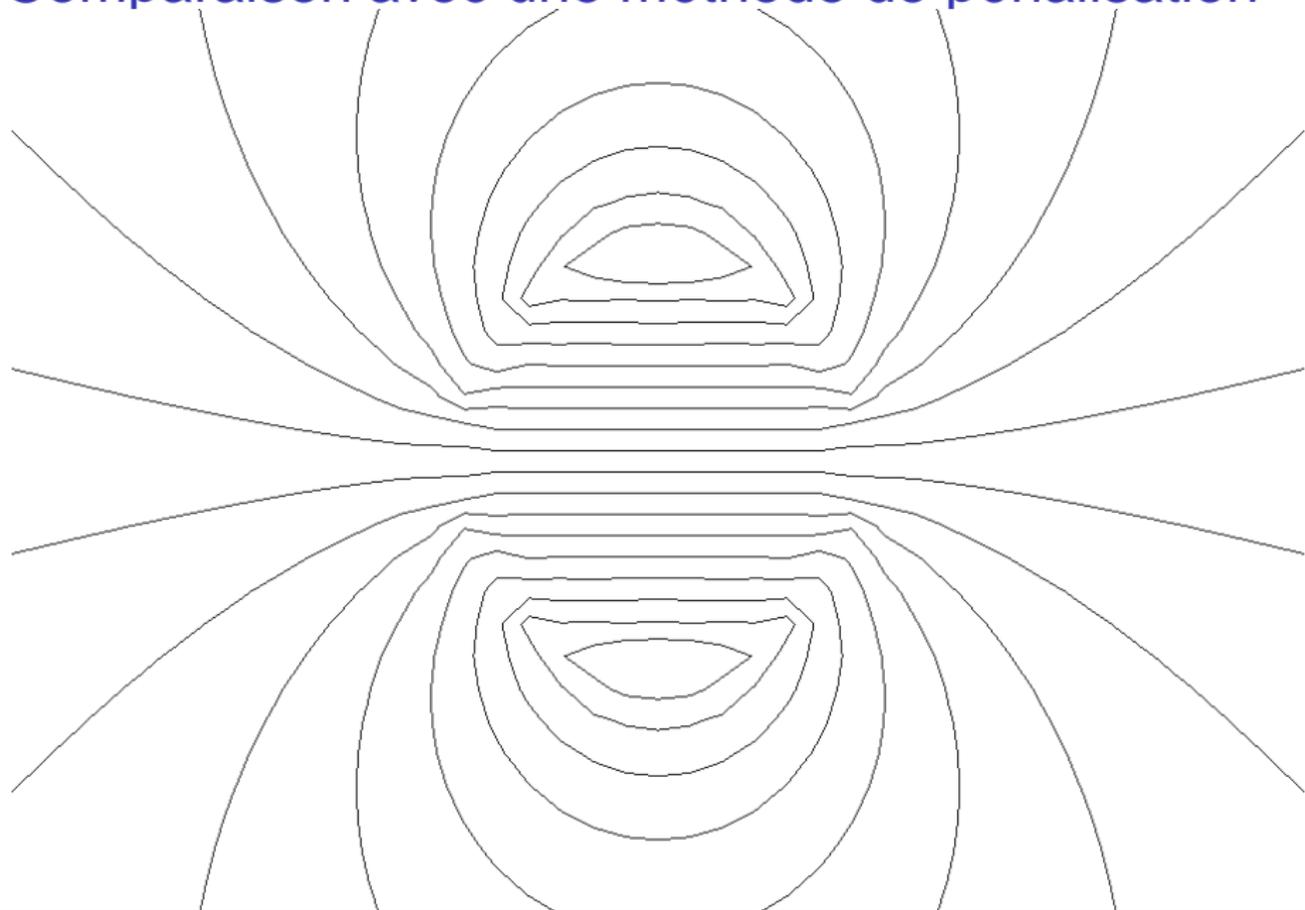
$$\begin{cases} -\nu \Delta \mathbf{w}_g + \nabla \pi_g = (\mathbf{u}_g - \mathcal{R}(\mathbf{u}_g)) \delta\gamma & \text{dans } \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{w}_g = 0 & \text{dans } \Omega \\ \mathbf{w}_g = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases}$$

Et on projète ensuite \mathbf{w}_g sur chaque particule sur l'orthogonal de l'ensemble des mouvements rigides.

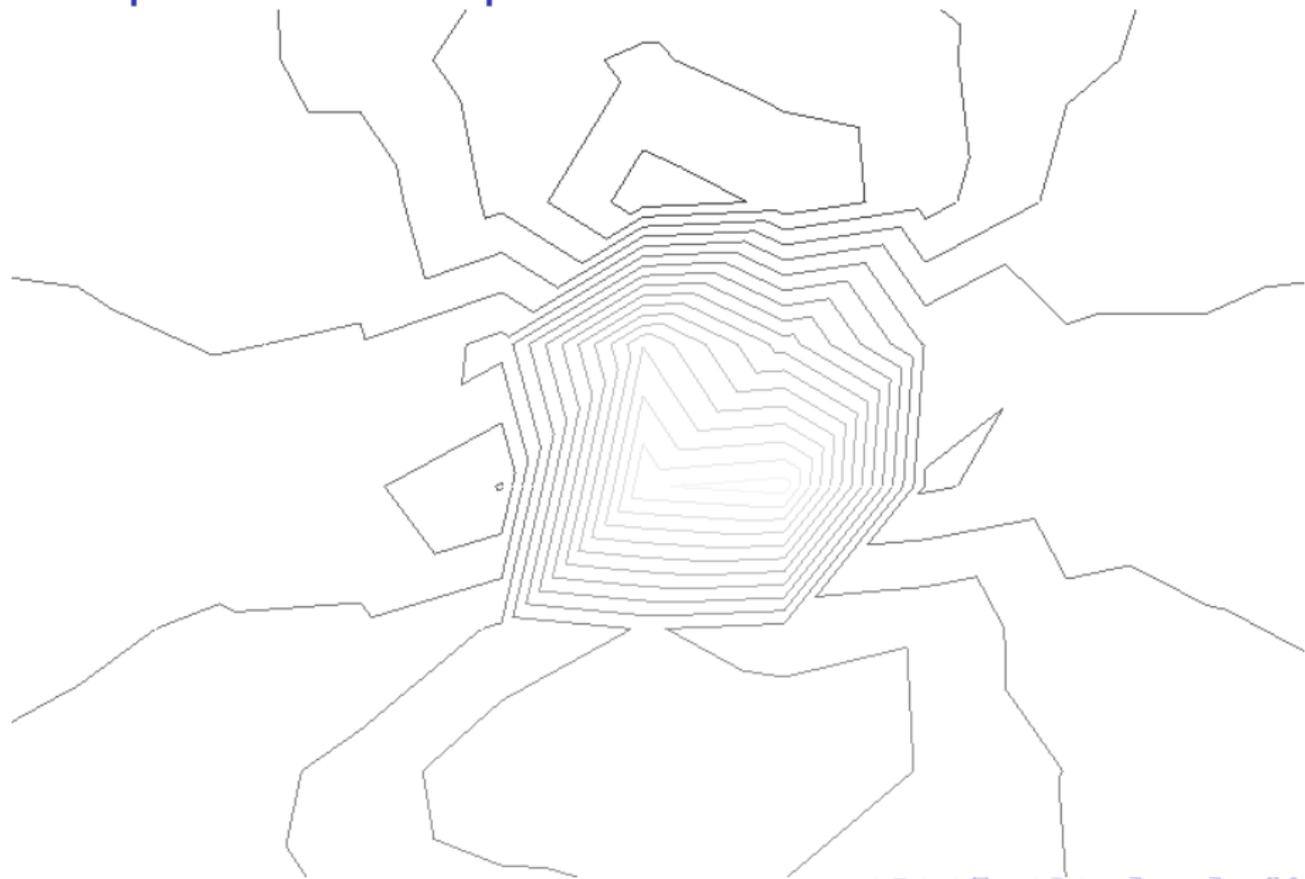
Comparaison avec une méthode de pénalisation



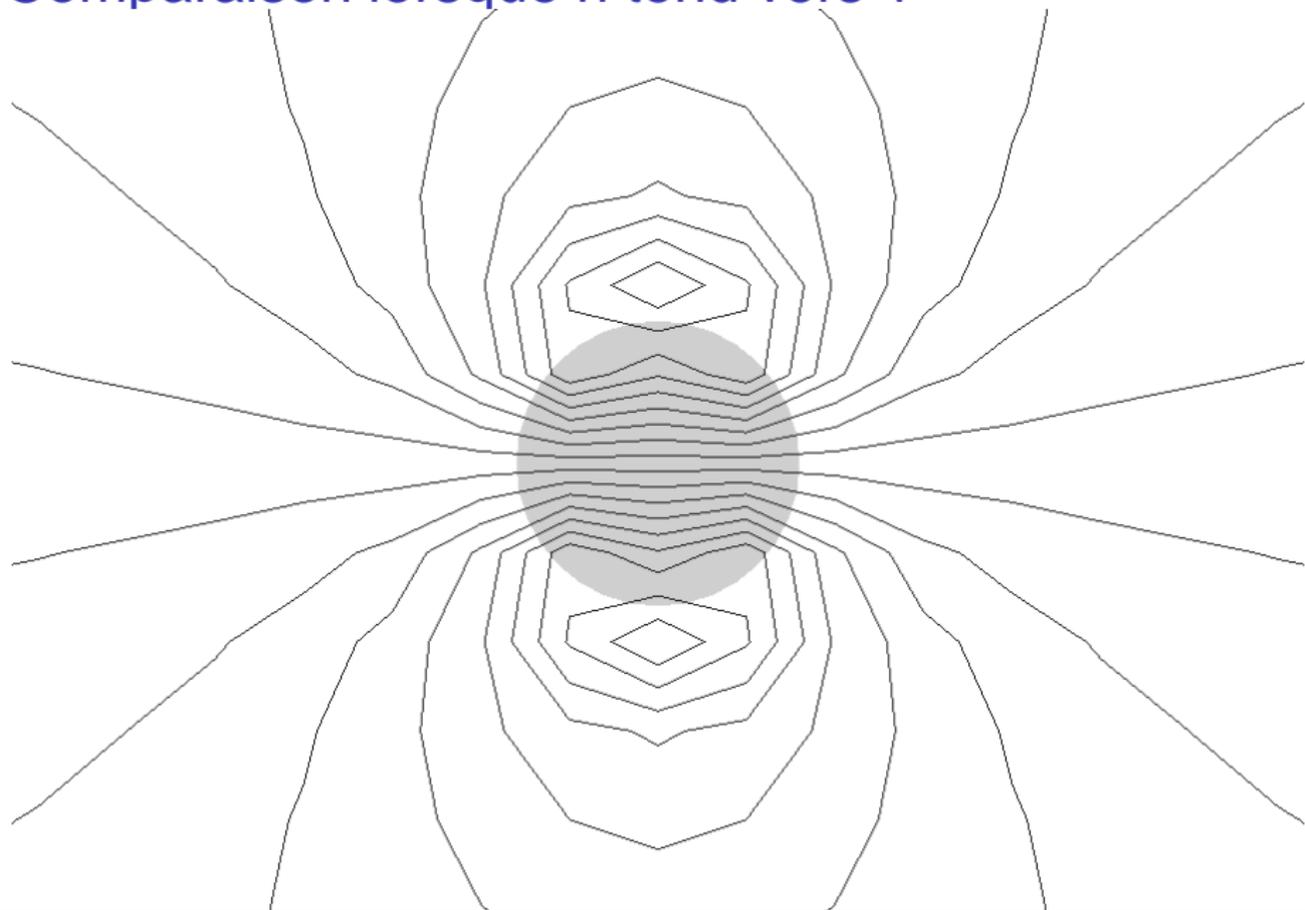
Comparaison avec une méthode de pénalisation



Comparaison lorsque h tend vers 1



Comparaison lorsque h tend vers 1



Code éléments finis

- Éléments finis $4Q_1/Q_1$ en 2d, $8Q_1/Q_1$ en 3d.
- Utilisation de la librairie *PETSc* pour les solveurs linéaires.
- Couplé avec le code de contacts *SCoPI* (Thèse d'Aline Lefebvre).

Préconditionneur

h	$n = \text{itérations}$	temps (s)
2^{-4}	275	-
2^{-5}	633	0.1
2^{-6}	1217	0.74
2^{-7}	2218	5.66
2^{-8}	4044	67.8

Table: Sans préconditionneur

h	itérations	temps
2^{-4}	80	0.0072
2^{-5}	91	0.0275
2^{-6}	93	0.105
2^{-7}	90	0.43
2^{-8}	87	2.84
2^{-9}	86	13.49
2^{-10}	83	54.5
2^{-11}	79	213

Table: FFT

Résumé

- Utilisation de solveurs rapide (maillage cartésien).
- Méthode d'ordre optimal.
- Résolution de problèmes classiques, pas de modification des opérateurs.
- Résolution de deux problèmes par itération du gradient conjugué.

