



**HAL**  
open science

# Analyse d'une méthode de couplage entre un fluide compressible et une structure déformable

Laurent Monasse

► **To cite this version:**

Laurent Monasse. Analyse d'une méthode de couplage entre un fluide compressible et une structure déformable. Analyse numérique [math.NA]. Université Paris-Est, 2011. Français. NNT: . tel-00658152

**HAL Id: tel-00658152**

**<https://theses.hal.science/tel-00658152>**

Submitted on 10 Jan 2012

**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.

UNIVERSITÉ —  
— PARIS-EST

T H È S E

présentée pour obtenir le titre de

**Docteur de l'Université Paris-Est**  
**Spécialité : MATHÉMATIQUES**

par Laurent MONASSE

**Sujet : Analyse d'une méthode de couplage entre un fluide  
compressible et une structure déformable**

Soutenue le 10 octobre 2011  
devant le jury composé de :

*Président :* Rémi ABGRALL  
*Rapporteurs :* Patrick LE TALLEC  
Bertrand MAURY  
*Examineurs :* Christian MARIOTTI  
Christian TENAUD  
*Directeurs :* Serge PIPERNO  
Virginie DARU



*A Marie-Agnès,  
pour son soutien tout  
au long de ces années*



## Remerciements

Je souhaiterais tout d'abord remercier Serge Piperno et Virginie Daru pour leur encadrement au cours de mes trois années de thèse au CERMICS et au LIMSI. Leurs conseils avisés m'ont guidé tout au long de ce travail. Mes remerciements vont également à Christian Mariotti qui m'a accueilli au CEA depuis mon stage de master. J'ai beaucoup apprécié de travailler avec lui pendant ces quatre années. Je souhaite également exprimer ma gratitude envers Christian Tenaud pour les nombreux éclairages qu'il m'a apportés au cours de nos discussions.

Je suis extrêmement reconnaissant à Patrick Le Tallec et Bertrand Maury d'avoir accepté la lourde tâche d'être rapporteur de cette thèse.

Je remercie vivement Rémi Abgrall qui me fait l'honneur de participer à ce jury.

Je tiens à remercier Lazhar Houas, Jérôme Giordano, Georges Jourdan, Christian Mariani, Laurent Biamino et toute l'équipe de l'IUSTI pour leur accueil à Marseille et les comparaisons expérimentales que cette collaboration a rendues possibles.

Je souhaite également remercier les chercheurs du CERMICS pour leur accueil au sein du laboratoire. Mes remerciements vont tout particulièrement à Eric Cancès, Jean-Philippe Chancelier, Jean-François Delmas, Alexandre Ern, Claude Le Bris, Tony Lelièvre, Régis Monneau et Gabriel Stoltz pour m'avoir guidé et soutenu dans mes premiers choix scientifiques. Mes sincères remerciements vont à Frédéric Legoll et Karam Sab à l'UR Navier pour les discussions fructueuses concernant la mécanique du solide. J'adresse également mes remerciements à Ismaila Dabo avec lequel j'ai partagé l'organisation du séminaire de calcul scientifique durant deux ans. Un grand merci à Catherine, Martine et Nathalie pour leur soutien administratif au CERMICS.

Je profite de ces quelques lignes pour remercier également tous les collaborateurs que j'ai côtoyés au CEA : tout d'abord François et Pierre-Franck pour m'avoir accueilli dans leur laboratoire, ainsi que Magali, Ludovic, Elisabeth, Thomas, Olaf, Yves, Philippe, Nicolas, Françoise, Christophe, Roger et Jean-Yves, pour les nombreuses discussions (scientifiques ou non !) que nous avons pu avoir ensemble. Je remercie également Christine et Isabelle pour leur soutien administratif. J'adresse enfin toutes mes amitiés au groupe des coureurs de BIII.

Je souhaite remercier vivement Patrick Le Quéré de m'avoir accueilli au LIMSI, ainsi que tous les membres du laboratoire, en particulier Tuan Dang Anh, Jalel Chergui, Olivier Daube, Ivan Delbende, Yann Fraigneau, Olivier Le Maitre, François Lusseyran, Lionel Mathelin, Sophie Pageau-Maurice, Luc Pastur, Valérie Ronflé, Laurence Rostaing et Anne Sergent, pour l'ambiance de travail sympathique du laboratoire.

Un grand merci à tous les doctorants et post-doctorants des trois laboratoires ! Les trois ans n'auraient pas été aussi agréables sans la présence des deux Julien, de Géraldine, Vincent, Michaël, Christophe, Sébastien et Martin au CEA, de Lyes, Jérémy, Benjamin, Adolfo, Benoit, Nicolas, Samia, Francky, Christelle, Zhenlan, Witze,

Lan et Ercan au LIMSI, ni celles des trois David, des deux Arnaud, de Ronan, Virginie, Christelle, Rémi, Matthew, Salma, Abdel, Fabien, Sébastien, Nancy, Olivier, Patrick, José, Maxence, Marie, Kimiya, Stephano, Raphaël, Guy, Pablo et Pierre au CERMICS, sans oublier bien sûr Julie au LIMSI et au CERMICS ! Un grand merci en particulier à tous ceux qui ont eu le courage (la témérité ?) d'accepter que nous allions courir ensemble...

Je souhaiterais également exprimer ma gratitude envers mon employeur, le Ministère de l'Écologie, du Développement durable, des Transports et du Logement, qui a financé mes travaux durant trois ans.

Je souhaite remercier mes parents ainsi que toute ma famille, qui m'ont encouragé à la poursuite de ces études et m'ont laissé totalement libre pour trouver la voie dans laquelle je voulais m'engager. Leurs conseils et leur soutien m'ont été d'un grand secours pour toutes les décisions que j'ai eues à prendre.

Enfin, et surtout, merci à Marie-Agnès, tu sais me rassurer quand je doute et me rendre le sourire même quand tout va mal... C'est une grande force de t'avoir à mes côtés.

# Table des matières

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Introduction</b>  | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Méthodes numériques pour l'interaction fluide-structure</b>                     | <b>7</b>  |
| 2.1      | Introduction . . . . .   | 7         |
| 2.2      | Équations régissant le fluide . . . . .  | 8         |
| 2.3      | Méthodes de discrétisation spatiale du couplage fluide-structure . . . . .         | 9         |
| 2.3.1    | Méthodes ALE . . . . .   | 10        |
| 2.3.2    | Méthodes de domaine fictif . . . . .   | 12        |
| 2.4      | Schémas d'intégration en temps pour le couplage fluide-structure . . . . .         | 27        |
| 2.4.1    | Schémas de couplage explicites . . . . .   | 28        |
| 2.4.2    | Schémas de couplage implicites . . . . .   | 30        |
| 2.4.3    | Schémas de couplage semi-implicites . . . . .                                      | 30        |
| 2.5      | Conclusion . . . . .   | 31        |
| <b>3</b> | <b>An energy-preserving Discrete Element Method for elastodynamics</b>             | <b>33</b> |
| 3.1      | Introduction . . . . .   | 34        |
| 3.2      | Description of the method . . . . .  | 36        |
| 3.2.1    | Geometrical description of the system . . . . .                                    | 36        |
| 3.2.2    | Expression of the Hamiltonian of the system . . . . .                              | 38        |
| 3.2.3    | Derivation of the forces and torques between particles . . . . .                   | 40        |
| 3.3      | Consistency and accuracy of the scheme . . . . .                                   | 41        |
| 3.3.1    | Modified equation for the scheme . . . . .   | 41        |
| 3.3.2    | Comparison with Cosserat and Cauchy continuum theories . . . . .                   | 43        |
| 3.4      | Preservation of the Hamiltonian structure by the time integration scheme . . . . . | 45        |
| 3.4.1    | Description of the scheme . . . . .  | 45        |
| 3.4.2    | Implementation with forces and torques . . . . .                                   | 46        |
| 3.4.3    | Resolution of the nonlinear step . . . . .   | 47        |
| 3.5      | Numerical results . . . . .  | 49        |
| 3.5.1    | Lamb's problem . . . . .   | 49        |



|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| 3.5.2    | Conservation of energy . . . . .   | 50        |
| 3.5.3    | Static shell test cases . . . . .  | 52        |
| 3.6      | Conclusion . . . . .   | 54        |
| 3.7      | Appendices . . . . .   | 54        |
| 3.7.1    | Expression of the equivalent volumetric deformation with a<br>free surface . . . . .                         | 54        |
| 3.7.2    | Expression of the coefficients for the flexion and torsion of the<br>particle links . . . . .                | 55        |
| 3.7.3    | Derivation of the forces and torques from the potential energies   | 56        |
| 3.7.4    | Details on the implementation of the RATTLE scheme with<br>forces and torques . . . . .                      | 57        |
| 3.7.5    | Resolution of the nonlinear step of the RATTLE time-scheme   | 58        |
| <b>4</b> | <b>An Embedded Boundary method for the conservative coupling of<br/>a compressible flow and a rigid body</b> | <b>63</b> |
| 4.1      | Introduction . . . . .   | 64        |
| 4.2      | Solid and fluid discretization methods . . . . .   | 66        |
| 4.2.1    | Solid time-discretization method . . . . .   | 66        |
| 4.2.2    | Fluid discretization method . . . . .  | 67        |
| 4.3      | Treatment of the cells cut by the solid boundary . . . . .   | 69        |
| 4.4      | Coupling algorithm . . . . .   | 71        |
| 4.4.1    | Computation of fluid fluxes and of the boundary pressure<br>(steps (1) and (2)) . . . . .                    | 72        |
| 4.4.2    | Computation of the solid step (step (3)) . . . . .   | 73        |
| 4.4.3    | Update of the boundary and of the volume fractions (step (4))  | 74        |
| 4.4.4    | Modification of fluxes (step (5)) . . . . .  | 75        |
| 4.4.5    | Conservative mixing of small cut cells . . . . .   | 77        |
| 4.5      | Analysis of the conservation of mass, momentum and energy . . . . .  | 77        |
| 4.5.1    | Integration on the fluid domain . . . . .  | 78        |
| 4.5.2    | Solid conservation balance . . . . .   | 78        |
| 4.6      | Conservation of constant flows . . . . .   | 79        |
| 4.6.1    | Steady constant flow with moving boundaries . . . . .  | 79        |
| 4.6.2    | Free slip along a straight boundary . . . . .  | 80        |
| 4.7      | Numerical examples . . . . .   | 81        |
| 4.7.1    | One-dimensional results . . . . .  | 81        |

---

|          |   |            |
|----------|---|------------|
| 4.7.2    | Double Mach reflection . . . . .  | 85         |
| 4.7.3    | Lift-off of a cylinder . . . . .  | 86         |
| 4.7.4    | Flapping doors . . . . .  | 92         |
| 4.8      | Conclusion . . . . .  | 95         |
| <b>5</b> | <b>Coupling with a deformable solid</b>                                 | <b>97</b>  |
| 5.1      | Introduction . . . . .  | 97         |
| 5.2      | Coupling algorithm . . . . .  | 99         |
| 5.2.1    | General coupling architecture . . . . .                                 | 99         |
| 5.2.2    | Deformed boundary reconstruction . . . . .                              | 101        |
| 5.2.3    | Evaluation of the fluid pressure forces . . . . .                       | 103        |
| 5.3      | Convergence of the fixed-point procedure . . . . .                      | 105        |
| 5.3.1    | Notations . . . . .   | 105        |
| 5.3.2    | Estimate on the position of the center of mass . . . . .                | 107        |
| 5.3.3    | Estimate on rotation . . . . .  | 108        |
| 5.3.4    | End of the proof and remarks . . . . .                                  | 109        |
| 5.4      | Exact conservation of energy for the undeformable solid . . . . .       | 110        |
| 5.5      | Numerical results . . . . .   | 112        |
| 5.5.1    | Tangentially vibrating rod . . . . .                                    | 112        |
| 5.5.2    | Clamped beam . . . . .  | 113        |
| 5.6      | Conclusion . . . . .  | 117        |
| <b>6</b> | <b>Résultats numériques</b>   | <b>119</b> |
| 6.1      | Flottement d'une plaque mince dans un écoulement supersonique . . . . . | 119        |
| 6.2      | Comparaisons expérimentales . . . . .                                   | 123        |
| 6.2.1    | Ouverture d'une porte par un choc incident . . . . .                    | 123        |
| 6.2.2    | Interaction d'une onde de choc avec une plaque déformable . . . . .     | 132        |
| <b>7</b> | <b>Conclusion</b>   | <b>143</b> |



# Introduction

---

Les phénomènes d'interaction fluide-structure font partie de la vaste classe des problèmes multi-physiques. Les deux matériaux en présence n'obéissent pas aux mêmes lois de comportement, mais ils interagissent dans un système fortement couplé. Dans le cas de l'interaction fluide-structure, il s'agit d'un solide mobile, rigide ou déformable, et d'un fluide liquide ou gazeux. L'écoulement du fluide autour de la structure est conditionné par le mouvement de la structure solide, et réciproquement, la déformation de la structure est influencée par les efforts du fluide sur sa paroi.

Un grand nombre de situations font intervenir des phénomènes d'interaction fluide-structure. Différents régimes peuvent être distingués. Les applications en biomécanique font en général intervenir un fluide liquide, incompressible et visqueux et une structure déformable de densités proches : écoulements sanguins dans les vaisseaux, déformation des globules rouges dans les capillaires, nage des poissons... En génie civil, l'écoulement peut être aérien (résistance d'un pont ou d'un bâtiment au vent) ou hydraulique (digue soumise à la houle, tenue de piles d'un pont), sa vitesse étant en général de faible Mach, l'écoulement peut donc être considéré incompressible. L'industrie nucléaire s'intéresse également à l'écoulement de réfrigérant (avec ou sans changement de phase) dans les tuyaux des centrales. Dans le domaine des transports, un écoulement à vitesse subsonique peut interagir avec une structure mobile et engendrer des ondes acoustiques (bruit dans un véhicule ou un train) ou, à vitesse transsonique, être responsable de la ruine d'un avion (vibration des ailes entraînant le flottement). Enfin, dans le domaine militaire ou de prévention du risque, les effets d'une explosion sur un bâtiment ou sur un sous-marin font intervenir des phénomènes non-linéaires complexes (ondes de choc, fissuration, rupture). Pour toutes ces applications, les résultats expérimentaux sont généralement longs et coûteux à établir, et certains éléments ne sont même pas accessibles à l'expérience. Si la simulation numérique est suffisamment fiable, elle peut être une bonne alternative à l'expérimentation.

Les applications extrêmement variées faisant intervenir de l'interaction fluide-structure demandent des méthodes numériques adaptées. Ainsi, on peut en général modéliser la résistance d'un pont au vent par des méthodes linéaires, en effectuant le calcul des fréquences propres de la structure et en les comparant à la fréquence des tourbillons engendrés par la structure. De même, certains problèmes d'acoustique peuvent être étudiés par une analyse spectrale ou des méthodes de tracé de rayons. En revanche, les modèles non-linéaires nécessaires à l'étude de certains phénomènes

demandent une résolution par des méthodes numériques plus poussées afin de capturer l'intégralité des particularités physiques de la solution, comme les ondes de choc ou les zones de rupture du matériau. Ce sont ces phénomènes complexes qui nous intéresseront dans la suite de ce travail.

De nombreuses méthodes précises et robustes ont été développées au cours des dernières décennies afin de résoudre l'écoulement du fluide, d'une part, et la déformation de la structure, d'autre part. Avec le développement de la puissance des calculateurs, la simulation numérique du couplage de ces méthodes devient accessible. Cependant, il faut que ce couplage ne dégrade pas la qualité des résultats engendrés par les méthodes fluide et solide. En particulier, la simulation numérique se doit d'être stable afin d'obtenir un résultat de façon assurée. Le fait que les méthodes fluide et solide prises séparément soient stables n'assure en aucun cas la stabilité du système couplé. Par ailleurs, il faut assurer que la méthode numérique obtenue est consistante avec les équations résolues afin que le résultat numérique soit "proche", en un certain sens, de la solution physique du problème. Nous nous intéresserons donc principalement à ces deux propriétés dans notre étude du schéma de couplage.

L'objectif de cette thèse est d'étudier le couplage entre un fluide compressible et une structure déformable afin de simuler l'effet d'une onde de choc aérienne sur un bâtiment. Pour l'interaction fluide-structure, deux types d'approches peuvent être envisagés : une résolution découplée ou une résolution couplée. La résolution découplée consiste en général à résoudre le problème fluide sur un domaine fixe, puis à intégrer les efforts du fluide sur la structure pour en déduire le déplacement. Cette approche ne donnera un résultat raisonnable que dans le cas où le mouvement de la structure est extrêmement lent par rapport au temps caractéristique d'évolution du fluide. Au contraire, nous souhaitons étudier des problèmes où la dynamique de la structure est comparable à celle du fluide, avec éventuellement une rupture du matériau et le vol balistique d'éléments solides sous l'effet du souffle d'une explosion. Dans ce cas, une résolution couplée complète est nécessaire.

Une difficulté majeure tient au fait que le domaine de résolution du fluide varie en fonction du temps suivant le déplacement du solide avec, dans les cas qui nous intéressent, de grandes déformations de ce domaine et la possibilité de changements de topologie en raison de la rupture ou du contact. Trois principaux types d'approches sont envisageables pour traiter la déformation du domaine fluide : une approche multiphasique, une approche avec déformation de maillage ou une approche par domaine fictif. L'approche multiphasique (lagrangienne ou eulérienne) est limitée au cas où le solide et le fluide peuvent être décrits par les mêmes équations avec des paramètres physiques variables affectés à chaque phase et advectés au cours du mouvement de l'interface. En général, les méthodes eulériennes (le domaine de calcul est fixe et ne suit pas le matériau) sont préférées pour le calcul de l'écoulement fluide, afin d'éviter de trop grandes distorsions des mailles de calcul. Au contraire, le solide est plutôt simulé avec des méthodes lagrangiennes (le domaine se déforme en suivant le déplacement matériel), qui permettent de suivre les discontinuités ma-

---

térielles avec précision et de traiter les phénomènes de plasticité. Les approches de déformation de maillage permettent d'assurer une transition lisse entre ces deux types de modélisation. L'exemple typique d'une telle approche est la méthode ALE (Arbitrairement Eulérienne-Lagrangienne) : le domaine fluide est déformé de façon à suivre l'interface fluide-solide, sans toutefois subir des déformations aussi grandes que dans une approche purement lagrangienne pour le fluide. La déformation du maillage induit des termes additionnels dans la résolution des équations du fluide. Cependant, des difficultés apparaissent lorsque le déplacement de la structure est trop important : le domaine fluide doit alors être remaillé, ce qui peut entraîner des coûts de calculs accrus en trois dimensions. C'est pour contourner la question du remaillage que les méthodes de domaine fictif ont été développées. Dans les applications qui nous intéressent, ce cas de figure se présentera régulièrement, tout particulièrement en raison de la rupture de la structure sous l'effet du souffle. C'est pour cette raison que nous nous tournons vers les méthodes de domaine fictif qui seront étudiées dans ce qui suit.

Au cours de notre travail, nous nous limiterons à un cadre d'étude physique volontairement simplifié, mais dont les propriétés sont *a priori* les plus contraignantes pour les schémas de couplage développés. Nous garderons à l'esprit l'objectif d'intégration de ces schémas à un programme de calcul industriel réaliste. Les problèmes présentés seront bidimensionnels. Le modèle physique étudié pour le fluide sera le modèle des gaz parfaits compressibles non-visqueux, décrit par les équations d'Euler. Pour la structure, nous nous restreindrons à un solide indéformable ou déformable avec une loi de comportement élastique linéaire. Ces modèles présentent la particularité physique de conserver exactement l'énergie, sans aucune dissipation physique. Nous utiliserons cette propriété importante tout au long de notre travail. Nous estimons en effet que l'ajout de termes dissipatifs, tels que la viscosité, le frottement et la diffusion thermique, s'ils influent sur le réalisme du résultat de la simulation, ne constituent pas des enjeux majeurs pour la stabilité du schéma numérique et pourront être traités par des méthodes usuelles sans remettre en cause les résultats obtenus. Cette approche nous évite également d'avoir à traiter la turbulence.

Nous nous appuyerons dans le cadre de cette thèse sur une méthode numérique classique pour le calcul de l'écoulement fluide compressible. Une formulation Volumes Finis des équations d'Euler sur un maillage cartésien régulier avec des flux numériques décentrés de type Roe d'ordre élevé (par une montée en ordre de type Lax-Wendroff) est utilisée dans les simulations numériques. Cependant, dans l'étude du schéma de couplage, la forme précise de la méthode de calcul des flux numériques ne sera pas utilisée afin d'en préserver la généralité. L'état du fluide est intégré en temps de façon explicite. Pour la structure, une méthode particulière plus originale est employée. La méthode des Éléments Discrets décrit le matériau continu comme un assemblage de "grains" élémentaires interagissant par l'intermédiaire de forces et de moments. L'expression de ces forces et de ces moments permet de retrouver le comportement macroscopique du matériau. Cette approche autorise une prise en compte de la rupture plus simple que par une méthode d'Éléments Finis classiques,

car il suffit de rompre le lien entre deux grains de matière pour assurer la perte de cohésion du solide. L'intégration en temps du mouvement des particules solides est également assuré par un schéma explicite.

Des critères d'efficacité de la simulation ont guidé le développement de notre méthode de couplage. Le coût de calcul des méthodes Volumes Finis et Éléments Discrets se concentre principalement dans les étapes d'évaluation des flux numériques et des forces et moments entre particules, respectivement. Nous souhaitons éviter une méthode de couplage globalement implicite entre ces deux méthodes, car cela impliquerait de calculer plusieurs fois par pas de temps les flux, forces et moments dans le cadre d'une procédure de résolution itérative, jusqu'à atteindre la convergence. Le coût total de la simulation multiplierait alors le coût des calculs fluide et solide indépendants par le nombre d'itérations utilisées par pas de temps, ce qui devient rapidement exorbitant. Nous optons donc pour une méthode de couplage globalement explicite, avec une seule évaluation des flux numériques et des forces et moments par pas de temps. Nous espérons pouvoir ainsi construire un schéma numérique stable, consistant et dont le coût global n'excède pas significativement le coût total des calculs fluide et solide pris séparément.

Le plan de cette thèse est le suivant. Dans le premier chapitre, nous rappelons les équations régissant l'interaction fluide-structure. Nous décrivons et analysons les méthodes numériques existant au début de cette thèse pour traiter les problèmes d'interaction fluide-structure. Nous comparons tout d'abord les avantages et inconvénients des méthodes de déformation de maillage (méthode ALE) et des différentes méthodes de domaine fictif. Cette revue nous permettra de choisir une méthode de domaine fictif adaptée aux objectifs visés. Puis nous nous intéresserons à l'intégration en temps du schéma de couplage et à ses implications sur la stabilité du schéma. En particulier, nous verrons que pour le couplage avec un fluide compressible, l'utilisation d'un schéma globalement explicite est justifiée.

Dans le second chapitre, nous détaillons la méthode Éléments Discrets utilisée pour décrire le solide. Nous montrons la consistance de l'expression des forces et des moments avec l'élastodynamique linéaire ainsi que le caractère hamiltonien du schéma semi-discrétisé spatialement dans ce cas. Utilisant cette propriété, nous sommes en mesure de préserver l'énergie du solide en employant un schéma numérique symplectique. Nous prouvons au passage que, sous une condition CFL, le problème non-linéaire intervenant dans le schéma de résolution de la rotation admet une unique solution et que l'algorithme itératif utilisé converge.

Dans le troisième chapitre, nous présentons le schéma numérique de couplage entre un solide rigide indéformable et un fluide compressible que nous avons développé. Sous la contrainte de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie du système, nous montrons qu'un schéma explicite est possible. De plus, ce schéma conserve des propriétés de consistance qui nous assurent que le solide n'engendre pas de rugosité artificielle dans les mailles fluides coupées, et que le mouvement du solide à travers la grille fluide ne crée pas de perturbation importante

en changeant de maille.

Dans le quatrième chapitre, le schéma de couplage est étendu au cas d'un solide déformable. La principale nouveauté par rapport au cas indéformable provient de la reconstruction nécessaire d'une paroi continue autour des particules solides et du fait que cette paroi est extensible au cours du mouvement solide. Nous montrons alors qu'un schéma totalement explicite n'est plus en mesure d'assurer à la fois les propriétés de conservation et la consistance du schéma dans des cas simples. Nous sommes alors contraints d'introduire une résolution implicite de la surface de la paroi dans le schéma. Cependant, nous pouvons assurer que la méthode semi-implicite que nous proposons ne remet pas en cause les performances du schéma de couplage, car la procédure itérative de résolution de la surface ne fait pas intervenir le calcul des flux et des forces et moments. Nous prouvons par ailleurs la convergence géométrique de cette procédure.

Dans le cinquième chapitre, nous montrons la robustesse de la méthode de couplage développée sur des résultats numériques présentant un intérêt pour les applications industrielles futures visées. Nos résultats sur le phénomène de flottement d'une plaque dans un écoulement supersonique et leur comparaison à des références numériques mettent en avant les très bonnes propriétés en terme de conservation de l'énergie du système de la méthode proposée. La comparaison entre la simulation numérique et des résultats expérimentaux prouve le caractère prédictif de la méthode de couplage développée.





# Méthodes numériques pour l'interaction fluide-structure

---

## 2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous décrivons les méthodes numériques les plus couramment utilisées pour effectuer des simulations d'interaction fluide-structure. Notre description sera guidée par l'application finale recherchée : la simulation de l'interaction entre une onde de choc aérienne (explosion ou écoulement à vitesse supersonique ou subsonique élevée) et une structure (bâtiment, véhicule, ...), avec possible rupture du solide. La modélisation utilisée pour le fluide sera donc celle d'un écoulement compressible, ce qui conditionnera le schéma de couplage développé. De même, le solide sera modélisé par des Éléments discrets afin d'être en mesure de prendre en compte la rupture. Dans le cadre de cette thèse, le matériau restera toujours cohésif et aucune fracturation ne sera considérée, mais tout le développement de la méthode de couplage sera fait dans le but d'y intégrer ultérieurement la rupture du solide.

Nous présentons tout d'abord le modèle régissant le fluide pour le régime compressible que nous souhaitons traiter. Nous rappelons les équations d'Euler qui seront utilisées dans toute la suite de ce travail. La méthode Éléments Discrets utilisée pour modéliser le solide sera exposée plus en détail dans le chapitre 3.

Nous nous intéressons ensuite aux différentes méthodes proposées pour discrétiser le problème d'interaction fluide-structure en espace, tout particulièrement du point de vue de la déformation du domaine fluide avec le déplacement du solide. Nous rappelons brièvement la formulation ALE, puis nous présentons les grandes classes de méthodes de domaine fictif. En vue de la prise en compte de la rupture du matériau solide, une approche par domaines fictifs sera utilisée pour prendre en compte l'interaction fluide-structure dans les chapitres 4 et 5. Une attention particulière sera apportée aux propriétés de conservation lors de la discrétisation en espace afin de garantir la stabilité du couplage et la capture précise des chocs.

Enfin, nous décrivons différents types de schémas d'intégration en temps pour l'interaction fluide-structure. Notre étude ne sera pas tournée vers la recherche de l'ordre de convergence optimal mais vers les propriétés de stabilité des schémas et la conservation de l'énergie. La compressibilité ou l'incompressibilité du fluide en interaction paraît jouer un rôle important dans la stabilité des schémas explicites,

ce qui justifiera la recherche d'un schéma de couplage globalement explicite pour l'interaction fluide compressible/structure déformable.

## 2.2 Équations régissant le fluide

Dans le cadre des phénomènes étudiés (interaction d'ondes de choc aériennes avec des structures), le fluide compressible peut être considéré en première approximation comme non-visqueux. Cette hypothèse sera utilisée tout au long de notre travail. Nous pouvons alors décrire le fluide par les équations d'Euler :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p) = 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \operatorname{div}((\rho E + p)\mathbf{u}) = 0 \quad (2.3)$$

où  $\rho$ ,  $\mathbf{u}$ ,  $p$  et  $\rho E$  sont respectivement la densité, la vitesse, la pression et la densité d'énergie du fluide. Les équations (2.1), (2.2) et (2.3) expriment respectivement la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie du fluide. Ces équations nécessitent une relation complémentaire de fermeture fondée sur des hypothèses physiques sur le comportement du fluide. La plus simple, qui sera adoptée par la suite, est l'hypothèse des gaz parfaits. Si l'on écrit l'énergie interne  $\rho e$  comme la différence entre l'énergie totale  $\rho E$  et l'énergie cinétique :

$$\rho e = \rho E - \frac{1}{2}\rho \|\mathbf{u}\|^2, \quad (2.4)$$

on exprime  $p$  comme une fonction linéaire de  $\rho e$  :

$$p = (\gamma - 1)\rho e \quad (2.5)$$

$\gamma$  est le rapport des chaleurs spécifiques, c'est une constante strictement supérieure à 1. En pratique,  $\gamma$  vaut  $\frac{5}{3}$  pour un gaz parfait monoatomique,  $\frac{7}{5}$  pour un gaz parfait diatomique. Dans la suite, l'air sera assimilé à un gaz parfait avec  $\gamma = 1,4$ . En pratique, cette approximation est satisfaisante pour un gaz de diazote et de dioxygène.

En deux dimensions d'espace, les équations d'Euler peuvent donc s'écrire sous la forme :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{w})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{w})}{\partial y} = 0 \quad (2.6)$$

où on a noté

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (\rho E + p)u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (\rho E + p)v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

La forme de ces équations sous forme conservative se prête bien à la simulation par des méthodes Volumes Finis sur maillage cartésien. En effet,  $\mathbf{f}$  et  $\mathbf{g}$  s'interprètent comme les flux dans les directions  $x$  et  $y$  respectivement. L'hypothèse à la base de la méthode Volumes Finis est de calculer des approximations de la valeur moyenne de  $\mathbf{w}$  dans chacune des mailles de la discrétisation fluide. Tout l'enjeu est alors de calculer des flux numériques approchés à l'interface entre les cellules, et l'évolution de  $\mathbf{w}$  s'obtient par un bilan de masse, de quantité de mouvement et d'énergie sur la maille pendant un pas de temps. De très nombreuses méthodes ont été proposées pour le calcul des flux numériques. Nous ne présenterons pas ici toutes les différentes approches développées, et renvoyons par exemple à [57, 91, 136] pour une revue de ces méthodes. Notre méthode de couplage ne dépendra pas intimement de l'algorithme employé pour le calcul des flux numériques.

## 2.3 Méthodes de discrétisation spatiale du couplage fluide-structure

Dans cette section, nous nous attachons à décrire les méthodes mises en œuvre dans la littérature pour simuler l'écoulement fluide autour d'une structure mobile. Dans un premier temps, le problème sera non-discrétisé ou semi-discrétisé en espace. Dans la section suivante, nous nous concentrerons sur les méthodes de discrétisation temporelle.

Le mouvement de la structure solide déforme le domaine fluide au cours du temps. Le domaine fluide doit donc être mis à jour régulièrement : il est possible de garder le domaine fluide fixé pour un certain nombre de pas de temps en cas de déformation faible de la structure, mais dès que la structure évolue dans des temps caractéristiques comparables à ceux de l'écoulement fluide, il est préférable de recalculer l'interface fluide-solide à chaque pas de temps. Suivant les méthodes utilisées, la prise en compte de cette déformation peut être plus ou moins coûteuse.

Nous allons en particulier présenter deux catégories de méthodes pour prendre en compte la déformation du domaine fluide. La première est la formulation ALE (Arbitrairement lagrangienne-eulérienne) [29] qui consiste à déformer le domaine fluide à partir d'une configuration de référence, ce qui introduit des termes complémentaires liés au mouvement du maillage de calcul dans les équations aux dérivées partielles du modèle. Nous décrirons ensuite certaines des méthodes de domaine fictif les plus couramment utilisées. Le principe de ces méthodes est de superposer un solide mobile sur un domaine fluide fixe, et d'imposer des conditions sur le domaine fluide fictif sous le solide afin d'assurer la non-pénétration du fluide à travers la frontière solide.

### 2.3.1 Méthodes ALE

L'approche lagrangienne pour la simulation d'un fluide est envisageable et donne de bons résultats pour certains problèmes multiphasiques intervenant dans l'industrie nucléaire [17], mais quand l'écoulement devient complexe, la déformation induite du maillage impose un remaillage du domaine complet en respectant les interfaces. Dans un écoulement réaliste, ce remaillage intervient dans des temps très courts. Une formulation eulérienne est donc mieux adaptée à la simulation d'un écoulement fluide. En revanche, dans le cadre de l'interaction fluide-structure, une formulation purement eulérienne ne permet pas de suivre efficacement les phénomènes à l'interface fluide-solide et pose la question de la loi de comportement à imposer dans les cellules coupées par cette interface. L'approche ALE est construite pour éviter ces inconvénients : l'écoulement fluide est calculé sur un domaine qui est déformé de façon à suivre le mouvement de l'interface (lagrangien près du solide) et dont la vitesse de déformation ne suit pas nécessairement celle du fluide à l'intérieur du domaine. On note  $\mathbf{U}$  cette vitesse du maillage fluide. Si  $\mathbf{U}$  est nul, la méthode se réduit à une approche eulérienne ; si  $\mathbf{U}$  est égal à la vitesse du fluide, on retrouve l'approche lagrangienne.  $\mathbf{U}$  peut varier arbitrairement et continûment d'une valeur à l'autre dans le domaine fluide. La formulation ALE se marie naturellement bien avec les méthodes Volumes Finis : les volumes finis sont simplement mobiles et déformables et les inconnues numériques sont les approximations des valeurs moyennes sur ces volumes déformables. L'évolution en temps de ces valeurs moyennes découle naturellement des équations de conservation que l'on cherche à approcher.

Nous présentons dans ce qui suit une formulation classique de la méthode ALE.

Considérons le référentiel du laboratoire, dans lequel les coordonnées eulériennes sont notées  $\mathbf{x}$ , et les coordonnées lagrangiennes liées au solide notées  $\mathbf{X}$ . Le domaine fluide de référence est noté  $\Omega_0$ , et le domaine fluide au temps  $t$  est désigné par  $\Omega_t$ . Nous notons également  $\Gamma_0$  et  $\Gamma_t$  l'interface entre le fluide et le solide initialement et au temps  $t$ , respectivement. Il est possible de faire le passage entre  $\mathbf{X}$  et  $\mathbf{x}$  par la bijection  $\phi$  :

$$\forall \mathbf{X} \in \Omega_0, \forall t > 0, \quad \mathbf{x} = \phi(\mathbf{X}, t) \in \Omega_t. \quad (2.8)$$

Nous supposons ici que  $\phi$  est une application de classe  $C^1$ .

Nous nous intéressons à une variable physique  $g$  dans les coordonnées eulériennes. Nous la noterons  $\tilde{g}$  dans le référentiel lagrangien, de telle sorte que :

$$\forall \mathbf{X} \in \Omega_0, \quad \tilde{g}(\mathbf{X}, t) = g(\phi(\mathbf{X}, t), t) \quad (2.9)$$

Notons maintenant  $\xi$  les coordonnées dans le maillage mobile de la formulation ALE. On peut les exprimer, par exemple, dans les coordonnées lagrangiennes :

$$\xi = \xi(\mathbf{X}, t) \quad (2.10)$$

On définit alors le Jacobien et la vitesse du maillage mobile par

$$\tilde{J}(\mathbf{X}, t) = \det \left( \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{X}} \Big|_t (\mathbf{X}, t) \right) \quad (2.11)$$

### 2.3. Méthodes de discrétisation spatiale du couplage fluide-structure 11

$$\tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{X}, t) = \left. \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t) \quad (2.12)$$

où l'indice dans les dérivées partielles indique les variables qui restent constantes lors de la dérivation.

On peut alors montrer les résultats suivants :

–  $\tilde{J}$  est solution de l'équation différentielle :

$$\left. \frac{\partial \tilde{J}}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t) = \tilde{J}(\mathbf{X}, t) \operatorname{div}_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{U})(\boldsymbol{\xi}(\mathbf{X}, t), t) \quad (2.13)$$

– Soit  $g$  une variable suffisamment régulière, alors on a :

$$\left. \frac{\partial(\tilde{J}g)}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t) = \tilde{J}(\mathbf{X}, t) \left( \left. \frac{\partial g}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\xi}} + \operatorname{div}_{\boldsymbol{\xi}}(g\mathbf{U}) \right) (\boldsymbol{\xi}(\mathbf{X}, t), t) \quad (2.14)$$

Le premier résultat peut être vu comme une conséquence du second en prenant  $g = 1$ . Il donne une propriété de conservation du volume. Au niveau numérique, la vérification exacte de la discrétisation de (2.13) assure la conservation exacte d'un état constant. Cette propriété est à l'origine des Geometric Conservation Laws (GCL) [134] qui permettent d'obtenir des propriétés de stabilité [37] et de consistance [32].

Dans le cas des équations d'Euler, on obtient la formulation suivante en utilisant (2.14) :

$$\left. \frac{\partial(\tilde{J}\tilde{\rho})}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t) + \tilde{J}(\mathbf{X}, t) \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\rho(\mathbf{u} - \mathbf{U}))(\boldsymbol{\xi}(\mathbf{X}, t), t) = 0 \quad (2.15)$$

$$\left. \frac{\partial(\tilde{J}\tilde{\rho}\tilde{u})}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t) + \tilde{J}(\mathbf{X}, t) \left( \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\rho u(\mathbf{u} - \mathbf{U})) + \frac{\partial p}{\partial x} \right) (\boldsymbol{\xi}(\mathbf{X}, t), t) = 0 \quad (2.16)$$

$$\left. \frac{\partial(\tilde{J}\tilde{\rho}\tilde{v})}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t) + \tilde{J}(\mathbf{X}, t) \left( \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\rho v(\mathbf{u} - \mathbf{U})) + \frac{\partial p}{\partial y} \right) (\boldsymbol{\xi}(\mathbf{X}, t), t) = 0 \quad (2.17)$$

$$\left. \frac{\partial(\tilde{J}\tilde{\rho}\tilde{E})}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t) + \tilde{J}(\mathbf{X}, t) \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\rho E(\mathbf{u} - \mathbf{U}) + p\mathbf{u})(\boldsymbol{\xi}(\mathbf{X}, t), t) = 0 \quad (2.18)$$

La méthode ALE donne donc une formulation des équations d'Euler sous forme conservative, avec une modification des vitesses de transport par la vitesse du maillage. L'utilisation d'une méthode Volumes Finis est donc simple à mettre en œuvre dès qu'une vitesse de maillage  $\mathbf{U}$  est calculée. Le calcul de la vitesse de maillage  $\mathbf{U}$  doit vérifier les conditions GCL (2.13), mais doit aussi assurer que le maillage reste peu déformé afin de garder des mailles non retournées. Ceci peut être assuré, par exemple, en résolvant l'équation [102] :

$$\Delta \mathbf{U} = \mathbf{0} \text{ dans } \Omega_t \quad (2.19)$$

$$\mathbf{U} = \mathbf{u}_s \text{ sur } \Gamma_t \quad (2.20)$$

## 12 Chapitre 2. Méthodes numériques pour l'interaction fluide-structure

---

où  $\mathbf{u}_s$  est la vitesse du solide. On peut alors calculer  $J$  de façon à ce qu'il soit compatible avec (2.13). Quand le déplacement de l'interface solide devient trop important, il convient de remailler le domaine fluide afin d'éviter les mailles trop étirées qui réduisent la précision et risquent d'être retournées. Les valeurs sont alors projetées sur le nouveau maillage.

Cette nécessité du remaillage est un des principaux inconvénients de la méthode ALE. Si le calcul est possible en deux dimensions d'espace, le coût du remaillage devient très rapidement une part importante du temps de calcul global sur des géométries complexes et en trois dimensions d'espace. C'est pour cette raison qu'ont été développées les méthodes de domaine fictif, dans lesquelles le maillage du domaine fluide reste fixe au cours du temps et où la pénétration du fluide dans le solide est pénalisée.

### 2.3.2 Méthodes de domaine fictif

Afin d'éviter de déformer le domaine fluide, les méthodes de domaine fictif travaillent sur un maillage fluide fixe. Le solide est alors superposé au maillage fluide et la valeur prise par le fluide dans les mailles occupées par le solide est totalement fictive. La question est alors de savoir quelles conditions imposer afin que le fluide "voie" la présence du solide. Cette problématique ne se posait pas pour la méthode ALE car les deux maillages fluide et solide ont une interface (commune ou distincte, suivant l'algorithme utilisé) bien définie et ne se recouvrent pas. Un grand nombre de méthodes différentes ont été proposées afin de traiter cette question. On peut dégager six types principaux de méthodes de domaine fictif : les méthodes de frontières immergées, les méthodes de pénalisation, les méthodes utilisant des multiplicateurs de Lagrange, les méthodes multi-domaines, les méthodes fondées sur des interpolations, et les méthodes assurant des propriétés de conservation. Nous allons présenter chacune de ces classes de méthodes.

#### 2.3.2.1 Frontières Immergées

La méthode des Frontières Immergées (*Immersed Boundary Method*, notée IBM) a été proposée à l'origine par Peskin [113, 114] pour la simulation des écoulements sanguins dans le coeur. Le modèle physique considéré est donc celui des écoulements visqueux incompressibles couplés à des structures minces (parois cardiaques, valves) de densité comparable à celle du fluide.

Le principe de la méthode IBM est de déplacer la paroi solide à la vitesse du fluide, et d'imposer faiblement un saut dans la contrainte du fluide à la traversée de l'interface. Cette condition est réalisée en imposant des forces additionnelles dans la formulation fluide au voisinage de la paroi solide. Plus précisément, les équations

### 2.3. Méthodes de discrétisation spatiale du couplage fluide-structure 13

résolues pour le fluide sont les suivantes [114] :

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + S_h(\mathbf{u})\mathbf{u} \right) + \mathbf{D}_h^0 p = \mu L_h \mathbf{u} + \mathbf{f} \quad (2.21)$$

$$\mathbf{D}_h^0 \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.22)$$

où  $\mathbf{u}$ ,  $p$  et  $\mu$  désignent la vitesse, la pression et la viscosité du fluide,  $S_h(\mathbf{u})$ ,  $\mathbf{D}_h^0$  et  $L_h$  sont des analogues discrets des opérateurs  $\mathbf{u} \cdot \nabla$ ,  $\nabla$  et  $\Delta$  respectivement, et  $\mathbf{f}$  est le vecteur des forces additionnelles induites par la présence du solide dans le fluide. Ces forces sont données par l'expression suivante :

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{F}(\mathbf{y}, t) \delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\mathbf{y}, t)) d\mathbf{y} \quad (2.23)$$

où  $\mathbf{X}$  et  $\mathbf{F}$  désignent respectivement la position lagrangienne du solide et la force liée à l'énergie interne du solide comme dérivée de Fréchet de l'énergie  $E$  par rapport à la position  $\mathbf{X}$  :

$$\mathbf{F}(\mathbf{y}, t) = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{X}(\mathbf{y}, t)}, \quad (2.24)$$

et  $\delta_h$  désigne une "approximation de la fonction de Dirac". Le choix du noyau  $\delta_h$  à support compact est dicté par des considérations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie, d'invariance par translation et d'intégration exacte de polynômes de degré déterminé. Dans [114], l'expression de  $\delta_h$  est la suivante :

$$\delta_h(\mathbf{x}) = \frac{1}{h^3} \phi\left(\frac{x_1}{h}\right) \phi\left(\frac{x_2}{h}\right) \phi\left(\frac{x_3}{h}\right) \quad (2.25)$$

où  $h$  est le pas d'espace de la discrétisation fluide, et où  $\phi$  est donnée par :

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{8} \left( 3 - 2|r| + \sqrt{1 + 4|r| - 4r^2} \right) & \text{si } |r| \leq 1 \\ \frac{1}{8} \left( 5 - 2|r| - \sqrt{-7 + 12|r| - 4r^2} \right) & \text{si } 1 \leq |r| \leq 2 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.26)$$

Inversement, le solide est résolu par l'équation suivante :

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt}(\mathbf{y}, t) = \int \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\mathbf{y}, t)) d\mathbf{y}. \quad (2.27)$$

La vitesse du fluide dicte donc l'évolution de la position du solide.

La méthode IBM est affectée de plusieurs inconvénients. Tout d'abord, elle est principalement tournée vers le traitement des structures minces. En effet, pour une structure épaisse, l'hypothèse d'un mouvement du solide régi par la vitesse du fluide n'est plus correcte, car c'est plutôt le mouvement de la structure qui modifie alors l'écoulement. Le fluide n'apporte plus qu'une contribution aux forces appliquées sur un élément de structure, au même titre que les contraintes internes au solide. La méthode repose également entièrement sur le fait qu'il est possible, pour une



## 14 Chapitre 2. Méthodes numériques pour l'interaction fluide-structure

structure mince, de calculer un saut de contrainte dans le fluide à la traversée de la structure, lié à la contrainte interne de la structure. La méthode originelle souffre alors du fait que le calcul est effectué avec l'hypothèse d'une vitesse régulière dans le domaine fluide, ce qui n'est plus vrai dans le cas d'une structure infiniment mince. Ce point a été amélioré dans la méthode *Immersed Interface Method* (IIM) développée par LeVeque, Li et Lai [92, 93, 95], par l'introduction de conditions de saut dans les différences finies de la méthode fluide à la traversée de la structure. La méthode IIM semble être d'ordre 2 alors que la méthode IBM originelle montre une convergence numérique d'ordre 1.

Un autre inconvénient de la méthode IBM est la possibilité de fuites numériques de fluide à travers la paroi solide [142]. Une paroi solide fermée autour d'un domaine fluide verrait alors son volume diminuer comme si le fluide fuyait à travers la paroi. La méthode IIM améliore ce point en réduisant les fuites de fluide, mais la conservation n'est toujours pas exacte [142]. En fait, on peut considérer ces méthodes comme des cas particuliers des méthodes de pénalisation de la pénétration du fluide dans le solide.

### 2.3.2.2 Méthodes de pénalisation

Une caractéristique principale de l'interaction entre un solide déformable non-poreux et un fluide est la non-pénétration du fluide dans le solide. En général, dans le cadre d'une méthode de domaine fictif, cette condition n'est pas aisément assurée. Une approche possible pour traiter le domaine fictif est de pénaliser la pénétration du fluide dans la structure.

**Pénalisation par porosité de type Brinkman** Un premier point de vue consiste à voir le solide comme un milieu poreux, avec une imperméabilité d'autant plus grande que la porosité sera faible. Cette approche a été originellement proposée par Arquis et Caltagirone [9] pour des écoulements incompressibles visqueux, avec un modèle de porosité de Brinkman. Ce modèle revient à pénaliser la vitesse du fluide dans le volume du solide en considérant une perméabilité  $\frac{1}{\eta}$  très grande dans le fluide par rapport au solide. Angot *et al.* [4] ont étudié un modèle similaire (pénalisation  $L^2$ ) : en notant  $\Omega$  le domaine fixe total,  $\Omega_s$  le domaine fluide fictif sous le solide et  $\Omega_f$  le domaine fluide effectif, la vitesse  $\mathbf{u}_\eta$  et la pression  $p_\eta$  vérifient les équations suivantes :

$$\frac{\partial \mathbf{u}_\eta}{\partial t} - \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{u}_\eta + \mathbf{u}_\eta \cdot \nabla \mathbf{u}_\eta + \frac{1}{\eta} \mathbf{1}_{\Omega_s} \mathbf{u}_\eta + \nabla p_\eta = f \text{ dans } \mathbb{R}^+ \times \Omega \quad (2.28)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{u}_\eta = 0 \text{ dans } \mathbb{R}^+ \times \Omega. \quad (2.29)$$

Angot *et al.* [4] montrent en utilisant des estimations *a priori* sur  $\mathbf{u}_\eta$  et un résultat de compacité que  $\mathbf{u}_\eta$  converge vers  $\mathbf{u}_f$  quand  $\eta$  tend vers 0 avec un ordre de convergence

### 2.3. Méthodes de discrétisation spatiale du couplage fluide-structure 15

$\mathcal{O}(\eta^{\frac{3}{4}})$ , où  $\mathbf{u}_f$  est la solution de l'équation de Navier-Stokes :

$$\frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial t} - \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{u}_f + \mathbf{u}_f \cdot \nabla \mathbf{u}_f + \nabla p_f = f \text{ dans } \mathbb{R}^+ \times \Omega_f \quad (2.30)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{u}_f = 0 \text{ dans } \mathbb{R}^+ \times \Omega_f \quad (2.31)$$

$$u_f = 0 \text{ sur } \partial \Omega_f \quad (2.32)$$

L'erreur  $\mathbf{u}_\eta - \mathbf{u}_f$  vérifie formellement et numériquement une équation de Darcy à l'intérieur du solide, justifiant une interprétation sous la forme d'un solide poreux. Numériquement, une convergence en  $\mathcal{O}(\eta)$  est observée en pratique. [4] montre qu'une telle convergence à l'ordre 1 en  $\eta$  peut être obtenue théoriquement avec une pénalisation  $H^1$  :

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{1}{\eta} \mathbf{1}_{\Omega_s}\right) \frac{\partial \mathbf{u}_\eta}{\partial t} - \operatorname{div} \left( \left(1 + \frac{1}{\eta} \mathbf{1}_{\Omega_s}\right) \sigma(\mathbf{u}_\eta, p_\eta) \right) \\ + \mathbf{u}_\eta \cdot \nabla \mathbf{u}_\eta + \frac{1}{\eta} \mathbf{1}_{\Omega_s} \mathbf{u}_\eta = f \quad \text{dans } \mathbb{R}^+ \times \Omega \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{u}_\eta = 0 \quad \text{dans } \mathbb{R}^+ \times \Omega \quad (2.34)$$

où  $\sigma(\mathbf{u}, p) = \frac{1}{2Re}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - p\mathbf{I}$  est le tenseur des contraintes dans le fluide. Cependant, la pénalisation crée une couche limite artificiellement épaisse autour du solide qui n'améliore pas en pratique la convergence numérique du schéma.

Ce type de pénalisation a été utilisé pour traiter l'équation des ondes [111] et Navier-Stokes compressible [13]. Dans ce dernier cas, la pénalisation porte sur la quantité de mouvement et l'énergie dans le solide :

$$\frac{\partial \mathbf{w}_\eta}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{f}(\mathbf{w}_\eta)) + \frac{1}{\eta} \mathbf{1}_{\Omega_s} \begin{pmatrix} 0 \\ \rho_\eta u_\eta \\ \rho_\eta v_\eta \\ \rho_\eta (E_\eta - E_{\Omega_s}) \end{pmatrix} = \frac{1}{Re} \operatorname{div}(\mathbf{f}_V(\mathbf{w}_\eta)) \quad (2.35)$$

où  $\mathbf{f}_V$  désigne le flux visqueux, et  $E_{\Omega_s} = c_V T_{\Omega_s}$  est une "énergie" du solide à la température fixée  $T_{\Omega_s}$ . La condition au bord simulée est alors une condition de vitesse nulle au bord ( $\mathbf{u} = \mathbf{0}$  sur  $\partial \Omega_f$ ) ainsi qu'une condition de Dirichlet en température ( $T = T_{\Omega_s}$  sur  $\partial \Omega_f$ ).

Si les termes de pénalisation étaient traités de façon explicite, la restriction sur le pas de temps serait du type  $\Delta t \leq C\eta$ . Cette restriction n'est pas souhaitée car  $\eta$  est destiné à être pris petit. En revanche, un traitement implicite des termes de pénalisation conduit à la stabilité sous les conditions CFL du schéma originel (sans pénalisation). La résolution implicite de (2.35) est efficace car la résolution est totalement locale et ne fait pas intervenir le calcul (explicite et coûteux) des flux numériques.

Notons que, par définition, les méthodes de pénalisation n'assurent pas une conservation exacte à l'interface fluide-solide. Si cette non-conservation peut ne pas

## 16 Chapitre 2. Méthodes numériques pour l'interaction fluide-structure

être gênante pour l'interaction avec un fluide incompressible ou à bas Mach, elle risque de diffuser artificiellement les chocs impactant le solide pour un fluide compressible.

**Méthodes de couplage Euler-Lagrange** Les méthodes de couplage Euler-Lagrange ont été développées principalement pour les codes d'hydrodynamique compressible et incompressible (impacts de vagues sur des bateaux par exemple) [6]. Un maillage solide lagrangien est superposé à un maillage fluide eulérien fixe. Le principe est alors de pénaliser la différence de vitesse entre l'interface solide et le fluide. L'approche utilisée dans [6] consiste à considérer les nœuds à l'interface solide comme "esclaves" de nœuds "maîtres" constitués de particules fluides virtuelles (Figure 2.1). Ces nœuds sont liés par des ressorts de raideur  $k$  qui pénalisent la pénétration de fluide dans le solide.

Pour chaque nœud, on définit  $\mathbf{d}^n$  la profondeur de pénétration au temps  $n\Delta t$ . Celle-ci est incrémentée à chaque pas de temps par la violation de la condition de vitesse relative nulle à l'interface pendant le pas de temps :

$$\mathbf{d}^{n+1} = \mathbf{d}^n + \Delta t(\mathbf{v}_f^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{v}_s^{n+\frac{1}{2}}) \quad (2.36)$$

où  $\mathbf{v}_s^{n+\frac{1}{2}}$  et  $\mathbf{v}_f^{n+\frac{1}{2}}$  sont respectivement les vitesses de l'interface au nœud esclave et du fluide au nœud maître. La pénétration permet alors de calculer les forces entre le fluide et le solide. Cette force n'agit que si le solide comprime le fluide, afin d'éviter la formation de vide. S'il y a compression, la force  $\mathbf{F}_s$  appliquée sur le nœud esclave solide et la force  $\mathbf{F}_f$  appliquée sur le fluide prennent la forme suivante au temps  $n\Delta t$  :

$$\mathbf{F}_s = -\mathbf{F}_f = k\mathbf{d}^n \quad (2.37)$$

Tout le succès de la méthode est alors conditionné par le choix de la raideur  $k$  du ressort. Afin d'éviter la fuite de fluide à travers le solide, il est important de prendre  $k$  suffisamment grand ; en revanche, si  $k$  est trop grand, le problème devient raide et impose une restriction du pas de temps  $\Delta t$ . Il est également possible qu'en cas d'impact, des oscillations de l'interface apparaissent. Le choix de  $k$  dépend donc fortement du problème considéré, ce qui est une faiblesse majeure de la méthode. Une possibilité explorée par [6] est d'ajouter un amortissement visqueux  $C = \xi\sqrt{kM}$  où  $M$  est la masse équivalente du système nœud maître - nœud esclave et  $\xi$  le coefficient d'amortissement.  $\xi$  est pris égal à 2 pour être à un amortissement critique optimal. Il est à noter que cet amortissement qui atténue les oscillations numériques peut également amortir des oscillations physiques si la raideur du ressort  $k$  est trop proche des raideurs physiques du matériau.

Il serait également possible d'imposer des conditions de contact cinématique en forçant  $\mathbf{v}_s^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{v}_f^{n+\frac{1}{2}}$ . Cependant, si ces conditions conservent bien la quantité de mouvement totale, elles ne conservent pas l'énergie totale du système, engendrant ainsi une mauvaise capture des phénomènes physiques en jeu.

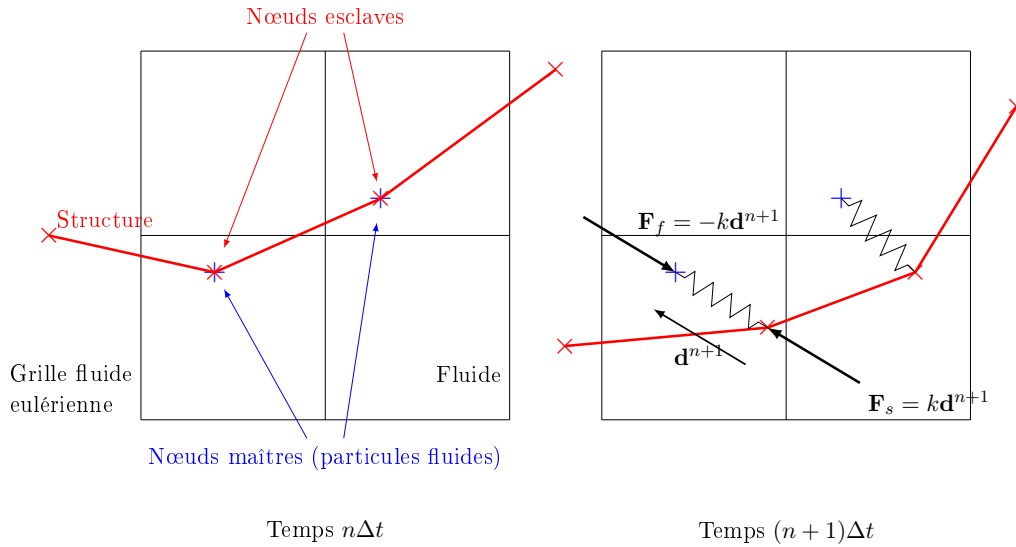


FIG. 2.1 – Schéma de l'algorithme de couplage Euler-Lagrange

### 2.3.2.3 Méthodes par multiplicateurs de Lagrange

Nous avons vu que les méthodes de pénalisation assurent le couplage fluide-structure en pénalisant la pénétration du fluide dans le solide, en général en imposant faiblement la condition de vitesse nulle à la paroi du solide. Une autre possibilité est de forcer cette condition par des multiplicateurs de Lagrange dans les équations du fluide. Cette approche a notamment été adoptée par [55, 56, 144].

La méthode *Fictitious domain* a été développée par Glowinski *et al.* [55] afin d'imposer des conditions aux limites de Dirichlet dans des équations aux dérivées partielles elliptiques. Pour l'interaction fluide-structure, la méthode consiste à remplir le domaine solide d'un état fluide virtuel, à relaxer la condition de mouvement de corps rigide du solide indéformable, puis à imposer le mouvement de corps rigide par multiplicateurs de Lagrange dans la formulation variationnelle du fluide. Cette approche a été étendue à l'interaction avec un solide déformable par Yu [144]. Les problèmes solide et fluide sont alors couplés par la pseudo-force que constituent les multiplicateurs de Lagrange, et il faut résoudre un problème supplémentaire sur les multiplicateurs de Lagrange dans le solide. La procédure peut être menée de façon totalement explicite en temps. On peut rapprocher cette méthode de la méthode IBM, avec la différence notable que les pseudo-forces sont intégrées directement à la formulation variationnelle et ne cherchent pas à approcher l'opérateur de Dirac mais reçoivent une interprétation comme multiplicateurs de Lagrange de la condition de non-pénétration à l'interface.

### 2.3.2.4 Méthodes multi-domaines

Les méthodes multi-domaines n'utilisent pas à proprement parler de domaines fictifs, car elles suivent plutôt les idées des algorithmes de décomposition de domaine. Cependant, leur capacité à simuler un solide mobile sur une grille globalement fixe rappelle l'approche par domaines fictifs. Plusieurs méthodes ont été proposées dans la littérature, en particulier pour l'interaction entre un écoulement compressible ou incompressible et des solides rigides mobiles ou fixes [103, 135, 87]. Les applications fluides recherchées dans ces travaux sont principalement le calcul d'écoulements compressibles visqueux autour de corps solides et le calcul de la sédimentation de particules solides dans un fluide incompressible. Nous donnons ici quelques détails sur ces méthodes.

Tidriri et Le Tallec [135, 87] partent du constat que l'écriture des équations de Navier-Stokes compressible sous forme conservative et les méthodes Volumes Finis associées sont très efficaces pour capturer les bonnes relations de choc dans un fluide compressible, mais induisent des couches limites trop importantes au voisinage des parois. En revanche, une écriture sous forme non-conservative permet d'approcher correctement la condition de vitesse nulle à la paroi mais peine à assurer la vérification des relations de Rankine-Hugoniot dans un choc. L'idée est alors de calculer un couplage entre deux domaines fluides : un vaste domaine où l'approche conservative est utilisée (solution globale), et un domaine plus restreint autour du solide où le modèle non-conservatif est utilisé (solution locale). Les deux domaines se recouvrent donc. La condition de Dirichlet sur la vitesse à la paroi solide est utilisée uniquement sur le domaine local, et est remplacée par une condition de Neumann pour le domaine global (égalité des flux à la paroi entre la solution locale et la solution globale). Une condition de Dirichlet impose la continuité des solutions globale et locale à l'interface entre les deux domaines. [87] montre la convergence d'un couplage explicite global-local dès que le recouvrement des domaines a une taille suffisante.

La méthode *Fat Boundary* développée par Maury [103] utilise une approche similaire pour la résolution d'un problème de Poisson dans un domaine à trous. Un maillage non-structuré adapté à l'interface fluide-solide entoure le solide, tandis que le domaine global est discrétisé par un maillage cartésien, comme représenté sur la figure 2.2. Une telle approche permet d'utiliser des algorithmes rapides (transformée de Fourier rapide, . . .) pour la résolution du domaine global. Des conditions de saut à la paroi solide, à la façon de [92], sont incorporées dans la formulation Éléments Finis du domaine local. La résolution du problème se fait par itération sur la résolution des problèmes local et global avec conditions de Dirichlet et Neumann à l'interface.

Cette approche nous semble pouvoir être étendue à un solide déformable par l'application de méthodes de type ALE sur le domaine local afin de prendre en compte la déformation du solide. Elle se prête naturellement à la simulation du mouvement d'un nombre arbitraire de solides dans un fluide, tant que les domaines locaux les entourant ne se recouvrent pas. [103] note d'ailleurs que si les particules solides sont toutes identiques, une seule matrice de masse Éléments Finis doit être construite

### 2.3. Méthodes de discrétisation spatiale du couplage fluide-structure 19

et inversée pour l'ensemble des domaines locaux. En revanche, si le solide se fissure ou si les particules entrent en contact, le maillage local doit être reconstruit, ce qui revient aux difficultés engendrées par les méthodes ALE. Nous ne nous tournons donc pas vers ce type de formulation.

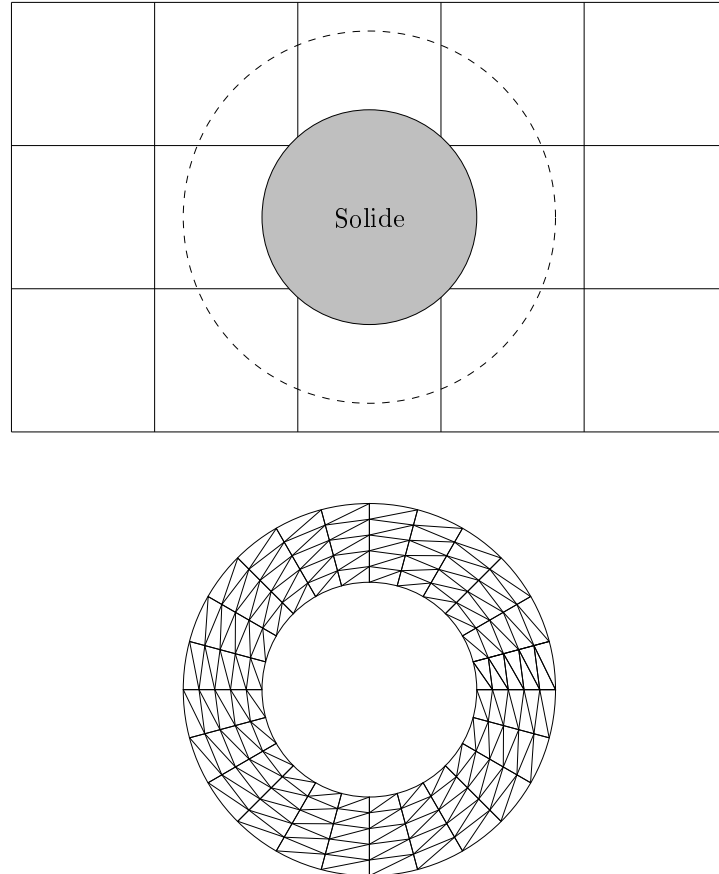


FIG. 2.2 – Schéma de l'algorithme *Fat Boundary Method* : maillage global et maillage local

#### 2.3.2.5 Méthodes d'interpolation

Les méthodes d'interpolation diffèrent des méthodes de pénalisation exposées précédemment par le fait que l'accent n'est plus mis sur l'échange de forces entre le solide et le fluide, mais sur la vérification des conditions aux limites à l'interface entre le fluide et le solide. Elles trouvent leur origine dans le travail de Mohd-Yusof [106] sur le "direct forcing". D'autres types d'approches, notamment ceux s'apparentant à la méthode *Ghost Fluid* de Fedkiw [42], ont suivi la même voie pour imposer les conditions aux limites sans pénalisation.

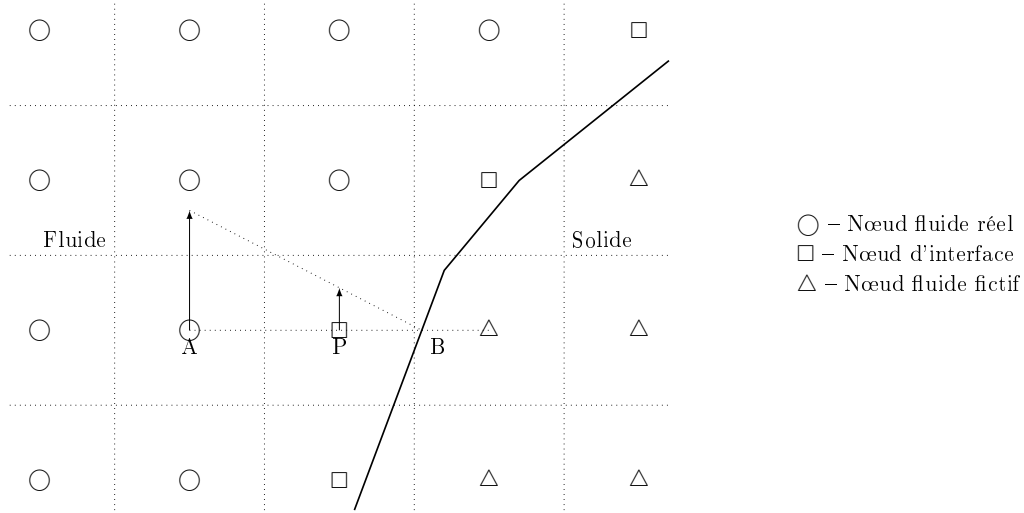


FIG. 2.3 – Schéma de l'algorithme Direct Forcing

**Méthode Direct Forcing** Le principe de la méthode Direct Forcing consiste à écrire le schéma sur la vitesse d'un fluide dans une méthode Immersed Boundary pour Navier-Stokes, avec une force  $\mathbf{f}$  de forçage :

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla p + \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{u} + \mathbf{f} \quad (2.38)$$

Si l'on veut imposer  $\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{v}^{n+1}$  à l'interface avec le solide, où  $\mathbf{v}$  est la vitesse de l'interface, il suffit d'imposer :

$$\mathbf{f} = \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{u} + \frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} \quad (2.39)$$

dans un voisinage de l'interface. En pratique, la référence à une force  $\mathbf{f}$  est éliminée : la vitesse est simplement modifiée dans un voisinage de la paroi de façon à assurer la vérification des conditions aux limites. Si la paroi est alignée avec le maillage, cela est possible en modifiant directement la valeur de la vitesse à la paroi. Si ce n'est pas le cas, la vitesse est modifiée dans les cellules à l'intérieur du domaine fluide adjacentes à la paroi, comme représenté sur la figure 2.3. Le stencil du schéma numérique utilisé pour le fluide s'étendant en général à l'intérieur du domaine solide, il est en général décidé d'étendre les valeurs de vitesse du fluide aux cellules fictives à l'intérieur du domaine solide.

La méthode originelle de Mohd-Yusof [106], reprise dans [33], consiste à prendre une vitesse relative à la paroi nulle, à interpoler linéairement la vitesse dans la couche de nœuds d'interface, puis à utiliser une estimation de la diffusion  $\Delta \mathbf{u}$  afin d'avoir un profil de vitesse compatible avec les conditions de Dirichlet sur la vitesse au bord. Les vitesses virtuelles dans le solide sont prises comme l'opposée de l'interpolation linéaire de la vitesse au point symétrique du nœud par rapport à la paroi.

### 2.3. Méthodes de discrétisation spatiale du couplage fluide-structure 21

[33] montre que l'approche par interpolation est plus précise que l'utilisation d'une approximation de la paroi en marches d'escalier ou de la pondération des nœuds par la fraction volumique occupée par le solide.

Ce principe a été utilisé pour des simulations incompressibles à nombre de Reynolds élevé en ajoutant une loi de paroi *ad hoc* afin d'avoir le bon profil de vitesse dans la couche limite, en combinaison avec des modèles de turbulence RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes) [76, 75] et LES (Large eddy simulation) [133]. La méthode a également été étendue aux fluides compressibles visqueux [28].

**Méthode Ghost Fluid** La méthode Ghost Fluid (GFM) a été initialement développée [42] pour traiter l'interaction de plusieurs matériaux compressibles, fluides ou solides, n'ayant pas nécessairement les mêmes lois de comportement, séparés par des interfaces. Ces interfaces sont en général suivies par des méthodes de type "Level set" qui décrivent l'interface comme la courbe des zéros d'une fonction  $\phi$ . L'idée à l'origine de la méthode GFM est le fait que l'interface est, du point de vue du fluide, une discontinuité de contact. La pression  $p$  et la vitesse normale  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$  sont donc continues à travers l'interface, tandis que l'entropie et la vitesse tangentielle peuvent être discontinues à travers l'interface. Ces conditions aux limites sont alors imposées par des techniques d'extrapolation des valeurs sur des cellules virtuelles.

Le principe de la méthode GFM est présenté sur la figure 2.4 en une dimension d'espace. De part et d'autre de l'interface existent deux types de valeurs pour la pression, la vitesse et l'entropie du fluide : une valeur réelle prise par le fluide présent de ce côté de l'interface, et une valeur virtuelle utilisée par le stencil de la méthode pour l'autre fluide de l'interface. Pour fixer les idées, considérons le matériau 1 à gauche de l'interface, et le matériau 2 à droite de l'interface. On construit donc des cellules virtuelles, les "cellules fantômes", pour le matériau 1 à droite de l'interface. L'idée originelle consiste à imposer aux cellules fantômes du matériau 1 la vitesse et la pression de leurs homologues du matériau 2, et la densité (ou alternativement, l'entropie) de la plus proche cellule réelle du matériau 1. Cependant, comme cela est montré dans [109, 104], cette approche peut engendrer une densité localement trop forte ou trop peu élevée au voisinage de l'interface après l'interaction d'une onde de choc forte avec l'interface. Menikoff [104] explique le phénomène par l'épaisseur numérique du choc due à la viscosité numérique, et Noh [109] propose d'introduire un flux thermique artificiel à l'interface pour compenser l'absence de diffusion thermique dans le modèle qui rend de tels comportements numériques possibles. Une autre approche est proposée par Fedkiw *et al.* [42, 43] en introduisant un mécanisme d'évaluation de l'entropie dans les cellules fantômes non pas à l'interface, mais plus loin à l'intérieur du fluide réel. La valeur de l'entropie est également modifiée à la cellule la plus proche de l'interface afin d'éviter un surchauffage au voisinage de l'interface. Cette dernière approche est présentée sur la figure 2.4.

En deux ou trois dimensions d'espace, l'extrapolation des valeurs des cellules fantômes pour le matériau 1 se fait par imposition des valeurs du matériau 2 pour



## 22 Chapitre 2. Méthodes numériques pour l'interaction fluide-structure

les quantités continues à l'interface,  $p$  et  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$  (avec éventuellement interpolation si les maillages ne coïncident pas de part et d'autre), et par imposition des valeurs symétriques par rapport à la paroi pour le matériau 1 (avec interpolation à partir des valeurs aux nœuds) pour les quantités discontinues, l'entropie  $S$  et la vitesse tangentielle  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{t}$ . Différents types d'interpolation sont envisageables selon le type de comportement des matériaux [41].

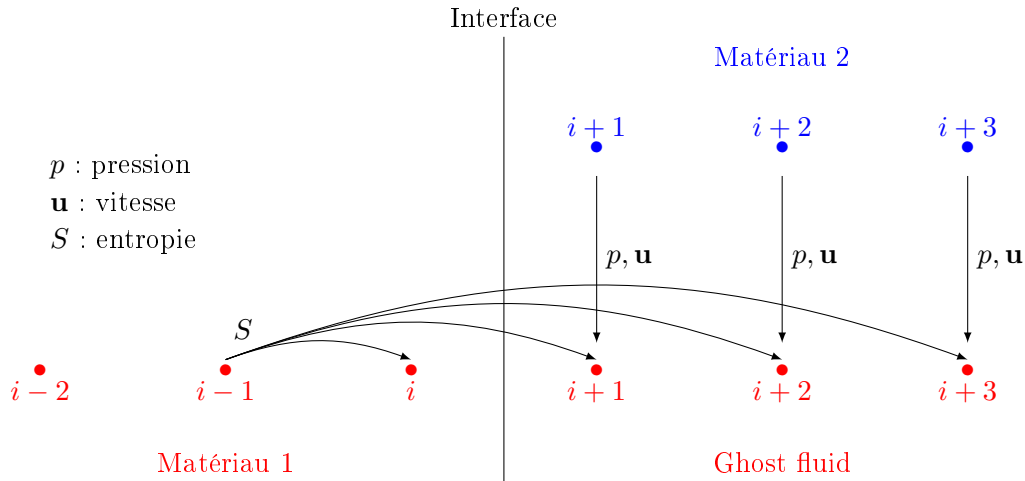


FIG. 2.4 – Schéma de l'algorithme Ghost Fluid

Des modifications de la méthode GFM ont été proposées. Parmi celles-ci, la méthode Ghost Fluid Method for the Poor (GFMP) [39, 2] propose de remplacer le stockage coûteux d'une couche de cellules fantômes autour de l'interface par le calcul de flux distincts pour les deux matériaux à l'interface. L'analyse d'Abgrall et Karni [2] se fonde sur le fait que la suppression des oscillations de pression à l'interface par la méthode GFM en comparaison avec d'autres méthodes multimatériaux tire son origine de l'utilisation d'une seule loi de comportement pour le calcul des flux dans chacun des deux matériaux. Il n'y a donc aucune loi de mélange à l'interface. Par ailleurs, ils notent, à l'instar de [42], que la conservation exacte de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie n'est pas assurée par la méthode GFM. L'idée consiste alors à abandonner la conservation exacte de l'énergie du système tout en assurant la conservation exacte de la masse et de la quantité de mouvement. À l'interface, il existe alors un flux d'énergie pour le matériau 1 et un flux d'énergie pour le matériau 2 qui sont distincts et assurent l'absence d'oscillations de la pression. Les flux de masse et de quantité de mouvement sont en revanche égaux à l'interface. La méthode est alors presque conservative. [39] étend cette méthode au calcul d'explosions sous-marines où de fortes discontinuités de pression et de densité sont rencontrées. La principale avancée est l'utilisation d'un solveur de Riemann exact pour le problème de Riemann diphasique unidimensionnel à l'interface. Cette caractéristique permet la prise en compte de fortes discontinuités. D'autres

### 2.3. Méthodes de discrétisation spatiale du couplage fluide-structure 23

variantes de la méthode GFM existent, par exemple la Modified Ghost Fluid Method (MGFM) [97] qui consiste à résoudre un problème de Riemann à l'interface pour prédire l'état à l'interface et définir les états des cellules fantômes, ou encore la real Ghost Fluid Method (rGFM) [138] qui cherche à mieux prédire l'impédance de l'interface lors de l'interaction avec un choc en calculant l'état de la cellule réelle la plus proche de l'interface par un problème de Riemann et en calculant les états des cellules fantômes par un problème d'advection.

La méthode GFM est au départ conçue pour la résolution de problèmes multiphasiques fluides compressibles, mais a également été utilisée pour traiter des problèmes d'interaction fluide-structure compressible [51, 7, 124, 140, 41, 21]. Le principe de cellules fictives dans le solide permettant l'utilisation de schémas numériques à stencil large est conservé par toutes ces méthodes. [7] étudie l'impact de la méthode d'extrapolation des valeurs des cellules fantômes à l'intérieur du solide sur la précision du schéma couplé. [140] apporte une amélioration sur le traitement des conditions de transmission fluide-structure par la résolution exacte d'un problème de Riemann fluide-structure unidimensionnel à la surface pour calculer la vitesse et la pression à la paroi.

**Avantages et inconvénients de ces méthodes** Un des avantages des méthodes d'interpolation pour l'interaction fluide-structure tient au fait que le couplage entre un code solide lagrangien et un code fluide sur maillage structuré peut se faire de manière totalement transparente. Il suffit de modifier les valeurs de cellules dans ou à l'interface du solide, et d'appliquer une force de pression sur la paroi solide pour coupler le fluide et le solide. Aucune hypothèse sur la loi de comportement du fluide ou du solide n'est nécessaire, contrairement aux méthodes de Frontières Immergées classiques qui supposent en général un comportement compatible avec les forces de pénalisation appliquées. La simplicité de ces méthodes est donc un de leurs atouts.

De plus, une grande flexibilité est possible dans le choix de la méthode d'interpolation suivant le type de problème à traiter. Nous avons vu qu'il est possible de prendre des lois linéaires simples de réflexion par rapport à l'interface aussi bien que des interpolations complexes modélisant des lois de paroi pour obtenir une bonne approximation de la couche limite dans le cas d'un fluide visqueux. L'interpolation est un moyen simple de monter en ordre à proximité de l'interface.

En revanche, un inconvénient majeur de ces méthodes est qu'elles n'assurent pas la conservation de la plupart des quantités physiques. En général, elles ne conservent pas la masse fluide qui peut pénétrer numériquement dans le solide. Cependant, il semble que la perte de masse diminue avec le raffinement du maillage et que le type d'interpolation utilisée puisse contribuer à la réduire [7, 42]. De plus, les développements quasi-conservatifs de la méthode GFMP [39, 2] assurent la conservation de toutes les quantités physiques sauf de l'énergie. Cependant, cette dernière approche consiste à ne plus se contenter de valeurs fictives pour le fluide dans le solide mais à imposer des flux à l'interface dans une formulation Volumes Finis. Une telle orien-

## 24 Chapitre 2. Méthodes numériques pour l'interaction fluide-structure

tation nous évoque un lien évident avec les méthodes conservatives développées par Colella *et al.* [112], sur lesquelles nous revenons dans la section suivante.

### 2.3.2.6 Méthodes conservatives

Les méthodes conservatives consistent en une approche de type Volumes Finis de l'interaction fluide-structure pour des fluides compressibles. Elles trouvent leur origine dans les travaux de Noh sur le couplage entre une méthode lagrangienne pour le solide et une méthode Volumes Finis eulérienne pour le fluide [108]. Elles assurent une conservation exacte de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie du système par la discrétisation spatiale du schéma.

Le principe de la méthode est le suivant : les flux numériques entre cellules fluides sont calculés sur toute la grille eulérienne fluide, sans prendre en compte la présence du solide, puis des corrections sont apportées à l'intégration des flux dans la formulation fluide afin d'assurer une conservation discrète exacte des quantités conservatives à la paroi solide. La principale difficulté tient au fait que cette formulation fait intervenir des cellules coupées dont le volume est arbitrairement petit. Si l'on écrit la conservation exacte de la quantité  $w$  sur une cellule fluide coupée, dont le taux d'occupation par du solide au temps  $n\Delta t$  est noté  $\alpha^n$  et le bilan sur la cellule pendant le pas de temps est  $\Delta w^{n,n+1}$  :

$$(1 - \alpha^{n+1})w^{n+1} = (1 - \alpha^{n+1})w^n + \Delta w^{n,n+1}, \quad (2.40)$$

on voit immédiatement que pour des cellules de volume fluide petit ( $\alpha^{n+1}$  proche de 1), il faut nécessairement être extrêmement précis dans l'évaluation du bilan  $\Delta w^{n,n+1}$  ou appliquer un traitement spécial à la cellule, sans quoi le schéma numérique sera instable. Cette instabilité est intrinsèquement liée au respect de la condition CFL classique liant le pas de temps et le pas d'espace dans les schémas numériques explicites pour les systèmes hyperboliques. Classiquement, si  $c$  désigne la célérité maximale des ondes dans le milieu considéré, et  $\Delta t$  et  $h$  sont les pas de temps et d'espace respectivement, il faut imposer :

$$\Delta t \leq \frac{h}{c} \quad (2.41)$$

Plus généralement, sur un maillage non-structuré, la stabilité prend la forme :

$$c\Delta t \leq \frac{V}{P}, \quad (2.42)$$

où  $V$  et  $P$  désignent respectivement le volume et le périmètre de la maille. Ici, le même type de condition est valable en remplaçant la taille caractéristique du maillage en espace  $h$  par la taille caractéristique minimale des cellules coupées  $(1 - \alpha)h$ , ce qui impose :

$$\Delta t \leq \frac{(1 - \alpha)h}{c} \quad (2.43)$$

### 2.3. Méthodes de discrétisation spatiale du couplage fluide-structure 25

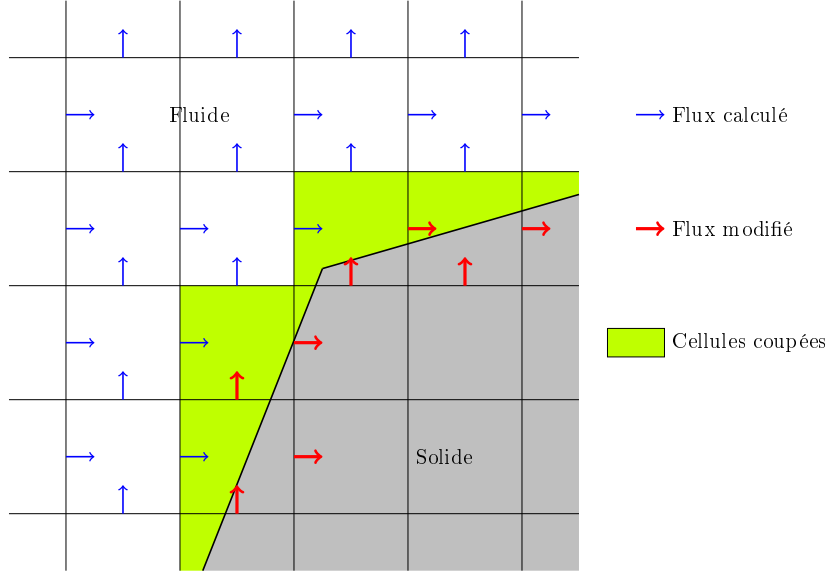


FIG. 2.5 – Schéma de l'algorithme Embedded Boundaries

Cette condition permet de stabiliser le schéma mais au prix d'une diminution très coûteuse du pas de temps. Il s'agit donc de stabiliser le schéma sans avoir à réduire le pas de temps par rapport à la condition CFL classique pour le fluide.

Deux principaux types d'approches ont été adoptés pour assurer la conservation et la stabilité du schéma sans réduire le pas de temps. La première, développée initialement par Colella *et al.* [112, 22, 105], consiste à calculer un état du fluide sans prise en compte de la présence du solide, puis à évaluer le défaut de conservation dans chaque cellule coupée. Cette quantité est alors redistribuée en partie sur la cellule coupée et en partie sur les cellules voisines. La redistribution se fait sur la base d'une pondération par la masse de fluide effectivement présente dans chacune des cellules. L'autre approche consiste à calculer directement l'état conservatif donné par le bilan discret sur la cellule [36, 70], et est présentée sur la figure 2.5. En notant  $f_d$ ,  $f_g$ ,  $f_h$  et  $f_b$  les flux à droite, gauche, haut et bas respectivement, et  $\kappa$  la proportion des faces de la cellule occupée par du solide :

$$\Delta w^{n,n+1} = \Delta t \left( \frac{1 - \kappa_l}{\Delta x} f_l - \frac{1 - \kappa_r}{\Delta x} f_r + \frac{1 - \kappa_b}{\Delta y} f_b - \frac{1 - \kappa_t}{\Delta y} f_t \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta y} X_{\mathcal{F}} + \sum_{\mathcal{F}} \Delta w_{\mathcal{F}}^{n,n+1} \quad (2.44)$$

où  $X_{\mathcal{F}}$  désigne le travail des forces de pression à la paroi solide  $\mathcal{F}$  et  $\Delta w_{\mathcal{F}}^{n,n+1}$  désigne la quantité balayée par le mouvement de la paroi pendant le pas de temps, on peut vérifier que le bilan discret de masse, de quantité de mouvement et d'énergie est exact. Afin d'éviter l'instabilité du schéma pour les petites cellules coupées, [36] suggère de fusionner ces cellules avec une voisine entièrement fluide, tandis que [70]

propose le mélange conservatif de la cellule dans la direction de la normale extérieure au solide. Cette approche est schématisée sur la figure 2.6.

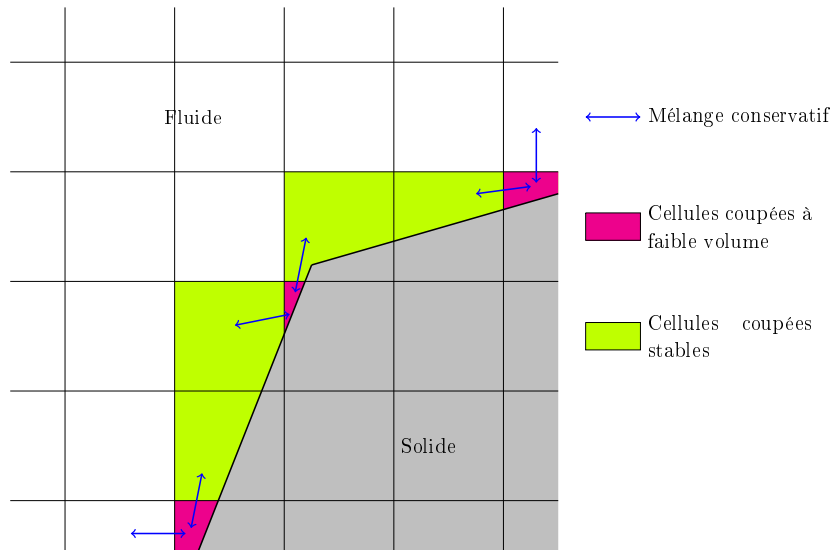


FIG. 2.6 – Stabilisation de l'algorithme Embedded Boundaries à pas de temps fixé

Ces approches sont limitées par le fait qu'il n'est pas possible de traiter un solide ayant une épaisseur inférieure à une cellule fluide. Par ailleurs, la procédure de mélange avec une cellule voisine n'assure pas la stabilité dans le cas où une cellule coupée n'a pas de cellule voisine de volume fluide suffisant [54]. Ce cas de figure peut se produire si deux parois solides occupent une même cellule fluide en vis-à-vis. Cette situation peut donc potentiellement se présenter souvent dans la simulation de phénomènes de fissuration ou de contact entre solides. [112, 22, 105] limitent l'impact de cette question en combinant la méthode conservative avec des approches de raffinement de maillage adaptatif (Adaptive mesh refinement ou AMR) afin d'avoir un maillage fin à proximité des interfaces fluide-solide. Cette approche permet d'obtenir un maillage suffisamment fin pour que les parois solides soient séparées par plus d'une cellule fluide, sans mettre en péril la capacité de simulation par le temps de calcul qu'impliquerait un maillage raffiné uniforme. Enfin, la méthode de mélange proposée par [70] peut se heurter à l'incapacité de définir une normale extérieure au solide dans une cellule occupée par plusieurs parois solides de directions différentes.

Notons que la combinaison de la propriété de conservation avec des propriétés simples de consistance (conservation d'un état fluide au repos autour d'un solide) impose la forme de l'équation (2.44). Les deux approches aboutissent donc au même résultat, si ce n'est éventuellement dans la procédure de mélange conservatif des petites cellules avec les cellules voisines. L'approche adoptée par les méthodes conservatives étant particulièrement adaptée au problème que nous souhaitons traiter, nous utiliserons ces méthodes dans la suite de notre travail, avec des modifications apportées à la procédure de mélange conservatif des petites cellules.

## 2.4 Schémas d'intégration en temps pour le couplage fluide-structure

Les problèmes d'interaction fluide-structure font intervenir un fluide et une structure couplés par des conditions aux limites au bord reliant les vitesses et contraintes dans le fluide et le solide à l'interface  $\Sigma$  les séparant. Dans le cas d'un fluide visqueux, ces conditions sont en général les conditions de non-glissement, qui s'écrivent comme des conditions de continuité de la vitesse et de la contrainte normale :

$$\mathbf{u}_f = \mathbf{u}_s, \quad \sigma_f \cdot \mathbf{n}_f + \sigma_s \cdot \mathbf{n}_s = \mathbf{0} \quad \text{sur } \Sigma, \quad (2.45)$$

et pour un fluide non visqueux, on écrit les conditions de glissement parfait à l'interface, qui donnent la continuité de la vitesse normale et de la contrainte normale :

$$\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_f + \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}_s = 0, \quad \sigma_f \cdot \mathbf{n}_f + \sigma_s \cdot \mathbf{n}_s = \mathbf{0} \quad \text{sur } \Sigma, \quad (2.46)$$

où  $\mathbf{u}_s$  et  $\mathbf{u}_f$ ,  $\mathbf{n}_s$  et  $\mathbf{n}_f$ ,  $\sigma_s$  et  $\sigma_f$  désignent respectivement la vitesse, la normale extérieure sortante et la contrainte du solide et du fluide.

Deux approches sont possibles pour satisfaire la condition de bord (2.45) ou (2.46) : une approche monolithique ou une approche partitionnée. L'approche monolithique consiste à résoudre à l'aide d'un solveur unique le fluide et la structure, ce qui nécessite en général l'inversion d'une matrice fluide-structure globale. Une telle approche peut utiliser une formulation ALE [65], une formulation eulérienne pour le fluide et le solide [40] ou encore des méthodes de domaine fictif [10]. L'approche monolithique satisfait naturellement la condition d'interface (2.45) ou (2.46), mais rend le code de simulation moins modulaire. En effet, le couplage est écrit "en dur" dans le programme, et il est nécessaire de changer entièrement une partie du code si l'on veut changer le comportement du fluide ou du solide. De plus, des programmes extrêmement efficaces ont été développés indépendamment pour la simulation du fluide et du solide, et il est souhaitable de pouvoir utiliser ces techniques. C'est tout l'intérêt de l'approche partitionnée.

L'approche partitionnée consiste à résoudre le fluide et le solide à l'aide de deux solveurs différents. Les conditions aux limites (2.45) ou (2.46) ne sont alors pas nécessairement vérifiées à chaque pas de temps. Si les conditions sont vérifiées, on dit que le schéma est *fortement couplé*. Au contraire, si elles ne sont pas exactement vérifiées à chaque pas de temps, le schéma est dit *faiblement couplé*. En général, un schéma fortement couplé sera implicite, tandis que les schémas explicites seront faiblement couplés. En raison du coût en temps de calcul des schémas implicites dû à la résolution itérative du problème aux limites fluide-solide, des schémas de couplage semi-implicites ont été développés afin d'éviter les instabilités associées aux schémas explicites. Nous allons détailler ces différentes formes de schémas de couplage dans les sections suivantes.

### 2.4.1 Schémas de couplage explicites

Les schémas de couplage explicites sont la méthode partitionnée la plus naturelle pour traiter l'interaction fluide-structure. Le solide et le fluide sont avancés à tour de rôle, la pression du fluide sur l'interface imposant une contrainte sur le solide, et le mouvement du solide induit par ces contraintes entraînant la déformation du domaine fluide. Les conditions de continuité de la vitesse et de la contrainte à l'interface ne sont donc pas nécessairement assurées à chaque pas de temps.

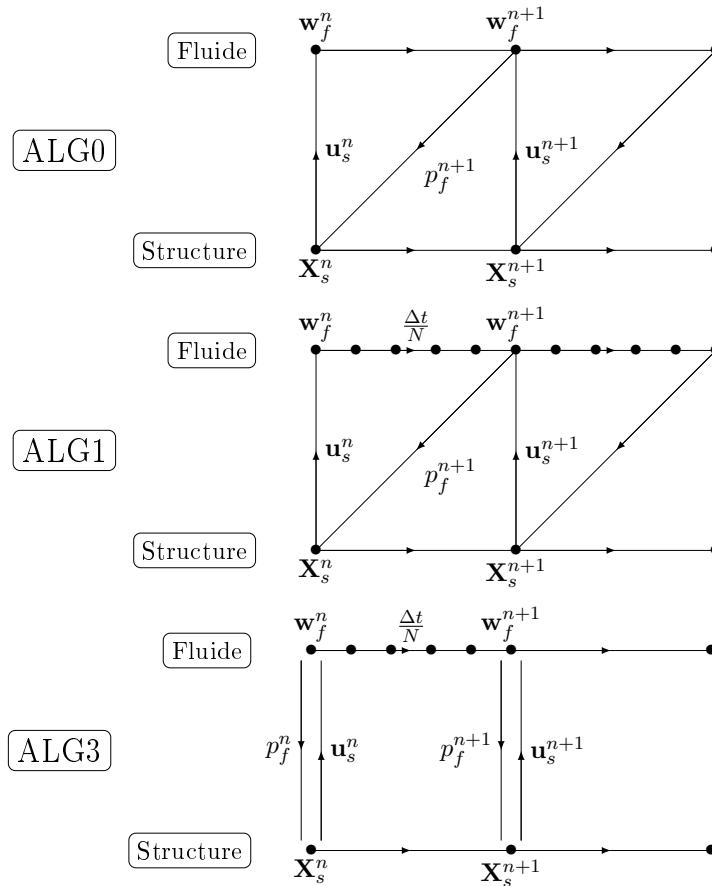


FIG. 2.7 – Différents algorithmes de couplage explicites

Plusieurs algorithmes d'intégration en temps différents sont possibles, suivant que le fluide ou le solide est calculé en premier, ou encore selon le pas de temps auquel sont pris le déplacement du solide ou la pression du fluide à l'interface. Nous indiquons sur la figure 2.7 quelques exemples d'algorithmes présentés par [118] pour la simulation de problèmes aéroélastiques (fluide compressible non visqueux). Il est possible de faire le choix d'un schéma décalé (*staggered*) simple, à l'instar de l'algorithme ALG0. Un autre choix consiste à prendre en compte les échelles différentes des pas de temps dans le fluide et le solide (liées aux disparités de vitesse du son dans les matériaux ainsi qu'aux tailles de maillage utilisées) et sous-cycler la

résolution du fluide ou du solide afin de ne coupler qu'au pas de temps le plus large. C'est le choix qui est fait dans les algorithmes ALG1 et ALG3.

Comme les conditions à l'interface ne sont pas assurées, il est possible que le schéma numérique induise une dérive de l'énergie du système au cours de la simulation. En effet, pendant le pas de temps  $[n\Delta t, (n+1)\Delta t]$ , le travail des forces solides à l'interface  $\int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} \mathbf{u}_s \cdot \boldsymbol{\sigma}_s \cdot \mathbf{n}_s$  ne s'annule pas nécessairement avec le travail des forces fluides  $\int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} \mathbf{u}_f \cdot \boldsymbol{\sigma}_f \cdot \mathbf{n}_f$ . La stabilité du schéma numérique étant intrinsèquement liée aux bornes sur l'énergie du système, le schéma couplé peut être instable alors que chacun des schémas fluide et solide est stable. La stabilité ou l'instabilité dépend fortement de l'algorithme de couplage utilisé. [118, 116, 117] discutent cette problématique en montrant son influence sur la prédiction du phénomène de flottement en aéroélasticité. Nous renvoyons à [38] pour une revue plus complète des schémas de couplage explicites avec un fluide compressible.

La situation est plus critique dans le cadre de l'interaction avec un fluide incompressible. Comme le suggère [86], un effet de masse ajoutée peut intervenir dans le cas où les densités du fluide et du solide sont comparables et que la vitesse de l'écoulement est faible. [18] a montré, sur un cas simplifié (fluide à écoulement potentiel, structure élastique linéaire fine) mais présentant les caractéristiques importantes d'un problème fluide-structure, un résultat de stabilité faisant intervenir le rapport de densité entre le solide et le fluide ainsi qu'un paramètre géométrique décrivant le rapport entre l'épaisseur de la structure et la taille du problème. Le résultat montre que le schéma explicite devient instable quand le rapport de densité  $\frac{\rho_s}{\rho_f}$  tend vers 0 ou quand la structure devient très élancée, et ce, indépendamment du pas de temps employé. Notons également que l'incompressibilité semble jouer un rôle important dans les instabilités observées [45]. Cela pourrait être lié au fait que, contrairement au cas d'un fluide compressible, la vitesse de propagation de l'information dans le fluide incompressible est infinie, et que le problème devient ainsi non-local.

Burman et Fernandez [15, 16] ont proposé une méthode explicite pour le traitement de l'interaction fluide-structure incompressible. Les conditions aux limites sont traitées dans un sens faible, en suivant la formulation de la méthode de Nitsche (voir par exemple [11, 63]). Cette méthode consiste en l'ajout dans la formulation variationnelle d'un terme de pénalisation consistant avec les équations, avec des paramètres de pénalisation choisis de façon optimale selon le problème. Le couplage avec la méthode de Nitsche permet d'obtenir des estimées sur l'énergie pour la semi-discrétisation en espace en raison de son caractère dissipatif, sous des conditions sur les paramètres de pénalisation. Les sous-problèmes fluide et solide associés à cette formulation variationnelle sont alors couplés à leur interface par des conditions de Dirichlet sur la pression fluide et de Robin sur la contrainte et le déplacement solide. Ces conditions diffèrent des traditionnelles conditions de transmission de type Dirichlet-Neumann présentées précédemment. Un autre point clé de la stabilisation est l'introduction d'une pénalisation en temps des fluctuations de la pression du fluide à l'interface. Cette pénalisation est encore une fois consistante avec les équations.



tions traitées. Il est intéressant de noter que cette stabilisation peut être vue comme un équivalent discret d'une compressibilité artificielle. Sous une condition CFL faisant intervenir les paramètres de pénalisation de Nitsche, il est alors possible de montrer une borne sur l'énergie du système. Le schéma explicite proposé est alors conditionnellement stable, mais cette fois-ci, indépendamment du rapport de densité fluide-solide et du rapport d'aspect de la structure. Cependant, l'erreur en temps est sous-optimale, avec un taux de convergence en  $\mathcal{O}(\Delta t^{\frac{1}{2}})$ . Il est toutefois possible de regagner un ordre supérieur à 1 en appliquant quelques itérations d'un correcteur.

### 2.4.2 Schémas de couplage implicites

Les schémas de couplage implicites consistent à imposer fortement la vérification des conditions aux limites à l'interface fluide-solide. Ils peuvent donc assurer la conservation exacte de l'énergie lors du couplage, à l'erreur de convergence du point fixe près, comme montré dans [86]. L'écriture du schéma implicite implique la résolution d'un problème de point-fixe à chaque pas de temps pour trouver la solution au temps  $(n + 1)\Delta t$ . Cette résolution peut être réalisée par une méthode itérative de type Newton [46], quasi-Newton [50], Gauss-Seidel [101], avec éventuellement l'ajout d'une relaxation d'Aitken ou d'un algorithme de gradient pour accélérer la convergence.

Un schéma fortement couplé est en général beaucoup plus coûteux en temps de calcul que la somme des temps de calcul du fluide et du solide, car la résolution itérative du problème de point fixe demande de résoudre les problèmes fluide et solide à chaque itération. La stabilité est en général assurée sous des conditions moins contraignantes que pour les schémas explicites ; cependant, [86, 18] montrent par exemple que dans le cas où des effets de masse ajoutée importants interviennent, il est nécessaire d'ajouter une relaxation suffisamment forte au schéma itératif pour avoir la convergence de la méthode de point-fixe. Ces propriétés rendent la simulation de problèmes d'interaction fluide-structure souvent trop coûteux pour des problèmes réalistes. C'est pour rendre de telles simulations possibles qu'ont été développés les schémas semi-implicites.

### 2.4.3 Schémas de couplage semi-implicites

Les schémas de couplage semi-implicites reposent sur l'idée que seule une partie de l'équation pose une difficulté dans l'établissement de la stabilité du schéma. Il s'agit donc de traiter les termes n'intervenant pas dans l'instabilité de façon explicite, tandis que les termes induisant des instabilités sont traités implicitement. Ici, c'est l'effet de masse ajoutée qui semble être à l'origine de l'instabilité. Au contraire, les termes de dissipation, convection et les non-linéarités géométriques liées à la déformation du domaine fluide peuvent être traités explicitement.

Plusieurs choix sont possibles pour le traitement semi-implicite. [45] propose une approche basée sur la résolution des équations de Navier-Stokes par un schéma de

projection de Chorin-Temam [20, 132]. L'interface fluide-structure est tout d'abord prédite par une extrapolation de la position du solide au temps  $(n + 1)\Delta t$ . Cette nouvelle position d'interface permet de construire une déformation du maillage ALE et de résoudre les équations de Navier-Stokes sans la contrainte d'incompressibilité. Le couplage itératif porte alors sur l'étape de projection de la vitesse du fluide sur l'espace des champs à divergence nulle et la détermination de la pression comme multiplicateur de Lagrange de cette contrainte, et sur l'étape d'avancée du solide sous les forces de pression fluide. La résolution du problème fluide revient donc à la résolution d'un problème de Darcy sur le domaine fluide, qui est moins coûteuse que le calcul complet du problème d'advection-diffusion sur maillage mobile dans un schéma de couplage implicite. Notons que les conditions aux limites à l'interface ne sont pas exactement vérifiées en raison de l'utilisation d'un prédicteur de la position du solide au temps  $(n + 1)\Delta t$  pour la déformation du maillage fluide, ce qui implique que le schéma semi-implicite est faiblement couplé. Cependant, [45] montre que le traitement explicite à l'aide du prédicteur ne compromet pas la stabilité du couplage, et que le schéma semi-implicite reste conditionnellement stable sans dépendre du rapport de densité solide-fluide. La démonstration de la stabilité est toutefois intimement liée à la dissipation d'énergie due à l'utilisation d'un schéma *leap-frog* pour la structure, comme indiqué par [16].

Un autre schéma semi-implicite est proposé par Quaini et Quarteroni [121] en suivant le même découpage en une résolution explicite pour les termes d'advection-diffusion et un traitement implicite des termes de pression. La différence majeure tient à l'utilisation du schéma fractionnaire algébrique Yosida [122] pour le fluide à la place du schéma de projection de Chorin-Temam. Le principe de la méthode Yosida consiste à remplacer la factorisation LU exacte de la matrice de couplage entre le solide et le fluide par une décomposition LU inexacte mais de coût calculatoire moindre. La raison invoquée pour l'utilisation de cette méthode est le fait que le schéma de Chorin-Temam induit en général des couches limites sur la pression au voisinage des parois. La méthode Yosida améliore ce point au prix d'une erreur de splitting supplémentaire. Le schéma de couplage semi-implicite proposé ne satisfait pas exactement les conditions aux limites et il n'y a donc théoriquement pas conservation de l'énergie, même si les résultats numériques présentés dans [121] suggèrent le même type de résultats de stabilité que pour [45].

## 2.5 Conclusion

Notre objectif dans cette thèse est de développer une méthode de couplage fluide-structure capable de prendre en compte la rupture du matériau pour le traitement de l'interaction entre une onde de choc aérienne et une structure. Nous avons vu qu'en cas de grands déplacements ou de rupture du solide, les méthodes de domaine fictif sont bien adaptées. La conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie est par ailleurs un critère que nous voulons assurer afin d'obtenir des coefficients de transmission des ondes corrects et un schéma numérique stable. Nous

## **32 Chapitre 2. Méthodes numériques pour l'interaction fluide-structure**

---

sommes donc amenés à utiliser une méthode *Embedded Boundary* conservative (telle qu'exposée dans la section 2.3.2.6) pour prendre en compte du solide dans le fluide. Les principales modifications apportées à la méthode porteront sur l'algorithme de mélange des petites cellules avec les cellules voisines.

Pour le schéma d'intégration temporelle, nous nous orientons vers une approche partitionnée globalement explicite afin de limiter les coûts de calcul de l'algorithme de couplage. Notre approche n'est pas fortement couplée, car les critères de vérification des conditions aux limites à l'interface fluide-solide sont remplacés par des propriétés de conservation et de consistance (comme conservation de solutions particulières). Nous verrons cependant que dans notre cas, il est possible d'assurer un équilibre d'énergie discret entre le fluide et le solide au cours de chaque pas de temps. Les échanges fluide-structure étant entièrement localisés le long de l'interface, nous serons en mesure d'imposer ces conditions à l'aide d'une résolution semi-implicite n'impliquant que les éléments fluide et solide à l'interface.

# An energy-preserving Discrete Element Method for elastodynamics

---

Réalisé avec Christian Mariotti<sup>a</sup>

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

Ce chapitre est actuellement soumis pour publication à *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*.

### 3.1 Introduction

Particle methods are meshless simulation techniques in which a continuum medium is approximated through the dynamics of a set of interacting particles. Two main classes of particle methods can be distinguished : Discrete Element methods (DEM), which rely on the contact interaction of material particles by means of forces and torques, and Smooth Particle Hydrodynamics (SPH) methods, in which the continuum is discretized by localized kernel functions.

Discrete Element methods consist in the resolution of the equations of motion of a set of particles submitted to forces and torques. It is thus possible to account for a variety of phenomena (behaviour laws, models, scales,...) using a single numerical method. A wide variety of Discrete Element methods have been designed changing the expression of the forces, with particular attention devoted to specific aspects. Discrete Element methods have first been developed by Hoover, Arhurst and Olness [69] in models for crystalline materials. Their application to geotechnical problems was carried out by Cundall and Strack [23], and their use in granular materials and rock simulation is still widespread [123, 120]. Discrete Element Methods have also been used to simulate thermal conduction in granular assemblies [44] or fluid-structure interaction [62]. The model is also able to account for grain size effects [71], and to treat fracture in a natural way. Discrete Element methods used for granular materials generally describe particles as spherical elements interacting via noncohesive, frictional contact forces [123]. For brittle materials, models also use unilateral contact forces, combined with bonds which simulate cohesion [120]. Kun and Herrmann developed a combination of the contact model with a lattice model of beams to account for the cohesion [82], which has been extended to Reissner models of beams to simulate large rotations of the material [24, 71]. The authors use Voronoi tessellations to generate the polygonal particles. However, the results obtained still depend on the size of the discretization (which physically corresponds to the size of heterogeneities) [71]. The effective macroscopic Young modulus and Poisson ratio highly depend on the isotropy of the distribution of the particles and are only empirically linked to their microscopic value for the Reissner beams [82].

In a different approach, SPH methods describe the particles as smooth density kernel functions. The kernel functions are an approximation of the partition of unity. The continuous equations of evolution of the fluid or solid material therefore induce the dynamics of the particles. Originating from astrophysical compressible fluid simulations [52, 99], SPH was extended to incompressible fluids [107] and to elastic and plastic dynamics [96], and used for fluid-structure interaction with both domains discretized with SPH [5]. A state of the art review of the method with applications to solid mechanics is presented in [68]. SPH preserves the total mass of the system exactly. However, in tensile regime, unphysical clusters of particles tend to appear in situations where a homogeneous response is expected [129]. Hicks, Swegle and Attaway advocate the smoothing of the variables between neighbouring particles to stabilize the method, rather than introducing artificial viscosities [67].

Bonet and Lok have addressed the issue of angular momentum preservation, and show that rotational invariance is equivalent to the exact evaluation of the gradients of linear velocity fields, which can be achieved either through correction of the kernel function or through a modification of its gradient [14]. In order to circumvent the difficulties affecting SPH, Yserentant developed the Finite Mass method, in which particles of fixed size and shape also possess a rotational degree of freedom (spin). The method achieves effective partition of unity, and thus preserves momentum, angular momentum and energy, ensuring stability [143].

The Moving Particle Semi-implicit (MPS) method is a variant of the SPH method developed by Koshizuka. It consists in the derivation of the dynamics of a set of points from a discrete Hamiltonian [80]. As in the SPH method, the differential operators are approximated by a kernel function of compact support. The expression of the approximated differential operators is inserted in the classical Hamiltonian of the system, and by application of Hamilton's equations, the dynamics of the discretized system is obtained. To preserve the Hamiltonian structure of the dynamic of the system through time discretization, the authors use symplectic schemes [128]. The MPS method has been used initially for free-surface flows [80, 79], and has been extended to nonlinear elastodynamics [81, 128] and to fluid-structure interaction [88]. Using similar ideas, by deriving the dynamics of the system from a discrete Hamiltonian, Fahrenthold has simulated compressible flows [78] and impact events with breaking of the target [34, 35].

These methods show the importance of the preservation of momentum and energy for the accuracy and stability of the scheme over long-time simulation. The use of symplectic schemes ensures the preservation of the structure of Hamilton's equations by the numerical time integration, and therefore the preservation of momentum and energy [60]. Simo, Tarnow and Wong note, however, that while ensuring the stability of the simulation for small time steps, the symplectic schemes fail to preserve exactly energy and become unstable for larger time steps [125]. They derive a general class of implicit time-stepping algorithms which exactly enforce the conservation of momentum, angular momentum and energy. The algorithms are built in order to preserve linear and angular momentum, and energy conservation is enforced either with a projection method (projection on the manifold of constant energy) or with a collocation method. The algorithm is used for nonlinear elasticity in large deformation using finite element methods [125, 58, 84] and for low-velocity impact [64].

In this chapter, we extend and analyze the Discrete Element method initially introduced by Mariotti [100]. Combining a Discrete Element Method with a lattice model of beams, we are able to account for the cohesion of the material, and analytically recover the macroscopic behaviour of the continuous material. The method, Mka3D, has been successfully used to simulate the propagation of seismic waves in linear elastic medium [100]. Here, we extend the properties of the algorithm to the case of large displacements without fracture. Contrary to usual Discrete Element methods, we are able to derive the microscale forces and torques analytically from

the macroscopic Young modulus and Poisson ratio, and to prove the convergence of the method as the grid is refined. In addition, as in MPS methods, we derive the forces and torques between particles from a Hamiltonian formulation. Using a symplectic scheme, we ensure the preservation of energy over long-time simulations, and thus stability of the method. This allows for the simulation of three-dimensional wave propagation as well as shell or multibody dynamics. The chapter is organized as follows. In section 3.2, we describe the lattice model used. We introduce the Hamiltonian of the system and we derive the expression of forces and torques chosen to simulate linear elasticity. In section 3.3, we show that these expressions lead to a macroscopic behaviour of the material equivalent to a Cosserat continuum, with a characteristic length of the order of the size of the particles. Hence, the model is consistent with a Cauchy continuum medium up to second-order accuracy, in the case of small displacement and small deformation. The microscopic values of Young modulus and Poisson ratio yield directly the macroscopic values, and we can choose Poisson ratio in the whole interval  $(-1, 0.5)$ . In section 3.4, we then describe the symplectic RATTLE time-scheme [60], which allows us to preserve a discrete energy over long-time simulations. These theoretical results are illustrated by numerical simulations of test cases involving large displacements in section 3.5.

## 3.2 Description of the method

### 3.2.1 Geometrical description of the system

In order to discretize the continuum material, several methods have been suggested for Discrete Element Methods. Most authors working on granular materials use hard spheres, in order to simplify the computation of contacts between particles, as the exact form of the particles is mainly unknown. However, in the case of the simulation of a continuous material, this method is not adapted as the interstitial vacuum between spheres is inconsistent with the compactness of the solid. In addition, the difficulty to obtain a dense packing of hard spheres, and the problem of the expression of cohesion between the particles, have led us to use Voronoi tessellations instead, as suggested in [82, 24]. The particles are therefore convex polyhedra which define a partition of the entire domain, as shown on Figure 3.1. As we shall see, this method allows us to handle any Poisson ratio  $\nu$  strictly between  $-1$  and  $0.5$ , independently from the size of the particles. On the contrary, most granular sphere packing methodologies account for a limited range of  $\nu$ , which is size dependent.

The following parameters are relevant to describe the motion of a given particle  $I$  :  $\mathbf{X}_I$  and  $\mathbf{v}_I$  denote respectively the position and velocity of its center of mass ( $\mathbf{v}_I = \frac{d\mathbf{X}_I}{dt}$ ),  $\mathbf{Q}_I$  denotes the orthogonal rotation matrix of the frame attached to the rigid particle, and the angular velocity vector  $\boldsymbol{\Omega}_I$  is uniquely defined by :

$$\mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}_I) = \frac{d\mathbf{Q}_I}{dt} \mathbf{Q}_I^T, \quad (3.1)$$

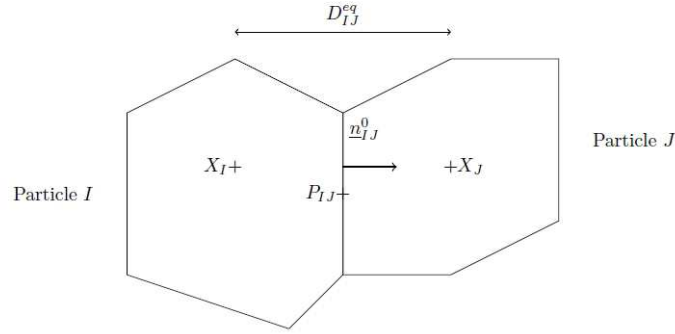


FIG. 3.1 – Geometric description of the particles

where the map  $\mathbf{j} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^{3 \times 3}$  is such that :

$$\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^3, \mathbf{j}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{y}$$

Finally, the material of particle  $I$  is described by its mass  $m_I$ , its volume  $V_I$  and its principal moments of inertia  $I_I^1$ ,  $I_I^2$  and  $I_I^3$ . We suppose the local frame attached to the particle is attached to the principal axes of inertia  $(\mathbf{e}_I^1, \mathbf{e}_I^2, \mathbf{e}_I^3)$ . The matrix of inertia in the fixed frame is given by :

$$\mathbf{R}_I = \mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{R}_I^0 \cdot \mathbf{Q}_I^{-1} \quad (3.2)$$

where  $\mathbf{R}_I^0$  is the matrix of inertia written in the inertial frame :

$$\mathbf{R}_I^0 = \begin{pmatrix} I_I^1 & 0 & 0 \\ 0 & I_I^2 & 0 \\ 0 & 0 & I_I^3 \end{pmatrix}$$

We also define the parameters  $d_I^1$ ,  $d_I^2$  and  $d_I^3$  as :

$$d_I^i = \frac{I_I^1 + I_I^2 + I_I^3}{2} - I_I^i, \quad i = 1, 2, 3$$

and we introduce the following matrix  $\mathbf{D}_I$  defined in the inertial frame :

$$\mathbf{D}_I = \begin{pmatrix} d_I^1 & 0 & 0 \\ 0 & d_I^2 & 0 \\ 0 & 0 & d_I^3 \end{pmatrix}$$

The Discrete Element Method relies on the computation of forces and torques between nearest neighbours particles. We denote by  $\mathcal{V}_I$  the list of the neighbouring particles linked to particle  $I$ . For each link between two particles  $I$  and  $J$ , we define  $P_{IJ}$  the center of gravity of the interface,  $S_{IJ}$  the surface of the interface, the distance between particles  $I$  and  $J$  :

$$D_{IJ} = \|\mathbf{X}_I \mathbf{X}_J\|,$$



and the initial exterior normal vector for link  $IJ$  :

$$\mathbf{n}_{IJ} = \frac{1}{D_{IJ}} \mathbf{X}_I \mathbf{X}_J$$

We define two normalized orthogonal vectors of the interface  $\mathbf{s}_{IJ}$  and  $\mathbf{t}_{IJ} = \mathbf{n}_{IJ} \wedge \mathbf{s}_{IJ}$ , serving as references to evaluate the torsion between particles  $I$  and  $J$ .

These parameters are given a fixed value at the beginning of the computation.  $D_{IJ}^0$  and  $\mathbf{n}_{IJ}^0$  respectively denote the initial values for  $D_{IJ}$  and  $\mathbf{n}_{IJ}$ . The particles are therefore assumed to be rigid. However, compressibility effects are taken into account through the expression of interaction potentials.

In addition, we define the following quantities :

- the displacement at the interface between particles  $I$  and  $J$  :

$$\Delta \mathbf{u}_{IJ} = \mathbf{X}_J - \mathbf{X}_I + \mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{X}_J^0 \mathbf{P}_{IJ} - \mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{X}_I^0 \mathbf{P}_{IJ}$$

- When particle  $I$  has several free interfaces (i.e. not linked to another particle), these surfaces are marked as stress-free. To account for the free deformation of the particle in these directions, free-volume  $V_I^l$  is defined as the sum of the volumes of all pyramidal polyhedra with a free surface as basis and  $X_I^0$  as summit.
- the volumetric deformation  $\varepsilon_I^v$  of particle  $I$  is defined as the sum of all contributions of the deformations of the material links of particle  $I$ . We have assumed that the bending of the link between two particles does not affect volume, as long as the centers of the interface of the two particles stay in contact. The corrective term on the volume is active only on particles having a free surface, and accounts for the boundary condition  $\sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}$ . We derive it in Appendix 3.7.1.

$$\varepsilon_I^v = \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \frac{1}{2} \frac{S_{IJ}}{V_I + 3 \frac{\nu}{1-2\nu} V_I^l} \Delta \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ}$$

- The interpolated volumetric deformation for link  $(IJ)$  :

$$\varepsilon_{IJ}^v = \frac{1}{2} (\varepsilon_I^v + \varepsilon_J^v)$$

### 3.2.2 Expression of the Hamiltonian of the system

We denote by  $E$  the Young's modulus and by  $\nu$  the Poisson's ratio for the material. The Hamiltonian formulation of the elastodynamic equations on a domain  $\Omega$  is as follows :

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \int_{\Omega} \frac{1}{2\rho} \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} + U(\mathbf{q}) \quad (3.3)$$

where  $\mathbf{q}$  is the displacement field and  $\mathbf{p} = \rho \mathbf{v}$  is the density of momentum.  $U(\mathbf{q})$  is the potential energy of the system. It can be expressed in terms of the stress tensor  $\sigma$  and the linearized strain tensor  $\varepsilon = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{q} + \nabla \mathbf{q}^T)$  :

$$U(\mathbf{q}) = W(\varepsilon) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sigma(\varepsilon) : \varepsilon \quad (3.4)$$

In the case of Cauchy linear elasticity, we use the constitutive relation

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{E}{1+\nu}\varepsilon + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}\text{tr}(\varepsilon)\text{Id} \quad (3.5)$$

to derive the expressions of  $W(\varepsilon)$  and  $U(\mathbf{q})$  :

$$W(\varepsilon) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{E}{1+\nu} \varepsilon : \varepsilon + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \text{tr}(\varepsilon)^2 \quad (3.6)$$

$$U(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{E}{2(1+\nu)} \nabla \mathbf{q} : \nabla \mathbf{q} + \frac{E}{2(1+\nu)(1-2\nu)} (\text{div } \mathbf{q})^2 \quad (3.7)$$

We choose to discretize the Hamiltonian formulation as a discrete Hamiltonian  $H_h$ . The displacement field  $\mathbf{q}$  is derived from the values of  $(\mathbf{X}_I, \mathbf{Q}_I)$ . The density of momentum derives from :

$$\mathbf{T}_I = m_I \mathbf{v}_I \quad (3.8)$$

$$\mathbf{P}_I = \mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}_I) \cdot \mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{D}_I \quad (3.9)$$

We define :

$$H_h(\mathbf{X}, \mathbf{Q}, \mathbf{T}, \mathbf{P}) = \frac{1}{2} \sum_I \frac{1}{m_I} \mathbf{T}_I \cdot \mathbf{T}_I + \frac{1}{2} \sum_I \text{tr}(\mathbf{P}_I \cdot \mathbf{D}_I^{-1} \cdot \mathbf{P}_I^{\text{T}}) + U_h(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) \quad (3.10)$$

The discretized potential energy is split into three terms :

$$U_h(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) = U_t(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) + U_d(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) + U_f(\mathbf{Q})$$

$U_t(\mathbf{X}, \mathbf{Q})$  corresponds to the first term of (3.6) : we approach the strain of the link  $(IJ)$  in the direction  $\mathbf{n}_{IJ}$   $\varepsilon \cdot \mathbf{n}_{IJ}$  by the normalized displacement  $\frac{1}{D_{IJ}^0} \Delta \mathbf{u}_{IJ}$ , and we use the approximation :

$$\varepsilon : \varepsilon \approx \sum_{J \in \mathcal{V}_I} (\varepsilon \cdot \mathbf{n}_{IJ})^2 \quad (3.11)$$

We therefore write :

$$U_t(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) = \frac{1}{2} \sum_{(IJ)} S_{IJ} \frac{E}{1+\nu} \frac{\Delta \mathbf{u}_{IJ} \cdot \Delta \mathbf{u}_{IJ}}{D_{IJ}^0}$$

This energy accounts for the deformation of each link between two particles.

$U_d(\mathbf{X}, \mathbf{Q})$  corresponds to the second term of (3.6) : we approach the trace of the strain  $\text{tr}(\varepsilon)$  in particle  $I$  by the sum of the normalized displacements  $\varepsilon_I^v$  for links surrounding  $I$ . A corrective term is added for cells having a free boundary :

$$U_d(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) = \frac{1}{2} \sum_I \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left( V_I + 3 \frac{\nu}{1-2\nu} V_I^l \right) (\varepsilon_I^v)^2$$

This energy accounts for the global volumetric deformation of each particle.

The former two terms are sufficient to recover the equations of elastodynamics inside the solid. However, for the method to be able to cope with thin one-element shells, we add the pure flexion term  $U_f(\mathbf{Q})$  :

$$U_f(\mathbf{Q}) = - \sum_{(IJ)} \frac{S_{IJ}}{D_{IJ}^0} (\alpha_n(\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{n}_{IJ}^0) \cdot (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{n}_{IJ}^0) + \alpha_s(\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{s}_{IJ}) \cdot (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{s}_{IJ}) + \alpha_t(\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{t}_{IJ}) \cdot (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{t}_{IJ}))$$

This term accounts for the flexion between particles. The coefficients  $\alpha_n$ ,  $\alpha_s$  and  $\alpha_t$  are chosen to recover the exact flexion and torsion of a beam, and are detailed in Appendix 3.7.2.

### 3.2.3 Derivation of the forces and torques between particles

We use Hamilton's equations for the system (3.10) :

$$\dot{\mathbf{X}}_I = \frac{\partial H_h}{\partial \mathbf{T}_I} \quad (3.12)$$

$$\dot{\mathbf{Q}}_I = \frac{\partial H_h}{\partial \mathbf{P}_I} \quad (3.13)$$

$$\dot{\mathbf{T}}_I = - \frac{\partial H_h}{\partial \mathbf{X}_I} \quad (3.14)$$

$$\dot{\mathbf{P}}_I = - \frac{\partial H_h}{\partial \mathbf{Q}_I} + \Lambda_I \cdot \mathbf{Q}_I \quad (3.15)$$

where  $\Lambda_I$  is the symmetric matrix of the Lagrange multipliers associated with the constraint  $\mathbf{Q}_I^T \cdot \mathbf{Q}_I = \text{Id}$ .

Equations (3.12) and (3.13) give us the usual kinematic relations between position and velocity :

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{X}}_I &= m_I^{-1} \mathbf{T}_I = \mathbf{v}_I \\ \dot{\mathbf{Q}}_I &= \mathbf{P}_I \cdot \mathbf{D}_I^{-1} = \mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}_I) \cdot \mathbf{Q}_I \end{aligned}$$

The derivation of forces and torques from the potential energies is carried out in Appendix 3.7.3. We obtain  $m_I \dot{\mathbf{v}}_I = \mathbf{F}_{IJ}$  where  $\mathbf{F}_{IJ}$ , the force exerted by particle  $I$  on particle  $J$ , is given by :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{IJ} &= \frac{S_{IJ}}{D_{IJ}^0} \frac{E}{1+\nu} \boldsymbol{\Delta} \mathbf{u}_{IJ} \\ &+ S_{IJ} \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \varepsilon_{IJ}^v \left( \mathbf{n}_{IJ} + \frac{1}{D_{IJ}} \boldsymbol{\Delta} \mathbf{u}_{IJ} - \frac{1}{D_{IJ}} (\boldsymbol{\Delta} \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ}) \mathbf{n}_{IJ} \right) \end{aligned} \quad (3.16)$$

This expression can be seen as a discrete version of Hooke's law of linear elasticity

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{E}{1+\nu} \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \text{Id} \quad (3.17)$$

using the previous analogies between  $\frac{1}{D_{IJ}^0} \Delta \mathbf{u}_{IJ}$  and  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon_{IJ}^v$  and  $\text{tr}(\varepsilon)$ , and noting that  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$  is a force per surface unit (a pressure).

For the rotational part, we define the two following torques :

$$\mathbf{M}_{IJ}^t = \frac{S_{IJ}}{D_{IJ}^0} \frac{E}{1+\nu} (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{X}_I^0 \mathbf{P}_{IJ}) \wedge \Delta \mathbf{u}_{IJ} + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \varepsilon_{IJ}^v S_{IJ} (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{X}_I^0 \mathbf{P}_{IJ}) \wedge \mathbf{n}_{IJ} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{IJ}^f = \frac{S_{IJ}}{D_{IJ}^0} & (\alpha_n (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{n}_{IJ}^0) \wedge (\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{n}_{IJ}^0) + \alpha_s (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{s}_{IJ}) \wedge (\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{s}_{IJ}) \\ & + \alpha_t (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{t}_{IJ}) \wedge (\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{t}_{IJ})) \end{aligned} \quad (3.19)$$

We note the fact that  $\mathbf{M}_{IJ}^t$  corresponds to the torque of force  $\mathbf{F}_{IJ}$  with respect to the center of gravity of the interface  $P_{IJ}$  :

$$\mathbf{M}_{IJ}^t = (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{X}_I^0 \mathbf{P}_{IJ}) \wedge \mathbf{F}_{IJ}$$

and  $\mathbf{M}_{IJ}^f$  is the flexion-torsion torque. We get the equation on the angular velocity :

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{R}_I \cdot \boldsymbol{\Omega}_I) = \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \mathbf{M}_{IJ} \quad (3.20)$$

where :

$$\mathbf{M}_{IJ} = \mathbf{M}_{IJ}^t + \mathbf{M}_{IJ}^f$$

In the case when exterior forces and torques are applied to the system, they are to be added to the internal forces and torques computed above.

### 3.3 Consistency and accuracy of the scheme

In this section, we investigate the consistency and the accuracy of the scheme. We first propose a modified equation for small displacements and small deformations. As the equations obtained are coupled dynamics for displacement and rotation, we compare the model with Cosserat generalized continuum, and recover a Cauchy continuum as the spatial discretization  $h$  tends to zero.

#### 3.3.1 Modified equation for the scheme

The modified equation approach is a standard scheme analysis where a set of continuous equations verified by the approximate solution is sought for. These modified equations should be an approximate version of continuous equations derived from physics.

In order to be able to carry out a Taylor developments of the displacement, we place the points of the Voronoi tessellation on a Cartesian grid. The Discrete Element method can be seen, in this simplified case, as a Finite Difference scheme.

We assume that no exterior force and no exterior torque are applied on the system. The displacement  $\xi_I$  of particle  $I$  is given by :

$$\xi_I = \mathbf{X}_I - \mathbf{X}_I^0$$

We assume that  $\xi$  is a regular function on the domain, and we can therefore expand  $\xi_J$  at point  $I$  with Taylor series if  $J \in \mathcal{V}_I$ . We denote  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  and  $\Delta z$  the grid steps in each direction, and  $h$  their maximum.

We assume displacements and rotations to be small. We denote  $\theta_x^I$ ,  $\theta_y^I$  and  $\theta_z^I$  the small rotation angles around axes  $x$ ,  $y$  and  $z$ .

Using (3.16), a simple Taylor development of the equations of motion yields for the displacement :

$$\begin{aligned} \rho \ddot{\xi}_x = & \frac{E}{1+\nu} \left( \frac{\partial^2 \xi_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \xi_x}{\partial z^2} + \frac{\partial \theta_z}{\partial y} - \frac{\partial \theta_y}{\partial z} \right) \\ & + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left( \frac{\partial^2 \xi_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \xi_z}{\partial x \partial z} \right) \\ & + \frac{E}{1+\nu} \left( \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 \xi_x}{\partial x^4} + \frac{\Delta y^2}{12} \frac{\partial^4 \xi_x}{\partial y^4} + \frac{\Delta z^2}{12} \frac{\partial^4 \xi_x}{\partial z^4} + \frac{\Delta y^2}{6} \frac{\partial^3 \theta_z}{\partial y^3} - \frac{\Delta z^2}{6} \frac{\partial^3 \theta_y}{\partial z^3} \right) \\ & + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left( \frac{\Delta x^2}{3} \frac{\partial^4 \xi_x}{\partial x^4} + \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^4 \xi_y}{\partial x^3 \partial y} \right. \\ & \left. + \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^4 \xi_z}{\partial x^3 \partial z} + \frac{\Delta y^2}{6} \frac{\partial^4 \xi_y}{\partial x \partial y^3} + \frac{\Delta z^2}{6} \frac{\partial^4 \xi_z}{\partial x \partial z^3} \right) + \mathcal{O}(h^3) \quad (3.21) \end{aligned}$$

The same results hold for  $\xi_y$  and  $\xi_z$  permuting the indices  $x$ ,  $y$  and  $z$  circularly.

Using (3.18) and (3.19), (3.20) gives the equivalent equation for the rotation :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta y^2 + \Delta z^2}{12} \rho \ddot{\theta}_x = & \frac{E}{1+\nu} \left( \frac{\partial \xi_z}{\partial y} - \frac{\partial \xi_y}{\partial z} - 2\theta_x + \frac{\Delta y^2}{6} \frac{\partial^3 \xi_z}{\partial y^3} - \frac{\Delta z^2}{6} \frac{\partial^3 \xi_y}{\partial z^3} + \frac{\Delta y^4}{120} \frac{\partial^5 \xi_z}{\partial y^5} \right. \\ & \left. - \frac{\Delta z^4}{120} \frac{\partial^5 \xi_y}{\partial z^5} - \frac{\Delta y^2}{4} \frac{\partial^2 \theta_x}{\partial y^2} - \frac{\Delta z^2}{4} \frac{\partial^2 \theta_x}{\partial z^2} - \frac{\Delta y^4}{48} \frac{\partial^4 \theta_x}{\partial y^4} - \frac{\Delta z^4}{48} \frac{\partial^4 \theta_x}{\partial z^4} \right) \\ & + E \left[ \frac{\Delta y^2 + \Delta z^2}{12(1+\nu)} \left( \frac{\partial^2 \theta_x}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 \theta_x}{\partial x^4} \right) + \frac{\Delta z^2}{12} \left( \frac{\partial^2 \theta_x}{\partial y^2} + \frac{\Delta y^2}{12} \frac{\partial^4 \theta_x}{\partial y^4} \right) \right. \\ & \left. + \frac{\Delta y^2}{12} \left( \frac{\partial^2 \theta_x}{\partial z^2} + \frac{\Delta z^2}{12} \frac{\partial^4 \theta_x}{\partial z^4} \right) \right] + \mathcal{O}(h^5) \quad (3.22) \end{aligned}$$

The same results hold for  $\theta_y$  and  $\theta_z$  permuting the indices  $x$ ,  $y$  and  $z$  circularly.

We see that these sets of equations couple  $\xi$  and  $\theta$ , and by construction of the method, no constitutive law exists between  $\xi$  and  $\theta$ . The fact that a rotation remains in the equations can be compared to Cosserat continuum theory. We investigate this comparison in the following subsection.

### 3.3.2 Comparison with Cosserat and Cauchy continuum theories

In a Cosserat model for continuum media, the kinematics is described by a displacement field  $\mathbf{u}$  and a rotation field  $\phi$ . A modified strain tensor  $\varepsilon$  and a new curvature strain tensor  $\kappa$  are introduced [31] :

$$\varepsilon = \nabla \mathbf{u} + \mathbf{j}(\phi)$$

$$\kappa = \nabla \phi$$

We define  $\mathbf{t}$  and  $\mu$  the stress and couple stress tensors. We assume the following constitutive relations :

$$\mathbf{t} = \lambda \text{tr}(\varepsilon) \mathbf{ld} + \mu \varepsilon + \mu_c \varepsilon^T \quad (3.23)$$

$$\mu = \alpha \text{tr}(\kappa) \mathbf{ld} + \gamma \kappa + \beta \kappa^T \quad (3.24)$$

where  $\lambda$ ,  $\mu$ ,  $\mu_c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  and  $\gamma$  are elastic moduli.

The dynamical equations for the system are :

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = \text{div } \mathbf{t}$$

$$\mathbf{l}_c \ddot{\phi} = \text{div } \mu + \mathbf{e} : \mathbf{t}$$

where  $\rho$  denotes the density,  $\mathbf{l}_c$  is a characteristic inertia matrix,  $:$  denotes the double contraction product of tensors, and  $\mathbf{e}$  is defined as follows :

$$(\mathbf{e})_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{if } (ijk) \text{ is an even permutation} \\ -1 & \text{if } (ijk) \text{ is an odd permutation} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

Using the constitutive relations (3.23) and (3.24), the following equations can be obtained :

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = (\lambda + \mu_c) \nabla \text{div } \mathbf{u} + \mu \Delta \mathbf{u} + (\mu - \mu_c) \text{curl } \phi \quad (3.25)$$

$$\mathbf{l}_c \ddot{\phi} = (\alpha + \beta) \nabla \text{div } \phi + \gamma \Delta \phi - 2(\mu - \mu_c) \phi + (\mu - \mu_c) \text{curl } \mathbf{u} \quad (3.26)$$

Identifying the terms of (3.25) with equation (3.21), we find :

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$$

$$\mu = \frac{E}{1+\nu}$$

$$\mu_c = 0$$

and we therefore recover the classical expression, for Cauchy media, of the first Lamé coefficient  $\lambda_{Cauchy}$ , and  $\frac{\mu+\mu_c}{2}$  corresponds to the classical second Lamé coefficient  $\mu_{Cauchy}$ . Comparing then equation (3.26) with equation (3.22), we find :

$$\mathbf{l}_c = \rho \begin{pmatrix} \frac{\Delta y^2 + \Delta z^2}{12} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\Delta x^2 + \Delta z^2}{12} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta x^2 + \Delta y^2}{12} \end{pmatrix}$$

For a given  $h = \Delta x = \Delta y = \Delta z$ , we see that the modified equations for the scheme are those of a Cosserat generalized continuum, with second-order accuracy, and the coefficients verify  $\alpha + \beta = 0$  and  $\gamma = \frac{E}{2(1+\nu)}h^2$ . In the case of an anisotropic mesh size ( $\Delta x \neq \Delta y \neq \Delta z$ ), we cannot identify the coefficients with the isotropic Cosserat equations, due to the presence of the Laplacian operator. We can however find an anisotropic Cosserat model with weighted second derivatives instead of the Laplacian.

One of the main characteristics of a Cosserat generalized continuum is to exhibit a characteristic length for the material,  $l_c$ , which describes the length of the nonlocal interactions.  $l_c$  is defined as :

$$l_c^2 = \frac{\gamma}{\mu + \mu_c}$$

In our case, we see that :

$$l_c = \frac{\sqrt{2}}{2}h$$

$l_c$  is of the same order as the size of the particles. In an homogenization analysis framework, S. Forest, F. Pradel and K. Sab have shown [47] that when the macroscopic length of the system is fixed and the characteristic length  $l_c$  of the Cosserat continuum tends to 0, the macroscopic behavior of the material is that of a Cauchy continuum. We therefore converge to a Cauchy continuum as  $h$  tends to 0.

As a consequence, displacement  $\boldsymbol{\xi}$ , acceleration  $\ddot{\boldsymbol{\xi}}$ , rotation  $\boldsymbol{\theta}$  and acceleration of rotation  $\ddot{\boldsymbol{\theta}}$  in equations (3.21) and (3.22) converge to finite macroscopic quantities. Therefore, using the equations on rotation, we find :

$$\boldsymbol{\theta} = \frac{1}{2}\text{curl } \boldsymbol{\xi} + \mathcal{O}(h^2) \tag{3.27}$$

which is the classical definition of the local rotation of a Cauchy material at order 2. Using this relation in the equations of displacement, we find the equations of linear elasticity for a Cauchy continuum medium up to error terms of order  $\mathcal{O}(h^2)$  :

$$\rho \ddot{\boldsymbol{\xi}} = \frac{E}{2(1+\nu)} \Delta \boldsymbol{\xi} + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \nabla \text{div } \boldsymbol{\xi} + \mathcal{O}(h^2)$$

and taking  $\frac{1}{2}\text{curl}$  of this equation, we find the equivalent equation on rotation up to error terms of order  $\mathcal{O}(h^2)$  :

$$\rho \ddot{\boldsymbol{\theta}} = \frac{E}{2(1+\nu)} \Delta \boldsymbol{\theta} + \mathcal{O}(h^2) \tag{3.28}$$

We recover a second-order accuracy on the rotation  $\boldsymbol{\theta}$ . As equation (3.27) shows,  $\boldsymbol{\theta}$  is a derivate of  $\boldsymbol{\xi}$ , and we should expect only first-order accuracy using a second-order accurate method on  $\boldsymbol{\xi}$ . We have therefore improved the accuracy on  $\boldsymbol{\theta}$  using the Discrete Element method.

## 3.4 Preservation of the Hamiltonian structure by the time integration scheme

### 3.4.1 Description of the scheme

The model built has a Hamiltonian structure. To preserve this property after time discretization, we use a symplectic time integration scheme. As the system (3.12)–(3.15) is a constrained Hamiltonian system [60, Sec VII.5], it is natural to use the following RATTLE scheme [3] with time-step  $\Delta t$  :

$$\mathbf{T}_I^{n+1/2} = \mathbf{T}_I^n - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{X}_I}(\mathbf{X}^n, \mathbf{Q}^n) \quad (3.29)$$

$$\mathbf{P}_I^{n+1/2} = \mathbf{P}_I^n - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{Q}_I}(\mathbf{X}^n, \mathbf{Q}^n) + \frac{\Delta t}{2} \Lambda_I^n \mathbf{Q}_I^n \quad (3.30)$$

$$\mathbf{X}_I^{n+1} = \mathbf{X}_I^n + \frac{\Delta t}{m_I} \mathbf{T}_I^{n+1/2} \quad (3.31)$$

$$\mathbf{Q}_I^{n+1} = \mathbf{Q}_I^n + \Delta t \mathbf{P}_I^{n+1/2} \mathbf{D}_I^{-1} \quad (3.32)$$

$$\text{where } \Lambda_I^n \text{ is such that } \mathbf{Q}_I^{n+1\text{T}} \cdot \mathbf{Q}_I^{n+1} = \text{Id} \quad (3.33)$$

$$\mathbf{T}_I^{n+1} = \mathbf{T}_I^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{X}_I}(\mathbf{X}^{n+1}, \mathbf{Q}^{n+1}) \quad (3.34)$$

$$\mathbf{P}_I^{n+1} = \mathbf{P}_I^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{Q}_I}(\mathbf{X}^{n+1}, \mathbf{Q}^{n+1}) + \frac{\Delta t}{2} \tilde{\Lambda}_I^{n+1} \mathbf{Q}_I^{n+1}, \quad (3.35)$$

$$\text{where } \tilde{\Lambda}_I^{n+1} \text{ is such that } \mathbf{Q}_I^{n+1\text{T}} \cdot \mathbf{P}_I^{n+1} \cdot \mathbf{D}_I^{-1} + \mathbf{D}_I^{-1} \cdot \mathbf{P}_I^{n+1\text{T}} \cdot \mathbf{Q}_I^{n+1} = 0 \quad (3.36)$$

where  $\Lambda_I^n$  and  $\tilde{\Lambda}_I^n$  are symmetric matrices, the Lagrange multipliers associated with the constraints (3.33) and (3.36). We denote the scheme (3.29)–(3.36) by :

$$(\mathbf{X}^{n+1}, \mathbf{Q}^{n+1}, \mathbf{T}^{n+1}, \mathbf{P}^{n+1}) = \Psi_{\Delta t}(\mathbf{X}^n, \mathbf{Q}^n, \mathbf{T}^n, \mathbf{P}^n)$$

The proof for RATTLE's symplecticity can be found in [89]. As a consequence, in the absence of exterior forces, the energy of the system is an invariant of the system, and is preserved by the numerical integration in time. More precisely, the error is of order  $\mathcal{O}(e^{-\frac{\kappa}{\Delta t}})$  over a time period of  $e^{\frac{\kappa}{\Delta t}}$ , with  $\kappa > 0$  independent from  $\Delta t$  [60]. This yields the stability of the simulation over long time periods if the time step is chosen sufficiently small. In addition, we directly derive from (3.29)–(3.36) that the linear and angular momentum are exactly preserved.

Another important property of the RATTLE scheme is its reversibility. Starting with the knowledge of positions and velocities at time  $(n+1)\Delta t$ , we recover the positions and velocities at time  $n\Delta t$  with the following scheme :

$$(\mathbf{X}^n, \mathbf{Q}^n, \mathbf{T}^n, \mathbf{P}^n) = \Psi_{-\Delta t}(\mathbf{X}^{n+1}, \mathbf{Q}^{n+1}, \mathbf{T}^{n+1}, \mathbf{P}^{n+1})$$



As a reversible scheme, RATTLE is of even order, and as it is consistent, it is a second-order scheme.

RATTLE has the advantage of enforcing explicitly matrix  $\mathbf{Q}_I^n$  to be a rotation matrix, and at the same time be explicit in time. However, the nonlinearity of the constraint on  $\mathbf{Q}_I^n$  needs to be solved with an iterative algorithm, which will be addressed in section 3.4.3.

### 3.4.2 Implementation with forces and torques

For effective implementation of the RATTLE scheme, a difficulty arises from the fact that we do not necessarily have a direct access to  $\frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{X}_I}(\mathbf{X}^n, \mathbf{Q}^n)$  and  $\frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{Q}_I}(\mathbf{X}^n, \mathbf{Q}^n)$ , as we compute the expression of forces and torques rather than the functional  $U_h$ . In the particular case studied here, we could impose directly  $U_h$  in the computation of velocity and position, but in that case, we would not be able to treat non-conservative exterior forces and torques, and the extension of the method to more complex behavior laws for the material would become unfeasible. To that end, we have chosen to recover  $\frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{X}_I}(\mathbf{X}^n, \mathbf{Q}^n)$  and  $\frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{Q}_I}(\mathbf{X}^n, \mathbf{Q}^n)$  from the expression of forces and torques. We prove, in Appendix 3.7.4, that the equations to be solved have the same form as (3.29–3.35), replacing  $\frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{X}_I}$  with  $-\mathcal{F}_I^n = -\sum_{J \in \mathcal{V}_I} \mathbf{F}_{IJ}$  and  $\frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{Q}_I}$  with  $-\frac{1}{2} \mathbf{j}(\mathcal{M}_I^n) \mathbf{Q}_I^n$ , where  $\mathcal{M}_I^n = \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \mathbf{M}_{IJ}$ , and changing the Lagrange multipliers.

In order to implement the scheme, without having to compute matrices  $\Lambda_I^n$  and  $\tilde{\Lambda}_I^n$ , we follow once more [60, Sec VII.5]. We set :

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_I^n &= \mathbf{Q}_I^{n\top} \cdot \mathbf{P}_I^n \\ \mathbf{Z}_I^{n+1/2} &= \mathbf{Q}_I^{n\top} \cdot \mathbf{P}_I^{n+1/2} \cdot \mathbf{D}_I^{-1} \end{aligned}$$

We use the following algorithm :

- We start the time step knowing  $\mathbf{X}_I^n, \mathbf{Q}_I^n, \mathbf{Z}_I^{n-1/2}$  and  $\mathbf{T}_I^{n-1/2}$  (in the first step, these last two elements are the null matrix and the null vector).
- We compute the forces and torques in a submodule of the code, using only positions  $\mathbf{X}^n$  and  $\mathbf{Q}^n$ .
- The displacement scheme is written :

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_I^{n+1/2} &= \mathbf{T}_I^{n-1/2} + \Delta t \mathcal{F}_I^n \\ \mathbf{X}_I^{n+1} &= \mathbf{X}_I^n + \frac{\Delta t}{m_I} \mathbf{T}_I^{n+1/2} \end{aligned}$$

- Then, we use the rotation scheme :
  - Compute  $\mathbf{A}_I^n = \mathbf{D}_I \cdot \mathbf{Z}_I^{n-1/2} - \mathbf{Z}_I^{n-1/2\top} \cdot \mathbf{D}_I + \Delta t \mathbf{Q}_I^{n\top} \cdot \mathbf{j}(\mathcal{M}_I^n) \cdot \mathbf{Q}_I^n$
  - Find  $\mathbf{Z}_I^{n+1/2}$  such that :

$$\begin{cases} \text{Id} + \Delta t \mathbf{Z}_I^{n+1/2} \text{ is orthogonal} \\ \mathbf{Z}_I^{n+1/2} \cdot \mathbf{D}_I - \mathbf{D}_I \cdot \mathbf{Z}_I^{n+1/2\top} = \mathbf{A}_I^n \end{cases} \quad (3.37)$$

– Compute  $Q_I^{n+1} = Q_I^n \cdot (\text{Id} + \Delta t Z_I^{n+1/2})$

We can observe that all those steps are explicit, and that the only step that requires an iterative resolution is (3.37). Following [60], we use the quaternion iterative method to solve (3.37) for  $Z_{n+1/2}$ . We describe that method in the next subsection.

### 3.4.3 Resolution of the nonlinear step

Note that  $A_I^n$  is a skew-symmetric matrix, which can be written as :

$$A_I^n = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha_3 & \alpha_2 \\ \alpha_3 & 0 & -\alpha_1 \\ -\alpha_2 & \alpha_1 & 0 \end{pmatrix}$$

Equation (3.37) now reads :

$$\begin{cases} Z_I^{n+1/2} \cdot D_I - D_I \cdot Z_I^{n+1/2T} = A_I^n \\ \left( \text{Id} + \Delta t Z_I^{n+1/2} \right) \cdot \left( \text{Id} + \Delta t Z_I^{n+1/2T} \right) = \text{Id} \end{cases} \quad (3.38)$$

To impose the second line of (3.38), we write the matrix  $\text{Id} + \Delta t Z_I^{n+1/2}$  with the quaternion notation :

$$\text{Id} + \Delta t Z_I^{n+1/2} = (e_0^2 + e_1^2 + e_2^2 + e_3^2) \text{Id} + 2e_0 E + 2E^2$$

with :

$$E = \begin{pmatrix} 0 & -e_3 & e_2 \\ e_3 & 0 & -e_1 \\ -e_2 & e_1 & 0 \end{pmatrix}$$

We make use of the property that every orthogonal matrix can be written in this form, and that condition  $e_0^2 + e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 = 1$  ensures that such a matrix is orthogonal. Equation (3.37) is hence equivalent to solving for  $e_0, e_1, e_2, e_3$  the following quadratic system of equations :

$$\begin{cases} 2(d_2 + d_3)e_0e_1 + 2(d_2 - d_3)e_2e_3 = \Delta t \alpha_1 \\ 2(d_1 + d_3)e_0e_2 + 2(d_3 - d_1)e_1e_3 = \Delta t \alpha_2 \\ 2(d_1 + d_2)e_0e_3 + 2(d_1 - d_2)e_1e_2 = \Delta t \alpha_3 \\ e_0^2 + e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 = 1 \end{cases} \quad (3.39)$$

Existence and uniqueness do not hold for this set of equations. In the simple case where  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 0$ , there are distinct solutions for  $(e_0, e_1, e_2, e_3) : (1, 0, 0, 0)$  (in that case,  $Z^{n+\frac{1}{2}} = \text{Id}$ ),  $(0, 1, 0, 0)$  (in that case,  $Z^{n+\frac{1}{2}}$  represents the axial symmetry around axis  $x$ ),  $(0, 0, 1, 0)$  (associated with the axial symmetry around axis  $y$ ),  $(0, 0, 0, 1)$  (associated with the axial symmetry around axis  $z$ ), and their opposites which represent the same transformation. There is a deep physical reason for that non-uniqueness : dynamically speaking, the rigid body is totally represented by its

equivalent inertia ellipsoid (the ellipsoid with the same axes of inertia and moments of inertia), which is invariant under the axial symmetries around the inertial axes  $x$ ,  $y$  and  $z$ . As the rotation  $\mathbf{Id} + \Delta t \mathbf{Z}_I^{n+1/2}$  is an increment of the global rotation of the particle, we select a solution “close” to identity, in a certain sense.

The existence and uniqueness in a neighbourhood of identity can be obtained from the equivalent formulation of RATTLE using the discrete Moser-Veselov scheme, with a fixed point theorem applied on equation (17) of reference [61]. We have found an explicit bound on the time-step  $\Delta t$  for the iterative scheme to converge, and ensure existence and uniqueness in a neighbourhood of identity. It is derived in Appendix 3.7.5. We use the following iterative scheme [60] :

- We start with  $(e_0^0, e_1^0, e_2^0, e_3^0) = (1, 0, 0, 0)$  (which represents identity).
- At each iteration, we compute :

$$e_1^{k+1} = \frac{\Delta t \alpha_1 - 2(d_2 - d_3)e_2^k e_3^k}{2(d_2 + d_3)e_0^k} \quad (3.40)$$

$$e_2^{k+1} = \frac{\Delta t \alpha_2 - 2(d_3 - d_1)e_1^k e_3^k}{2(d_1 + d_3)e_0^k} \quad (3.41)$$

$$e_3^{k+1} = \frac{\Delta t \alpha_3 - 2(d_1 - d_2)e_1^k e_2^k}{2(d_1 + d_2)e_0^k} \quad (3.42)$$

$$e_0^{k+1} = \sqrt{1 - (e_1^{k+1})^2 - (e_2^{k+1})^2 - (e_3^{k+1})^2} \quad (3.43)$$

Let us introduce :

$$\mathcal{B}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) = \left\{ (e_0, e_1, e_2, e_3) \text{ such that } e_0^2 + e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 = 1, e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 < \frac{1}{2} \right\}$$

When the time-step  $\Delta t$  satisfies the condition :

$$\Delta t \left( \frac{|\alpha_1|}{I_1} + \frac{|\alpha_2|}{I_2} + \frac{|\alpha_3|}{I_3} \right) \leq \frac{\sqrt{21} - 3}{6} \approx 0.26 \quad (3.44)$$

the algorithm (3.40)–(3.43) converges with a geometrical speed to the unique solution in  $\mathcal{B}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$ .

Let us observe that  $I_i$  and  $\mathbf{D}$  scale as  $\rho h^5$ . In addition, as  $\mathbf{P}_I = \mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}_I) \mathbf{Q}_I \mathbf{D}_I, \mathbf{Z}_I^{n+1/2}$  is of the order of  $\|\boldsymbol{\Omega}_I\|$ . Using the expressions (3.18) and (3.19), and the fact that  $\alpha_n, \alpha_s$  and  $\alpha_t$  scale as  $h^2$ , we obtain that  $\mathcal{M}_I^n$  is of the order of  $Eh^3$ . Condition (3.44) therefore gives us a constraint on the time-step of the following type :

$$\Delta t \|\boldsymbol{\Omega}_I\| + \frac{\Delta t^2 E}{h^2 \rho} \leq C \quad (3.45)$$

where  $C$  is a constant. This is the natural CFL condition for an explicit scheme on rotation, with  $\sqrt{\frac{E}{\rho}}$  the typical celerity of the compression and shear waves in the material.

## 3.5 Numerical results

In this section, we present several challenging test cases. First, we address Lamb’s problem, which allows us to examine numerically the accuracy of the method in the case of small displacements against a semi-analytic solution. The presence of surface waves is the most difficult part of the problem, and the results appear to be satisfactory. We examine the conservation of energy on the case of a three-dimensional cylinder submitted to large displacement. In the end, we also demonstrate the ability of the method to tackle static rod and shell problems using the same formulation, on the cases of the bending of a rod and of the loading of a hemispherical shell.

### 3.5.1 Lamb’s problem

We have simulated Lamb’s problem (see [83]) : a semi-infinite plane is described by a rectangular domain, with a free surface on the upper side, and absorbing conditions on the other sides. On a surface particle, we apply a vertical force, whose time evolution is described by a Ricker function (the second derivative of a Gaussian function). We observe the propagation of three waves : inside the domain, a compression wave of type P and a shear wave of type S, and on the surface, a Rayleigh wave. We also have a P-S wave linking the P and the S waves, which is a conversion of the P wave into an S wave after reflection at the surface. In the case of a two-dimensional problem, the intensity of P and S waves is inversely proportional to the distance to the source, and the intensity of the Rayleigh wave is preserved throughout its propagation.

We have chosen the following characteristics for the material : the density is  $\rho = 2200 \text{ kg.m}^{-3}$ , the Poisson coefficient is  $\nu = 0.25$ , Young’s modulus is  $E = 1.88.10^{10} \text{ Pa}$ . The velocity of P waves is therefore approximately  $3202 \text{ m.s}^{-1}$  and the velocity of S waves is  $1849 \text{ m.s}^{-1}$ .

The force applied is a Ricker of central frequency 14.5 Hz, that is, with maximal frequency around 40 Hz. The minimal wave length for P waves is therefore 80 m, and the minimal wave length for S waves is approximately 50 m. In the rest of this subsection, we call “wave length” this minimal wave length of 50 m. We indicate the discretization step in terms of number of elements per wave length.

Lamb’s problem has the interesting particularity of having a semi-analytic solution : Cagniard’s method is described in [27]. We have compared our results with this exact solution and thus estimate the numerical error of the scheme. The comparison between the numerical results and the semi-analytic solution obtained at 300 meters from the source, on the surface, with  $\Delta x = \Delta y = 5 \text{ m}$  (10 points per wave length), is shown on figure 3.2.

We compute the same result with different spatial discretizations, with  $\Delta x = \Delta y$ . As expected, refining the spatial discretization decreases the error. The velocity of the different waves agrees with the exact solution, and the amplitude of the waves

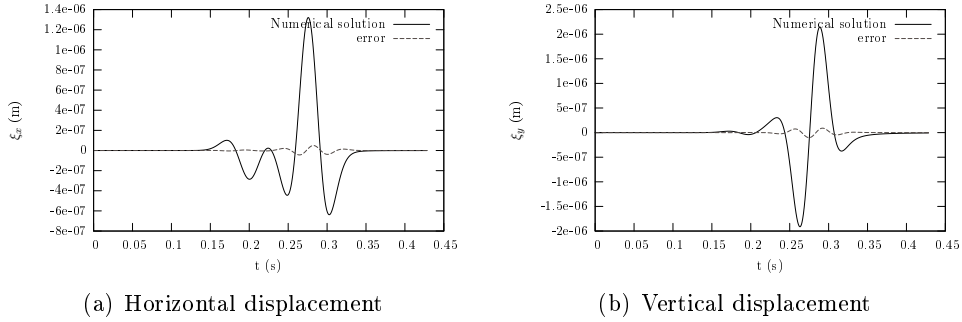


FIG. 3.2 – Displacement at the surface, 300 meters from source, with  $\Delta x = 5$  m,  $\Delta y = 5$  m (10 points per wave length)

is accurately captured with more than 10 elements per wavelength. The accuracy of the method cannot compare with that of spectral elements (5 points per wave length), but it gives better results than classic second-order finite elements (30 points per wave length), and mostly on the surface, where we recover the non-dissipative Rayleigh wave. This is probably due to the introduction of parameter  $\theta$  which helps us simulate the rotation of the particle precisely, instead of recovering it as a Taylor development of the displacement, thus losing one order of accuracy for rotation.

If we measure the  $L^\infty$ -error on vertical displacement at 300 meters from the source, with an angle of  $60^\circ$  with the horizontal axis, we obtain an approximate slope of 2 fitting the points (figure 3.3). This confirms the results of subsection 3.3.1 as to the second-order nature of the spatial scheme.

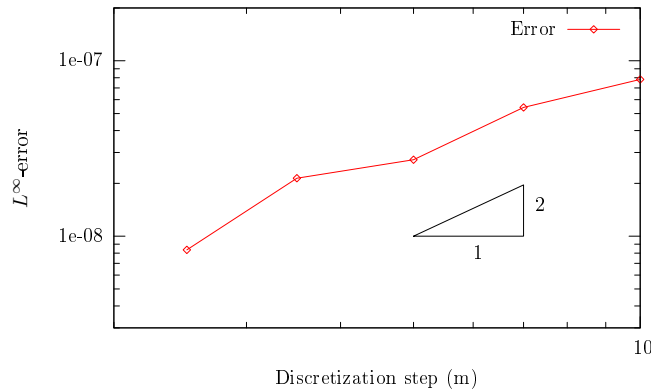


FIG. 3.3 – Linear fitting of the log-log diagram for the numerical error against the spatial discretization step

### 3.5.2 Conservation of energy

In order to illustrate the conservation of energy by the scheme, we model the evolution of a pinched cylinder. The cylinder has a radius of 1m, a height of 2m and

a width of 1cm. The physical characteristics are that of steel ( $E = 210000$  MPa,  $\nu = 0.25$ ). The cylinder is discretized with 50 elements on the perimeter, 20 elements on the height and one element in thickness. Opposite forces are applied on two sides of the cylinder, pinching it. At the initial time, the forces are removed, and the cylinder is left free. We simulate the system over 500,000 time-steps, corresponding to 45 oscillations of the first mode of the cylinder. The large number of time-steps required reflects the fact that a number of smaller local oscillations propagate at high velocities, and that the cylinder is very thin. On figure 3.4, we observe an excellent preservation of the energy. The configuration of the cylinder at the moment of release is shown on figure 3.5.

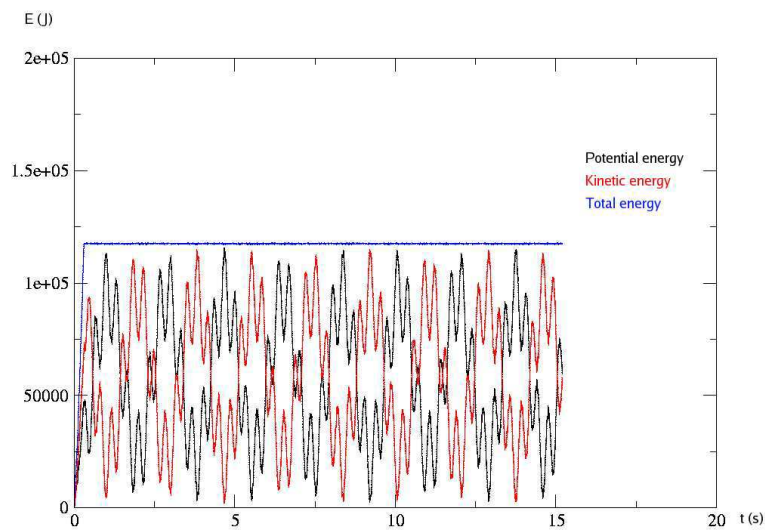


FIG. 3.4 – Total, potential and kinetic energies for the simulation of the cylinder over 500000 time-steps

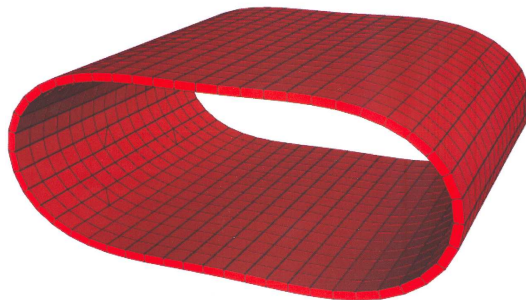


FIG. 3.5 – Initial configuration of the cylinder

The preservation of energy is quite satisfactory, even with large displacements in a three-dimensional geometry.

### 3.5.3 Static shell test cases

In order to show the versatility of the method, we compare the static deformation obtained with Mka3D (adding damping to the model) to the second and fourth benchmarks for geometric nonlinear shells found in [130].

The first benchmark considered is that of the cantilever subjected to an end moment  $\mathcal{M}$ . Let  $N$  be the number of discrete elements in the length of the beam. We take one element in the two other directions. We immediately see that at the equilibrium, for each particle  $I$ , the sum of forces is null, and using the boundary conditions, the force  $\mathbf{F}_{IJ}$  between particles is always null. The sum of moments is also zero, and is equal to the end moment  $\mathcal{M}$ . As  $\mathbf{F}_{IJ} = \mathbf{0}$ , if we denote  $\theta_N$  the angle between two consecutive particles, using (3.51),

$$\mathbf{M}_{IJ} = \mathbf{M}_{IJ}^f = \frac{EI}{2D_{IJ}^0} \sin \theta_N \quad (3.46)$$

If we take the maximum end moment  $\mathcal{M}_{max} = 2\pi \frac{EI}{L}$ , which is the theoretical moment applied to bend the beam into a circle, we obtain :

$$N\theta_N = N \arcsin \left( \frac{2\pi}{N} \right) \quad (3.47)$$

As  $N$  tends to infinity, the deflection angle of the end  $N\theta_N$  tends to  $2\pi$  with second order accuracy, which indicates a second order convergence to the theoretical solution. This convergence has been checked in practice.

The second benchmark considered is a hemispherical shell with an  $18^\circ$  circular cutout at its pole, loaded by alternating radial point forces  $\mathcal{F}$  at  $90^\circ$  intervals. The shell is discretized by 16 elements in latitude, 64 elements in longitude and one element in thickness. The initial and deformed geometries are shown on figure 3.6. The radial deflections at the points of loading A and B are compared with the results obtained in [130] in figure 3.7. Our results are in very good agreement with the benchmark.

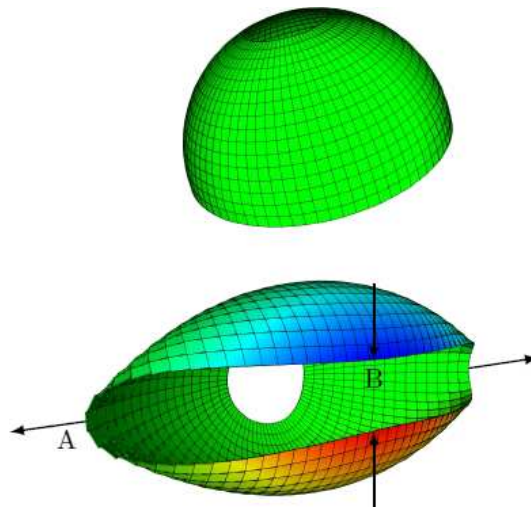


FIG. 3.6 – Initial geometry and deformed geometry at  $\mathcal{F} = 400N$  for the hemispherical shell subjected to alternating radial forces

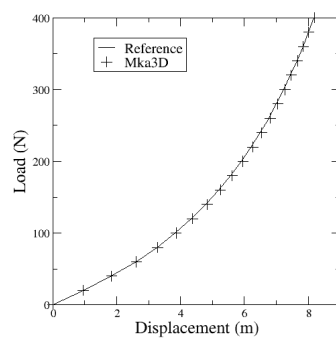
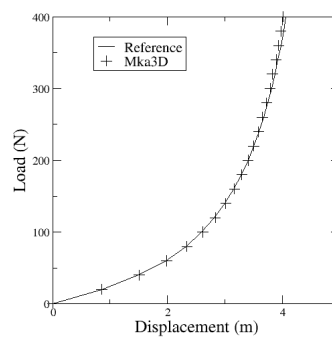


FIG. 3.7 – Load-deflection curves for the hemisphere shell at the loading points A (left) and B (right)



### 3.6 Conclusion

In this chapter, we proposed a numerical discretization of material continuum, allowing for the simulation of three-dimensional wave propagation as well as shell or multibody dynamics, in a monolithic way. It is consistent with the equations of elastodynamics at order 2 in space and in time, and we numerically recover the propagation of seismic waves in the body of the material and at the free surface. Furthermore, the dynamics of the system are written in the form of a Hamiltonian dynamics. Using symplectic schemes, we correctly reproduce the preservation of the system energy. This ensures numerical  $L^2$ -stability of the scheme, and allows long-time stable simulations with large displacements and large deformations. As the method is entirely local and requires no matrix inversion, it can be easily parallelized with domain decomposition. The main restriction is the size of the time-step due to the explicit nature of the integration scheme. This could be remedied by using asynchronous symplectic integrators in order to have local time refinement at small elements and a global larger time-step [94]. This work can be seen as a first step towards using more complex constitutive laws (while still maintaining stability of the scheme), and towards coupling particle dynamics simulation with a fluid dynamics simulation for fluid-structure interaction.

### 3.7 Appendices

#### 3.7.1 Expression of the equivalent volumetric deformation with a free surface

We need to account for the boundary condition  $\sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}$  at every free surface of the particles. We have seen in section 3.2.3 that the discrete equivalent for  $\sigma \cdot \mathbf{n}$  is  $\mathbf{F}_{IJ}$ . For a given particle  $I$ , we assume that the particle is surrounded by real particles  $J \in \mathcal{V}_I$ , and by ‘ghost’ particles  $J \in \mathcal{V}_I^l$  at every free boundary. The position of these particles is adjusted in order to satisfy the boundary condition.

The equivalent deformation of particle  $I$  can be expressed as in the bulk of the material :

$$\varepsilon_I^v = \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \frac{1}{2} \frac{S_{IJ}}{V_I} \Delta \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ} + \sum_{J \in \mathcal{V}_I^l} \frac{1}{2} \frac{S_{IJ}}{V_I} \Delta \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ}$$

For a ghost particle  $J \in \mathcal{V}_I^l$ , the boundary condition  $\mathbf{F}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ} = 0$  boils down to :

$$\frac{S_{IJ}}{D_{IJ}^0} \frac{E}{1 + \nu} \Delta \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ} + S_{IJ} \frac{E\nu}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \varepsilon_I^v = 0 \quad (3.48)$$

Summing (3.48) over the ghost particles, and using the fact that the free volume  $V_I^l$  satisfies

$$V_I^l = \sum_{J \in \mathcal{V}_I^l} \frac{S_{IJ} D_{IJ}^0}{6}$$

we find that the deformation of the links with the ghost particles should follow the equation :

$$\sum_{J \in \mathcal{V}_I^l} \frac{1}{2} \frac{S_{IJ}}{V_I} \Delta \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ} = -\frac{3\nu}{1-2\nu} \frac{V_I^l}{V_I + \frac{3\nu}{1-2\nu} V_I^l} \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \frac{1}{2} \frac{S_{IJ}}{V_I} \Delta \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ}$$

Inserting this relation in the expression of  $\varepsilon_I^v$ , we check that :

$$\varepsilon_I^v = \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \frac{1}{2} \frac{S_{IJ}}{V_I + \frac{3\nu}{1-2\nu} V_I^l} \Delta \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ}$$

### 3.7.2 Expression of the coefficients for the flexion and torsion of the particle links

We denote :

$$I_{IJ}^s = \iint_{S_{IJ}} (\mathbf{X} \mathbf{P}_{IJ} \cdot \mathbf{s}_{IJ})^2 dX \quad (3.49)$$

$$I_{IJ}^t = \iint_{S_{IJ}} (\mathbf{X} \mathbf{P}_{IJ} \cdot \mathbf{t}_{IJ})^2 dX \quad (3.50)$$

the principal moments of the interface between particles  $I$  and  $J$ , we require that :

$$\begin{cases} \alpha_n + \alpha_s = \frac{EI_{IJ}^s}{S_{IJ}} \\ \alpha_n + \alpha_t = \frac{EI_{IJ}^t}{S_{IJ}} \\ \alpha_s + \alpha_t = \frac{E(I_{IJ}^s + I_{IJ}^t)}{2(1+\nu)S_{IJ}} \end{cases} \quad (3.51)$$

The expression of the  $\alpha$  is given by :

$$\alpha_n = \frac{(1+2\nu)E}{4(1+\nu)S_{IJ}} (I_{IJ}^s + I_{IJ}^t) \quad (3.52)$$

$$\alpha_s = \frac{E}{4(1+\nu)S_{IJ}} ((3+2\nu)I_{IJ}^s - (1+2\nu)I_{IJ}^t) \quad (3.53)$$

$$\alpha_t = \frac{E}{4(1+\nu)S_{IJ}} ((3+2\nu)I_{IJ}^t - (1+2\nu)I_{IJ}^s) \quad (3.54)$$

### 3.7.3 Derivation of the forces and torques from the potential energies

The derivation of potential energies is straightforward :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial U_t}{\partial \mathbf{X}_I} &= - \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \frac{S_{IJ}}{D_{IJ}^0} \frac{E}{1+\nu} \Delta \mathbf{u}_{IJ} \\
 \frac{\partial U_d}{\partial \mathbf{X}_I} &= - \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} S_{IJ} \varepsilon_{IJ}^v \left( \mathbf{n}_{IJ} + \frac{1}{D_{IJ}} \Delta \mathbf{u}_{IJ} - \frac{1}{D_{IJ}} (\Delta \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ}) \mathbf{n}_{IJ} \right) \\
 \frac{\partial U_t}{\partial \mathbf{Q}_I} &= - \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \frac{S_{IJ}}{D_{IJ}^0} \frac{E}{1+\nu} \Delta \mathbf{u}_{IJ} \otimes \mathbf{X}_I^0 \mathbf{P}_{IJ} \\
 \frac{\partial U_d}{\partial \mathbf{Q}_I} &= - \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} S_{IJ} \varepsilon_{IJ}^v \mathbf{n}_{IJ} \otimes \mathbf{X}_I^0 \mathbf{P}_{IJ} \\
 \frac{\partial U_f}{\partial \mathbf{Q}_I} &= - \sum_{J \in \mathcal{V}_I} S_{IJ} \frac{E}{D_{IJ}^0} (\alpha_n (\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{n}_{IJ}^0) \otimes \mathbf{n}_{IJ}^0 + \alpha_s (\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{s}_{IJ}) \otimes \mathbf{s}_{IJ} \\
 &\quad + \alpha_t (\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{t}_{IJ}) \otimes \mathbf{t}_{IJ})
 \end{aligned}$$

Using the expression of the force  $\mathbf{F}_{IJ}$  between particles  $I$  and  $J$  :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{F}_{IJ} &= \frac{S_{IJ}}{D_{IJ}^0} \frac{E}{1+\nu} \Delta \mathbf{u}_{IJ} \\
 &\quad + S_{IJ} \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \varepsilon_{IJ}^v \left( \mathbf{n}_{IJ} + \frac{1}{D_{IJ}} \Delta \mathbf{u}_{IJ} - \frac{1}{D_{IJ}} (\Delta \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ}) \mathbf{n}_{IJ} \right)
 \end{aligned}$$

we obtain :

$$m_I \dot{\mathbf{v}}_I = \bar{\mathbf{T}}_I = \mathbf{F}_{IJ}$$

For the rotational part, it is easily obtained that :

$$\mathbf{j}(\mathbf{R}_I \boldsymbol{\Omega}_I) = \mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}_I) \mathbf{D} - \mathbf{D} \mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}_I) = \mathbf{P}_I \cdot \mathbf{Q}^T - \mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{P}^T$$

Deriving in time, we obtain :

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{j}(\mathbf{R}_I \cdot \boldsymbol{\Omega}_I)) = - \left( \frac{\partial H_h}{\partial \mathbf{Q}_I} \right) \mathbf{Q}_I^T + \mathbf{Q}_I \left( \frac{\partial H_h}{\partial \mathbf{Q}_I} \right)^T$$

Using the fact that :

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) \cdot \mathbf{Q} = \mathbf{a} \otimes (\mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{b})$$

we get :

$$\frac{\partial U_t}{\partial \mathbf{Q}_I} \cdot \mathbf{Q}_I^T = - \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \frac{S_{IJ}}{D_{IJ}^0} \frac{E}{1+\nu} \Delta \mathbf{u}_{IJ} \otimes (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{X}_I^0 \mathbf{P}_{IJ}) \quad (3.55)$$

$$\frac{\partial U_d}{\partial \mathbf{Q}_I} \cdot \mathbf{Q}_I^T = - \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} S_{IJ} \varepsilon_{IJ}^v \mathbf{n}_{IJ} \otimes (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{X}_I^0 \mathbf{P}_{IJ}) \quad (3.56)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_f}{\partial \mathbf{Q}_I} \cdot \mathbf{Q}_I^T = & - \sum_{J \in \mathcal{V}_I} S_{IJ} \frac{E}{D_{IJ}^0} (\alpha_n (\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{n}_{IJ}^0) \otimes (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{n}_{IJ}^0) + \alpha_s (\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{s}_{IJ}) \otimes (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{s}_{IJ}) \\ & + \alpha_t (\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{t}_{IJ}) \otimes (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{t}_{IJ})) \end{aligned} \quad (3.57)$$

Denoting  $\text{symm}()$  and  $\text{skew}()$  the symmetric and skew-symmetric parts of a matrix, we note that for any  $\mathbf{a}$  and  $\mathbf{b}$  :

$$\mathbf{j}(\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}) = -\text{skew}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})$$

Using the expression of the torques  $\mathbf{M}_{IJ}^t$  and  $\mathbf{M}_{IJ}^f$  :

$$\mathbf{M}_{IJ}^t = \frac{S_{IJ}}{D_{IJ}^0} \frac{E}{1+\nu} (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{X}_I^0 \mathbf{P}_{IJ}) \wedge \Delta \mathbf{u}_{IJ} + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \varepsilon_{IJ}^v S_{IJ} (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{X}_I^0 \mathbf{P}_{IJ}) \wedge \mathbf{n}_{IJ}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{IJ}^f = & \frac{S_{IJ}}{D_{IJ}^0} (\alpha_n (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{n}_{IJ}^0) \wedge (\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{n}_{IJ}^0) + \alpha_s (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{s}_{IJ}) \wedge (\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{s}_{IJ}) \\ & + \alpha_t (\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{t}_{IJ}) \wedge (\mathbf{Q}_J \cdot \mathbf{t}_{IJ})) \end{aligned}$$

equation (3.15) gives us the equation on the angular velocity :

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{R}_I \cdot \boldsymbol{\Omega}_I) = \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \mathbf{M}_{IJ}^t + \mathbf{M}_{IJ}^f$$

### 3.7.4 Details on the implementation of the RATTLE scheme with forces and torques

For forces, the relation is simple :

$$\frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{X}_I} (\mathbf{X}, \mathbf{Q}) = - \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \mathbf{F}_{IJ}$$

For torques, we have :

$$\frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{Q}_I} (\mathbf{X}, \mathbf{Q}) = \dot{\mathbf{P}}_I - \mathbf{Q}_I \Lambda_I$$

where  $\Lambda_I$  is the symmetric matrix of Lagrange multipliers associated with constraint  $\mathbf{Q}_I \cdot \mathbf{Q}_I^T = \text{Id}$ . On the other hand,

$$\begin{aligned} \mathbf{j} \left( \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \mathbf{M}_{IJ} \right) &= \dot{\mathbf{P}}_I \cdot \mathbf{Q}_I^T + \mathbf{P}_I \cdot \dot{\mathbf{Q}}_I^T - \dot{\mathbf{Q}}_I \cdot \mathbf{P}_I^T - \mathbf{Q}_I \cdot \dot{\mathbf{P}}_I^T \\ &= \mathbf{Q}_I \cdot \left( \frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{Q}_I} (\mathbf{X}, \mathbf{Q}) \right)^T - \frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{Q}_I} (\mathbf{X}, \mathbf{Q}) \cdot \mathbf{Q}_I^T \end{aligned}$$

as the  $\Lambda_I$  are symmetric. Therefore, there exists a symmetric matrix  $\Lambda_I^0$  such that :

$$\frac{\partial U_h}{\partial \mathbf{Q}_I}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) = \left( -\frac{1}{2} \mathbf{j} \left( \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \mathbf{M}_{IJ} \right) - \Lambda_I^0 \right) \cdot \mathbf{Q}_I$$

We denote :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_I^n &= \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \mathbf{F}_{IJ} \\ \mathcal{M}_I^n &= \sum_{J \in \mathcal{V}_I} \mathbf{M}_{IJ} \end{aligned}$$

where forces  $\mathbf{F}_{IJ}$  and torques  $\mathbf{M}_{IJ}$  have been computed with positions  $\mathbf{X}^n$  and  $\mathbf{Q}^n$ .

We can rewrite equations (3.29) to (3.35) as follows :

$$\mathbf{T}_I^{n+1/2} = \mathbf{P}_I^n + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}_I^n \quad (3.58)$$

$$\mathbf{P}_I^{n+1/2} = \mathbf{P}_I^n + \frac{\Delta t}{4} \mathbf{j}(\mathcal{M}_I^n) \mathbf{Q}_I^n + \frac{\Delta t}{2} (\Lambda_I^n + \Lambda_I^{n,0}) \mathbf{Q}_I^n \quad (3.59)$$

$$\mathbf{X}_I^{n+1} = \mathbf{X}_I^n + \frac{\Delta t}{m_I} \mathbf{T}_I^{n+1/2} \quad (3.60)$$

$$\mathbf{Q}_I^{n+1} = \mathbf{Q}_I^n + \Delta t \mathbf{P}_I^{n+1/2} \mathbf{D}_I^{-1} \quad (3.61)$$

$$\text{where } \Lambda_I^n \text{ is such that } \mathbf{Q}_I^{n+1\text{T}} \cdot \mathbf{Q}_I^{n+1} = \text{Id} \quad (3.62)$$

$$\mathbf{T}_I^{n+1} = \mathbf{T}_I^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}_I^{n+1} \quad (3.63)$$

$$\mathbf{P}_I^{n+1} = \mathbf{P}_I^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{4} \mathbf{j}(\mathcal{M}_I^{n+1}) \mathbf{Q}_I^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} (\tilde{\Lambda}_I^{n+1} + \tilde{\Lambda}_I^{n+1,0}) \mathbf{Q}_I^{n+1}, \quad (3.64)$$

$$\text{where } \Lambda_I^n \text{ is such that } \mathbf{Q}_I^{n+1\text{T}} \cdot \mathbf{P}_I^{n+1} \cdot \mathbf{D}_I^{-1} + \mathbf{D}_I^{-1} \cdot \mathbf{P}_I^{n+1\text{T}} \cdot \mathbf{Q}_I^{n+1} = 0 \quad (3.65)$$

### 3.7.5 Resolution of the nonlinear step of the RATTLE time-scheme

In this appendix, we examine the resolution of the nonlinear step of the RATTLE time-scheme described in section 3.4.3. We determine conditions on the time-step  $\Delta t$  that ensure convergence of the iterative algorithm (3.40)–(3.43) in a certain neighbourhood of identity, and we conclude on the existence and uniqueness of a solution in this neighbourhood.

We denote  $\mathcal{B}(\mathbf{0}, r)$  the ball of center  $\mathbf{0}$  and radius  $r$  :

$$\mathcal{B}(\mathbf{0}, r) = \{(e_1, e_2, e_3) / e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 < r^2\}$$

Using the numerical scheme described in section 3.4.3, we first show that it stabilizes a ball included in  $\mathcal{B}(\mathbf{0}, \frac{\sqrt{2}}{2})$ , under a CFL-type condition on  $\Delta t$ . We then show convergence in that same ball, and we conclude on convergence to the unique fixed point.

### 3.7.5.1 The iterative scheme is bounded

Starting with a given  $(e_0, e_1, e_2, e_3)$  computed in the previous iteration, such that  $e_0^2 + e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 = 1$ , the iterative scheme (3.40)–(3.43) gives the new quadruplet  $(e_0^*, e_1^*, e_2^*, e_3^*)$  defined by :

$$\begin{aligned} e_1^* &= \frac{\Delta t \alpha_1 - 2(d_2 - d_3)e_2 e_3}{2(d_2 + d_3)e_0} \\ e_2^* &= \frac{\Delta t \alpha_2 - 2(d_3 - d_1)e_1 e_3}{2(d_1 + d_3)e_0} \\ e_3^* &= \frac{\Delta t \alpha_3 - 2(d_1 - d_2)e_1 e_2}{2(d_1 + d_2)e_0} \\ e_0^* &= \sqrt{1 - (e_1^*)^2 - (e_2^*)^2 - (e_3^*)^2} \end{aligned}$$

For this scheme to be well-defined,  $(e_1^*, e_2^*, e_3^*)$  should be in  $\mathcal{B}(\mathbf{0}, 1)$ . We impose a stronger condition, with  $(e_1, e_2, e_3)$  and  $(e_1^*, e_2^*, e_3^*)$  in  $\mathcal{B}(\mathbf{0}, \beta)$  where  $\beta$  is less than  $\frac{1}{2}$ .

Suppose that :

$$e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 < \beta$$

We want to have :

$$(e_1^*)^2 + (e_2^*)^2 + (e_3^*)^2 < \beta$$

As  $e_0^2 + e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 = 1$ , we also have  $e_0^2 > 1 - \beta$ . Since :

$$|e_2 e_3| \leq \frac{1}{2}(e_2^2 + e_3^2) < \frac{\beta}{2}$$

we obtain :

$$|e_1^*| < \frac{1}{2\sqrt{1 - \beta}(d_2 + d_3)} (|\Delta t \alpha_1| + \beta|d_2 - d_3|)$$

Let us define  $I_1 = d_2 + d_3$ ,  $I_2 = d_1 + d_3$ ,  $I_3 = d_1 + d_2$  and :

$$\begin{aligned} f(\beta) &= \frac{1}{4(1 - \beta)} \left[ \Delta t^2 \left( \frac{|\alpha_1|^2}{I_1^2} + \frac{|\alpha_2|^2}{I_2^2} + \frac{|\alpha_3|^2}{I_3^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + 2\beta \Delta t \left( \frac{|d_2 - d_3||\alpha_1|}{I_1^2} + \frac{|d_3 - d_1||\alpha_2|}{I_2^2} + \frac{|d_1 - d_2||\alpha_3|}{I_3^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \beta^2 \left( \frac{|d_2 - d_3|^2}{I_1^2} + \frac{|d_3 - d_1|^2}{I_2^2} + \frac{|d_1 - d_2|^2}{I_3^2} \right) \right] \end{aligned}$$

then the previous assumptions imply that :

$$(e_1^*)^2 + (e_2^*)^2 + (e_3^*)^2 < f(\beta)$$

Therefore, a sufficient condition for the scheme to be bounded is  $f(\beta) \leq \beta$ . We know that :

$$\frac{|d_2 - d_3|}{I_1} = \frac{|d_2 - d_3|}{d_2 + d_3} \leq 1$$

as the  $d_i$  are positive. Then :

$$f(\beta) \leq \frac{1}{4(1-\beta)} \left( \Delta t^2 \left[ \frac{|\alpha_1|^2}{I_1^2} + \frac{|\alpha_2|^2}{I_2^2} + \frac{|\alpha_3|^2}{I_3^2} \right] + 2\beta\Delta t \left( \frac{|\alpha_1|}{I_1} + \frac{|\alpha_2|}{I_2} + \frac{|\alpha_3|}{I_3} \right) + 3\beta^2 \right)$$

Hence, a sufficient condition for  $f(\beta) \leq \beta$  to hold is :

$$\Delta t^2 \left( \frac{|\alpha_1|^2}{I_1^2} + \frac{|\alpha_2|^2}{I_2^2} + \frac{|\alpha_3|^2}{I_3^2} \right) + 2\beta\Delta t \left( \frac{|\alpha_1|}{I_1} + \frac{|\alpha_2|}{I_2} + \frac{|\alpha_3|}{I_3} \right) + 7\beta^2 - 4\beta < 0 \quad (3.66)$$

Let us define :

$$B = \frac{|\alpha_1|}{I_1} + \frac{|\alpha_2|}{I_2} + \frac{|\alpha_3|}{I_3}$$

$$C = \frac{|\alpha_1|^2}{I_1^2} + \frac{|\alpha_2|^2}{I_2^2} + \frac{|\alpha_3|^2}{I_3^2}$$

A sufficient condition to obtain (3.66) is to have  $\Delta t \leq \tilde{\Delta t}$  with :

$$\tilde{\Delta t} = \frac{-2\beta B + \sqrt{4\beta^2 B^2 - 4(7\beta^2 - 4\beta)C}}{2C}$$

As we supposed that  $0 < \beta < \frac{1}{2} < \frac{4}{7}$ ,  $7\beta^2 - 4\beta < 0$ . We also know that  $B^2 \leq 3C$  and  $C \leq B^2$ , and it follows that :

$$\tilde{h} \geq \frac{2\sqrt{\frac{\beta - \beta^2}{3}} - \beta}{B}$$

In the end, we have the following lemma :

**Lemma 1** *Let us choose  $0 < \beta < \frac{1}{2}$  and  $\Delta t > 0$  such that :*

$$\Delta t \left( \frac{|\alpha_1|}{I_1} + \frac{|\alpha_2|}{I_2} + \frac{|\alpha_3|}{I_3} \right) \leq 2\sqrt{\frac{\beta - \beta^2}{3}} - \beta \quad (3.67)$$

*If  $(e_1, e_2, e_3) \in \mathcal{B}(0, \sqrt{\beta})$ , then  $(e_1^*, e_2^*, e_3^*) \in \mathcal{B}(\mathbf{0}, \sqrt{\beta})$ .*

### 3.7.5.2 The iterative scheme is a contraction

Following the previous subsection, suppose that  $(e_1, e_2, e_3)$  and  $(f_1, f_2, f_3)$  are in  $\mathcal{B}(0, \sqrt{\beta})$ , and let  $e_0 = \sqrt{1 - e_1^2 - e_2^2 - e_3^2}$  and  $f_0 = \sqrt{1 - f_1^2 - f_2^2 - f_3^2}$ . We define  $e^*$  and  $f^*$  as before. We show here that  $\|e^* - f^*\| \leq \rho\|e - f\|$ , with  $0 < \rho < 1$ .

We compute :

$$e_1^* - f_1^* = \frac{(d_2 - d_3)}{I_1 e_0} \left[ (f_2 - e_2) \left( \frac{f_3 + e_3}{2} \right) + (f_3 - e_3) \left( \frac{f_2 + e_2}{2} \right) \right] + \frac{f_0 - e_0}{e_0} f_1^*$$

We then use the fact that  $\frac{|d_2-d_3|}{f_1} < 1$ . As the same type of results hold with a circular permutation of indices  $x, y$  and  $z$ , we let  $\|\cdot\|$  the Euclidean norm in  $\mathbb{R}^3$  on  $(e_1, e_2, e_3)$ , and we find :

$$\begin{aligned} \|e^* - f^*\|^2 &\leq 2 \frac{\left(\frac{f_2+e_2}{2}\right)^2 + \left(\frac{f_3+e_3}{2}\right)^2}{e_0^2} (f_1 - e_1)^2 + 2 \frac{\left(\frac{f_1+e_1}{2}\right)^2 + \left(\frac{f_3+e_3}{2}\right)^2}{e_0^2} (f_2 - e_2)^2 \\ &+ 2 \frac{\left(\frac{f_1+e_1}{2}\right)^2 + \left(\frac{f_2+e_2}{2}\right)^2}{e_0^2} (f_3 - e_3)^2 + \frac{4}{e_0^2} (f_2 - e_2)(f_3 - e_3) \left(\frac{f_2 + e_2}{2}\right) \left(\frac{f_3 + e_3}{2}\right) \\ &+ \frac{4}{e_0^2} (f_1 - e_1)(f_3 - e_3) \left(\frac{f_1 + e_1}{2}\right) \left(\frac{f_3 + e_3}{2}\right) + \frac{4}{e_0^2} (f_1 - e_1)(f_2 - e_2) \left(\frac{f_1 + e_1}{2}\right) \left(\frac{f_2 + e_2}{2}\right) \\ &+ 2 \frac{(f_1^*)^2 + (f_2^*)^2 + (f_3^*)^2}{e_0^2} (f_0 - e_0)^2 \end{aligned}$$

Since :

$$\begin{aligned} \frac{4}{e_0^2} (f_2 - e_2)(f_3 - e_3) \left(\frac{f_2 + e_2}{2}\right) \left(\frac{f_3 + e_3}{2}\right) &\leq \frac{2}{e_0^2} \left[ (f_2 - e_2)^2 \left(\frac{f_2 + e_2}{2}\right)^2 \right. \\ &\left. + (f_3 - e_3)^2 \left(\frac{f_3 + e_3}{2}\right)^2 \right] \end{aligned}$$

we have :

$$\|e^* - f^*\|^2 \leq \frac{2}{e_0^2} \left( \left\| \frac{e+f}{2} \right\|^2 \|e - f\|^2 + \|f^*\|^2 (f_0 - e_0)^2 \right)$$

We also have :

$$(f_0 - e_0)^2 \leq \frac{\left\| \frac{e+f}{2} \right\|^2}{\left(\frac{e_0+f_0}{2}\right)^2} \|e - f\|^2$$

In the end, we obtain the upper bound :

$$\|e^* - f^*\|^2 \leq 2 \frac{\left\| \frac{e+f}{2} \right\|^2}{e_0^2} \left( 1 + \frac{\|f^*\|^2}{\left(\frac{e_0+f_0}{2}\right)^2} \right) \|e - f\|^2$$

If we take the same hypotheses as in the first subsection, that is,  $(e_1, e_2, e_3) \in \mathcal{B}(\mathbf{0}, \sqrt{\beta})$  and  $(f_1, f_2, f_3) \in \mathcal{B}(\mathbf{0}, \sqrt{\beta})$ , and  $h$  such that  $(e_1^*, e_2^*, e_3^*) \in \mathcal{B}(\mathbf{0}, \sqrt{\beta})$  and  $(f_1^*, f_2^*, f_3^*) \in \mathcal{B}(\mathbf{0}, \sqrt{\beta})$ , then due to the convexity of  $\mathcal{B}(\mathbf{0}, \sqrt{\beta})$ , we have :

$$\left\| \frac{e+f}{2} \right\|^2 < \beta$$

and moreover, as  $e_0^2 > 1 - \beta$  et  $f_0^2 > 1 - \beta$ , then  $\left(\frac{e_0+f_0}{2}\right)^2 > 1 - \beta$ .



Then :

$$2 \frac{\|\frac{e+f}{2}\|^2}{e_0^2} \left( 1 + \frac{\|f^*\|^2}{\left(\frac{e_0+f_0}{2}\right)^2} \right) \leq 2 \frac{\beta}{1-\beta} \left( 1 + \frac{\beta}{1-\beta} \right) = \frac{2\beta}{(1-\beta)^2}$$

In order to have a scheme which is a contraction, it is sufficient to impose :

$$\frac{2\beta}{(1-\beta)^2} \leq 1$$

As  $0 < \beta < \frac{1}{2}$ , it is sufficient to choose :

$$\beta \leq 2 - \sqrt{3}$$

### 3.7.5.3 Optimization on constant $\beta$

Optimizing the stability condition (3.67) on  $\Delta t$ , we obtain the following optimal value of  $\beta$  :

$$\beta_{\max} = \frac{7 - \sqrt{21}}{14} \approx 0.17$$

### 3.7.5.4 Conclusion

If we take the time-step  $\Delta t$  such that :

$$\Delta t \left( \frac{|\alpha_1|}{I_1} + \frac{|\alpha_2|}{I_2} + \frac{|\alpha_3|}{I_3} \right) \leq 2 \sqrt{\frac{\beta_{\max} - \beta_{\max}^2}{3}} - \beta_{\max} \approx 0.26$$

then the iterative scheme starting with  $(1, 0, 0, 0)$  converges to the unique solution of the nonlinear problem in  $\mathcal{B}(\mathbf{0}, \sqrt{\frac{7-\sqrt{21}}{14}})$ , and the convergence speed is geometric with a rate  $\rho < 1$ . In addition,  $\rho < 28 - 6\sqrt{21} \approx 0.5$ . We thus have proved existence and uniqueness of the solution in  $\mathcal{B}(\mathbf{0}, \frac{\sqrt{2}}{2})$ .

# An Embedded Boundary method for the conservative coupling of a compressible flow and a rigid body

---

Réalisé avec Virginie Daru<sup>a,b</sup>, Christian Mariotti<sup>c</sup>, Serge Piperno<sup>d</sup> et Christian Tenaud<sup>a</sup>

<sup>a</sup> LIMSI - CNRS, 91403 Orsay, France

<sup>b</sup> Arts et Métiers Paris Tech, DynFluid Lab., 75013 Paris, France

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

<sup>d</sup> Université Paris-Est, CERMICS, 77455 Marne-la-Vallée, France

Ce chapitre est une version étendue d'un article soumis pour publication à *Journal of Computational Physics* sous le titre "An Embedded Boundary method for the conservative coupling of a compressible flow and a rigid body".

## 4.1 Introduction

This work is devoted to the development of a coupling method for fluid-structure interaction in the compressible case. We intend to simulate transient dynamics problems, such as the impact of shock waves onto a structure, with possible fracturing causing the ultimate breaking of the structure. An inviscid fluid flow model is considered, being convenient for treating such short time scale phenomena. The simulation of fluid-structure interaction problems is often computationally challenging due to the generally different numerical methods used for solids and fluids and the instability that may occur when coupling these methods. Monolithic methods have been employed, using an Eulerian formulation for both the solid and the fluid (for instance, the diffusive interface method [40, 1]), or a Lagrangian formulation for both the fluid and the solid (for example, the PFEM method [72]), but in general, most solid solvers use Lagrangian formulations and fluid solvers use Eulerian formulations. In this paper we consider the coupling of a Lagrangian solid solver with an Eulerian fluid solver.

A possible choice is to deform the fluid domain in order to follow the movement of the solid boundary : the Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) method has been developed to that end. It has been widely used for incompressible [29, 45] and compressible [38] fluid-structure interaction. However, when solid impact or fracture occur, ALE methods are faced with a change of topology in the fluid domain that requires remeshing and projection of the fluid state on the new mesh, which are costly and error prone procedures. Moreover remeshing is poorly adapted to load balancing for parallel computations.

In order to allow for easier fracturing of the solid, we instead choose a method based on fictitious domains that solves the fluid flow on a fixed Eulerian mesh, on which a Lagrangian solid body is superimposed. A special treatment is then applied on fluid cells near the boundary and inside the solid. Different types of fictitious domain methods have been developed over the last thirty years. They can roughly be classified in three main classes : penalization methods, interpolation methods and conservative methods. Among penalization methods, the Immersed Boundary method is certainly the best known and most widely used for fluid-structure interaction. It was originally introduced by Peskin for incompressible blood flows [113, 114]. The solid boundaries deform under the action of the fluid velocity, and the presence of the solid adds forces in the fluid formulation that enforce the impermeability of the solid. However, Xu and Wang have pointed out some numerical leaking of fluid into the solid [142]. Following Leveque and Li [92, 93], they advocate the use of the Immersed Interface method, which incorporates jump conditions in the finite differences used. However, the absence of fluid mass loss is still not ensured exactly. In a different approach, Olovsson *et al.* [110, 6] couple an Eulerian and a Lagrangian method by penalizing the penetration of the solid into the fluid by a damped spring force. As the stiffness of the spring goes to infinity, the penetration goes to zero. Boiron *et al.* [13] and Paccou *et al.* [111] consider the solid as a porous

medium, using a Brinkman porosity model. As the porosity goes to zero, the solid becomes impermeable. However, in both cases, as the stiffness grows or the porosity decreases, the use of implicit schemes is mandatory to avoid the severe stability condition of explicit schemes [13, 111]. For the high speed phenomena we consider, we use explicit solid and fluid solvers and an explicit coupling algorithm is better suited in order to avoid costly iterative procedures.

Another class of fictitious domain methods consists in enforcing the boundary conditions through interpolations in the vicinity of the boundary, using the exact values taken by the fluid on the boundary [106, 33]. The method seems to be very versatile, being used with incompressible Navier-Stokes [106, 33], Reynolds-averaged Navier-Stokes [137, 75, 76], turbulent boundary layer laws [19] and compressible Navier-Stokes [28]. The Ghost Fluid method developed by Fedkiw *et al.* [42, 41] relies on the same type of principle for compressible fluids. The interface is tracked using a level-set function, and conditions are applied on both sides of the interface to interpolate the boundary conditions. The advantage of these methods is that they do not suffer from additional time-step restriction due to stability, and the order of accuracy of the boundary conditions can be set *a priori*. However, the interpolation does not ensure the conservation of mass, momentum and energy in the system. This can cause problems when dealing with shock waves interacting with solids.

Conservative fictitious domain methods, generally referred to as Embedded Boundary methods, rely on a modified integration of the numerical fluid fluxes in the cells cut by the solid boundary. The original idea of the method can be traced back to Noh's CEL code [108]. However, the approach brings out the problem of small cut-cells, where stability would require reducing the time step to very small values. Several solutions have been proposed to avoid time step restrictions in those cells, involving a conservative averaging in the vicinity of the boundary [112, 36, 54, 70].

In this chapter, we develop a new coupling method for fluid-structure interaction within the framework of conservative fictitious domain methods. The finite volume scheme for the fluid calculation is modified in the near interface region. The method can be implemented independently from the time integration scheme used for the fluid, whether based on space-time splitting or multi-level time integration. Conservative fictitious domain methods have proven to give satisfactory conservation results for inviscid compressible flows in the case of static solid boundaries. Nevertheless, to our knowledge, conservation issues of the coupling have not been studied in the case of moving solids. We establish new conservation results in such a case. Our coupling method is designed to be capable of treating the general case of moving deformable bodies. In the present work, however, we only consider non-deformable (rigid) solid bodies. The case of deformable bodies is the object of ongoing work.

The fluid and solid solvers that we consider were chosen according to their ability to deal with shock waves and fracturing solids. The solid solver is based on a Discrete Element method, implemented in a code named Mka3D in the CEA [100].

It can handle elasticity as well as fracture and impact of solids. Solids are discretized into polyhedral particles, which interact through well-designed forces and torques. The particles have a rigid-body motion, and fracture is treated in a straightforward way by removing the physical cohesion between particles. The work reported in this chapter is a first step towards the coupling with the Mka3D code. The time integration scheme used by Mka3D (Verlet for displacement of the center of mass and RATTLE for rotation, see Chapter 3) is retained for the rigid body treatment. Concerning the fluid solver, we use a Cartesian grid explicit finite volume method, based on the high-order one-step monotonicity-preserving scheme developed in [25] and space-time splitting. However we emphasize that our coupling method is independent from both the Discrete Element method (as long as a solid interface is defined) and the numerical scheme used for the fluid calculation.

The chapter is organized as follows : we first present briefly the solid and fluid methods in section 4.2. In sections 4.3 and 4.4, we describe the proposed explicit coupling procedure between the fluid and the moving solid in the framework of an Embedded Boundary method. The analysis of the conservation properties of the coupling is reported in section 4.5, where we show that mass, momentum and energy of the solid-fluid system are exactly preserved. In section 4.6, we demonstrate results about the preservation on a discrete level of two solid-fluid systems in uniform movement. Finally, we illustrate the efficiency and accuracy of the method on one and two-dimensional static and dynamic benchmarks in section 4.7.

## 4.2 Solid and fluid discretization methods

### 4.2.1 Solid time-discretization method

We consider a non-deformable solid (rigid body). The position and velocity of the solid are given, respectively, by the position of its center of mass  $\mathbf{X}$ , the rotation matrix  $\mathbf{Q}$ , the velocity of the center of mass  $\mathbf{V}$  and the angular momentum matrix  $\mathbf{P}$ . The physical characteristics of the solid are its mass  $m$  and its matrix of inertia  $\mathbf{R}$  which, in the inertial frame, is a diagonal matrix with the principal moments of inertia  $I_1$ ,  $I_2$  and  $I_3$  on the diagonal. Here, we instead use the diagonal matrix  $\mathbf{D} = \text{diag}(d_1, d_2, d_3)$ , where :

$$\forall i \in \{1, 2, 3\}, d_i = \frac{I_1 + I_2 + I_3}{2} - I_i.$$

The angular momentum matrix  $\mathbf{P}$  can be related to the usual angular velocity vector  $\boldsymbol{\Omega}$  by the relation  $\mathbf{P} = \mathbf{D}\mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega})\mathbf{Q}$ , where the map  $\mathbf{j} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^{3 \times 3}$  is defined such that :

$$\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^3, \mathbf{j}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{y}.$$

Let us denote by  $\mathbf{F}$  and  $\mathbf{M}$  the external forces and torques acting on the solid, and by  $\Delta t$  the time-step. In order to preserve the energy of the solid over

time integration of the movement, we choose a symplectic second-order scheme for constrained Hamiltonian systems, the RATTLE scheme [60] :

$$\mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{V}^n + \frac{\Delta t}{2m} \mathbf{F}^n, \quad (4.1)$$

$$\mathbf{X}^{n+1} = \mathbf{X}^n + \Delta t \mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}}, \quad (4.2)$$

$$\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{P}^n + \frac{\Delta t}{4} \mathbf{j}(\mathcal{M}^n) \mathbf{Q}^n + \frac{\Delta t}{2} \Lambda^n \mathbf{Q}^n, \quad (4.3)$$

$$\mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{Q}^n + \Delta t \mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{D}^{-1}, \quad (4.4)$$

$$\text{with } \Lambda^n \text{ such that } (\mathbf{Q}^{n+1})^T \mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{I}, \quad (4.5)$$

$$\mathbf{V}^{n+1} = \mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2m} \mathbf{F}^{n+1}, \quad (4.6)$$

$$\mathbf{P}^{n+1} = \mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{4} \mathbf{j}(\mathcal{M}^{n+1}) \mathbf{Q}^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} \tilde{\Lambda}^{n+1} \mathbf{Q}^{n+1}, \quad (4.7)$$

$$\text{with } \tilde{\Lambda}^{n+1} \text{ such that } (\mathbf{Q}^{n+1})^T \mathbf{P}^{n+1} \mathbf{D}^{-1} + \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{P}^{n+1})^T \mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{0}. \quad (4.8)$$

The symmetric matrices  $\Lambda^n$  and  $\tilde{\Lambda}^{n+1}$  play the role of Lagrange multipliers for the constraints on matrices  $\mathbf{Q}^{n+1}$  and  $\mathbf{P}^{n+1}$ .

The scheme makes use of the velocity at half time-step  $\mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}}$ , which is constant during the time-step. Let us now consider the angular velocity. For a rigid solid, we have for all points  $\mathbf{x}$  :

$$\mathbf{X} - \mathbf{x} = \mathbf{Q} \cdot (\mathbf{X}^0 - \mathbf{x}^0),$$

$\mathbf{X}^0$  and  $\mathbf{x}^0$  being material points of the solid at initial time. Using the identity  $\boldsymbol{\Omega} \wedge (\mathbf{Q}\mathbf{x}) = \mathbf{P}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{x}$  for all  $\mathbf{x}$ , the velocity at point  $\mathbf{x}$  can be written as :

$$\mathbf{V}(\mathbf{x}) = \mathbf{V} + \mathbf{P}\mathbf{D}^{-1} \cdot (\mathbf{X}^0 - \mathbf{x}^0)$$

which is more convenient for use in the time scheme. In analogy with displacement, we consider  $\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}}$  as constant during the time-step, and we define the velocity of point  $\mathbf{x}$  at half time-step  $(n + \frac{1}{2})\Delta t$  :

$$\mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) = \mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{D}^{-1} \cdot (\mathbf{X}^0 - \mathbf{x}^0).$$

### 4.2.2 Fluid discretization method

The problem of the interaction of shock waves with solid surfaces can be at first studied using an inviscid fluid model. In this work, we consider inviscid compressible flows, which follow the Euler equations :

$$\mathbf{w}_t + \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{w}) = \mathbf{0},$$

where  $\mathbf{w} = (\rho, \rho\mathbf{u}, \rho E)^\top$  is the vector of the conservative variables, and  $\mathbf{f}(\mathbf{w})$  is the Euler flux :

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} \rho\mathbf{u} \\ \rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p\mathbf{l} \\ (\rho E + p)\mathbf{u} \end{pmatrix},$$

where the pressure  $p$  is given by a perfect gas law :  $p = (\gamma - 1) (\rho E - \frac{1}{2}\rho\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})$ .

To solve these equations, we use the OSMP numerical scheme, which is a one-step high-order scheme developed in [25, 26]. It is derived using a coupled space-time Lax-Wendroff approach, where the formal order of accuracy in the scalar case can be set at arbitrary order (in this chapter, we use order 11, that is the OSMP11 scheme). Imposing the MP conditions (Monotonicity Preserving) prevents the appearance of numerical oscillations in the vicinity of discontinuities while simultaneously avoiding the numerical diffusion of extrema. In one space dimension, on a uniform mesh with step-size  $\Delta x$ , at order  $p$ , it can be written :

$$w_j^{n+1} = w_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{j+\frac{1}{2}}^p - f_{j-\frac{1}{2}}^p)$$

where  $f_{j+\frac{1}{2}}^p$  is the  $p$ th-order-accurate numerical flux of the scheme at the cell interface  $(j+\frac{1}{2})$ . Given the  $l$  eigenvectors of the Jacobian matrix of the flux  $\mathbf{r}_k$  and eigenvalues  $\lambda_k$ , the general expression of the numerical fluxes can be written :

$$f_{j+\frac{1}{2}}^p = f_{j+\frac{1}{2}}^{\text{Roe}} + \frac{1}{2} \sum_k (\psi^p \mathbf{r})_{k,j+\frac{1}{2}} \quad (4.9)$$

where, for clarity, the superscript  $n$  has been omitted.  $f_{j+\frac{1}{2}}^{\text{Roe}}$  is the first order Roe flux defined as follows :

$$f_{j+\frac{1}{2}}^{\text{Roe}} = \frac{1}{2} (f_j + f_{j+1}) - \frac{1}{2} \sum_k (\delta|f|\mathbf{r})_{k,j+\frac{1}{2}} \quad (4.10)$$

with

$$\delta|f|_{k,j+1/2} = |\lambda|_{k,j+1/2} \delta\alpha_{k,j+1/2}$$

$\delta\alpha_{k,j+\frac{1}{2}} = \mathbf{r}_k \cdot (w_{j+1}^n - w_j^n)$  being the  $k$ -th Riemann invariant of the Jacobian matrix. The  $\psi^p$  are corrective terms to obtain order  $p$ . The function  $\psi$  can be decomposed in odd and even parts :

$$\psi_{k,j+\frac{1}{2}}^p = \sum_{n=1}^m \psi_{k,j+\frac{1}{2}}^{2n} + js \sum_{n=1}^{m1} \psi_{k,j+1-\frac{js}{2}}^{2n+1} \quad (4.11)$$

where  $m = \lfloor \frac{p}{2} \rfloor$ ,  $m1 = \lfloor \frac{p-1}{2} \rfloor$  ( $\lfloor \cdot \rfloor$  is the integer division symbol), and  $js = \text{sign}(\lambda_{k,j+\frac{1}{2}})$ . The odd and even  $\psi$  functions are given by the recurrence formulae (valid for  $n \geq 1$ ) :

$$\psi_{k,j+\frac{1}{2}}^{2n} = \sum_{l=0}^{2n-2} (-1)^l \mathbf{C}_{2n-2}^l \cdot (c_{2n} \delta\alpha)_{k,j+\frac{1}{2}+n-1-l} \quad (4.12)$$

$$\psi_{k,j+\frac{1}{2}}^{2n+1} = \sum_{l=0}^{2n-1} (-1)^l \mathbf{C}_{2n-1}^l \cdot (c_{2n+1} \delta \alpha)_{k,j+\frac{1}{2}+(n-1-l) \cdot js}, \quad (4.13)$$

where  $\mathbf{C}_r^s = \frac{r!}{[(r-s)!s!]}$ . The coefficients  $c_q$  depend on the local CFL number,  $\nu_{k,j+\frac{1}{2}} = \frac{\delta t}{\delta x} \lambda_{k,j+\frac{1}{2}}$ , and are given by :

$$\begin{aligned} (c_2)_{k,j+\frac{1}{2}} &= |\lambda|_{k,j+\frac{1}{2}} (1 - |\nu|_{k,j+\frac{1}{2}}) \\ (c_{q+1})_{k,j+\frac{1}{2}} &= \frac{|\nu|_{k,j+\frac{1}{2}} + (-1)^q \lfloor \frac{(q+1)}{2} \rfloor}{q+1} \cdot (c_q)_{k,j+\frac{1}{2}}, \quad q \geq 2 \end{aligned} \quad (4.14)$$

At order  $p$ , the stencil of the scheme uses  $p+2$  points. Flux limiting TVD or MP constraints are then be applied to  $\psi^p$  to make the scheme non-oscillatory. The detail of the limiting procedure can be found in [26].

Near cut-cells, the existence of an adequate stencil of fluid points is not necessarily provided for. Two main types of solutions can be devised : either lower the order of accuracy and thus the stencil width, or construct fictitious fluid values in the solid. We resort to the second solution, with simple mirroring conditions with respect to the solid boundary. The solution is satisfactory as long as the solid is larger than the stencil of the scheme, which is the case for the numerical examples considered in this paper. In case this condition fails, we could resort to Ghost Fluid-type methods as in [42].

In two dimensions, the fluxes are computed using a directional Strang splitting [127] which is second-order accurate. However the error of the scheme remains very low [25]. This splitting procedure will be expressed in section 4.4 devoted to the coupling algorithm.

### 4.3 Treatment of the cells cut by the solid boundary

In order to take into account the position of the solid in the fluid domain, we rely on the Embedded Boundary method, which consists in modifying the fluid fluxes in cells that are cut by the solid boundary (named cut cells), as in [70, 36]. At time  $t$ , for a cut cell  $\mathcal{C}$ , we assume that the solid occupies a volume fraction  $\alpha_{\mathcal{C}}$ . We also assume that the density, velocity and pressure are constant in the cell. The fluid mass, momentum and energy quantities contained in the cell are therefore equal to their value at the center of the cell times the volume of the cell and the volume fraction of fluid  $1 - \alpha_{\mathcal{C}}$ . In the same way, the computed fluxes are assumed to be constant on the faces of a cell. Denoting by  $\kappa_{\mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2}$  the solid surface fraction of the face between cells  $\mathcal{C}_1$  and  $\mathcal{C}_2$ , the effective flux between  $\mathcal{C}_1$  and  $\mathcal{C}_2$  is the computed flux times the surface of their interface times the fluid surface fraction  $1 - \kappa_{\mathcal{C}_1 \mathcal{C}_2}$ . Additional fluxes come from the presence of the moving solid boundary. These fluxes arise due to the change in surface fractions and the work of the fluid pressure on the



solid surface. They are expressed in order to yield exact conservation of fluid mass and of the total momentum and energy of the system.

For the sake of simplicity, we limit ourselves to two space dimensions. However the three-dimensional case can be carried out in a similar way. Let us consider a fluid cell  $\mathcal{C}$  cut by the boundary, as shown in Figure 4.1. The indices  $l$ ,  $r$ ,  $t$  and  $b$  indicate respectively left, right, top and bottom in the sequel.

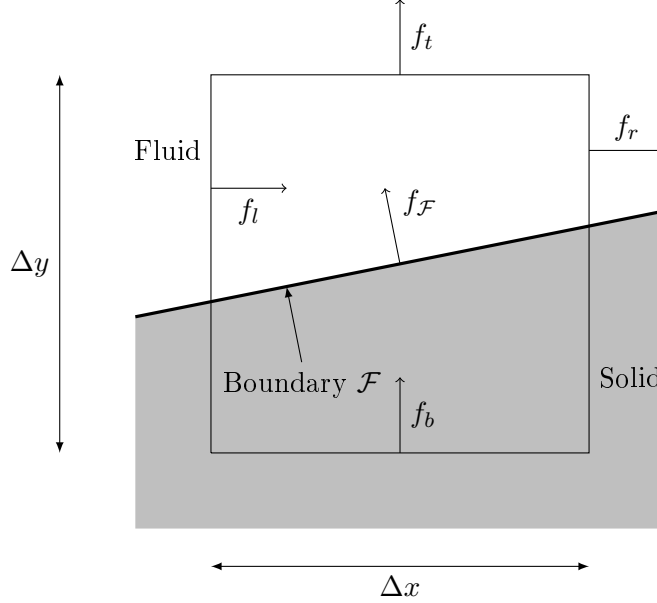


FIG. 4.1 – Physical fluxes in a cut cell

Integrating the Euler equations on the cut cell and over the time interval  $[n\Delta t, (n+1)\Delta t]$ , and applying the divergence theorem, we get :

$$(1 - \alpha_{\mathcal{C}}^{n+1})\Delta w_{\mathcal{C}} = \Delta t \left( \frac{1 - \kappa_{\mathcal{C}l}}{\Delta x} f_{\mathcal{C}l} - \frac{1 - \kappa_{\mathcal{C}r}}{\Delta x} f_{\mathcal{C}r} + \frac{1 - \kappa_{\mathcal{C}b}}{\Delta y} f_{\mathcal{C}b} - \frac{1 - \kappa_{\mathcal{C}t}}{\Delta y} f_{\mathcal{C}t} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta y} X_{\mathcal{F}} + \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} \Delta w_{\mathcal{F}}^n \quad (4.15)$$

where  $\Delta w_{\mathcal{C}} = w_{\mathcal{C}}^{n+1} - w_{\mathcal{C}}^n$  is the time increment and all fluxes are time-averaged over the time interval (the time averaging will be specified later). At the solid walls, pressure forces cause momentum and energy exchange between the solid and the fluid. They are taken into account through the exchange term  $X_{\mathcal{F}}$ . The detailed expression of  $X_{\mathcal{F}}$  will be given in section 4.4.4. Finally, the quantity  $\Delta w_{\mathcal{F}}^n$  represents the amount of  $w^n$  swept by each solid boundary  $\mathcal{F}$  present in the cell during the time step. The solid boundary  $\mathcal{F}$  is the largest subsegment of the solid boundary which is contained in one single cell (not necessarily the same) at times  $n\Delta t$  and  $(n+1)\Delta t$ . The precise definition of  $\mathcal{F}$  and the expression of  $\Delta w_{\mathcal{F}}^n$  will be given in section 4.4.3.

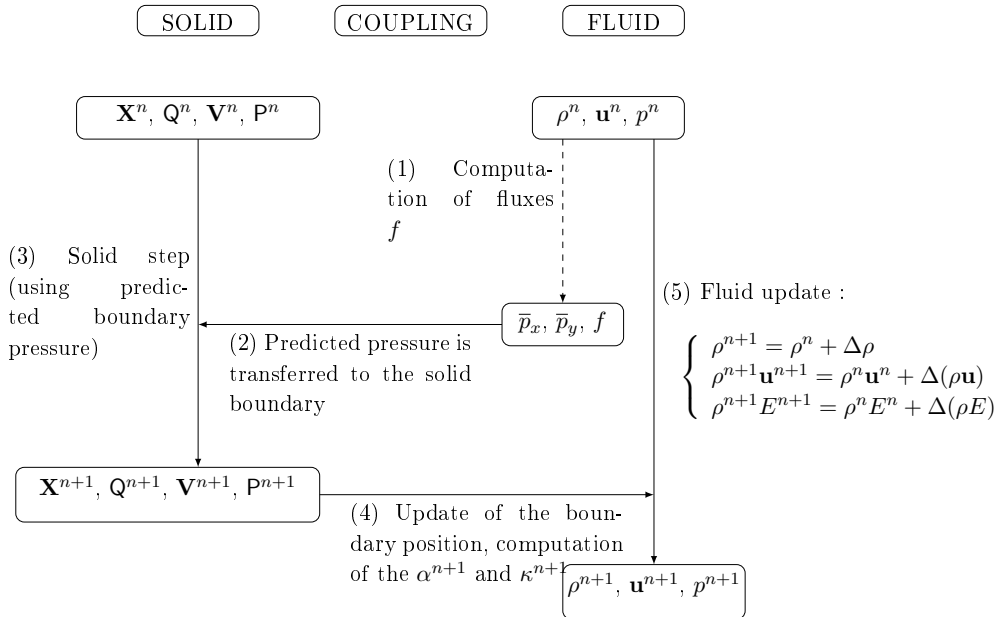
## 4.4 Coupling algorithm

Since the Discrete Element method is computationally expensive, the coupling algorithm should be explicit in order to avoid costly iterative procedures. In fact, the CFL condition of the explicit time-scheme gives the appropriate criterion for the capture of the high-frequency eigenmodes involved in the solid body fast dynamics. Moreover, as it is well known, explicit methods are more robust for impact problems. We choose the following general structure of the algorithm, which can be traced back to Noh [108] :

- The position of the solid and the density, velocity and pressure of the fluid are known at time  $t$
- The fluid exerts a pressure force on the solid boundaries : knowing the total forces applied on the solid, the position of the solid is advanced to time  $t + \Delta t$
- The density, velocity and pressure of the fluid are then computed at time  $t + \Delta t$ . This step takes into account the new position and velocity of the solid boundary, as well as the work of the forces of pressure on the boundary during the time step.

The choice of the coupling algorithm is guided by the conservation of the global momentum and energy of the system and the conservation of constant flows (see section 4.6).

At the beginning of a time step, at time  $n\Delta t$ , the position and rotation of the solid particle ( $\mathbf{X}^n, \mathbf{Q}^n$ ), the velocity and angular velocity of the solid particle ( $\mathbf{V}^n, \mathbf{\Omega}^n$ ) and the fluid state  $\mathbf{w}^n$  are known. We choose the following general architecture for the algorithm :



Steps (1) to (5) of the algorithm are computed successively, and are detailed in the following subsections.

#### 4.4.1 Computation of fluid fluxes and of the boundary pressure (steps (1) and (2))

Step (1) is a precomputation of fluxes without considering the presence of a solid boundary. As said above, the fluxes are computed in every cell using the OSMP11 scheme. However, we emphasize that the coupling algorithm does not depend on the choice of the numerical scheme. The fluxes are then stored for later use in step (5).

The other aim of this step is the computation of mean pressures in each cut-cell during the time-step in each direction  $\bar{p}_x$  and  $\bar{p}_y$ . These pressures, transferred to the solid boundary in step (2), account for the forces exerted by the fluid on the solid during the time-step. The same mean pressures will be used in step (5) to compute the momentum and energy exchanged between the solid and the fluid. In this way, the choice of  $\bar{p}_x$  and  $\bar{p}_y$  has no effect on the conservation of fluid mass, momentum or energy of the system. On the contrary it is a key ingredient for the exact conservation of constant flows (see section 4.6). The explicit structure of our solid and fluid methods allows several possibilities for the choice of boundary pressures while maintaining the stability of the coupling algorithm. This is unusual in fluid-structure interaction.

The Strang directional splitting algorithm [127] is originally formulated as follows :

$$\mathbf{w}_j^{(n+1)} = L_x \left( \frac{\Delta t}{2} \right) L_y (\Delta t) L_x \left( \frac{\Delta t}{2} \right) \mathbf{w}_j^n,$$

where  $L_x(\Delta t)$  and  $L_y(\Delta t)$  are finite-difference approximation operators for the integration by a time-step  $\Delta t$  in directions  $x$  and  $y$  respectively. Here, this splitting procedure is implemented in a simplified form :

$$\mathbf{w}_j^{(n+2)} = L_x (\Delta t) L_y (\Delta t) L_y (\Delta t) L_x (\Delta t) \mathbf{w}_j^n,$$

that recovers the symmetry of the solution every two time steps. In our case,  $L_x$  and  $L_y$  involve the computation of a flux in the  $x$  or  $y$  direction using the state of fluid  $\mathbf{w}$  of the cells. The mean pressures  $\bar{p}_x$  and  $\bar{p}_y$  are then the pressures in the cell used for the computation of the fluxes by  $L_x$  and  $L_y$ , respectively. The directional splitting used for the fluid flux computation does not require the solid body displacement to be split in  $x$  and  $y$  components. It is applied here only to recover second-order accuracy of the fluxes.

For a general multi-step time integration method, the definition of pressures  $\bar{p}_x$  and  $\bar{p}_y$  is the following. The time integration is supposed to consist in  $N$  successive steps, with intermediate results denoted  $\tilde{\mathbf{w}}_i = (\tilde{\rho}_i, \tilde{\rho}\tilde{\mathbf{u}}_i, \tilde{\rho}\tilde{e}_i)$ . The time-increment at each step in the  $x$  and  $y$  directions are denoted  $\Delta t_i^x$  and  $\Delta t_i^y$  respectively. These

intermediate time-steps are such that  $\Delta t = \sum_i \Delta t_i^x = \sum_i \Delta t_i^y$ . In two dimensions, a full time-step is written :

$$\tilde{\mathbf{w}}_0 = \mathbf{w}^n \quad (4.16)$$

$$\forall i \in \{0, \dots, N-1\}, \quad \tilde{\mathbf{w}}_{i+1} = L(\Delta t_i^x, \Delta t_i^y) \tilde{\mathbf{w}}_i \quad (4.17)$$

$$\mathbf{w}^{n+1} = \tilde{\mathbf{w}}_N \quad (4.18)$$

where  $L(\Delta t_i^x, \Delta t_i^y)$  is the following finite-difference approximation operator :

$$L(\Delta t_i^x, \Delta t_i^y) \mathbf{w} = \mathbf{w} - \left( \Delta t_i^x \frac{f^x(\mathbf{w}) - f^x(\mathbf{w})}{\Delta x} + \Delta t_i^y \frac{f^y(\mathbf{w}) - f^y(\mathbf{w})}{\Delta y} \right) \quad (4.19)$$

In the case of the original Strang splitting,  $N = 3$ ,  $\Delta t_0^x = \Delta t_2^x = \frac{\Delta t}{2}$ ,  $\Delta t_1^y = \Delta t$ , and  $\Delta t_1^x = \Delta t_0^y = \Delta t_2^y = 0$ . Runge-Kutta methods can also be expressed in this form. For instance, a third-order Runge-Kutta method can be written in three successive steps ( $N = 3$ ), with  $\Delta t_0^x = \Delta t_0^y = \frac{\Delta t}{6}$ ,  $\Delta t_1^x = \Delta t_1^y = \frac{\Delta t}{6}$  and  $\Delta t_2^x = \Delta t_2^y = \frac{2\Delta t}{3}$ . The coupling method can thus be extended to other splitting methods and to Runge-Kutta time-integration schemes.

We choose to define  $\bar{p}_x$  and  $\bar{p}_y$  using the intermediate pressures  $\tilde{p}_i$  :

$$\bar{p}_x = \frac{1}{\Delta t} \sum_i \Delta t_i^x \tilde{p}_i, \quad \bar{p}_y = \frac{1}{\Delta t} \sum_j \Delta t_j^y \tilde{p}_j \quad (4.20)$$

These pressures correspond to the mean pressures used for the computation of the flux in the  $x$  and  $y$  directions respectively during the time-step.

#### 4.4.2 Computation of the solid step (step (3))

Step (3) consists mainly in the application of the time integration scheme for the rigid body motion described in section 4.2.1. The essential difference with an uncoupled version lies in the integration of boundary pressure forces. As we consider an explicit coupling, the only boundary pressures available are  $\bar{p}_x$  and  $\bar{p}_y$ .

The solid is assumed to be polygonal (in two space dimensions) as described in Figure 4.2. We denote by  $\mathfrak{F}$  the list of all faces of the solid in contact with fluid. For every face  $\mathcal{F} \in \mathfrak{F}$ , the position of the center of the face is given by vector  $\mathbf{X}_{\mathcal{F}}$ , and we denote by  $S_{\mathcal{F}}$  its surface and  $\mathbf{n}_{\mathcal{F}}$  its normal vector (oriented from the solid to the fluid). The fluid pressure force  $\mathbf{F}_{\mathcal{F}}$  exerted on face  $\mathcal{F} \in \mathfrak{F}$  is written as :

$$\mathbf{F}_{\mathcal{F}} \cdot \mathbf{e}_x = -\bar{p}_x S_{\mathcal{F}} n_{\mathcal{F}}^x \quad (4.21)$$

$$\mathbf{F}_{\mathcal{F}} \cdot \mathbf{e}_y = -\bar{p}_y S_{\mathcal{F}} n_{\mathcal{F}}^y \quad (4.22)$$

The total fluid pressure force  $\mathbf{F}_f^n$  is the sum of the contributions on each face :

$$\mathbf{F}_f^n = \sum_{\mathcal{F} \in \mathfrak{F}} \mathbf{F}_{\mathcal{F}} \quad (4.23)$$

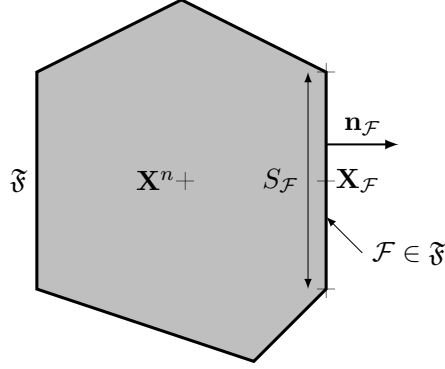


FIG. 4.2 – Geometric description of the particles

The fluid pressure torque  $\mathcal{M}_f^n$  is the sum of the torques of the pressure forces at the center of mass of the solid body :

$$\mathcal{M}_f^n = \sum_{\mathcal{F} \in \mathfrak{F}} \mathbf{F}_{\mathcal{F}} \wedge (\mathbf{X}^n - \mathbf{X}_{\mathcal{F}})$$

The solid time-step is written as in equations (4.1) to (4.8), with the only difference that the fluid pressure force and torque are taken constant during the whole time-step, equal to  $\mathbf{F}_f^n$  and  $\mathcal{M}_f^n$  (including in equations (4.6) and (4.7)). The fact that  $\mathbf{F}_f^n$ ,  $\mathcal{M}_f^n$ ,  $\mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}}$  and  $\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}}$  are constant during the time-step will be used in the conservation analysis in section 4.5.

#### 4.4.3 Update of the boundary and of the volume fractions (step (4))

Several tasks are carried out in step (4). For each cell  $\mathcal{C}$ , the new solid volume fraction of the cell  $\alpha_{\mathcal{C}}^{n+1}$  and new surface fractions  $\kappa_{\mathcal{C}}^{n+1}$  are computed. In addition, for each solid boundary  $\mathcal{F}$ , the pressures  $\bar{p}_x$  and  $\bar{p}_y$  are stored and the swept quantities  $\Delta w_{\mathcal{F}}^n$  used in (4.15) are evaluated.

In two dimensions, the solid boundary is polygonal, and we therefore only have to deal with plane boundaries  $\mathcal{F}$ . In order to simplify the computation of the average of  $\bar{p}_x$  and  $\bar{p}_y$  on  $\mathcal{F}$ , we also assume that each boundary  $\mathcal{F}$  is contained only in one cell at time  $n\Delta t$ . The computation of the contribution of  $\Delta w_{\mathcal{F}}^n$  to each cell is also easier if  $\mathcal{F}$  is entirely in the cell at time  $(n+1)\Delta t$ . We denote  $\Phi_n(\mathcal{F})$  the position of boundary  $\mathcal{F}$  at time  $n\Delta t$ . We choose to define  $\mathcal{F}$  as the largest subsegment of the boundary polygon such that  $\Phi_n(\mathcal{F})$  is contained in cell  $\mathcal{C}_n$  at time  $n\Delta t$  and  $\Phi_{n+1}(\mathcal{F})$  is contained in cell  $\mathcal{C}_{n+1}$  at time  $(n+1)\Delta t$  (see Figure 4.3). The two cells need not be necessarily different.  $\mathcal{F}$  may contain one or both vertices of the polygonal boundary at its ends, but we assume that each  $\mathcal{F}$  is contained in one single polygonal face. At each new time step, the polygonal boundary is subdivided into a new set of plane boundaries  $\mathcal{F}$ . Each newly computed boundary  $\mathcal{F} \in \mathfrak{F}$  stores every variable

necessary for the coupling : the surface  $S_{\mathcal{F}}$  and the normal vector  $\mathbf{n}_{\mathcal{F}}$  of  $\Phi_n(\mathcal{F})$ , the center of mass  $\mathbf{X}_{\mathcal{F}}$  of  $\mathcal{F}$ , and we define  $\mathbf{X}_{\mathcal{F}}^0 = \Phi_0(\mathbf{X}_{\mathcal{F}})$ . The boundary also stores the pressures  $\bar{p}_x$  and  $\bar{p}_y$  in the cell occupied by  $\Phi_n(\mathcal{F})$ , and the velocity of the center of the boundary at time  $(n + \frac{1}{2})\Delta t$ ,  $\mathbf{V}_{\mathcal{F}}^{n+\frac{1}{2}}$ , computed as :

$$\mathbf{V}_{\mathcal{F}}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{D}^{-1} \cdot (\mathbf{X}^0 - \mathbf{X}_{\mathcal{F}}^0) \quad (4.24)$$

The swept quantities  $\Delta w_{\mathcal{F}}^n$  are computed as the integral of  $w^n$  in the quadrangle bounded by  $\Phi_n(\mathcal{F})$  and  $\Phi_{n+1}(\mathcal{F})$  (see Fig. 4.3). The condition

$$\sum_{\mathcal{F}} \Delta w_{\mathcal{F}}^n = \sum_{\mathcal{C}} (\alpha_{\mathcal{C}}^{n+1} - \alpha_{\mathcal{C}}^n) w_{\mathcal{C}}^n \quad (4.25)$$

is then automatically satisfied as the set of such quadrangles is a partition of the volume swept by the solid during the time step.

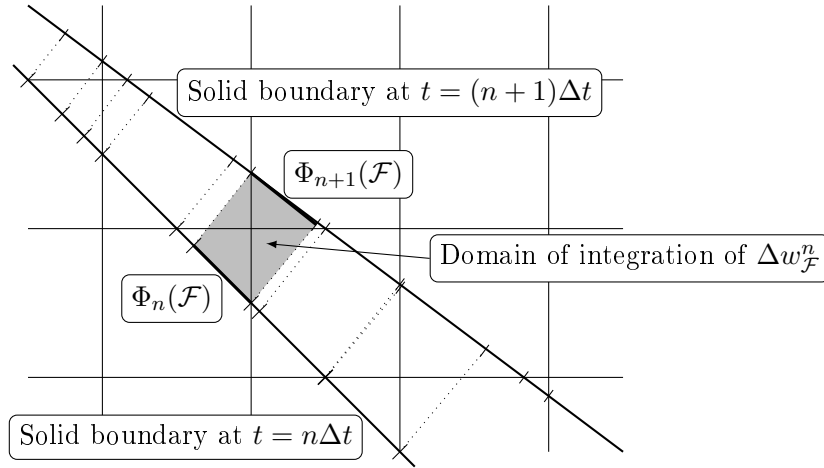


FIG. 4.3 – Update of the boundary and computation of the  $\Delta w_{\mathcal{F}}^n$

The computation of  $\alpha_{\mathcal{C}}^{n+1}$  and  $\kappa_{\mathcal{C}}^{n+1}$  involves the intersection of planes with rectangles, and can be carried out geometrically. The application of the divergence theorem to cell  $\mathcal{C}$  shows that the following relations are satisfied :

$$\kappa_{\mathcal{C}l}^n = \kappa_{\mathcal{C}r}^n + \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} \frac{S_{\mathcal{F}}}{\Delta y} n_{\mathcal{F}}^x \quad (4.26)$$

$$\kappa_{\mathcal{C}b}^n = \kappa_{\mathcal{C}t}^n + \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} \frac{S_{\mathcal{F}}}{\Delta x} n_{\mathcal{F}}^y \quad (4.27)$$

These conditions correspond to the geometric conservation laws (GCL) in ALE methods [90], and will be used in the analysis of the consistency of our method.

#### 4.4.4 Modification of fluxes (step (5))

Step (5) of the algorithm consists mainly in the computation of the final values  $w_{\mathcal{C}}^{n+1}$  in each cell, using a fully discrete expression of Eq. (4.15). It is the only part of

the algorithm where the fluid “sees” the presence of a solid. The explicit fluid fluxes were pre-computed in step (1) on the Cartesian regular grid, and the modification of fluxes aims at conserving the mass of fluid and balancing the momentum and energy transferred to the solid during the time-step.

The exchange term in (4.15) can be written as

$$X_{\mathcal{F}} = \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} S_{\mathcal{F}} f_{\mathcal{F}},$$

where  $f_{\mathcal{F}}$  is the fluid flux at the solid boundary  $\mathcal{F}$  (see fig. 4.1), that are approximated as :

$$f_{\mathcal{F}} = \frac{1}{S_{\mathcal{F}}} \left( 0, \int_{\mathcal{F}} \bar{p}_x n_{\mathcal{F}}^x, \int_{\mathcal{F}} \bar{p}_y n_{\mathcal{F}}^y, \mathbf{V}_{\mathcal{F}}^{n+\frac{1}{2}} \cdot \int_{\mathcal{F}} \begin{pmatrix} \bar{p}_x n_{\mathcal{F}}^x \\ \bar{p}_y n_{\mathcal{F}}^y \end{pmatrix} \right)^T \quad (4.28)$$

Here  $\mathbf{V}_{\mathcal{F}}^{n+\frac{1}{2}}$  is the velocity of the center of the boundary and is defined in (4.24).

Using the fluid fluxes given by the OSMP11 scheme, we finally compute the time increment  $\Delta w_{\mathcal{C}}$  from the following fully discrete version of equation (4.15) :

$$(1 - \alpha_{\mathcal{C}}^{n+1}) \Delta w_{\mathcal{C}} = \Delta t \left( \frac{1 - \kappa_{Cl}^{n+1}}{\Delta x} f_{Cl} - \frac{1 - \kappa_{Cr}^{n+1}}{\Delta x} f_{Cr} + \frac{1 - \kappa_{Cb}^{n+1}}{\Delta y} f_{Cb} - \frac{1 - \kappa_{Ct}^{n+1}}{\Delta y} f_{Ct} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta y} \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} S_{\mathcal{F}} f_{\mathcal{F}} + \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} \Delta w_{\mathcal{F}}^n \quad (4.29)$$

The value of  $w_{\mathcal{C}}$  is then updated in every cell :  $w_{\mathcal{C}}^{n+1} = w_{\mathcal{C}}^n + \Delta w_{\mathcal{C}}$ .

A main difference with [36] lies in the time integration of cell-face apertures  $(1 - \kappa_{\mathcal{C}})$ . Falcovitz *et al.* [36] use time-averaged cell-face apertures over the time step (at time  $(n + \frac{1}{2})\Delta t$ ), ensuring consistency (in the sense that the uniform motion of a solid-fluid system is exactly preserved). In fact, a key ingredient in the consistency proof is the fact that conditions (4.26) and (4.27) are checked exactly. In [36], the consistent choice of time-averaged cell-face apertures  $\kappa^{n+\frac{1}{2}}$  and solid surfaces in the fluid cell  $\tilde{S}^{n+\frac{1}{2}}$  allows to check these conditions.

Here we instead take  $\kappa^{n+1}$  and recover consistency using the solid surface  $\tilde{S}^{n+1}$  present in the fluid cell at time  $(n + 1)\Delta t$ . This result is proved in section 4.6. Note that  $\tilde{S}_{\mathcal{C}}^{n+1} = \sum_{\Phi_{n+1}(\mathcal{F}) \in \mathcal{C}} S_{\mathcal{F}}^n$  as the solid is undeformable. This choice is motivated by the fact that the computation of time averaged  $\kappa^{n+\frac{1}{2}}$  and  $\tilde{S}^{n+\frac{1}{2}}$  is already complex in two dimensions and might become intractable in three dimensions. In addition, it requires an implicit resolution of  $\tilde{S}^{n+\frac{1}{2}}$  in order to preserve the energy of the system. The choice of  $\kappa^{n+1}$  theoretically reduces the accuracy of the method in cut-cells. However, the accuracy of our numerical results did not advocate the use of the time-averaged  $\kappa^{n+\frac{1}{2}}$  and the related added complexity in the algorithm.

In order to avoid the classical restriction of the time-step due to vanishing volumes :

$$\Delta t \leq \frac{(1 - \alpha_C) \min(\Delta x, \Delta y)}{\|\mathbf{u}\| + c},$$

where  $c$  is the local speed of sound, we resort to the mixing of small cut cells with their neighbors to prevent instabilities.

#### 4.4.5 Conservative mixing of small cut cells

Two main methods have been developed to ensure the stability of conservative Embedded Boundary methods. A first method consists in computing a reference state using nonconservative interpolations, modified by redistributing the conservation error on neighbouring cells [112, 30, 105]. A second method is to compute a fully conservative state using a formula similar to (4.29). For stability reasons, small cells are merged with neighboring cells using a conservative procedure (originating from Glimm's idea [54]). We choose this second class of method, as [70] and [36].

Target cells need to be defined for small cells to be merged with them. [70] defines an equivalent normal vector to the boundary in the cell and mixes the cells preferentially in that direction. [36] rather merges newly exposed or newly covered cells with full neighbours having a face in common. In order to deal with cells occupied by several boundaries (impact of two solids), we cannot define a normal vector in every cell and we choose to improve the strategy applied in [36]. We define small cells as  $\alpha_C > 0.5$ . For mixing two cells  $\mathcal{C}$  and  $\mathcal{C}_T$ , so they have equal final value  $w$ , the following quantities are exchanged :

$$M_{\mathcal{C}\mathcal{C}_T} = \frac{\alpha_{\mathcal{C}_T}}{\alpha_C + \alpha_{\mathcal{C}_T}} (w_{\mathcal{C}_T} - w_C)$$

$$M_{\mathcal{C}_T\mathcal{C}} = \frac{\alpha_C}{\alpha_C + \alpha_{\mathcal{C}_T}} (w_C - w_{\mathcal{C}_T})$$

and it is easy to check that  $w_C + M_{\mathcal{C}\mathcal{C}_T} = w_{\mathcal{C}_T} + M_{\mathcal{C}_T\mathcal{C}}$ . In the two dimensional case, we select the target cell  $\mathcal{C}_T$  as the fully-fluid cell ( $\alpha_{\mathcal{C}_T} = 0$ ) nearest to  $\mathcal{C}$ , such that the path between the two cells does not cross a solid boundary. A recursive subroutine finds such a target cell in a small number of iterations, without any restriction on the geometry of the fluid domain.

## 4.5 Analysis of the conservation of mass, momentum and energy

In this section, we analyze the conservation properties of the coupling algorithm. These properties are verified for periodic boundary conditions or for an infinite domain.



### 4.5.1 Integration on the fluid domain

Integrating  $w$  on the fluid domain  $\Omega_f^{n+1}$  at time  $(n+1)\Delta t$ , we obtain using (4.29) and the cancellation of fluxes on each cell face :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{\Omega_f^{n+1}} w^{n+1} &= \sum_{\mathcal{C}} (1 - \alpha_{\mathcal{C}}^{n+1}) w_{\mathcal{C}}^n + \sum_{\mathcal{C}} (1 - \alpha_{\mathcal{C}}^{n+1}) \Delta w_{\mathcal{C}}^n \\ &= \sum_{\mathcal{C}} (1 - \alpha_{\mathcal{C}}^{n+1}) w_{\mathcal{C}}^n + \sum_{\mathcal{F}} \frac{\Delta t S_{\mathcal{F}}}{\Delta x \Delta y} f_{\mathcal{F}} + \sum_{\mathcal{F}} \Delta w_{\mathcal{F}}^n \end{aligned}$$

Using (4.25) we finally get :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{\Omega_f^{n+1}} w^{n+1} &= \sum_{\mathcal{C}} (1 - \alpha_{\mathcal{C}}^n) w_{\mathcal{C}}^n + \sum_{\mathcal{F}} \frac{\Delta t S_{\mathcal{F}}}{\Delta x \Delta y} f_{\mathcal{F}} \\ &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{\Omega_f^n} w^n + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta y} \sum_{\mathcal{F}} S_{\mathcal{F}} f_{\mathcal{F}} \end{aligned} \quad (4.30)$$

the expression of  $f_{\mathcal{F}}$  being given in Eq. 4.28.

The first component of system (4.30) expresses the fluid mass conservation. In order to proceed with the analysis of momentum and energy conservation, let us now turn to the solid part.

### 4.5.2 Solid conservation balance

Since the solid is treated using a Lagrangian method, the conservation of solid mass is straightforward. The fluid pressure force applied on the solid during the time step is given by (4.21), (4.22) and (4.23). Let us consider a solid boundary  $\mathcal{F} \in \mathfrak{F}$ , and denote by  $\Delta \mathcal{P}_{\mathcal{F}}$  the solid momentum variation induced by the pressure forces on  $\mathcal{F}$ , and  $\Delta \mathcal{E}_{\mathcal{F}}$  the corresponding energy variation. Recalling that the pressure forces are kept constant during the time step, the balance of momentum and energy is given by :

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{P}_{\mathcal{F}} &= \Delta t \mathbf{F}_{\mathcal{F}} \\ \Delta \mathcal{E}_{\mathcal{F}} &= \Delta t \mathbf{F}_{\mathcal{F}} \cdot \left( \frac{1}{S_{\mathcal{F}}} \int_{\mathcal{F}} \mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right) = \Delta t \mathbf{F}_{\mathcal{F}} \cdot \mathbf{V}_{\mathcal{F}}^{n+\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Finally, using the expression of forces  $\mathbf{F}_{\mathcal{F}}$ , we obtain :

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{P}_{\mathcal{F}}^x &= -\Delta t \int_{\mathcal{F}} \bar{p}_x n_{\mathcal{F}}^x \\ \Delta \mathcal{P}_{\mathcal{F}}^y &= -\Delta t \int_{\mathcal{F}} \bar{p}_y n_{\mathcal{F}}^y \\ \Delta \mathcal{E}_{\mathcal{F}} &= -\Delta t \mathbf{V}_{\mathcal{F}}^{n+\frac{1}{2}} \cdot \int_{\mathcal{F}} \begin{pmatrix} \bar{p}_x n_{\mathcal{F}}^x \\ \bar{p}_y n_{\mathcal{F}}^y \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Comparing with section 4.5.1, the balance of momentum and energy in the fluid domain results in :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_f^{n+1}} \rho^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} + \sum_{\mathcal{F}} \Delta \mathcal{P}_{\mathcal{F}} &= \int_{\Omega_f^n} \rho^n \mathbf{u}^n \\ \int_{\Omega_f^{n+1}} \rho^{n+1} E^{n+1} + \sum_{\mathcal{F}} \Delta \mathcal{E}_{\mathcal{F}} &= \int_{\Omega_f^n} \rho^n E^n \end{aligned}$$

This demonstrates the conservation of momentum and energy for the coupled system.

## 4.6 Conservation of constant flows

In this section we analyze the consistency of the coupling method, in the sense defined in [36], meaning exact conservation of uniform flows by the coupling algorithm. Two cases are analyzed. The first one, also considered in [36], consists of a solid immersed in a fluid and moving at the same velocity. This property is called “consistency” in [36]. The second one, not considered before, demonstrates the correct representation of the slip boundary condition along walls. These simple cases have been a guide to design the algorithm, as the preservation of such flows is a basic criterion for the quality of the method.

In the whole section, we consider a constant fluid state :  $\rho^n = \rho_0$ ,  $u^n = u_0$ ,  $v^n = v_0$  and  $p^n = p_0$  everywhere. The fluxes  $f$  are such that  $f_r = f_l = (\rho_0 u_0, \rho_0 u_0^2 + p_0, \rho_0 u_0 v_0, (\rho_0 e_0 + p_0) u_0)^T$  and  $f_t = f_b = (\rho_0 v_0, \rho_0 u_0 v_0, \rho_0 v_0^2 + p_0, (\rho_0 e_0 + p_0) u_0)^T$ . In this case, the efficient pressures on the boundary of the solid are  $\bar{p}_x = \bar{p}_y = p_0$ .

### 4.6.1 Steady constant flow with moving boundaries

We consider an arbitrarily shaped rigid body, moving at constant velocity with no rotation, immersed in a uniform fluid flowing at the same velocity.

The solid is a closed set, and we denote by  $\Omega_s^n$  the solid domain at initial time. We have :

$$\sum_{\mathcal{F}} S_{\mathcal{F}} \mathbf{n}_{\mathcal{F}} = \oint_{\partial \Omega_s^n} \mathbf{n} dS = \mathbf{0}$$

Using (4.21) and (4.22), we obtain :

$$\sum_{\mathcal{F}} \mathbf{F}_{\mathcal{F}} = - \sum_{\mathcal{F}} p_0 S_{\mathcal{F}} \mathbf{n}_{\mathcal{F}} = \mathbf{0}$$

This induces :

$$\mathbf{V}_i^{n+1} = \mathbf{V}_i^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{V}_i^n = (u_0, v_0)^T, \quad \mathbf{X}_i^{n+1} = \mathbf{X}_i^n + \Delta t (u_0, v_0)^T$$

In the same way,

$$\sum_{\mathcal{F}} \mathcal{M}_{\mathcal{F}} = - \sum_{\mathcal{F}} p_0 S_{\mathcal{F}} \mathbf{n}_{\mathcal{F}} \wedge (\mathbf{X}_i^n - \mathbf{X}_{\mathcal{F}}) = p_0 \oint_{\partial\Omega_s} (\mathbf{X}_i^n - \mathbf{X}) \wedge \mathbf{n} dS = \mathbf{0}$$

The volume swept by boundary  $\mathcal{F}$  is  $\Delta t S_{\mathcal{F}} (u_0, v_0)^T \cdot \mathbf{n}_{\mathcal{F}}$ . Since the initial state is constant,  $\Delta w_{\mathcal{F}}^n$  is given by :

$$\Delta w_{\mathcal{F}}^n = \frac{\Delta t S_{\mathcal{F}}}{\Delta x \Delta y} (u_0 n_{\mathcal{F}}^x + v_0 n_{\mathcal{F}}^y) w_0$$

In addition, as the solid translates without rotation, the normal vector  $\mathbf{n}_{\mathcal{F}}$  to a boundary  $\mathcal{F}$  is constant in time. Using this property in equations (4.26) and (4.27), we easily conclude that  $(1 - \alpha_{\mathcal{C}}) \Delta w_{\mathcal{C}} = 0$ . Thus  $w^{n+1} = w^n$ , showing that the constant flow is left unchanged by the coupling algorithm and the mixing of small cells.

#### 4.6.2 Free slip along a straight boundary

We consider an undeformable, fixed solid consisting in a semi-infinite half-space. The solid boundary is a straight planar boundary with a constant normal vector  $\mathbf{n}$  such that :

$$\mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n} = 0 \tag{4.31}$$

This initial state describes the free slip of the fluid along the straight boundary. In the inviscid case, no boundary layer should develop in the vicinity of the boundary. The conservation of such flows ensures that the boundary is not seen by the fluid as being artificially rough.

As the solid is fixed,  $\alpha_{\mathcal{C}}$  and  $\kappa_{\mathcal{C}}$  remain constant over time and  $\Delta w_{\mathcal{F}}^n$  is equal to zero. From equation (4.29), and using (4.26), (4.27) and (4.31), the components of  $\Delta w_{\mathcal{C}}$  are calculated as :

$$\begin{aligned} (1 - \alpha_{\mathcal{C}}) \Delta \rho_{\mathcal{C}} &= -\Delta t \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} \frac{S_{\mathcal{F}}}{\Delta x \Delta y} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_0 = 0 \\ (1 - \alpha_{\mathcal{C}}) \Delta (\rho u)_{\mathcal{C}} &= -\Delta t \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} \frac{S_{\mathcal{F}}}{\Delta x \Delta y} ((\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_0) u_0 + p_0 n_x) + \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} \frac{\Delta t S_{\mathcal{F}}}{\Delta x \Delta y} p_0 n_x = 0 \\ (1 - \alpha_{\mathcal{C}}) \Delta (\rho v)_{\mathcal{C}} &= -\Delta t \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} \frac{S_{\mathcal{F}}}{\Delta x \Delta y} ((\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_0) v_0 + p_0 n_y) + \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} \frac{\Delta t S_{\mathcal{F}}}{\Delta x \Delta y} p_0 n_y = 0 \\ (1 - \alpha_{\mathcal{C}}) \Delta (\rho E)_{\mathcal{C}} &= -\Delta t \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} \frac{S_{\mathcal{F}}}{\Delta x \Delta y} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_0) (\rho_0 e_0 + p_0) = 0 \end{aligned}$$

This shows that the constant flow is preserved by step (5) of the algorithm. This result is not modified by the mixing procedure. We thus have shown the exact preservation of the free slip of the fluid along a straight boundary.

## 4.7 Numerical examples

In the following, we consider a perfect gas, with  $\gamma = 1.4$ . In all computations the CFL number was fixed equal to 0.5.

### 4.7.1 One-dimensional results

A piston of density  $2 \text{ kg.m}^{-3}$  and length 0.5 m is initially centered at  $x = 2 \text{ m}$ , in a one-dimensional, 7m-long tube, whose ends are connected by periodic boundary conditions which allow an easier comparison with ALE results. The gas initial pressure and density are equal to  $10^6 \text{ Pa}$  and  $10 \text{ kg.m}^{-3}$  for  $x \leq 2 \text{ m}$  and  $x \geq 5 \text{ m}$  and to  $10^5 \text{ Pa}$  and  $1 \text{ kg.m}^{-3}$  elsewhere. The system is initially at rest. The initial pressure difference between the two sides of the piston triggers its movement and the propagation of waves in the fluid regions (a rarefaction in the left region and a shock wave in the right one). Wave interactions then occur at later time. The fluid pressure at time  $t = 0.003 \text{ s}$  is shown in Figure 4.4, and the trajectory of the solid is presented in Figure 4.5. The  $x - t$  diagram over a longer time (0.01 s) is shown in Figure 4.6.

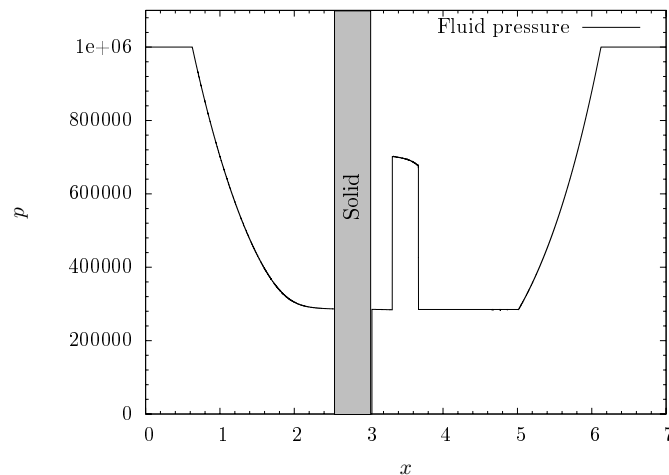


FIG. 4.4 – Pressure at time  $t = 0.003 \text{ s}$

An ALE computation was done for comparison, using a uniform grid moving at the solid velocity. The solid position and velocity are updated using the same second-order Verlet scheme. We compared the numerical results obtained through the Embedded Boundary method on 100, 200, 400, 800, 1600, 3200, 6400 and 12800 points grids with a 51200-points ALE grid, considered as the reference solution. We observe a second-order convergence of the solid position (Figure 4.7) and a super-linear convergence of order 1.2 of the fluid pressure (Figure 4.8). The convergence rate is optimal for the solid (Verlet scheme is second-order accurate). The conver-

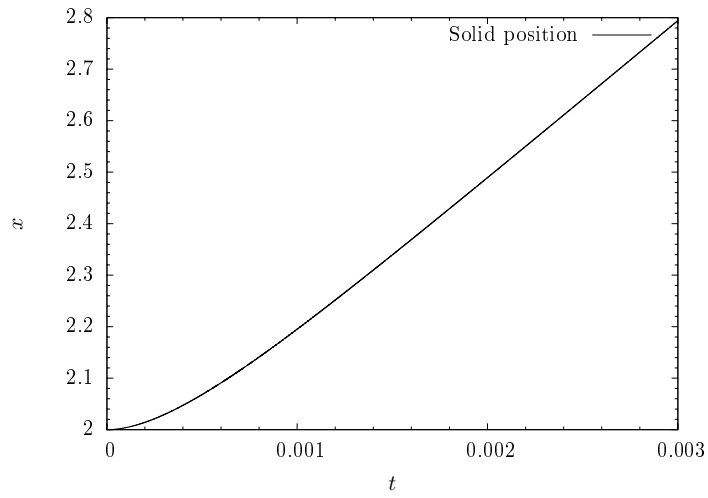
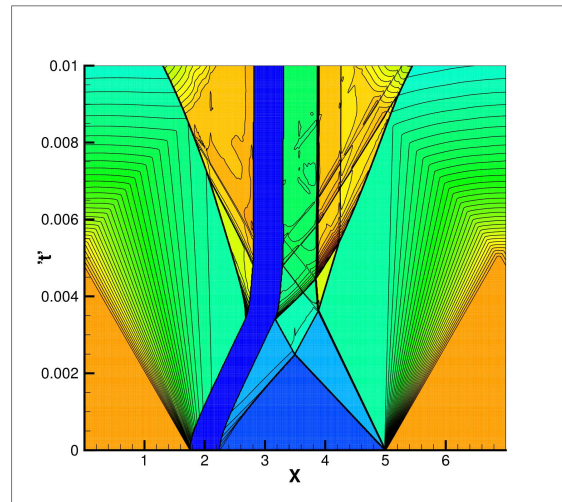
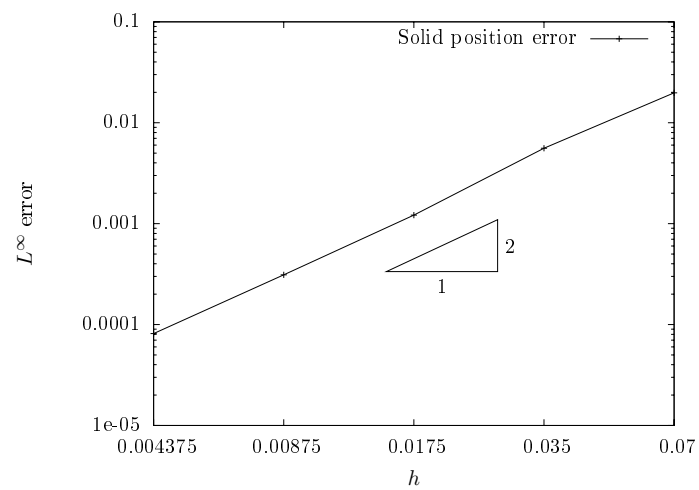


FIG. 4.5 – Time evolution of the solid position

gence rate for the fluid pressure is not optimal, due to the presence of discontinuities, but is not affected by the solid coupling.

FIG. 4.6 –  $x - t$  diagram (the position of the solid is in deep blue)FIG. 4.7 – Convergence of the solid position  $L^\infty$ -error

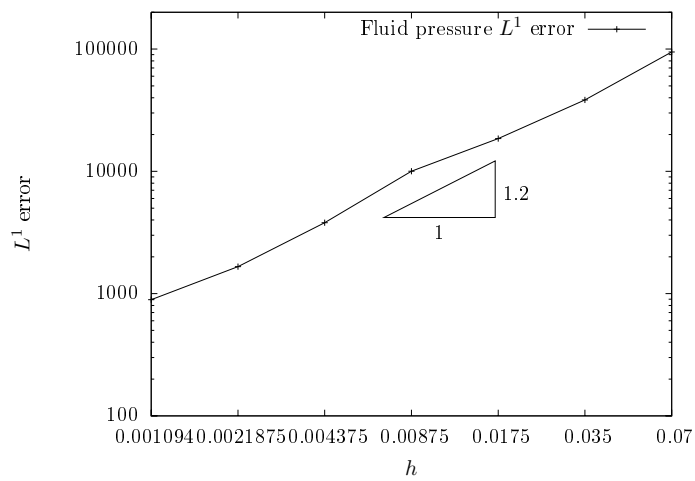


FIG. 4.8 – Convergence of the fluid pressure  $L^1$ -error

### 4.7.2 Double Mach reflection

A Mach 10 planar shock wave reflects on a fixed  $30^\circ$  wedge, creating a Mach front, a reflected shock wave, and a contact discontinuity which develops into a jet along the solid boundary. This benchmark was first simulated on a Cartesian grid aligned with the solid boundary, using different finite volume methods [73, 141, 25]. Non-aligned grid methods were also tested on this benchmark, using Embedded Boundary methods [112, 22], non-conservative Immersed Boundary methods [49],  $h$ -box methods [66], and kinetic schemes [77]. The position of the tip of the jet is an important characteristic of the accuracy of the results. The comparison with grid-aligned results shows that it is better recovered by conservative methods than non-conservative methods [112, 22].

We have simulated the problem on a grid aligned with the wedge (aligned case, Figure 4.9) and on a grid aligned with the incident shock wave (non-aligned case, Figure 4.10). The two results are very similar, and agree with [22, 112, 73, 25]. One can remark that all the features of the flow are captured at the correct position in the non-aligned case. The jet propagates along the wall without numerical friction due to the conservation of free slip along a straight boundary (section 4.6.2). In the principal Mach stem, the discontinuities are slightly more oscillatory than in the aligned case. This can be identified as a post-shock oscillation phenomenon to which Roe's scheme is especially prone (see, for instance, [74, 8]), and is not related to the coupling method. Nevertheless, the perturbations stay localized in the vicinity of discontinuities.

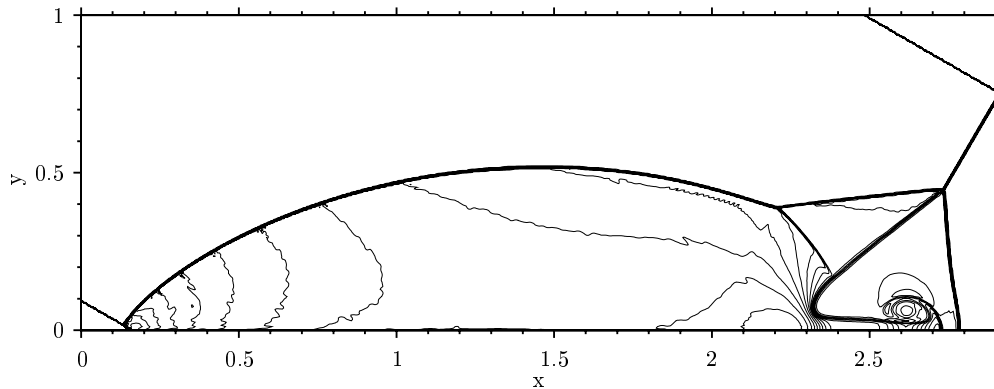


FIG. 4.9 – Aligned case : 30 contours of fluid density from 1.73 to 21,  $\Delta x = \Delta y = 1/220$



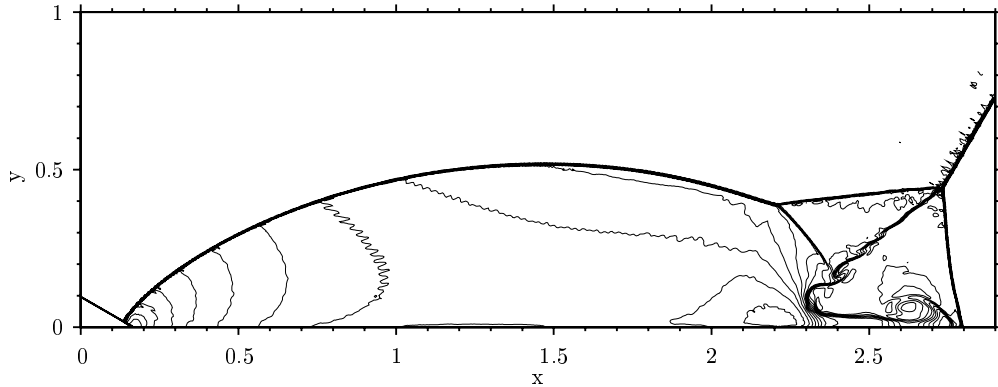


FIG. 4.10 – Non-aligned grid case : 30 contours of fluid density from 1.73 to 21,  $\Delta x = \Delta y = 1/220$

### 4.7.3 Lift-off of a cylinder

This moving body test case was first proposed in [36], using a conservative method. A rigid cylinder of density  $7.6\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$  and diameter 0.1 m, initially resting on the lower wall of a  $1\text{m} \times 0.2\text{m}$  two-dimensional channel filled with air at standard conditions ( $\rho = 1\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ,  $p = 1\text{ Pa}$ ), is driven and lifted upwards by a Mach 3 shock wave. Gravity is not taken into account. The problem was simulated in [48, 7, 70, 124]. In Figure 4.11, we present our results on a uniform  $1600 \times 320$  grid at times 0.14 s and 0.255 s. The cylinder was approximated by a polygon with 1240 faces.

Our results agree well on the position of the solid and of the shocks with Arienti et al. [7] and Hu et al. [70]. However, some differences should be noted. First of all, some reflected shock waves in our results seem to lag slightly behind their position in previous results. This difference might be caused by small differences in the final position of the solid. Hu et al. [70] also discuss the presence of a strong vortex under the cylinder in the results of Forrer and Berger [48]. They dismiss it as an effect of the space-time splitting scheme employed which affects the numerical dissipation. We also obtain this vortex, which does not disappear as we refine the mesh. We rather believe that this vortex is associated with a Kelvin-Helmholtz instability of the contact discontinuity present under the cylinder (Figure 4.12).

In Figures 4.13 and 4.14 we present convergence results on the final position of the center of mass of the cylinder, compared to those of Hu et al. [70]. We observe that our results exhibit a fast convergence process, which is not the case in [70]. Let us note that no exact solution exists for the final position of the cylinder. The final position we found is however in the same range as in [70]. The results also compare well with Arienti et al. [7]. The improvement lies in the combination of the conservative interface method [70] with a conservative coupling and a second-order

time-scheme for the rigid body motion. We present in Figures 4.15, 4.16 and 4.17 the respective conservation errors in fluid mass, momentum and energy due to fluid-structure coupling, after subtracting the theoretical drifts due to the incoming and outgoing fluid fluxes at the inflow and outflow boundaries. For this difficult case, the maximal conservation relative errors due to coupling were bounded by  $4 \cdot 10^{-6}$  over the whole simulation time, and no drift was observed.

In Figure 4.18 we present the relative computational cost of the coupling. The relative cost is defined as the ratio of the computational times dedicated to the coupling method and to the fluid and solid methods. In the rigid body case, the cost of the solid method is very low compared to that of the fluid method. As the coupling method is explicit and local, the computational cost is located on a manifold one dimension lower than the dimension of the whole space. In the two-dimensional case, the coupling is on a one-dimensional manifold. Indeed, we observe in Figure 4.18 that the relative cost of the coupling decreases as the grid is refined, with a slope of 0.5, and that the coupling cost remains lower than the fluid and solid costs, amounting to approximately 10–20% for the grids yielding sufficient accuracy.

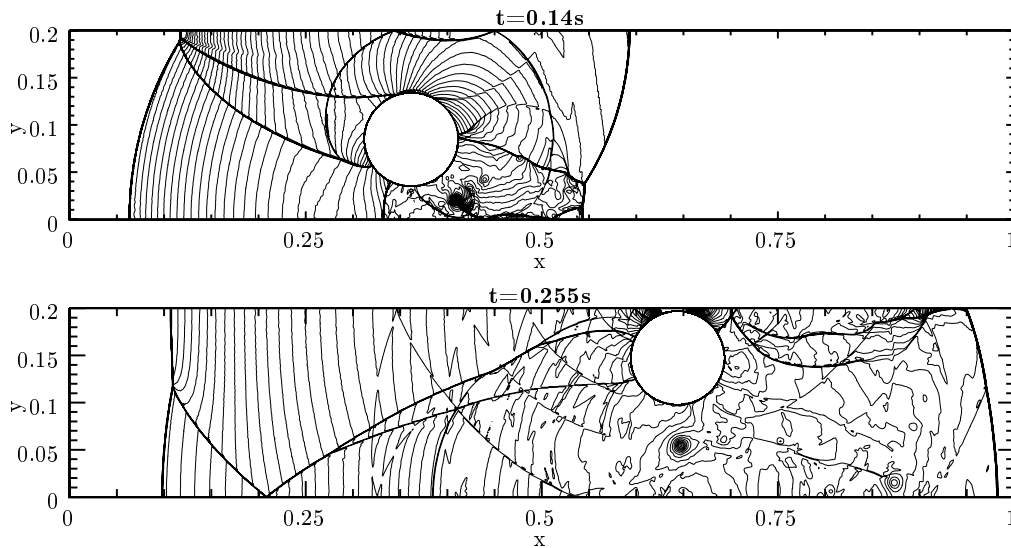


FIG. 4.11 – 60 contours of fluid pressure from 0 to 28 at different times,  $\Delta x = \Delta y = 6.25 \times 10^{-4}$

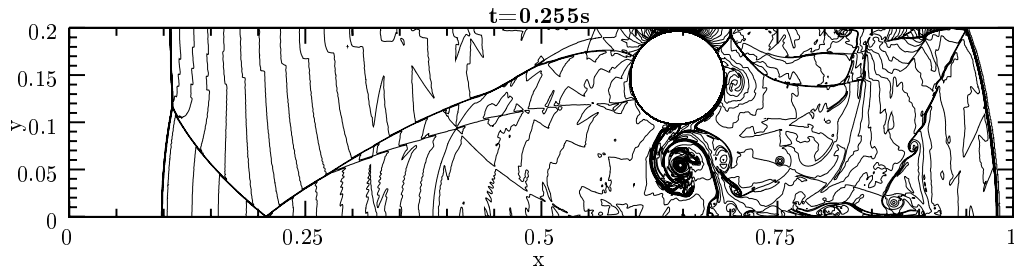


FIG. 4.12 – 60 contours of fluid density from 0 to 12 at final time,  $\Delta x = \Delta y = 6.25 \times 10^{-4}$

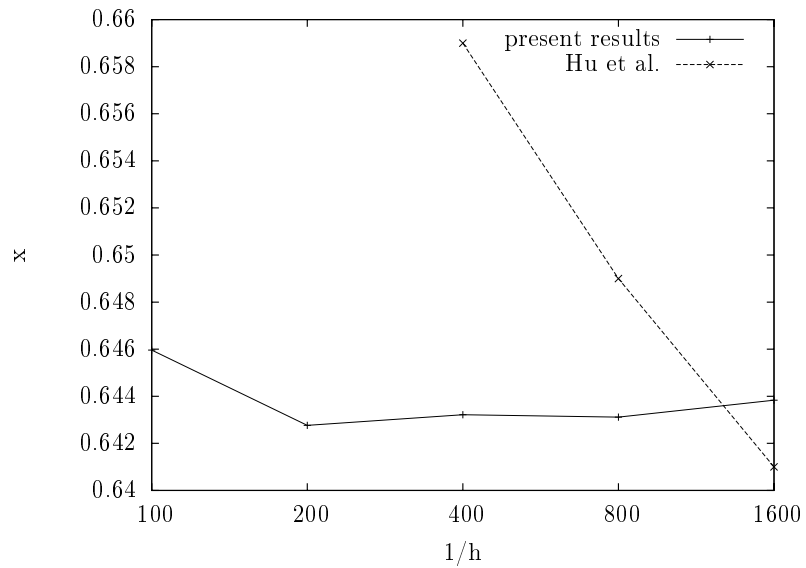


FIG. 4.13 – Comparison of the convergence of the horizontal position of the center of mass of the cylinder with Hu et al. [70]

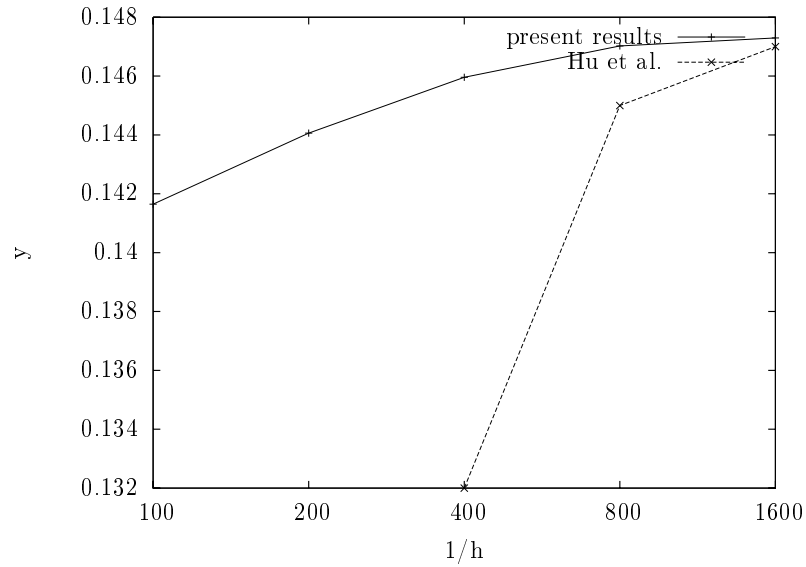


FIG. 4.14 – Comparison of the convergence of the vertical position of the center of mass of the cylinder with Hu et al. [70]

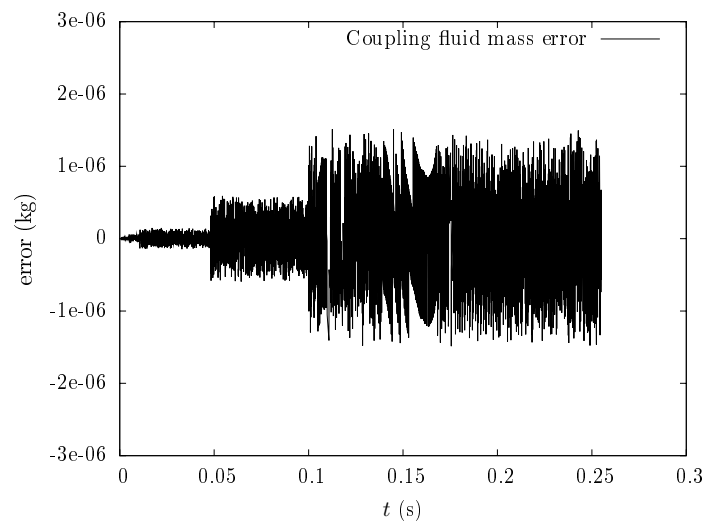


FIG. 4.15 – Conservation errors in fluid mass due to coupling

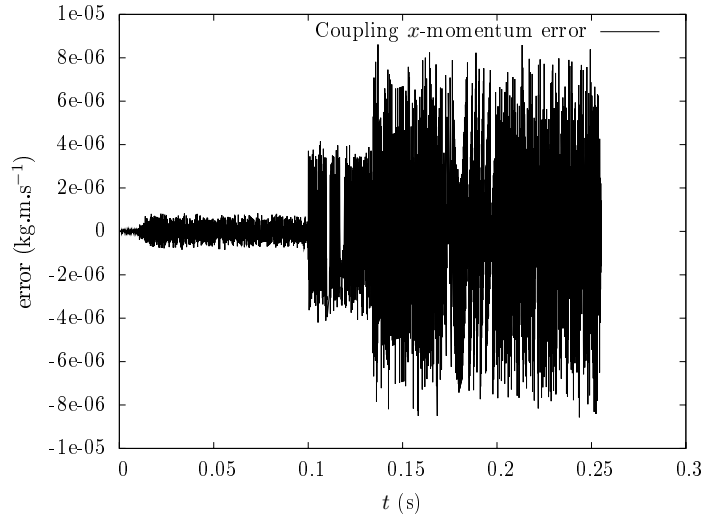


FIG. 4.16 – Conservation errors in momentum due to coupling

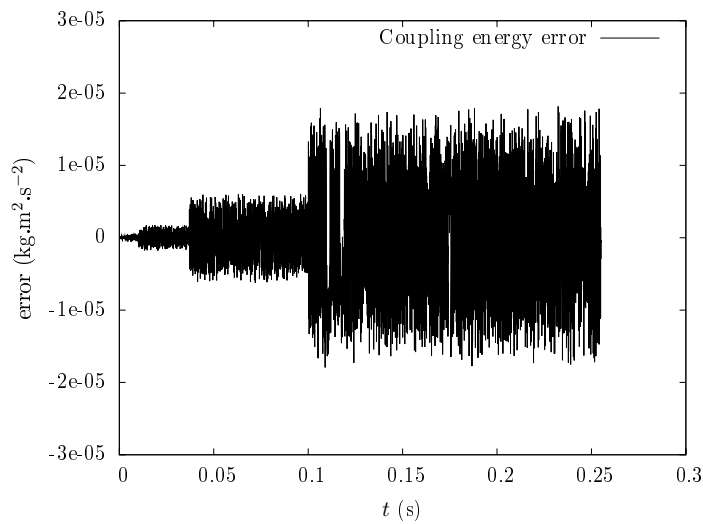


FIG. 4.17 – Conservation errors in energy due to coupling

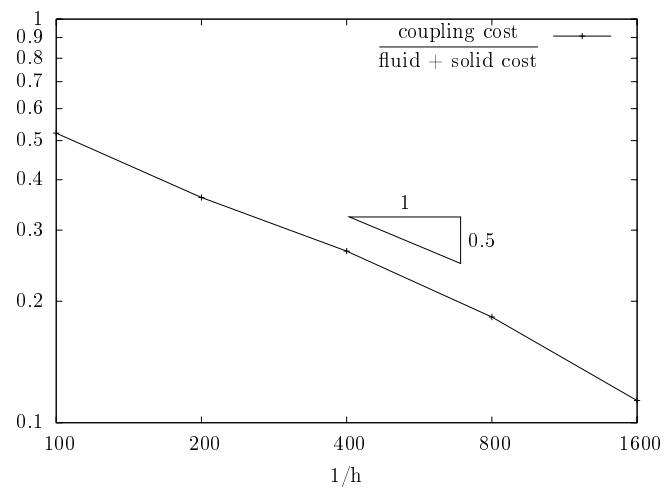


FIG. 4.18 – Ratio between the coupling computation cost and the fluid and solid costs

#### 4.7.4 Flapping doors

We propose this new fluid-structure interaction case as a demonstration of the robustness of our approach and as a first step towards fracture and impact simulations. The flapping doors case involves separating or closing solid boundaries, with cells including several moving boundaries. The algorithm is shown to be able to deal with such difficulties. Two doors initially close a canal and are impacted from the left by a Mach 3 shock. The canal consists of two fixed rigid walls, 2m long and 0.5m apart. Each door consists of a 0.2-m long and 0.05m-wide rectangle, completed at both ends by a half-circle of diameter 0.05m. The doors are respectively fixed on points  $(0.5, 0.025)$  and  $(0.5, 0.475)$  at the center of the half-circles. They can rotate freely around these points. The Mach 3 shock is initially located at  $x = 0.43\text{m}$ . The density of the solid is  $0.1 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  and the pre- and post-shock state of the fluid are  $(\rho, u, v, p) = (1, 0, 0, 1)$  and  $(\rho, u, v, p) = (3.857, 2.6929, 0, 10.333)$ . In Figure 4.19 we show the density field obtained using a  $1600 \times 400$  grid, at times 0.125s, 0.25s, 0.375s and 0.5s. After the incident shock hits the doors, it reflects to the left and the doors open due to the high rise in pressure. The opening of the doors produces a jet preceded by a shock wave propagating to the right. Then complex interactions of waves occur, due to door movements and interaction with the walls. Kelvin-Helmholtz instabilities of contact lines can be observed at  $t=0.5\text{s}$ . It is worth noting that symmetry of the flow about the centerline of the canal axis is remarkably well preserved by the coupling method.

As the doors remain tangent to the canal walls during their rotation, the fluid cannot pass between the wall and a door at its hinge. When the doors approach the walls at maximum rotation, the fluid is compressed, and eventually pushes them back. This is observed at time  $t = 0.2162\text{s}$  and  $t = 0.486\text{s}$  in Figure 4.20, which presents the time evolution of the doors rotation angle. In the first case, the distance between each door's straight boundary and the wall is less than 0.002m, while the size of a fluid cell is  $\Delta x = 0.00125\text{m}$ . The method is able to deal with the fact that most cells along the wall are cut by the moving boundary and contain several moving boundaries. Treating this test case with an ALE method would require several remeshings in the course of the simulation, especially in the initial separation of the tangent door tips, and when the doors approach the walls.

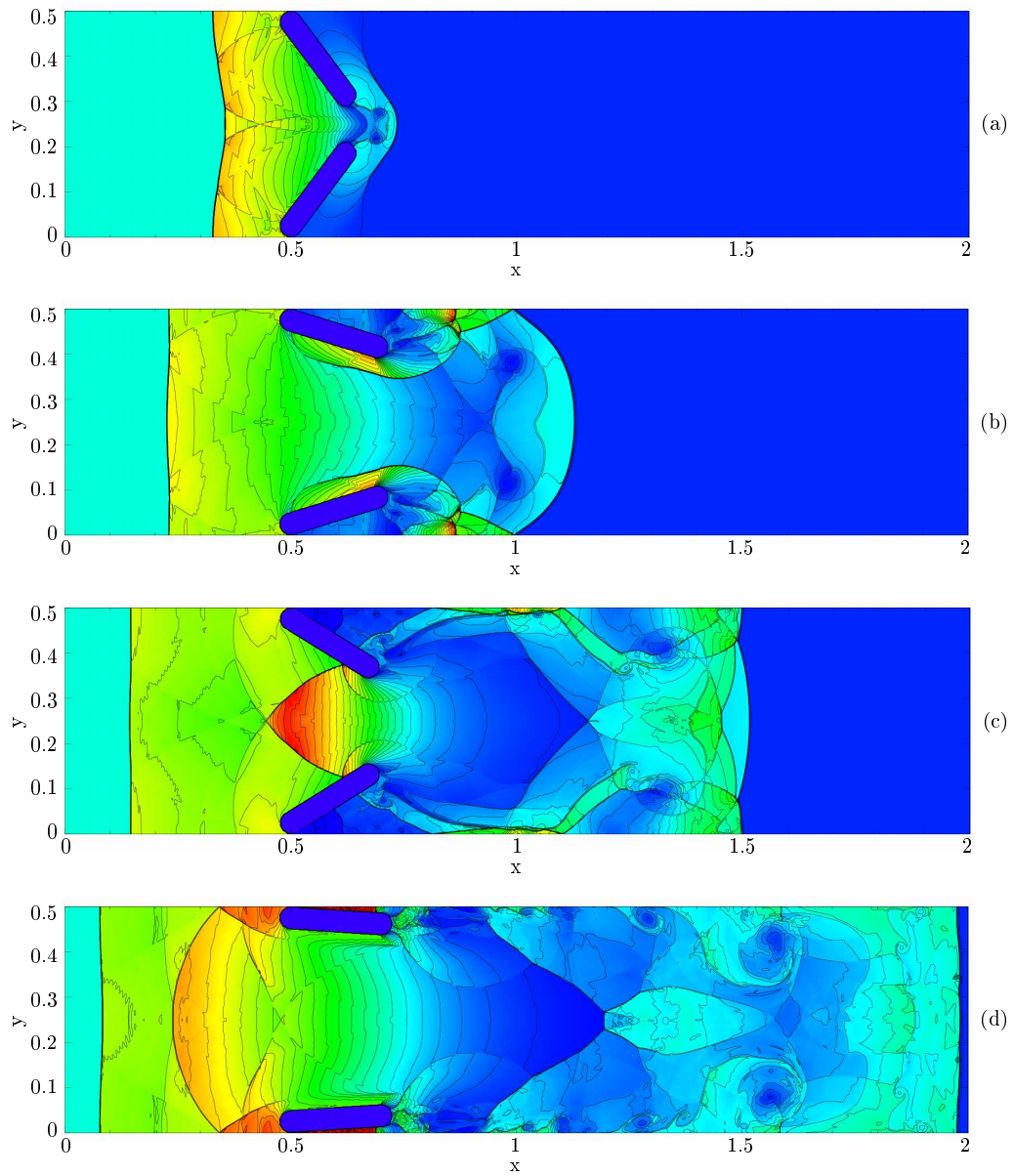


FIG. 4.19 – Density contours at times  $t = 0.125$ s (a),  $t = 0.25$ s (b),  $t = 0.375$ s (c) and  $t = 0.5$ s (d)



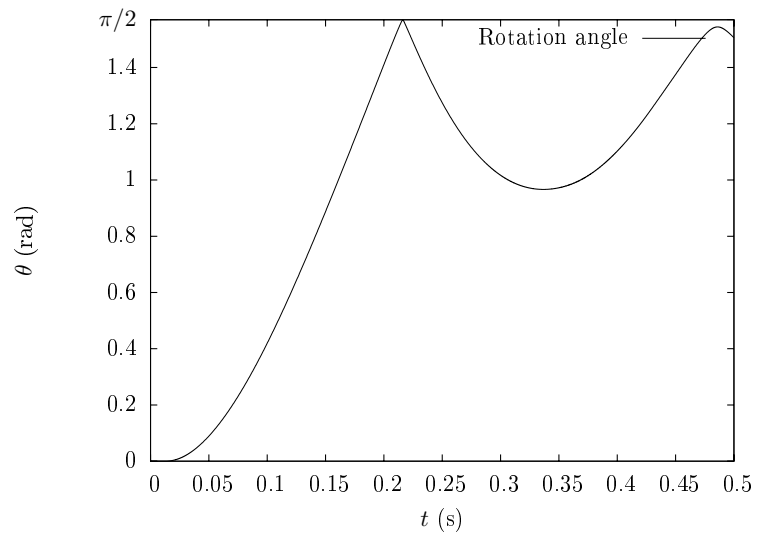


FIG. 4.20 – Time evolution of the rotation of a door

## 4.8 Conclusion

We have presented a new Embedded Boundary algorithm for coupling a Finite Volume method for compressible fluid flows with a rigid body. This explicit algorithm has the advantage of preserving the usual CFL stability condition : the time-step can be taken as the minimum of the full cell size fluid and solid time-steps. The combination of the Embedded Boundary method for the fictitious fluid domain and of the coupling strategy ensures the conservation of fluid mass and the balance of momentum and energy between fluid and solid. In addition, the exact conservation of the two constant states described in section 4.6 gives good insight on the consistency of the method : we prove the conservation of a constant flow in which a solid moves at the same velocity and the fact that the treatment at the boundary introduces no spurious roughness or boundary layers. The numerical examples suggest the second-order convergence of the solid position and the super-linear convergence of the fluid state in  $L^1$  norm, while our results on two-dimensional benchmarks agree very well with body-fitted methods and improve Immersed Boundary results. We are also capable of dealing with solid boundaries moving close to each other, which is promising for impact simulations. The method is computationally efficient, as the coupling adds an integration on a space one dimension smaller than the fluid and solid computation spaces. The present method is therefore perfectly liable to be extended to a deformable solid, and was designed to extend naturally in three space dimensions. The remaining difficulty is the ability to define and track the solid boundary surrounding a Discrete Element assembly.



# Coupling with a deformable solid

---

## 5.1 Introduction

Fluid-structure interaction with deformable boundaries is an important research subject in such varied applications as biomechanics [45, 85, 113], spacecraft and parachutes [131], flutter of wings and panels [118, 117] and resistance of structures submitted to explosions [126, 140]. A main challenge in fluid-structure interaction problems is the modification of the fluid domain due to the displacement of the solid. Three main types of answers have been developed to treat this issue : fully Eulerian [40, 1] or fully Lagrangian [72] methods, Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) methods [45, 85, 126] or fictitious domain methods. In general, monolithic Eulerian or Lagrangian approaches are limited to the case where the fluid and solid behave according to similar equations with different parameters. The Lagrangian description is less adapted for fluid dynamics due to the large deformation of the mesh induced by the fluid movement and needs efficient remeshing. On the contrary, it is better suited for solid computations due to the exact capture of material discontinuities and the easier access to the plastic deformation history. ALE methods have therefore been developed in order to exploit these features : an additional equation on the deformation of the fluid mesh is introduced and allows to switch smoothly from a Lagrangian description near the solid boundary to an Eulerian description in the bulk of the fluid domain. As long as the solid displacement is small enough, the distortion of the mesh can be controlled. However, in the event of large solid displacement or rupture, the fluid domain has to be remeshed [102], causing possibly costly additional computational time. On the other hand, fictitious domain methods can treat changes in the topology of the fluid domain without remeshing : the solid is superimposed on the fluid fixed grid and additional terms are introduced in the fluid formulation to penalize or prevent the penetration of fluid inside the solid. Various types of fictitious domain methods have been proposed. Among these, the Immersed Boundary method [113, 114] has gained popularity for incompressible fluids, but other approaches such as the direct forcing method [106, 28], Immersed Interface method [95], Ghost Fluid method [124, 42, 41], fictitious element method [139] and Embedded Boundary methods [112, 22, 105, 70, 36] have been developed for incompressible and compressible fluids in interaction with deformable structures. The accuracy of immersed and embedded methods and its comparison with body-fitted methods on incompressible test-cases has been assessed in [98].

The issue of conservation of mass, momentum and energy is crucial for the simulation of fluid-structure interaction problems as the stability analysis of the scheme relies on that property. This issue has to be addressed for compressible [117] as well as incompressible [45, 85] fluid-structure interaction. In addition, the absence of “leaking” of fluid into the solid and the accurate transfer of energy between the solid and the fluid are relevant considerations in order for the simulation to capture the physical properties of the phenomena. The question of conservation is especially non-trivial when the coupling is dealt with using an immersed boundary method and in the presence of shocks. Most Immersed Boundary methods either use interpolation of values inside the solid domain or additional forces in the fictitious fluid inside the fluid domain. Both approaches are unable to yield exact conservation and the conservation error is linked to the approximation error at the solid boundary. On the contrary, the Embedded Boundary method [112] is constructed in order to exactly conserve the semi-discretization in space of mass, momentum and energy of the system. However, to the best of our knowledge, no study has been carried out on the effect of the time-discretization of the coupling on the overall conservation of the energy of the system.

In this chapter, we use the Embedded Boundary method developed by Colella *et al.* [112] in combination with a Finite Volume method and a Discrete Element method. The Finite Volume method is computed on a Cartesian grid, using high-order upwind fluxes [25] calculated with a Lax-Wendroff approach. The Discrete Element method (Chapter 3) is a particle method for elastodynamics, in which particles interact through forces and torques yielding the macroscopic behaviour of the assembly. Both methods being time-explicit and computationally expensive, we require that the coupling algorithm be explicit too. We have already developed a conservative explicit coupling algorithm between the Finite Volume method and an undeformable solid in Chapter 4, and we extend the results to the deformable case here.

When dealing with incompressible fluids, a possible cause of instability of the numerical scheme is the so-called “added-mass effect” as first pointed out in [86]. A stability criterion for the explicit staggered coupling has been derived in [18], which implies the instability of the coupled fluid-structure system as the density ratios of the solid and the fluid are close to 1. The use of an implicit [18] or semi-implicit [45] coupling scheme improves the stability criterion. For compressible fluids, it has been found [59] that for very light solids (with solid density of the order of  $10^{-2}$  that of the fluid), the explicit coupling strategy becomes unstable, generating spurious pressure oscillations at the solid boundary which can result in the fluid pressure becoming negative. For our intended applications (the effect of an air or water shock wave on a concrete structure), such density ratios will not be encountered and it seems safe to use explicit schemes.

This chapter is organized as follows. In section 5.2, we describe the general architecture used and the main points which change with regard to the undeformable case. Details of the time-integration of the solid angular velocity in the coupling

scheme have been modified from Chapter 4. The solid boundary reconstruction is presented, and explicit, predictor and semi-implicit strategies are introduced for the evaluation of the surface of the boundary elements. We show that only the semi-implicit approach is able to recover at the same time consistency and conservation of energy. In section 5.3, we prove that the semi-implicit algorithm converges with geometric rate under a CFL condition, which, under the assumption that the solid density is larger than the fluid density, is less restrictive than the fluid CFL condition. In section 5.4, we prove that the modification of the solid angular velocity allows the exact conservation of a discrete energy for the coupled system in the undeformable case in two dimensions, and a quasi-conservation in three dimensions. Numerical results are then analyzed in section 5.5.

## 5.2 Coupling algorithm

### 5.2.1 General coupling architecture

We use the same explicit architecture as in Chapter 4. The fluid fluxes are precomputed and we denote by  $\bar{p}_x$  and  $\bar{p}_y$  the mean pressures used in the  $x$  and  $y$  directions. The fluid forces  $\mathbf{F}_{\mathcal{F}}$  acting on a solid planar boundary  $\mathcal{F}$  of surface  $\tilde{S}_{\mathcal{F}}$  and normal vector  $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{F}}$  are equal to the force of these pressures on the surface in contact with fluid :

$$\mathbf{F}_{\mathcal{F}} \cdot \mathbf{e}_x = -\bar{p}_x \tilde{S}_{\mathcal{F}} \tilde{n}_{\mathcal{F}}^x \quad (5.1)$$

$$\mathbf{F}_{\mathcal{F}} \cdot \mathbf{e}_y = -\bar{p}_y \tilde{S}_{\mathcal{F}} \tilde{n}_{\mathcal{F}}^y \quad (5.2)$$

The solid is then advanced in time : internal forces are computed based on the position of the solid particles and the position of each particle (submitted to a constant external fluid force) is integrated using the Verlet scheme for translation, and the RATTLE scheme for rotation (Chapter 3). The volume fractions of solid in fluid cells  $\alpha_{\mathcal{C}}^{n+1}$  and surface fractions of solid on cell interfaces  $\kappa^{n+1}$  can then be computed using the new position of the solid boundary. The fluid fluxes are modified using  $\alpha^{n+1}$ ,  $\alpha^n$ ,  $\kappa^{n+1}$ , the pressures  $\bar{p}_x$  and  $\bar{p}_y$  and the velocity of the boundary in order to enforce the conservation of fluid mass and of the total momentum and energy of the system (Chapter 4).

We recall the solid integration scheme for particle  $I$  used in Chapter 4 :

$$\mathbf{V}_I^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{V}_I^n + \frac{\Delta t}{2m_I} (\mathbf{F}_{I,i}^n + \mathbf{F}_{I,f}^n) \quad (5.3)$$

$$\mathbf{X}_I^{n+1} = \mathbf{X}_I^n + \Delta t \mathbf{V}_I^{n+\frac{1}{2}} \quad (5.4)$$

$$\mathbf{P}_I^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{P}_I^n + \frac{\Delta t}{4} \mathbf{j} (\mathcal{M}_{I,i}^n + \mathcal{M}_{I,f}^n) \mathbf{Q}_I^n + \frac{\Delta t}{2} \Lambda_I^n \mathbf{Q}_I^n \quad (5.5)$$

$$\mathbf{Q}_I^{n+1} = \mathbf{Q}_I^n + \Delta t \mathbf{P}_I^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{D}_I^{-1} \quad (5.6)$$

$$\text{with } \Lambda_I^n \text{ such that } (\mathbf{Q}_I^{n+1})^\top \mathbf{Q}_I^{n+1} = \mathbf{I} \quad (5.7)$$

$$\mathbf{V}_I^{n+1} = \mathbf{V}_I^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2m_I} (\mathbf{F}_{I,i}^{n+1} + \mathbf{F}_{I,f}^{n+1}) \quad (5.8)$$

$$\mathbf{P}_I^{n+1} = \mathbf{P}_I^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{4} \mathbf{j}(\mathcal{M}_{I,i}^{n+1}) \mathbf{Q}_I^{n+1} + \frac{\Delta t}{4} \mathbf{j}(\mathcal{M}_{I,f}^n) \mathbf{Q}_I^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} \tilde{\Lambda}_I^{n+1} \mathbf{Q}_I^{n+1} \quad (5.9)$$

$$\text{with } \tilde{\Lambda}_I^{n+1} \text{ such that } (\mathbf{Q}_I^{n+1})^\top \mathbf{P}_I^{n+1} \mathbf{D}_I^{-1} + \mathbf{D}_I^{-1} (\mathbf{P}_I^{n+1})^\top \mathbf{Q}_I^{n+1} = \mathbf{0}, \quad (5.10)$$

where  $\mathbf{F}_{I,i}$  and  $\mathcal{M}_{I,i}$  denote the interior forces and torques applied on particle  $I$  and  $\mathbf{F}_{I,f}$  and  $\mathcal{M}_{I,f}$  are the fluid forces and torques applied on the particle.

In order to preserve the energy exactly in the coupling scheme with an underformable solid, we give a new definition of the velocity of the centroid of boundary  $\mathcal{F}$  at time  $(n + \frac{1}{2})\Delta t$ ,  $\mathbf{V}_{\mathcal{F}}^{n+\frac{1}{2}}$ , which replaces equation (4.24) :

$$\mathbf{V}_{\mathcal{F}}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}} + \boldsymbol{\Omega}^{n+\frac{1}{2}} \wedge (\mathbf{X}_{\mathcal{F}}^n - \mathbf{X}^n) \quad (5.11)$$

and where we define the angular velocity  $\boldsymbol{\Omega}^{n+\frac{1}{2}}$  at time  $(n + \frac{1}{2})\Delta t$  using the relation :

$$\mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}^{n+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{2} \mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{Q}^n + \mathbf{Q}^{n+1})^\top. \quad (5.12)$$

We prove in Lemma 4 (page 111) that  $\boldsymbol{\Omega}^{n+\frac{1}{2}}$  is well-defined by (5.12).

This new formulation allows us to obtain a result concerning the exact discrete conservation of energy in the case of an undeformable solid in two dimensions (see section 5.4). Let us note that in the case of a deformable solid without fluid coupling, the time-integration scheme does not ensure the exact conservation of the discrete energy. Like many symplectic schemes, it only preserves an approximate discrete energy (whose expression cannot be found in general for a nonlinear potential) over long-time simulations. This induces fluctuations of the discrete energy of the solid around a mean value. Interactions between these numerical fluctuations of the discrete energy and the conservative fluid and coupling scheme could therefore take place. However, we observe in the numerical results that this is not the case and that the overall conservation of energy for the system is quite satisfactory.

The other differences with the undeformable case presented in Chapter 4 are the reconstruction of the solid boundary around the particle assembly and the integration of the boundary's surface  $\tilde{S}_{\mathcal{F}}$  and normal vector  $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{F}}$ . In the undeformable case, the explicit choice for  $\tilde{S}_{\mathcal{F}}$  and  $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{F}}$  was trivially  $S_{\mathcal{F}}^n$  and  $\mathbf{n}_{\mathcal{F}}^n$ . Let us stress that any choice for  $\tilde{S}_{\mathcal{F}}$  and  $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{F}}$  can be made without affecting the conservation of energy, as long as consistent choices are made. However, that choice affects the accuracy of the numerical method as a whole. We discuss in the subsequent sections the choice for the boundary reconstruction technique and for  $\tilde{S}_{\mathcal{F}}$  and  $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{F}}$ .

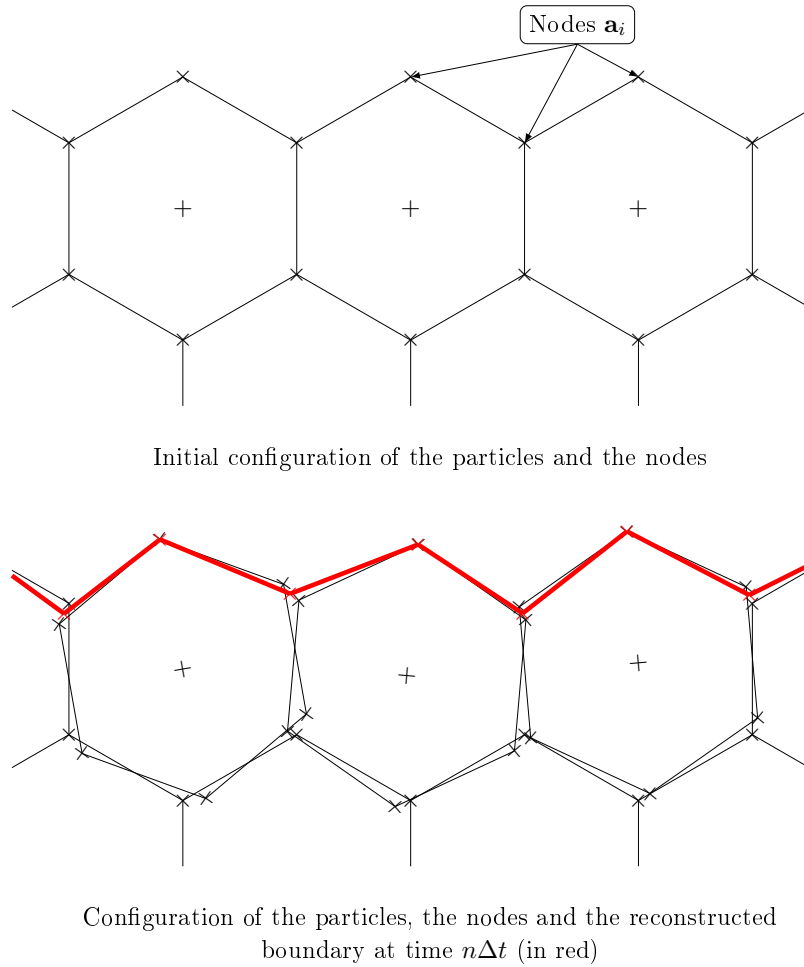


FIG. 5.1 – Reconstruction of the solid interface from the position of the particles

### 5.2.2 Deformed boundary reconstruction

The Discrete Element method consists of particles linked with cohesive forces and torques. If we keep a description of each particle as undeformable, the particles can overlap or become separated by small gaps as the solid is compressed or stretched. However, physically, no fluid should penetrate into the numerical gaps between the particles as the solid is cohesive. We therefore resort to the reconstruction of a continuous interface around the particle assembly, as close as possible to the actual displacement of the particles.

Several choices for the reconstruction are possible. For the sake of simplicity, we have explored here one option : the reconstructed interface is a polyhedral set with vertices obtained from a transformation of the vertices of the Discrete Elements lattice at time 0. Let us consider a vertex  $\mathbf{a}_i$  of the initial Discrete Element lattice : it supports several polygonal boundaries of one or more polyhedral particles. Let us denote  $\mathcal{P}_{\mathbf{a}_i}$  the set of particles which share the vertex  $\mathbf{a}_i$  and  $\#\mathcal{P}_{\mathbf{a}_i}$  the cardinality



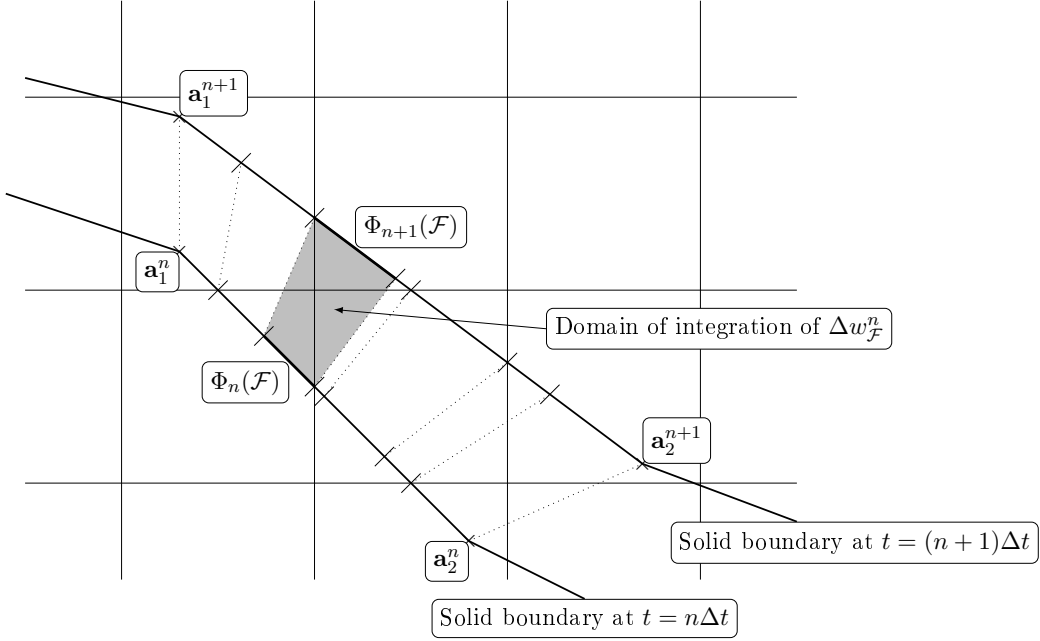


FIG. 5.2 – Update of the boundary and computation of the  $\Delta w_{\mathcal{F}}^n$

of set  $\mathcal{P}_{\mathbf{a}_i}$ . We define the mean vertex  $\bar{\mathbf{a}}_i^n$  corresponding to  $\mathbf{a}_i$  at time  $n\Delta t$  as the average of the positions of vertex  $\mathbf{a}_i$  under the rigid body motion of each particle in  $\mathcal{P}_{\mathbf{a}_i}$ :

$$\bar{\mathbf{a}}_i^n = \frac{1}{\#\mathcal{P}_{\mathbf{a}_i}} \sum_{I \in \mathcal{P}_{\mathbf{a}_i}} (\mathbf{X}_I^n + \mathbf{Q}_I^n \cdot (\mathbf{a}_i - \mathbf{X}_I^0)) \quad (5.13)$$

The reconstructed interface at time  $n\Delta t$  is the set of the polygons supported by the  $(\bar{\mathbf{a}}_i^n)_i$  such that the  $(\mathbf{a}_i)_i$  support a polygonal interface of the Discrete Elements in contact with fluid. Such a construction of the interface is straightforward in two dimensions. A typical boundary reconstruction is shown in Figure 5.1. In three dimensions, it is generally not possible to ensure that the  $\bar{\mathbf{a}}_i^n$  of a planar face remain coplanar. In this case, the polygon can be subdivided into triangles, the additional vertex being the centroid of the polygon. The reconstructed interface is the set of the triangles supported by the vertices at time  $n\Delta t$ .

Let us note that in the case when the solid amounts to one undeformable particle, the position of the vertices  $\bar{\mathbf{a}}_i^n$  coincides with that of  $\mathbf{a}_i$  under the rigid body movement. As a consequence, the results obtained in the undeformable case still hold.

In the same way as in Chapter 4, we define a mapping from the interface at time  $n\Delta t$  to its position at time  $(n+1)\Delta t$ . We assume that the interface behaves as an extensible elastic surface and that the points on the interface move as the surface stretches or shrinks. If a triangular element of surface is supported by vertices  $\mathbf{a}_1$ ,

$\mathbf{a}_2$  and  $\mathbf{a}_3$  and we express point  $\mathbf{x}$  of the surface at time  $n\Delta t$  as a barycenter :

$$\mathbf{x} = \alpha_1 \bar{\mathbf{a}}_1^n + \alpha_2 \bar{\mathbf{a}}_2^n + \alpha_3 \bar{\mathbf{a}}_3^n \quad (5.14)$$

$$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \geq 0, \quad \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1, \quad (5.15)$$

the map  $\Phi_n$  from the interface at time  $n\Delta t$  to the interface at time  $(n+1)\Delta t$  can be defined as :

$$\Phi_n(\mathbf{x}) = \alpha_1 \bar{\mathbf{a}}_1^{n+1} + \alpha_2 \bar{\mathbf{a}}_2^{n+1} + \alpha_3 \bar{\mathbf{a}}_3^{n+1} \quad (5.16)$$

The algorithm for the partitioning of the solid interface into boundary elements  $\mathcal{F}$  is presented in Figure 5.2.

### 5.2.3 Evaluation of the fluid pressure forces

Due to the deformation of the solid, the surface of each boundary element  $\mathcal{F}$  evolves during the time-step. In order to ensure the conservation of momentum and energy of the system, we need to use the same surface area  $\tilde{S}_{\mathcal{F}}$  and normal vector  $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{F}}$  during the time-step for the computation of solid pressure forces and for the modification of fluxes. On the other hand, the preservation of Galilean invariance involves the following geometric conservation laws in cell  $\mathcal{C}$  :

$$\kappa_{Cl}^{n+1} = \kappa_{Cr}^{n+1} + \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} \frac{\tilde{S}_{\mathcal{F}}}{\Delta y} \tilde{n}_{\mathcal{F}}^x \quad (5.17)$$

$$\kappa_{Cb}^{n+1} = \kappa_{Ct}^{n+1} + \sum_{\mathcal{F} \in \mathcal{C}} \frac{\tilde{S}_{\mathcal{F}}}{\Delta x} \tilde{n}_{\mathcal{F}}^y \quad (5.18)$$

We propose three different methods for the evaluation of  $\tilde{S}_{\mathcal{F}}$  and  $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{F}}$  : an explicit method, a predictor method and a semi-implicit method. We compare their performance in the sequel.

#### 5.2.3.1 Explicit method

The explicit method does not differ from the method exposed in Chapter 4. We take  $\tilde{S}_{\mathcal{F}} = S_{\mathcal{F}}^n$  and  $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{F}} = \mathbf{n}_{\mathcal{F}}^n$  for each boundary element. In the case of a rigid body in translation, conditions (5.17) and (5.18) are satisfied exactly, but this is no longer the case for a deformable solid. We therefore expect pressure fluctuations near a solid boundary deformed tangentially, whereas the slip boundary conditions should not yield such behavior.

We could satisfy exactly conditions (5.17) and (5.18) using  $\kappa^n$  instead of  $\kappa^{n+1}$  in the flux modification step. However, this solution seems to lead to instabilities as the boundary crosses cell faces. For newly covered cells, the left hand-side of (4.29) is equal to zero, whereas its right hand-side is not, using  $\kappa^n$  instead of  $\kappa^{n+1}$ . This might explain the instabilities observed. We do not resort to that modification of the algorithm.

### 5.2.3.2 Predictor method

In order to reduce the pressure fluctuations of the explicit method, we need to accurately predict the area and normal of the surface at time  $(n + 1)\Delta t$ . We also favour the fact that the method should remain explicit in time, in order to avoid a costly implicit resolution of the solid. To that end, we propose the following explicit method using a simple predictor for  $\tilde{S}_{\mathcal{F}}$  and  $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{F}}$ .

We define the mean velocity  $\mathbf{v}_{\mathbf{a}_i}^n$  of vertex  $\mathbf{a}_i$  as the average of the velocities of particles supported by  $\mathbf{a}_i$  :

$$\mathbf{v}_{\mathbf{a}_i}^n = \frac{1}{\#\mathcal{P}_{\mathbf{a}_i}} \sum_{I \in \mathcal{P}_{\mathbf{a}_i}} (\mathbf{V}_I^n + \mathbf{P}_I^n \mathbf{D}_I^{-1} \cdot (\mathbf{a}_i - \mathbf{X}_I^0)) \quad (5.19)$$

and we predict a new position  $\tilde{\mathbf{a}}_i$  for each vertex at time  $(n + 1)\Delta t$  :

$$\tilde{\mathbf{a}}_i = \bar{\mathbf{a}}_i^n + \Delta t \mathbf{v}_{\mathbf{a}_i}^n \quad (5.20)$$

The surface  $\tilde{S}_{\mathcal{F}}$  and normal  $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{F}}$  are computed on the polygon supported by the  $(\tilde{\mathbf{a}}_i)_i$ . This method still does not satisfy exactly conditions (5.17) and (5.18). However, results should be improved compared to the explicit method. Indeed, in the case when the surface deformation rate is constant, conditions (5.17) and (5.18) can be satisfied exactly. The pressure fluctuations only originate from the acceleration terms during the time-step.

### 5.2.3.3 Semi-implicit method

Conditions (5.17) and (5.18) can be satisfied exactly by taking  $\tilde{S}_{\mathcal{F}} = S_{\mathcal{F}}^{n+1}$  and  $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{F}} = \mathbf{n}_{\mathcal{F}}^{n+1}$ . Such an option leads to solve the solid with an implicit procedure which could be computationally expensive. We choose a semi-implicit procedure which only computes the position of particles in contact with fluid.

In order to reduce the computational cost, we precompute the internal forces between particles, as this is the most time-demanding step of the Discrete Element method. This computation is based on the position of particles at time  $n\Delta t$  and the internal forces are fixed throughout the iterative procedure. In the same way, the fluid pressures  $\bar{p}_x$  and  $\bar{p}_y$  have already been computed and remain fixed during the iterative procedure. For the particles in the outer layer of the solid (in contact with fluid), we compute the fluid forces exerted by the fluid pressure on surface  $\tilde{S}_{\mathcal{F}}$ , advance the position of the outer layer of particles with the internal and external pressure forces and update surface  $\tilde{S}_{\mathcal{F}}$  and normal  $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{F}}$ . We iterate the process until convergence is reached. Let us note that the procedure is more efficient than a global implicit method : the iterative procedure only involves the computation of positions of particles located in a limited space (typically one dimension smaller than the solid and fluid computation spaces). In addition, the expensive computation of the internal forces does not need to be carried out at each iteration : the only operations

involved are the inexpensive computation of fluid pressure forces, increment of the particle position and reconstruction of the boundary. We assess the efficiency of the semi-implicit method in section 5.5. We also prove in section 5.3 that under a classical CFL condition on the time-step, the iterative fixed point procedure converges at a geometric rate.

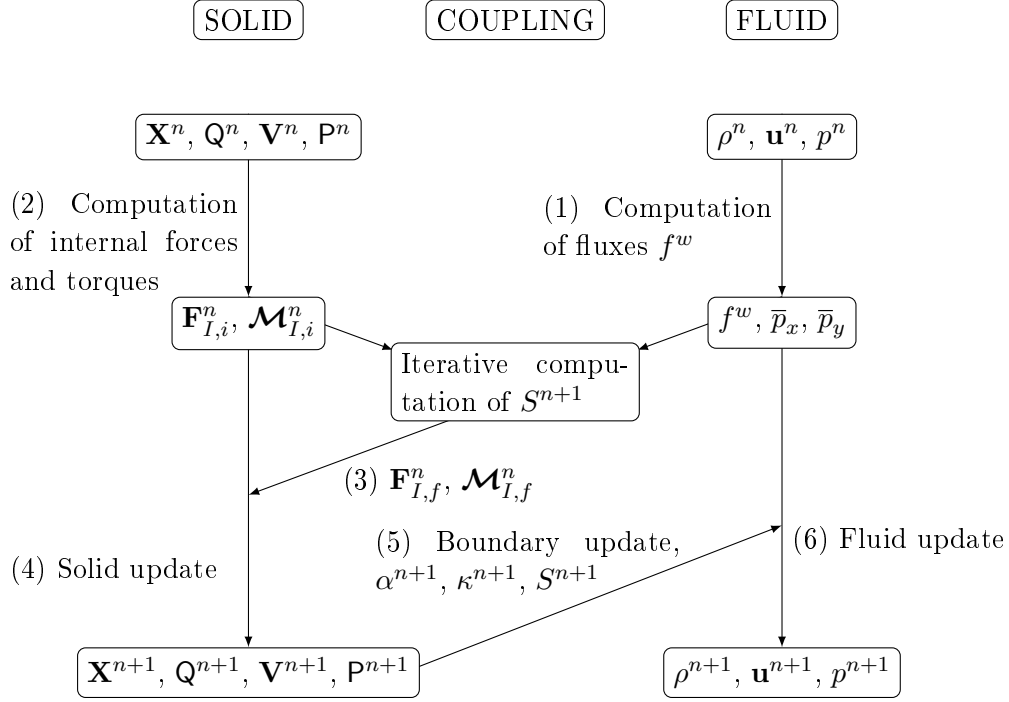


FIG. 5.3 – Structure of the semi-implicit scheme

The general structure of the semi-implicit scheme is presented on Figure 5.3. The most computationally expensive steps are steps (1) and (2). Let us note that these two steps are independent. The rest of the procedure is localized on the solid boundary and the fluid cell layer and solid particle layer in contact with the interface. The parallelization of the procedure with domain decomposition (in fluid and solid) should therefore be scalable.

## 5.3 Convergence of the fixed-point procedure

### 5.3.1 Notations

Let  $(\mathbf{X}^{n,k}, \mathbf{Q}^{n,k}) = \left( (\mathbf{X}_I^{n,k}, \mathbf{Q}_I^{n,k}) \right)_I$  be the field of positions of particles  $I$  of the solid at the  $k$ -th iteration of the fixed-point procedure of section 5.2.3.3. Let  $(\mathbf{X}^{n,k+1}, \mathbf{Q}^{n,k+1}) = \mathbf{f}(\mathbf{X}^{n,k}, \mathbf{Q}^{n,k})$  be the  $k+1$ -th iteration. The procedure is initia-

lized with  $(\mathbf{X}^{n,0}, \mathbf{Q}^{n,0}) = (\mathbf{X}^n, \mathbf{Q}^n)$ .  $\mathbf{f}$  can be expressed as follows :

$$\mathbf{v}_I^{n,k+1} = \mathbf{v}_I^n + \frac{\Delta t}{2m_I} \mathbf{F}_{I,i}^n + \frac{\Delta t}{2m_I} \mathbf{F}_{I,f}^{n,k} \quad (5.21)$$

$$\mathbf{X}_I^{n,k+1} = \mathbf{X}_I^n + \Delta t \mathbf{v}_I^{n,k+1} \quad (5.22)$$

$$\mathbf{P}_I^{n,k+1} = \mathbf{P}_I^n + \frac{\Delta t}{4} \mathbf{j}(\mathcal{M}_{I,i}^n) \mathbf{Q}_I^n + \frac{\Delta t}{4} \mathbf{j}(\mathcal{M}_{I,f}^{n,k}) \mathbf{Q}_I^n + \frac{\Delta t}{2} \Lambda_I^{n,k} \mathbf{Q}_I^n \quad (5.23)$$

$$\mathbf{Q}_I^{n,k+1} = \mathbf{Q}_I^n + \Delta t \mathbf{P}_I^{n,k+1} \mathbf{D}_I^{-1} \quad (5.24)$$

where  $\mathbf{F}_{I,i}^n$  and  $\mathcal{M}_{I,i}^n$  denote the internal forces and torques on particle  $I$  at time  $n\Delta t$  and  $\mathbf{F}_{I,f}^{n,k}$  and  $\mathcal{M}_{I,f}^{n,k}$  denote the pressure forces and torques of the fluid on particle  $I$  at time  $n\Delta t$  and at the  $k$ -th iteration of the fixed-point procedure.

In three space dimensions, let us denote  $\mathcal{F} \in (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  a boundary element included in the triangle supported by vertices  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  and  $\mathbf{a}_3$ . We suppose triangle  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  to be oriented (the normal vector going from the solid to the fluid) and non-degenerate. The surface and unitary normal of triangle  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  are given by :

$$S_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^{n,k} \mathbf{n}_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^{n,k} = \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{a}}_2^{n,k} - \bar{\mathbf{a}}_1^{n,k}) \wedge (\bar{\mathbf{a}}_3^{n,k} - \bar{\mathbf{a}}_1^{n,k}) \quad (5.25)$$

where the average position of the vertex  $\bar{\mathbf{a}}_i^{n,k}$  is given by :

$$\bar{\mathbf{a}}_i^{n,k} = \frac{1}{\#\mathcal{P}_{\mathbf{a}_i}} \sum_{I \in \mathcal{P}_{\mathbf{a}_i}} (\mathbf{X}_I^{n,k} + \mathbf{Q}_I^{n,k} \cdot (\mathbf{a}_i - \mathbf{X}_I^0)) \quad (5.26)$$

As the boundary element  $\mathcal{F}$  is included in the triangle, the normals coincide :  $\mathbf{n}_{\mathcal{F}}^{n,k} = \mathbf{n}_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^{n,k}$ . The application  $\Phi_{n,k}(\mathbf{x})$  is defined as in (5.16) :

$$\Phi_{n,k}(\mathbf{x}) = \alpha_1 \bar{\mathbf{a}}_1^{n,k} + \alpha_2 \bar{\mathbf{a}}_2^{n,k} + \alpha_3 \bar{\mathbf{a}}_3^{n,k} \quad (5.27)$$

$\Phi_{n,k}(\mathbf{x})$  is used to compute the position of the boundary element  $\mathcal{F}$  at the  $k$ -th iteration in the same way as  $\Phi_n(\mathbf{x})$  for the position at time  $(n+1)\Delta t$ . Let us note that this application ensures the following relation of surfaces :

$$S_{\mathcal{F}}^{n,k} = \frac{S_{\mathcal{F}}^n}{S_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^n} S_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^{n,k} \quad (5.28)$$

For the sake of simplicity, we suppose from now on that  $\bar{p}_x = \bar{p}_y = \bar{p}_z = \bar{p}$ . This assumption is not necessary to the proof, but greatly simplifies the presentation. Note that the mean pressure on each boundary is constant during the iterative process. We define the fluid pressure force  $\mathbf{F}_{I,f}^{n,k}$  on particle  $I$  :

$$\mathbf{F}_{I,f}^{n,k} = \sum_{\mathcal{F} \in I} \mathbf{F}_{\mathcal{F}}^{n,k}, \quad \mathbf{F}_{\mathcal{F}}^{n,k} = -\bar{p}_{\mathcal{F}} S_{\mathcal{F}}^{n,k} \mathbf{n}_{\mathcal{F}}^{n,k} \quad (5.29)$$

and the fluid pressure torque  $\mathcal{M}_{I,f}^{n,k}$  on particle  $I$  :

$$\mathcal{M}_{I,f}^{n,k} = \sum_{\mathcal{F} \in I} \mathbf{F}_{\mathcal{F}}^{n,k} \wedge (\mathbf{X}_{\mathcal{F}}^{n,k} - \mathbf{X}_I^{n,k}) \quad (5.30)$$

We now denote  $\bar{p}$  the mean pressure for triangle  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  :

$$\bar{p} = \sum_{\mathcal{F} \in (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)} \frac{S_{\mathcal{F}}^n}{S_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^n} \bar{p}_{\mathcal{F}} \quad (5.31)$$

We define, for a vertex  $\mathbf{a}$ , the displacement  $\xi_{\mathbf{a}}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q})$  of the vertex between the position at time  $n\Delta t$  and the  $k$ -th iteration :

$$\xi_{\mathbf{a}}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) = \frac{1}{\#\mathcal{P}_{\mathbf{a}}} \sum_{J \in \mathcal{P}_{\mathbf{a}}} \left( \mathbf{X}_J^{n,k} - \mathbf{X}_J^n + (\mathbf{Q}_J^{n,k} - \mathbf{Q}_J^n) \cdot (\mathbf{a} - \mathbf{X}_J^0) \right) \quad (5.32)$$

Then  $\mathbf{a}^{n,k} = \mathbf{a}^n + \xi_{\mathbf{a}}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q})$ , and using (5.28),

$$\mathbf{X}_I^{n,k+1} = \mathbf{C}_I^n + \frac{\Delta t^2}{2m_I} \sum_{(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) \in I} \mathbf{F}_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) \quad (5.33)$$

where  $\mathbf{C}_I^n$  is a constant with regard to  $k$  :

$$\mathbf{C}_I^n = \mathbf{X}_I^n + \Delta t \mathbf{v}_I^n + \frac{\Delta t^2}{2m_I} \mathbf{F}_{I,i}^n \quad (5.34)$$

$$\mathbf{F}_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) = \frac{1}{2\bar{p}} \left[ (\mathbf{a}_2^n - \mathbf{a}_1^n + \xi_{\mathbf{a}_2}^{n,k} - \xi_{\mathbf{a}_1}^{n,k}) \wedge (\mathbf{a}_3^n - \mathbf{a}_1^n + \xi_{\mathbf{a}_3}^{n,k} - \xi_{\mathbf{a}_1}^{n,k}) \right] (\mathbf{X}, \mathbf{Q}) \quad (5.35)$$

We denote  $h_s$  the size of the solid particles. Let us now prove that function  $\mathbf{f}$  is contracting for the following norm :

$$\|(\mathbf{X}, \mathbf{Q})\|_{\infty} = \max_J \|\mathbf{X}_J - \mathbf{Y}_J\| + h_s \max_J \|\mathbf{Q}_J - \mathbf{R}_J\| \quad (5.36)$$

### 5.3.2 Estimate on the position of the center of mass

Let  $(\mathbf{X}, \mathbf{Q})$  and  $(\mathbf{Y}, \mathbf{R})$  be two position fields on the particles. As

$$h_s \geq \max_{(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)} (\|\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1\|, \|\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1\|, \|\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_2\|), \quad (5.37)$$

we have :

$$\begin{aligned} & \|\mathbf{F}_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) - \mathbf{F}_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^{n,k}(\mathbf{Y}, \mathbf{R})\| \\ & \leq 2\bar{p} \left( h_s + 2 \max_i (\|\xi_{\mathbf{a}_i}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q})\|, \|\xi_{\mathbf{a}_i}^{n,k}(\mathbf{Y}, \mathbf{R})\|) \right) \max_i \|\xi_{\mathbf{a}_i}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) - \xi_{\mathbf{a}_i}^{n,k}(\mathbf{Y}, \mathbf{R})\| \end{aligned} \quad (5.38)$$

Using the expression of  $\xi_{\mathbf{a}_j}^{n,k}$  (5.32),

$$\|\xi_{\mathbf{a}_i}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) - \xi_{\mathbf{a}_i}^{n,k}(\mathbf{Y}, \mathbf{R})\| \leq \|(\mathbf{X}^{n,k} - \mathbf{Y}^{n,k}, \mathbf{Q}^{n,k} - \mathbf{R}^{n,k})\|_{\infty} \quad (5.39)$$

Using the solid CFL condition :

$$\|\xi_{\mathbf{a}_i}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q})\| \leq h_s \quad (5.40)$$

which implies :

$$\|\mathbf{F}_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) - \mathbf{F}_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^{n,k}(\mathbf{Y}, \mathbf{R})\| \leq 6\bar{p}h_s \|(\mathbf{X}^{n,k} - \mathbf{Y}^{n,k}, \mathbf{Q}^{n,k} - \mathbf{R}^{n,k})\|_\infty \quad (5.41)$$

As a result,

$$\|\mathbf{X}_I^{n,k+1} - \mathbf{Y}_I^{n,k+1}\| \leq \frac{3h_s \Delta t^2}{m_I} \sum_{(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) \in I} \bar{p} \|(\mathbf{X}^{n,k} - \mathbf{Y}^{n,k}, \mathbf{Q}^{n,k} - \mathbf{R}^{n,k})\|_\infty \quad (5.42)$$

### 5.3.3 Estimate on rotation

In the same way, for rotation,

$$\mathbf{Q}_I^{n,k+1} = \Gamma_I^n + \frac{\Delta t^2}{4} \sum_{\mathcal{F} \in I} (\mathbf{j}(\mathcal{M}_{\mathcal{F}}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q})) + 2\Lambda_I^{n,k}) \mathbf{Q}_I^n \mathbf{D}_I^{-1} \quad (5.43)$$

where  $\Gamma_I^n$  is given by :

$$\Gamma_I^n = \mathbf{Q}_I^n + \Delta t \mathbf{P}_I^n \mathbf{D}_I^{-1} + \frac{\Delta t^2}{4} \mathbf{j}(\mathcal{M}_{I,i}^n) \mathbf{Q}_I^n \mathbf{D}_I^{-1} \quad (5.44)$$

$$\mathcal{M}_{\mathcal{F}}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) = \frac{S_{\mathcal{F}}^n}{S_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^n} \mathbf{F}_{\mathcal{F}}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) \wedge (\mathbf{X}_{\mathcal{F}}^{n,k} - \mathbf{X}_I^{n,k}) \quad (5.45)$$

Let us note that

$$\|\mathbf{X}_{\mathcal{F}}^{n,k} - \mathbf{Y}_{\mathcal{F}}^{n,k}\| \leq \max_i \|\xi_{\mathbf{a}_i}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) - \xi_{\mathbf{a}_i}^{n,k}(\mathbf{Y}, \mathbf{R})\| \leq \|(\mathbf{X}^{n,k} - \mathbf{Y}^{n,k}, \mathbf{Q}^{n,k} - \mathbf{R}^{n,k})\|_\infty \quad (5.46)$$

$$\|\mathbf{X}_{\mathcal{F}}^{n,k} - \mathbf{X}_I^{n,k}\| \leq h_s \quad (5.47)$$

Using the bound on the force (5.41), we obtain :

$$\|\mathcal{M}_{\mathcal{F}}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) - \mathcal{M}_{\mathcal{F}}^{n,k}(\mathbf{Y}, \mathbf{R})\| \leq 10 \frac{S_{\mathcal{F}}^n}{S_{\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3}^n} \bar{p}_{\mathcal{F}} h_s^2 \|(\mathbf{X}^{n,k} - \mathbf{Y}^{n,k}, \mathbf{Q}^{n,k} - \mathbf{R}^{n,k})\|_\infty \quad (5.48)$$

Note that due to the construction of the Lagrange multiplier  $\Lambda_I^{n,k}$ , there exists a constant  $C$  such that :

$$\|\Lambda_I^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) - \Lambda_I^{n,k}(\mathbf{Y}, \mathbf{R})\| \leq C \|\mathcal{M}_{\mathcal{F}}^{n,k}(\mathbf{X}, \mathbf{Q}) - \mathcal{M}_{\mathcal{F}}^{n,k}(\mathbf{Y}, \mathbf{R})\| \quad (5.49)$$

In the end,

$$\|\mathbf{Q}_I^{n,k+1} - \mathbf{R}_I^{n,k+1}\| \leq \frac{5(1+2C)h_s^2 \Delta t^2}{2} \|\mathbf{D}_I^{-1}\| \sum_{(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) \in I} \bar{p} \|(\mathbf{X}^{n,k} - \mathbf{Y}^{n,k}, \mathbf{Q}^{n,k} - \mathbf{R}^{n,k})\|_\infty \quad (5.50)$$

## 5.3.4 End of the proof and remarks

As a result,

$$\begin{aligned} & \|(\mathbf{X}^{n,k+1} - \mathbf{Y}^{n,k+1}, \mathbf{Q}^{n,k+1} - \mathbf{R}^{n,k+1})\|_\infty \\ & \leq \left( \frac{3h_s}{m_I} + \frac{5(1+2C)h_s^3}{2} \|D_I^{-1}\| \right) \Delta t^2 \sum_{(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) \in I} \bar{p} \|(\mathbf{X}^{n,k} - \mathbf{Y}^{n,k}, \mathbf{Q}^{n,k} - \mathbf{R}^{n,k})\|_\infty \end{aligned} \quad (5.51)$$

We now suppose that the particles have a maximal aspect ratio : there exists  $\sigma_s$  the minimal inscribed sphere such that

$$\sigma_s = \min_{J} \sup_{\mathbf{x}, R} \{R > 0 \text{ s.t. } \mathcal{B}(\mathbf{x}, R) \subset J\} \quad (5.52)$$

Using the mass and inertia of a sphere of radius  $\sigma_s$  and of the same density  $\rho_s$  as the solid, we obtain

$$m_I \geq \frac{4\pi}{3} \rho_s \sigma_s^3, \quad \|D_I\| \geq \frac{4\pi}{15} \rho_s \sigma_s^5 \quad (5.53)$$

For a given aspect ratio  $\frac{h_s}{\sigma_s}$ , we note  $K(\frac{h_s}{\sigma_s})$  as :

$$K\left(\frac{h_s}{\sigma_s}\right) = \frac{9}{4\pi} \frac{h_s}{\sigma_s} + \frac{75(1+2C)}{8\pi} \left(\frac{h_s}{\sigma_s}\right)^3 \quad (5.54)$$

Then for  $\Delta t$  satisfying the CFL condition :

$$K\left(\frac{h_s}{\sigma_s}\right) \frac{\Delta t^2}{\sigma_s^2} \sum_{(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) \in I} \frac{\bar{p}}{\rho_s} < 1, \quad (5.55)$$

the map  $\mathbf{f}$  is contracting with respect to the norm  $\|(\mathbf{X}, \mathbf{Q})\|_\infty$ .

Let us comment on condition (5.55). We note that for a given aspect ratio of the particles, the condition on time-step  $\Delta t$  is proportional to the minimal solid space discretization step  $\sigma_s$ . Let us also note that the constant involves the ratio  $\frac{\bar{p}}{\rho_s}$  : if the solid density is assumed to be larger than the fluid density (which will be the case in most of our intended applications),  $\frac{\bar{p}}{\rho_s}$  is less than the square of the maximal fluid velocity  $c^2$ . The condition is compatible with the stability results found in [59] : a very small solid density induces numerical instabilities of the overall explicit coupling strategy. As our bounds on  $K$  have been very pessimistic, we can then expect that condition (5.55) is in practice less restrictive than the fluid CFL condition for physical density ratios. We have verified this on numerous simulations, in which the fixed point procedure always converged in less than 7 iterations, where the following criterion of convergence is chosen in the numerical simulations :

$$\max_I (\|\mathbf{X}_I^{n,k+1} - \mathbf{X}_I^{n,k}\|, \|\mathbf{v}_I^{n,k+1} - \mathbf{v}_I^{n,k}\|, \|\mathbf{Q}_I^{n,k+1} - \mathbf{Q}_I^{n,k}\|, \|\mathbf{P}_I^{n,k+1} - \mathbf{P}_I^{n,k}\|) \leq \varepsilon \quad (5.56)$$

where  $\varepsilon = 10^{-12}$ .



## 5.4 Exact conservation of energy for the undeformable solid

Let  $I$  be a solid undeformable particle. In this section, we omit the subscript  $I$  as there is only one particle. No interior forces exist in the solid. Denote  $\mathcal{E}_s^n$  the solid energy at time  $n\Delta t$  :

$$\mathcal{E}_s^n = \frac{1}{2}m\|\mathbf{V}^n\|^2 + \frac{1}{2}\text{tr}\left(\mathbf{P}^n\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{P}^n)^T\right) \quad (5.57)$$

In the sequel, we use the following lemma :

**Lemma 2** *Let  $\mathbf{A}$  and  $\mathbf{S}$  be respectively skew-symmetric and symmetric matrices. Then  $\text{tr}(\mathbf{AS}) = 0$ .*

The proof of the lemma is straightforward. Developing  $\mathcal{E}_s^{n+1}$  using equations (5.3)–(5.10), we obtain :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_s^{n+1} &= \frac{1}{2}m\|\mathbf{V}^n\|^2 + \Delta t\mathbf{F}_f^n \cdot \mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\text{tr}\left(\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}})^T\right) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{4}\text{tr}\left(\mathbf{j}(\mathcal{M}_f^n)\mathbf{Q}^{n+1}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}})^T\right) + \frac{\Delta t}{2}\text{tr}\left(\mathbf{P}^{n+1}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^{n+1})^T\tilde{\Lambda}^{n+1}\right) \\ &\quad - \frac{\Delta t^2}{8}\text{tr}\left(\tilde{\Lambda}^{n+1}\mathbf{Q}^{n+1}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^{n+1})^T\tilde{\Lambda}^{n+1}\right) - \frac{\Delta t^2}{32}\text{tr}\left(\mathbf{j}(\mathcal{M}_f^n)\mathbf{Q}^{n+1}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^{n+1})^T\mathbf{j}(\mathcal{M}_f^n)\right) \end{aligned} \quad (5.58)$$

Using Lemma 2, (5.10) and the symmetry of  $\tilde{\Lambda}^{n+1}$ , the fifth term of the right hand-side is equal to 0. Developing  $\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}}$ , we obtain :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_s^{n+1} &= \frac{1}{2}m\|\mathbf{V}^n\|^2 + \Delta t\mathbf{F}_f^n \cdot \mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\text{tr}\left(\mathbf{P}^n\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{P}^n)^T\right) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2}\text{tr}\left(\mathbf{j}(\mathcal{M}_f^n)\mathbf{Q}^{n+1}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}})^T\right) + \frac{\Delta t}{2}\text{tr}\left(\mathbf{P}^n\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^n)^T\Lambda^n\right) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{8}\text{tr}\left(\Lambda^n\mathbf{Q}^n\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^n)^T\Lambda^n\right) - \frac{\Delta t^2}{8}\text{tr}\left(\tilde{\Lambda}^{n+1}\mathbf{Q}^{n+1}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^{n+1})^T\tilde{\Lambda}^{n+1}\right) \end{aligned} \quad (5.59)$$

Again, applying Lemma 2, (5.10) at time  $n\Delta t$  and the symmetry of  $\Lambda^n$ , the fifth term vanishes.

We now prove a technical result on the trace of the Lagrange multipliers :

**Lemma 3**

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t^2}{8}\text{tr}\left(\Lambda^n\mathbf{Q}^n\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^n)^T\Lambda^n\right) - \frac{\Delta t^2}{8}\text{tr}\left(\tilde{\Lambda}^{n+1}\mathbf{Q}^{n+1}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^{n+1})^T\tilde{\Lambda}^{n+1}\right) \\ = \frac{1}{2\Delta t}\text{tr}\left(\mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}^{n+1} - \boldsymbol{\Omega}^n)\mathbf{Q}^{n+1}\mathbf{D}\mathbf{Q}^n\right) \end{aligned} \quad (5.60)$$

PROOF Using equations (5.5), (5.6), (5.9) and the fact that the Lagrange multipliers are symmetric matrices, we obtain the following expression for  $\Lambda^n$  and  $\tilde{\Lambda}^{n+1}$  :

$$\Lambda^n = \frac{2}{\Delta t^2}(\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n)\mathbf{D}\mathbf{Q}^{n\text{T}} - \frac{2}{\Delta t}\mathbf{P}^n\mathbf{Q}^{n\text{T}} \quad (5.61)$$

$$\tilde{\Lambda}^{n+1} = -\frac{2}{\Delta t^2}(\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n)\mathbf{D}\mathbf{Q}^{n+1\text{T}} + \frac{2}{\Delta t}\mathbf{P}^{n+1}\mathbf{Q}^{n+1\text{T}} \quad (5.62)$$

Inserting these equalities in the trace and using Lemma 2 and the constraints on  $\mathbf{P}^n$  and  $\mathbf{P}^{n+1}$ , the difference can be written :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t^2}{8}\text{tr}\left(\Lambda^n\mathbf{Q}^n\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^n)^{\text{T}}\Lambda^n\right) - \frac{\Delta t^2}{8}\text{tr}\left(\tilde{\Lambda}^{n+1}\mathbf{Q}^{n+1}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^{n+1})^{\text{T}}\tilde{\Lambda}^{n+1}\right) \\ = \frac{1}{2\Delta t}\text{tr}\left((\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n)(\mathbf{P}^{n+1} - \mathbf{P}^n)^{\text{T}}\right) \end{aligned} \quad (5.63)$$

The final result is obtained by inserting the relation giving the angular velocity  $\boldsymbol{\Omega}^n$  in terms of  $\mathbf{P}^n$  :

$$\mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}^n) = \mathbf{P}^n\mathbf{D}^{-1}\mathbf{Q}^{n\text{T}} \quad (5.64)$$

□

Let us note that equation (5.6) and Lemma 2 imply :

$$\frac{\Delta t}{2}\text{tr}\left(\mathbf{j}(\mathcal{M}_f^n)\mathbf{Q}^{n+1}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}})^{\text{T}}\right) = \frac{\Delta t}{4}\text{tr}\left(\mathbf{j}(\mathcal{M}_f^n)(\mathbf{Q}^n + \mathbf{Q}^{n+1})\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}})^{\text{T}}\right) \quad (5.65)$$

We now prove the following lemma :

**Lemma 4**  $\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^n + \mathbf{Q}^{n+1})^{\text{T}}$  is a skew-symmetric matrix, so that we can define the angular velocity vector  $\boldsymbol{\Omega}^{n+\frac{1}{2}}$  at time  $(n + \frac{1}{2})\Delta t$  by :

$$\mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}^{n+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{2}\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^n + \mathbf{Q}^{n+1})^{\text{T}}. \quad (5.66)$$

PROOF Let us note that :

$$\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}}\mathbf{D}^{-1} = \frac{1}{\Delta t}(\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n) \quad (5.67)$$

It follows that :

$$\mathbf{P}^{n+\frac{1}{2}}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{Q}^n + \mathbf{Q}^{n+1})^{\text{T}} = \frac{1}{\Delta t}(\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n)(\mathbf{Q}^n + \mathbf{Q}^{n+1})^{\text{T}} \quad (5.68)$$

$$= \frac{1}{\Delta t}(\mathbf{Q}^{n+1}(\mathbf{Q}^n)^{\text{T}} - \mathbf{Q}^n(\mathbf{Q}^{n+1})^{\text{T}}) \quad (5.69)$$

which proves the result. □

It is straightforward to see that :

$$\text{tr}\left(\mathbf{j}(\mathcal{M}_f^n)\mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}^{n+\frac{1}{2}})\right) = -2\mathcal{M}_f^n \cdot \boldsymbol{\Omega}^{n+\frac{1}{2}} \quad (5.70)$$

In the end, we obtain the variation of the discrete solid energy in terms of the fluid forces and torques and of the velocity of the solid at time  $(n + \frac{1}{2})\Delta t$  :

$$\mathcal{E}_s^{n+1} = \mathcal{E}_s^n + \Delta t \mathbf{F}_f^n \cdot \mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}} + \Delta t \mathcal{M}_f^n \cdot \boldsymbol{\Omega}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2\Delta t} \text{tr} \left( \mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}^{n+1} - \boldsymbol{\Omega}^n) \mathbf{Q}^{n+1} \mathbf{D} \mathbf{Q}^{nT} \right) \quad (5.71)$$

Note that in two space dimensions, the last term vanishes due to the commutation of the rotation matrices and of matrix  $\mathbf{D}$ . On the other hand, the works of fluid forces and torques exactly cancel with their discrete counterpart in the fluid integration scheme already computed in section 4.5.1.

We have therefore proved the exact conservation of a discrete energy for the coupled system in the case of an undeformable solid in two space dimensions. In the three-dimensional case, the conservation is not exact anymore. However, the discrepancy is limited : the product  $\mathbf{Q}^{n+1} \mathbf{D} \mathbf{Q}^{nT}$  is almost symmetric when the rotation matrices are close, and the term  $\mathbf{j}(\boldsymbol{\Omega}^{n+1} - \boldsymbol{\Omega}^n)$  is of the order of  $\Delta t$ . We therefore have a quasi-conservation in that case.

## 5.5 Numerical results

### 5.5.1 Tangentially vibrating rod

This case is a prototypical example of the inconsistency of the explicit and predictor schemes in the case of a tangential deformation of the solid boundary. A 2 meter long and 1 meter large rectangular rod is surrounded by gas at constant state  $(\rho, \mathbf{u}, p) = (1.4 \text{ kg.m}^{-3}, \mathbf{0} \text{ m.s}^{-1}, 1 \text{ Pa})$ . The rod's Young modulus and Poisson ratio are  $E = 7000 \text{ Pa}$  and  $\nu = 0$ . The rod is discretized with 10 Discrete elements in its length : the two extremal elements are fixed, and the other 8 elements are submitted to an external force  $\mathbf{F} = 0.25E\mathbf{e}_x$  while  $t$  is less than 0.05 s. The computation is carried out over 0.5s.

Physically, the rod should exhibit internal deformations, with both ends remaining fixed. As the Poisson ratio is  $\nu = 0$  and the force is directed along the axis of the rod, no normal deformation should occur at the surface of the rod. Only tangential deformations of the surface appear on both lateral sides of the rod. As a consequence, the tangential deformation of the boundary should create pressure oscillations for the explicit scheme, while the tangential deformation acceleration should yield smaller pressure oscillations for the predictor scheme. On the contrary, we expect the semi-implicit scheme to exactly preserve the constant state. This is precisely what is observed in Figure 5.4. The error for the explicit scheme grows faster when the velocity of the particles is the largest, whereas the error growth for the predictor scheme occurs when the particles accelerate or decelerate (in phase opposition with the explicit scheme). The predictor scheme does improve the error generated by the explicit scheme. However, only the semi-implicit scheme is able to eliminate totally the error (up to numerical errors caused by the incomplete convergence of the fixed point).

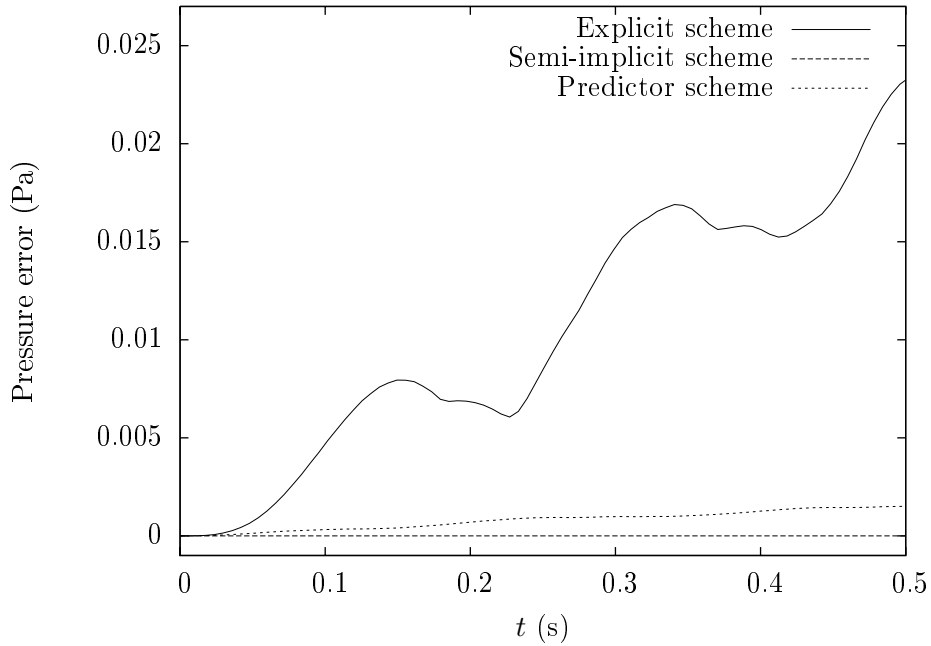


FIG. 5.4 – Evolution of the  $L^1$ -error in pressure of the explicit, predictor and semi-implicit schemes

### 5.5.2 Clamped beam

Consider a 4 meter long and 2 meter large canal, with fixed solid boundaries at the top and at the bottom. A beam is clamped at the bottom of the canal, its center is located at  $x = 2\text{m}$ . The beam is  $0.2857\text{ m}$  wide and  $1\text{m}$  long. Periodic boundary conditions are applied to both ends of the canal. Initially, the gas in the canal forms a double shock tube : the state is  $(\rho, \mathbf{u}, p) = (8\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}, \mathbf{0}\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}, 116.5\text{ Pa})$  if  $0 < x < 1.5\text{m}$ ,  $(\rho, \mathbf{u}, p) = (1.4\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}, \mathbf{0}\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}, 1\text{ Pa})$  if  $1.5\text{m} < x < 4\text{m}$ . The beam's density and Young's modulus are  $\rho_s = 100\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$  and  $E = 7000\text{Pa}$ , with a Poisson ratio  $\nu = 0$ . The fluid domain is discretized with  $400 \times 200$  elements ( $\Delta x = \Delta y = 10^{-2}\text{ m}$ ) and the beam is discretized with  $14 \times 50$  square elements ( $h_s = 2 \times 10^{-2}\text{ m}$ ). We show the pressure profile in the beam and in the fluid at time  $t = 0.08\text{s}$  computed with the semi-implicit scheme in Figure 5.5. On the left of the beam, we observe the primary reflected shock followed by successive compression waves induced by the multiple reflections of the shock wave inside the beam.

We compute the  $L^1$  error on pressure of the explicit and predictor scheme with regard to the semi-implicit scheme, and plot its evolution in time over 4 seconds in Figure 5.6. As expected, the error is more important for the explicit scheme than for the predictor scheme and it is cumulative. The choice of a semi-implicit scheme rather than the explicit or predictor scheme is therefore justified, in combination with the “consistency” property noted in section 5.5.1. We note that the CPU costs are the same for the explicit, predictor and semi-implicit schemes in this case.

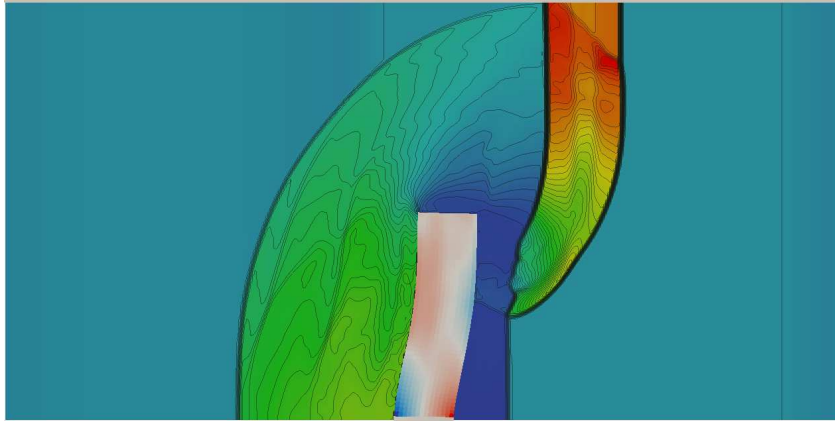


FIG. 5.5 – Pressure profile in the beam and in the fluid at time  $t = 0.08\text{s}$  (50 contours in the fluid from 0 to 160Pa)

In the case of a deformable solid coupled with the fluid, we have seen that no exact conservation of energy for the system can be proved. The energy conservation error of the system for the semi-implicit scheme is shown in Figure 5.7. The energy errors of the explicit and predictor schemes are similar. In comparison, the evolution of the solid energy is presented in Figure 5.8, as it corresponds to the energy transfer between the solid and the fluid. We observe that the ratio between the energy error and the energy transfer is of the order of  $10^{-5}$ . This fluctuation of energy is not linked to the convergence criterion, as it does not depend on the choice of the semi-implicit, explicit or predictor scheme, but originates from the fluctuation of the discrete energy in the symplectic scheme. However, we observe no energy drift during the simulation. This shows that the approach chosen still ensures an excellent long-term conservation of the energy of the system in the case of a deformable solid.

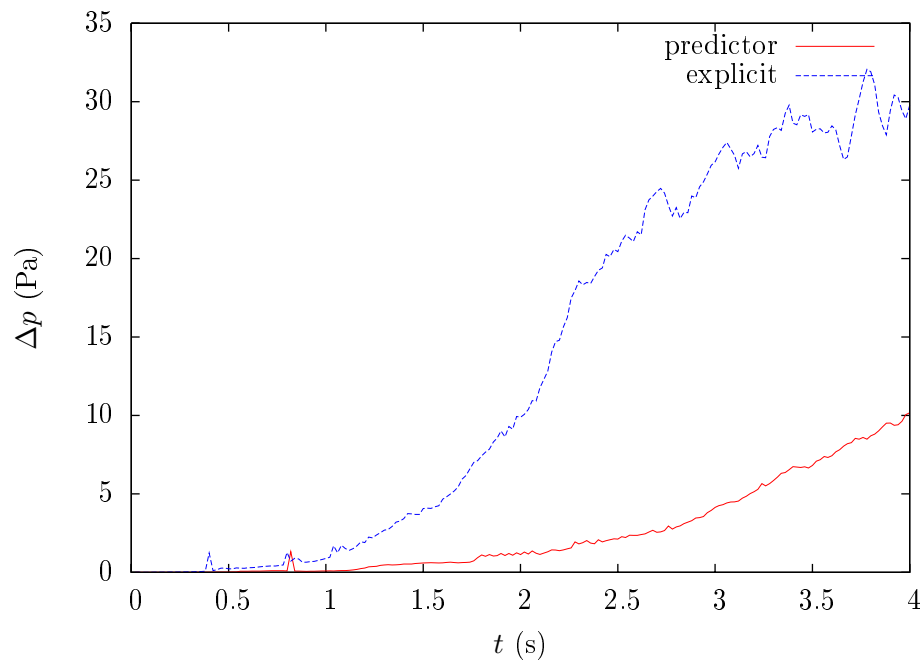
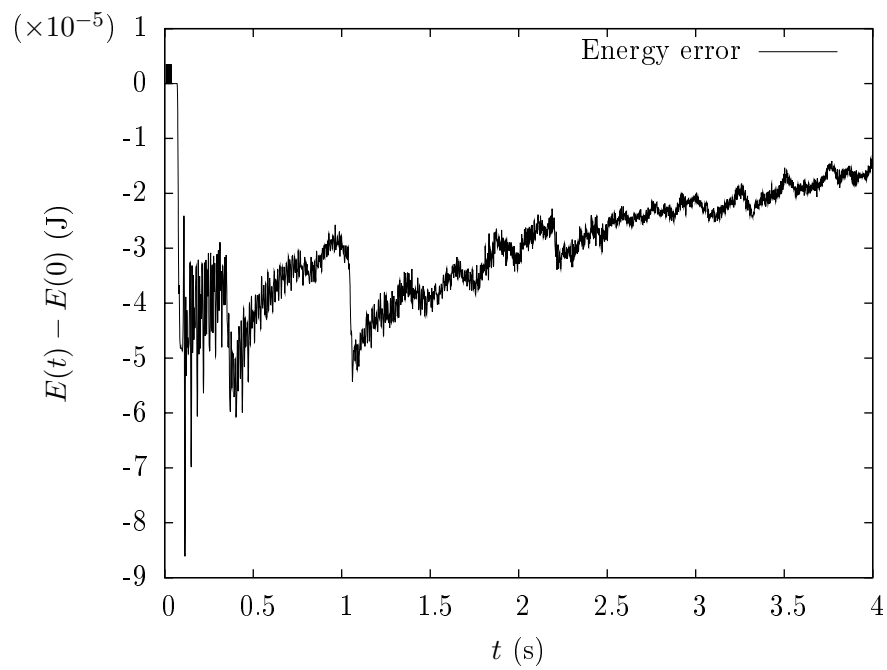
FIG. 5.6 – Evolution of the  $L^1$ -error in pressure of the explicit and predictor schemes

FIG. 5.7 – Evolution of the error in energy for the semi-implicit scheme

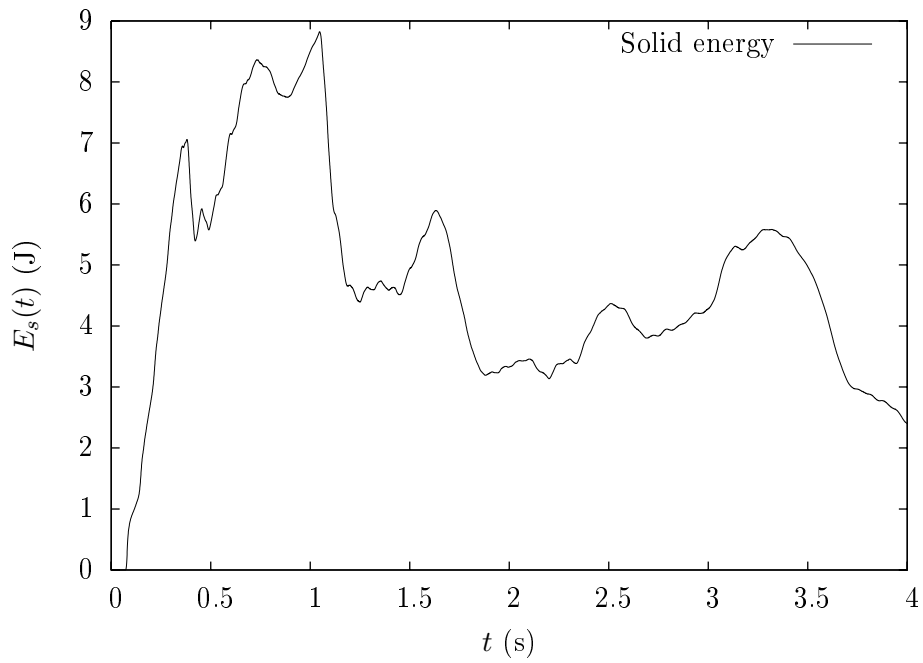


FIG. 5.8 – Evolution of the solid energy for the semi-implicit scheme

## 5.6 Conclusion

We have developed a coupling strategy between a deformable solid modelled with Discrete Elements and a compressible fluid approximated with Finite Volumes, inspired from the explicit coupling scheme with an undeformable solid (Chapter 4). In the case of a deformable solid, different approaches have been explored for the computation of the solid boundary surface and normal : explicit, predictor and semi-implicit algorithms have been proposed. The exact conservation of energy for an undeformable solid in two space dimensions is proved for the three schemes, and the numerical results show little conservation error in the deformable case. However, the explicit and predictor schemes are unable to recover consistency due to the explicit and conservative nature of the overall coupling algorithm. On the contrary, the semi-implicit algorithm retains consistency without impairing the numerical efficiency of the method. We therefore recommend the use of the semi-implicit version of the algorithm. We have proved the convergence of the fixed-point involved in the semi-implicit scheme with geometric convergence rate. The extension of these results to contact and fracturation requires the adequate reconstruction of a solid boundary around the solid assembly and of a map from the position of the boundary at time  $n\Delta t$  to its position at time  $(n+1)\Delta t$ . In the same way as we have been able to extend the coupling scheme from an undeformable to a deformable solid, the extension to fracturation and contact phenomena should therefore be possible.





# Résultats numériques

---

Dans ce chapitre, nous considérons des cas de validation de nos résultats en deux dimensions d'espace. Nous comparons tout d'abord nos résultats avec des résultats numériques [115, 116] sur le cas du flottement d'une plaque mince dans un écoulement supersonique, et la détermination de la limite de stabilité. Nous considérons ensuite deux cas de validation expérimentaux : l'ouverture d'une porte par un choc droit et les oscillations d'une plaque déformable impactée par une onde de choc.

## 6.1 Flottement d'une plaque mince dans un écoulement supersonique

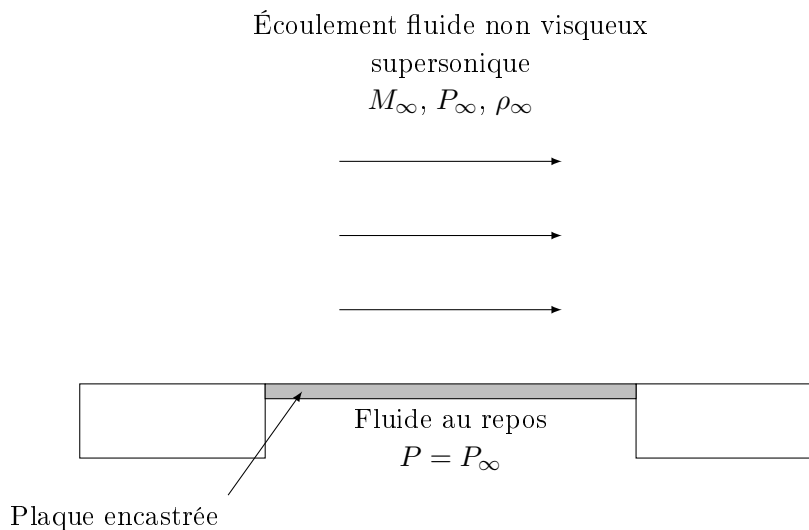


FIG. 6.1 – Schéma du problème de flottement

Nous étudions tout d'abord le problème de flottement d'une plaque mince déformable dans un écoulement supersonique étudié dans [115, 116]. Le problème est symptomatique du flottement d'une structure (aile d'avion, plaque du fuselage) en interaction avec un écoulement supersonique. Une plaque mince est encastrée à ses deux extrémités dans une paroi droite horizontale. La pression sous la plaque est constante et a pour valeur la pression  $P_\infty$  de l'écoulement libre, tandis qu'un écoulement supersonique à nombre de Mach  $M_\infty$  est produit au-dessus, comme représenté

sur la figure 6.1. Une analyse de stabilité linéaire utilisant une hypothèse de petits déplacements pour la plaque permet d'évaluer la limite de stabilité du système couplé, pour une plaque de rapport d'aspect infini. Le problème considéré ici est le même que dans [115, 116] : une plaque de longueur  $L = 0,5$  m, d'épaisseur  $h = 1,35 \cdot 10^{-3}$  m, de module d'Young  $E = 7,728 \cdot 10^{10}$  Pa, de coefficient de Poisson  $\nu = 0,33$  et de densité  $\rho_s = 2710$  kg.m<sup>-3</sup>, en interaction avec un fluide parfait non visqueux de densité  $\rho_\infty = 0,4$  kg.m<sup>-3</sup>, de pression  $P_\infty = 25714$  Pa et s'écoulant à un nombre de Mach  $M_\infty$ . La plaque est perturbée autour de son second mode propre. Pour ces données, la limite de stabilité théorique dans une analyse simplifiée intervient à  $M_\infty = 2,2686$ . Numériquement, [115, 116] trouve un nombre de Mach limite compris entre 2,23 et 2,24.

Nous avons simulé le même problème pour les nombres de Mach 2,23 et 2,24. Le domaine fluide utilisé s'étend sur 0,05 m en amont et 0,25 m en aval de la plaque, et 0,05 m sous la plaque et 0,45 m au-dessus. Nous discrétisons le domaine fluide avec  $80 \times 50$  cellules, soit un pas de discrétisation de 0,01 m. Notons que l'épaisseur de la plaque est inférieure au pas de discrétisation. Cependant, la plaque étant située exactement sur les interfaces entre deux couches de cellule, nous pouvons assurer qu'il n'y a pas de fuite de fluide à travers la plaque. De plus, cela sera le cas tout au long de la simulation, les déplacements verticaux de la plaque étant petits devant l'épaisseur de la plaque. Nous discrétisons le solide avec une seule particule dans l'épaisseur et 90 particules dans la longueur de la plaque. Les deux particules des extrémités sont bloquées en translation et en rotation pour reproduire les conditions d'encastrement.

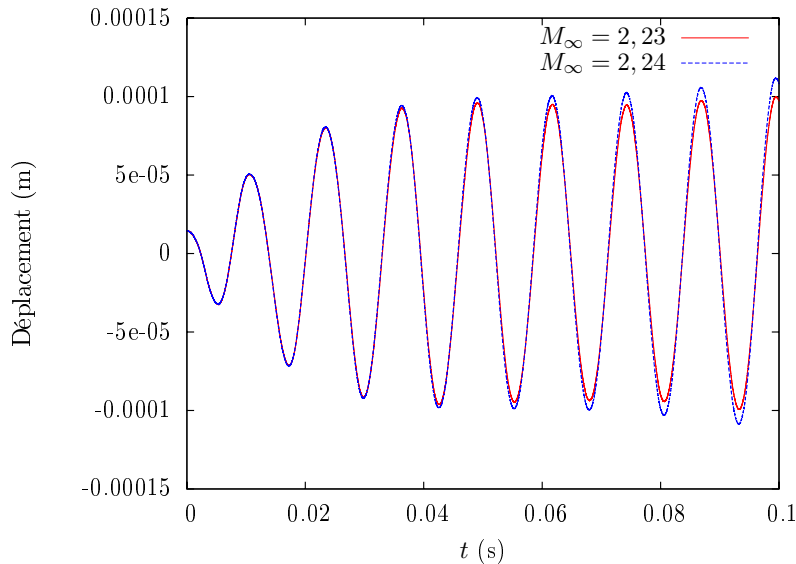


FIG. 6.2 – Comparaison du déplacement vertical en  $x = 0,35$  m de la plaque dans un écoulement  $M_\infty = 2,23$  (stable) et  $M_\infty = 2,24$  (instable)

Nous représentons sur la figure 6.2 le déplacement vertical de la plaque au point

$x = 0,35$  m (compté à partir du bord d'attaque de la plaque) pour des vitesses d'écoulement de nombre de Mach 2,23 et 2,24. Nous pouvons observer, comme dans [115, 116], que le mouvement de la plaque reste stable pour  $M_\infty = 2,23$ , tandis qu'il devient instable pour  $M_\infty = 2,24$  (croissance continue de l'amplitude du déplacement au cours des cycles). La limite de stabilité du système est donc observée pour un nombre de Mach compris entre 2,23 et 2,24 comme dans [115, 116], ce qui est proche de la limite théorique de stabilité de 2,2686. Notons que la conservation de l'énergie par le système est cruciale pour l'obtention correcte de cette limite de stabilité.

L'écoulement utilisé comme condition initiale est l'écoulement stationnaire autour de la position fixe de la plaque perturbée, présenté sur la figure 6.3. La figure 6.4 présente l'écoulement obtenu lors du phénomène de flottement, après avoir laissé la plaque libre d'osciller. Ces profils de densité normalisés par la densité ambiante sont en bon accord avec ceux présentés par [115]. La figure 6.5 représente le mode de flottement de la plaque. Celui-ci est en bon accord avec le mode présenté dans [115], même si le pic en  $x = 0,35$  m semble moins prononcé dans nos calculs. Nous attribuons cette différence au traitement des conditions aux limites d'encastrement. En effet, le fait de bloquer les deux particules extrêmes a pour effet de diminuer la longueur effective de la plaque et donc de la rigidifier. Cela explique les différences de l'ordre de 3% observées dans les fréquences propres de la plaque, ainsi que les amplitudes d'oscillation moindres.

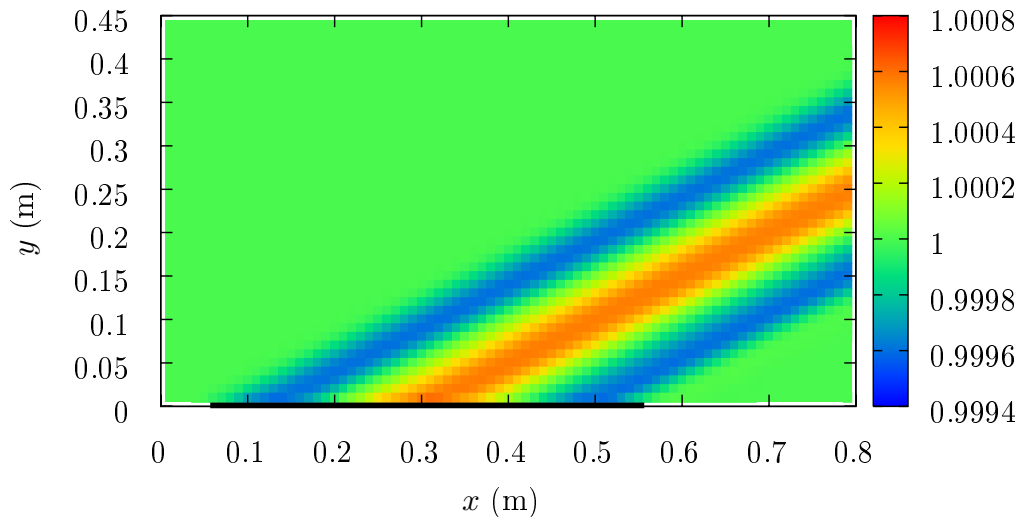


FIG. 6.3 – Profil de densité adimensionnée au-dessus de la plaque : écoulement initial sur la plaque perturbée (marquée en noir)

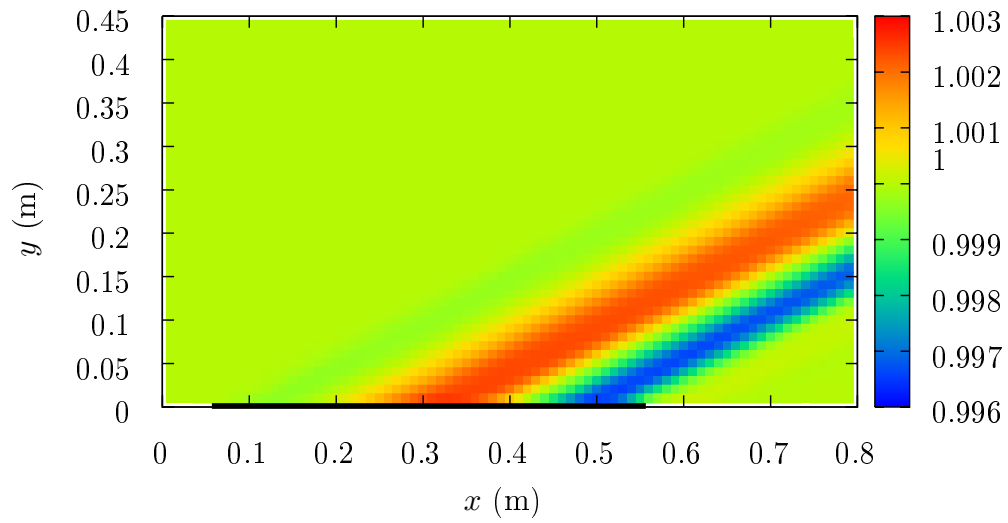


FIG. 6.4 – Profil de densité adimensionnée au-dessus de la plaque : écoulement sur la plaque en flottement (marquée en noir)

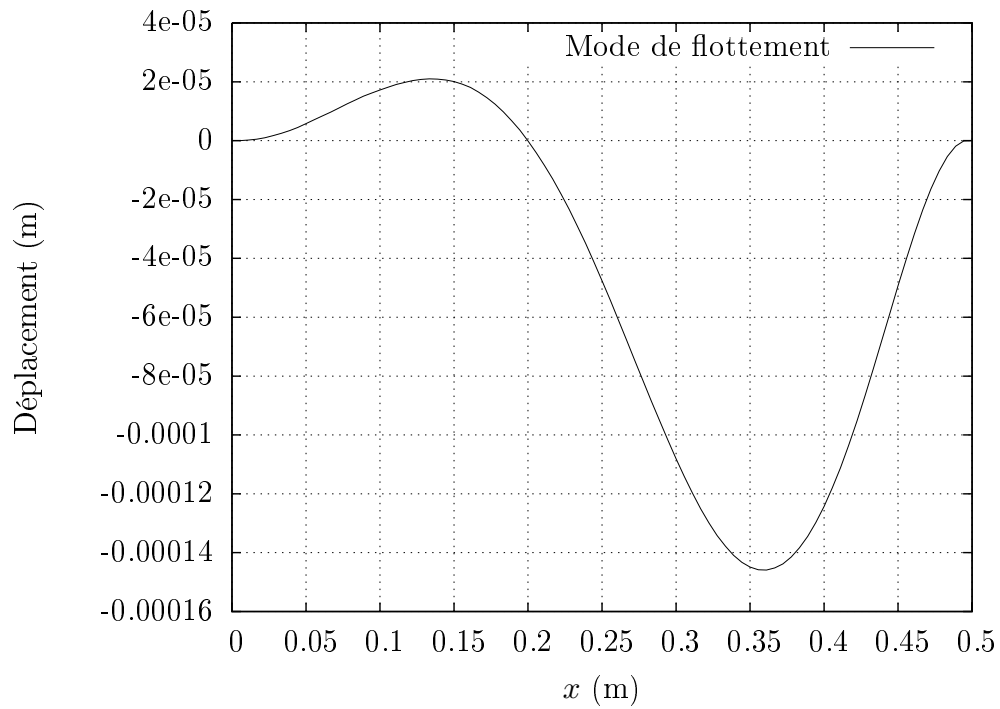


FIG. 6.5 – Mode propre de flottement de la plaque

## 6.2 Comparaisons expérimentales

### 6.2.1 Ouverture d'une porte par un choc incident

Dans cette section, nous comparons nos résultats numériques avec les expériences réalisées par Laurent Biamino *et al.* à l'IUSTI (Université de Provence/CNRS) présentées dans [12].

Le problème industriel à l'origine de l'expérience est le système de sécurité des moteurs d'avion. Dans un moteur à réaction, des ondes de choc peuvent apparaître qui menacent d'endommager le système mécanique et peuvent affecter les performances. Il est alors important de prévenir les augmentations de pression soudaines dans le compartiment du moteur. Pour cela, une valve de sécurité est utilisée pour permettre à l'air sous pression de s'écouler en partie hors du compartiment. Il s'agit donc de comprendre comment interagissent la valve et l'onde de choc incidente pour pouvoir prédire les éventuels dégâts causés à la structure de l'avion.

#### 6.2.1.1 Description du dispositif expérimental

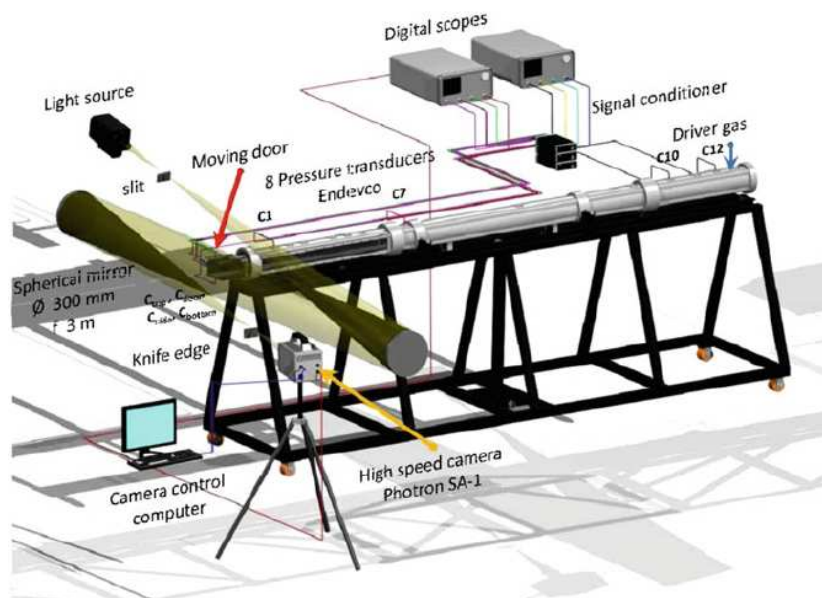


FIG. 6.6 – Dispositif expérimental utilisé (repris de [12])

La figure 6.6 reprend la description du tube à choc de section intérieure carrée  $80 \times 80$  mm utilisé à l'IUSTI. Ce tube à choc peut créer des chocs de nombre de Mach compris entre 1,1 et 5, mais pour des raisons de sécurité (sortie du choc par l'extrémité ouverte du tube), le nombre de Mach est limité à 1,25 dans l'expérience. Le tube est fermé d'un côté, et à l'autre extrémité se trouve une porte fixée par une

charnière. La porte peut s'ouvrir librement en pivotant autour de l'axe horizontal de la charnière. Le montage de la porte est présenté sur la figure 6.7 en position ouverte. On note  $\theta$  l'angle d'ouverture de la porte. La position initiale de la porte est en configuration fermée ( $\theta = 0$ ), et elle est bloquée en rotation par une bande Velcro dès que l'angle  $\theta$  atteint 90 degrés. La longueur totale du tube entre l'extrémité fermée et la porte est de 4,034 m.

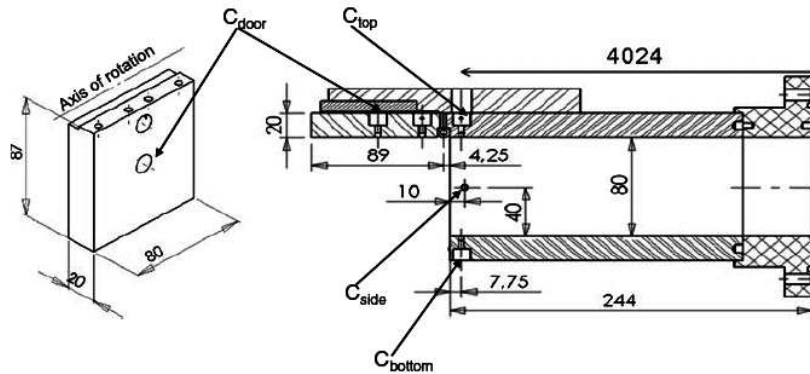


FIG. 6.7 – Schéma de la porte à l'extrémité du tube à choc (repris de [12]). Les dimensions sont données en mm

L'origine de l'axe du tube est fixée à l'extrémité fermée. Quatre capteurs de pression sont placés le long du tube, aux distances suivantes (en mm) :  $C_1$  (3630),  $C_7$  (2630),  $C_{10}$  (615) et  $C_{12}$  (265). Le diaphragme permettant de créer le choc est placé à 750 mm. Trois capteurs sont placés à proximité de la porte ( $C_{\text{bottom}}$ ,  $C_{\text{top}}$  et  $C_{\text{side}}$ ) à 4024 mm, respectivement en bas, sur le côté et en haut du tube. Un capteur est positionné au centre de la porte ( $C_{\text{door}}$ ).

Afin d'étudier l'effet de l'inertie de la porte sur son ouverture, deux portes différentes sont considérées. La première, en aluminium, est la plus légère. Sa masse est de 0,376 kg et son moment d'inertie (par rapport à la charnière) de 1026,2 kg.mm<sup>2</sup>. L'autre porte, en acier, est plus lourde. Sa masse est de 0.981 kg et son moment d'inertie de 2675,52 kg.mm<sup>2</sup>.

### 6.2.1.2 Caractéristiques de la simulation numérique

Nous pouvons considérer en première approximation que le problème étudié est bidimensionnel. Cela sera vrai en pratique à l'intérieur du tube à choc ; en revanche, lors de l'ouverture de la porte, des effets tridimensionnels apparaissent. La porte, en s'ouvrant, ne laissera passer l'écoulement que par l'ouverture en bas du tube, alors que dans l'expérience, l'écoulement peut également se faire par les côtés. Nous verrons que l'approximation bidimensionnelle permet néanmoins de retrouver les caractéristiques générales de l'écoulement.

Comme dans l'expérience, la porte n'est pas hermétiquement fermée initialement : un léger espace existe entre la porte et le tube à choc à la charnière et à

l'ouverture en bas. Ce point nous permet de ne pas avoir à considérer le contact dans toute la simulation.

Le domaine à simuler est extrêmement long, avec des conditions aux limites d'écoulement libre dans une atmosphère ambiante. Afin de limiter le temps de calcul, nous choisissons de simuler un domaine resserré autour du solide. Notre domaine de calcul a une taille de  $4,4 \times 0,2$  m, l'intérieur du tube à choc se situant dans l'intervalle  $[0, 4.034] \times [0.1, 0.18]$  m. Dans un premier calcul peu raffiné, nous utilisons une grille de calcul fluide de  $528 \times 24$  cellules, soit une taille de cellule d'environ 8.33 mm. Cette taille caractéristique est à comparer à la taille de la porte qui mesure  $20 \times 87$  mm. Le domaine de calcul est représenté sur la figure 6.8

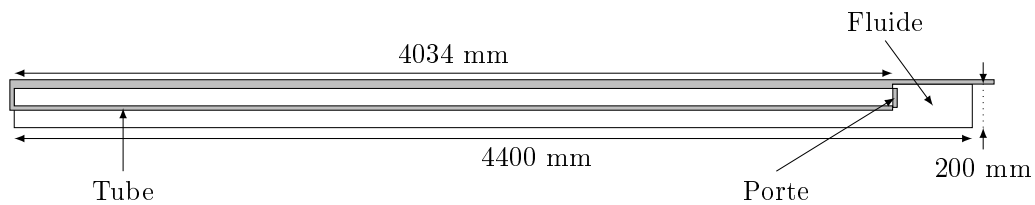


FIG. 6.8 – Schéma du domaine de calcul numérique

Une difficulté numérique importante est la prise en compte des conditions aux limites qui sont très proches de la porte (pour les plus proches, à une distance de l'ordre de 100 mm seulement). Afin d'approcher au mieux ces conditions aux limites, nous utilisons des conditions de Poinsot-Lele d'écoulement libre [119]. L'écoulement étant localement subsonique, afin que le problème soit bien posé, il faut assurer un retour à la pression atmosphérique ambiante en temps long.

Nous intégrons l'effet de la gravité dans les équations du mouvement de la porte. Nous verrons en effet que la gravité peut intervenir dans la détermination du temps d'ouverture de la porte. En revanche, nous considérons l'air comme un gaz parfait compressible non visqueux, avec  $\gamma = 1.4$ . Nous considérons que la charnière de la porte est parfaite et ne dissipe aucune énergie par frottement.

### 6.2.1.3 Analyse des résultats

Après la rupture contrôlée du diaphragme, une onde de choc (se dirigeant vers la porte) et une onde de détente sont engendrées. L'onde de détente se réfléchit contre le fond du tube, tandis que l'onde de choc se réfléchit contre la porte, exerçant ainsi une poussée sur celle-ci. L'ouverture de la porte permet à une partie de l'écoulement de se propager dans l'atmosphère environnante, tandis qu'une partie de l'onde incidente est réfléchi à l'intérieur du tube. Après une réflexion contre le fond du tube, l'onde de choc revient impacter la porte, qui s'est entretemps ouverte partiellement. L'onde de choc peut alors s'écouler hors du tube, avec de nouveau une réflexion partielle plus faible à l'intérieur du tube. Finalement, la porte, sous



l'effet de son inertie, s'ouvre en totalité. Des profils de pression à différents temps sont présentés sur la figure 6.9. Les photographies de strioscopie (gradient de densité) correspondantes sont reprises de [12] sur la figure 6.10. Les résultats numériques obtenus sont qualitativement très proches des résultats expérimentaux. Deux principales différences apparaissent. Tout d'abord, les temps de retour de l'onde réfléchie ne sont pas exactement identiques, ce que nous attribuons à des différences dans la préparation des conditions initiales. En effet, n'ayant pas d'information sur la densité initiale dans la chambre à haute pression séparée du reste du tube par le diaphragme, nous avons fait une hypothèse isotherme (équilibre des températures

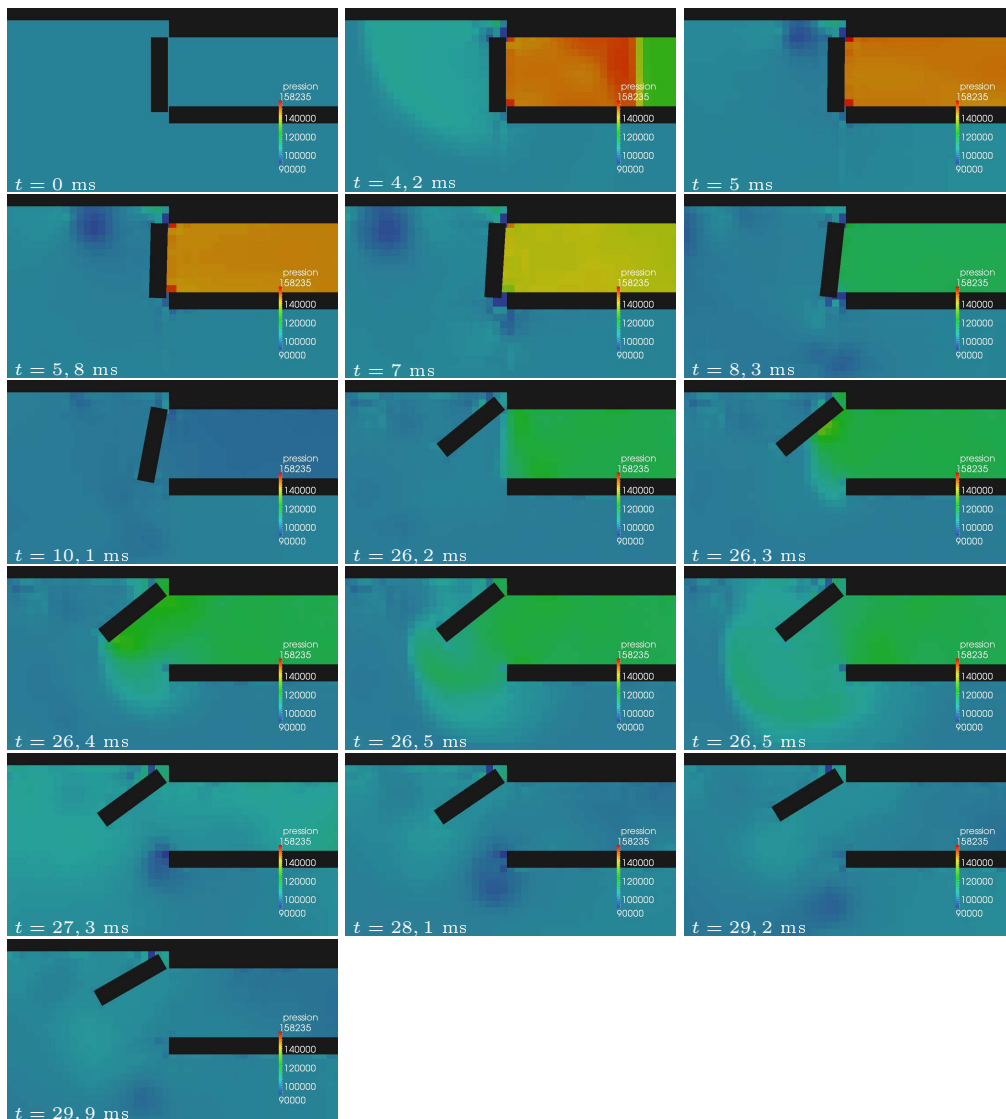


FIG. 6.9 – Profils de pression simulés autour de la porte à différents instants

entre les deux chambres du tube). Il se pourrait cependant que si l'augmentation de la pression a été réalisée de façon rapide juste avant la rupture du diaphragme, une hypothèse isentropique soit plus correcte, induisant des différences de densité entre la simulation et l'expérience et expliquant les légères différences de temps d'arrivée des ondes. Par ailleurs, nous notons que l'onde apparaissant à  $t = 26$  ms sur l'expérience ne peut pas être retrouvée sur la simulation aux temps comparables. Cette



FIG. 6.10 – Photographies de strioscopie obtenues expérimentalement à différents instants (reprises de [12])

onde semble être une discontinuité de contact qui est absente de nos résultats sur la densité. Une explication possible serait le fait que cette onde soit liée à des effets visqueux d'interaction de l'onde de choc avec la couche limite dans le tube.

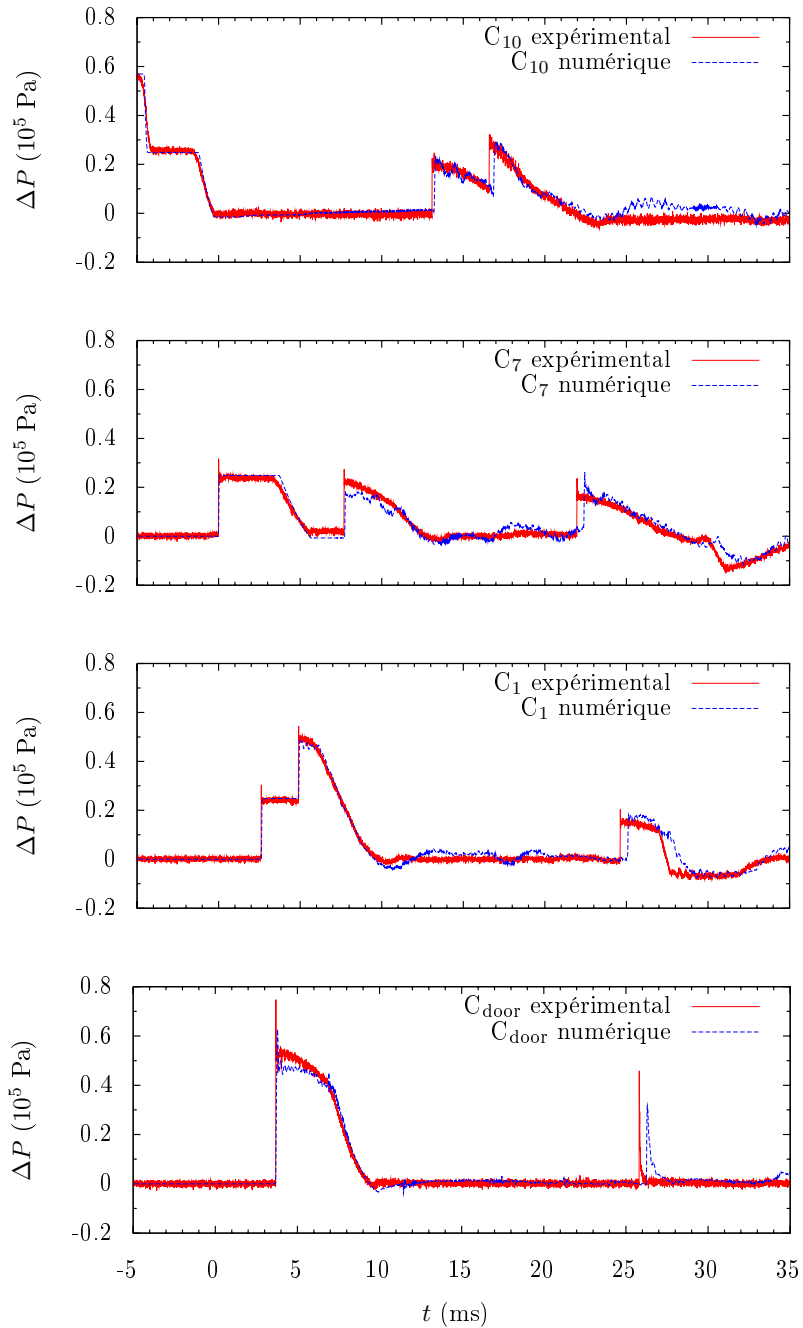


FIG. 6.11 – Comparaison des pressions expérimentales et numériques aux capteurs  $C_{10}$ ,  $C_7$ ,  $C_1$  et  $C_{door}$  pour l'interaction entre un choc à  $M_\infty = 1.1$  et une porte en aluminium

Le cas de référence utilisé par [12] est l'interaction d'une porte en aluminium avec un choc à Mach 1,1. Dans ce cas, l'évolution de la surpression  $\Delta P$  par rapport à l'atmosphère obtenue numériquement et expérimentalement aux capteurs  $C_{10}$ ,  $C_7$ ,  $C_1$  et  $C_{\text{door}}$  est représentée sur la figure 6.11. Le temps d'origine utilisé ici est le temps d'arrivée de l'onde de choc sur le capteur  $C_7$ . Nous pouvons noter que les temps d'arrivée et les amplitudes des ondes sont très proches de ceux obtenus expérimentalement. Les fluctuations de la solution numérique peuvent avoir plusieurs origines. Tout d'abord, la grille eulérienne utilisée est extrêmement grossière. La prise en compte de la présence du solide ne peut donc pas être très précise. L'épaisseur de la porte n'étant que de moins de trois cellules fluide, il est possible que le stencil large de la méthode induise des oscillations numériques parasites. Enfin, nous observons que les conditions aux limites d'écoulement libre à la frontière du domaine peuvent engendrer des ondes partiellement réfléchies ou interagir de façon complexe avec les vortex engendrés par l'écoulement autour de la porte. Une solution serait donc d'utiliser un maillage plus fin avec un domaine de calcul plus large autour du tube à choc. Nous n'avons pas conduit cette étude ici en raison du coût de calcul associé.

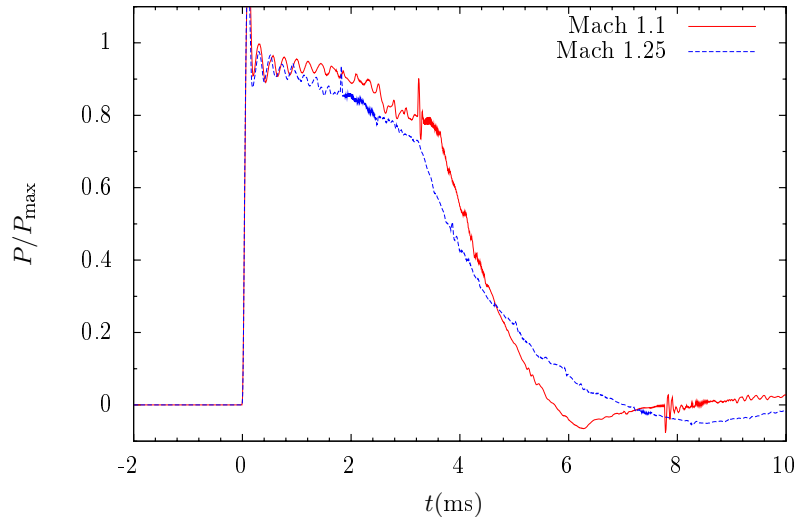


FIG. 6.12 – Comparaison de l'évolution de la pression au capteur  $C_{\text{door}}$  d'une porte en aluminium avec un choc à  $M_{\infty} = 1.1$  et à  $M_{\infty} = 1.25$

A l'instar de [12], nous avons comparé l'impact d'un choc Mach 1,25 à celui d'un choc à Mach 1,1 sur la porte en aluminium. L'évolution de la pression renormalisée par la pression maximale au cours du temps au capteur  $C_{\text{door}}$  est représentée sur la figure 6.12, le temps d'origine étant ici pris à l'impact du choc sur la porte. La pression de renormalisation  $P_{\text{max}}$  vaut ici 50000 Pa pour  $M_{\infty} = 1,1$  et 157000 Pa pour  $M_{\infty} = 1,25$ . Comme [12], nous observons initialement une diminution plus rapide de la surpression relative dans le cas  $M = 1,25$  que dans le cas  $M = 1,1$ . Cette diminution de la surpression peut s'expliquer par l'ouverture de la porte sous les forces de pression, qui est plus rapide dans le cas du choc  $M = 1,25$  que dans le

cas  $M = 1,1$ . La surpression s'annule ensuite sous l'effet des détentes réfléchies sur le fond du tube.

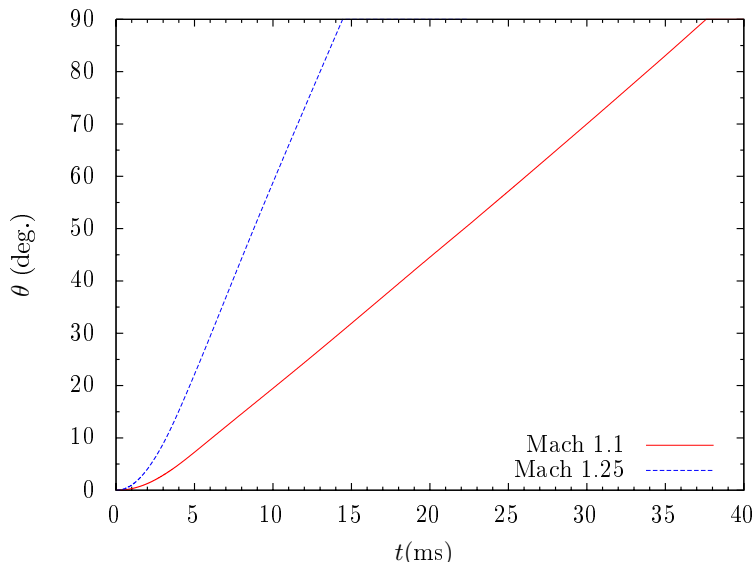


FIG. 6.13 – Comparaison de la rotation en ouverture d'une porte en aluminium par un choc  $M_\infty = 1,1$  et  $M_\infty = 1,25$

L'ouverture de la porte en fonction du temps pour les chocs  $M = 1,25$  et  $M = 1,1$  est représentée sur la figure 6.13. Nous obtenons des courbes d'évolution similaires à l'expérience, avec une première phase d'accélération de la porte sous l'effet des forces de pression, puis une deuxième phase où la porte s'ouvre à vitesse constante, sous l'effet de l'inertie. Les temps d'ouverture simulés pour les chocs  $M = 1,1$  et  $M = 1,25$  sont respectivement de 37,6 ms et 14,4 ms, qui sont remarquablement proches des temps mesurés expérimentalement de 37,5 ms et 13,8 ms. Nous obtenons donc une très bonne évaluation de la dynamique de la porte en dépit des simplifications physiques effectuées.

La comparaison avec les expériences sur l'influence de la masse de la porte est également très concluante. Nous présentons sur la figure 6.14 l'évolution de la surpression renormalisée par le pic de pression pour un choc  $M = 1,1$  dans le cas d'une porte en aluminium et d'une porte en acier. La pression  $P_{\max}$  est de nouveau prise égale à 50000 Pa. Nous observons, comme dans l'expérience, que la surpression est supérieure pour la porte en acier par rapport à la porte en aluminium. Cela est dû à la plus grande inertie de la porte en acier, qui limite la chute de la surpression par rapport à celle d'une porte en aluminium, plus légère et s'ouvrant donc plus rapidement. Cette constatation confirme l'origine de la chute de la surpression avec l'ouverture de la porte. La comparaison des dynamiques des deux portes est représentée sur la figure 6.15. On voit apparaître, dans le cas de la porte en acier, l'effet de la gravité en fin de course, le temps d'ouverture étant suffisamment long pour que la gravité fasse effet. Nous mesurons un temps d'ouverture de la porte en acier

d'environ 96 ms, en bon accord avec le temps d'ouverture expérimental de 92 ms.

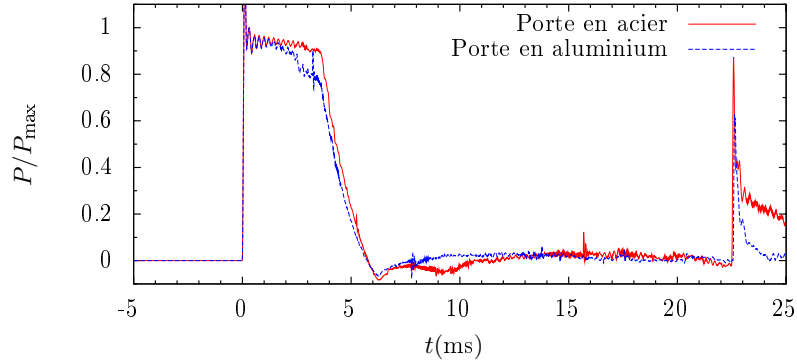


FIG. 6.14 – Comparaison de l'évolution de la pression au capteur  $C_{\text{door}}$  pour un choc  $M_{\infty} = 1.1$  entre une porte en aluminium et une porte en acier

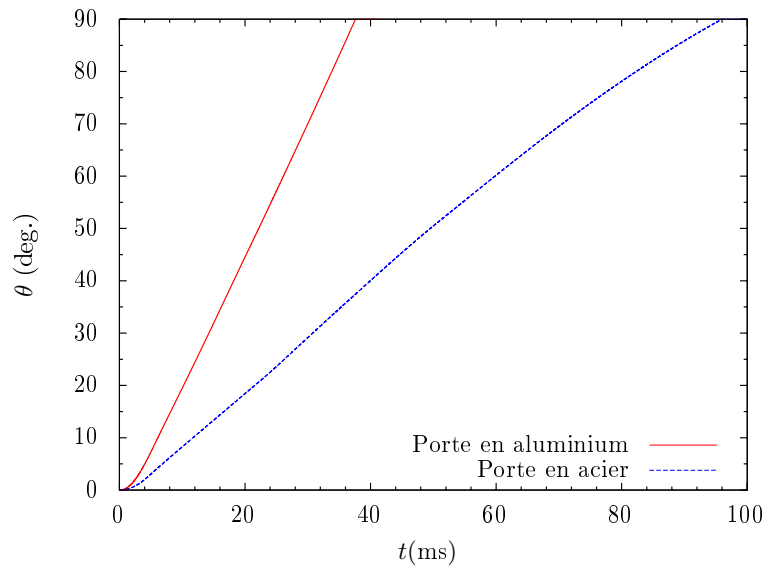


FIG. 6.15 – Comparaison de la rotation en ouverture par un choc  $M_{\infty} = 1.1$  d'une porte en aluminium et d'une porte en acier

#### 6.2.1.4 Conclusions

Nous retrouvons donc bien les caractéristiques principales de l'expérience avec notre méthode numérique, tout en ayant fait des simplifications physiques (pas de viscosité ni de dissipation, pas d'effets tridimensionnels). Les comparaisons quantitatives avec les données expérimentales semblent concluantes sur la validité du schéma numérique. En particulier, nous estimons que l'obtention d'un temps correct d'ouverture de la porte est un signe de la bonne conservation de l'énergie par

la méthode de couplage. Les transferts énergétiques entre le fluide et le solide permettent d'assurer des relations de transmission correctes entre les deux milieux.

### 6.2.2 Interaction d'une onde de choc avec une plaque déformable

Dans cette section, nous comparons nos résultats numériques avec une expérience d'interaction fluide-structure réalisée à l'IUSTI (Université de Provence/CNRS) [53]. Cette expérience a déjà été simulée par une méthode ALE de couplage bidimensionnel entre un code Volumes Finis pour les écoulements compressibles visqueux et un code de dynamique des structures. Le but de cette expérience est de fournir un cas-test de validation expérimentale pour l'interaction fluide-structure dynamique.

#### 6.2.2.1 Description du dispositif expérimental

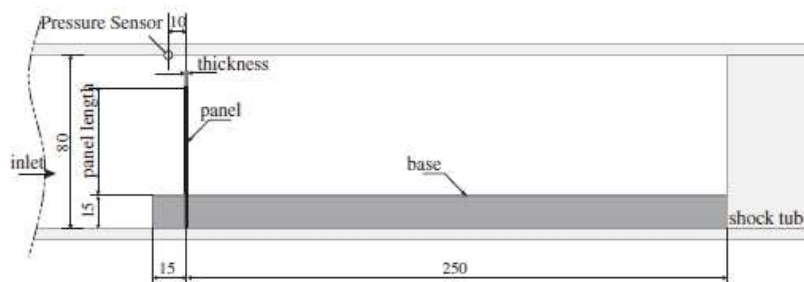


FIG. 6.16 – Dispositif expérimental utilisé (repris de [53])

Le tube à choc utilisé est toujours le tube à choc T80 de section carrée  $80 \times 80$  mm, de longueur totale 3,75 m. Cette fois-ci, les deux extrémités du tube à choc sont fermées. Un choc est engendré par une surpression dans l'extrémité gauche et la rupture contrôlée d'un diaphragme, puis le choc se propage jusqu'à l'extrémité droite où se trouve une chambre en plexiglass permettant la visualisation. Le dispositif que nous allons décrire ici se situe intégralement dans cette chambre. Nous nous limiterons donc à la description de cette partie du dispositif, en prenant l'arrivée d'un choc droit depuis la gauche comme donnée. Le choc utilisé dans ce travail a un nombre de Mach de 1,21.

Une plaque en acier ( $E = 220$  GPa et  $\rho = 7600$  kg.m<sup>3</sup>), d'épaisseur 1 mm et de longueur variable (40 mm ou 50 mm dans cette expérience) est fixée sur une base lui servant de support. La base est considérée comme indéformable, tandis que la plaque est déformable sous l'effet des forces de pression. La base surélève la plaque de 15 mm, et forme une marche d'escalier 15 mm en amont de la plaque. L'extrémité fermée du tube à choc se situe 250 mm en aval de la plaque. Un capteur de pression situé sur la paroi supérieure du tube 10 mm en amont de la plaque permet d'évaluer l'évolution de la pression subie par la plaque.

Lors de l'impact de l'onde de choc sur la plaque, une partie de l'onde de choc est transmise au-dessus de la plaque ainsi que par les côtés, tandis que le reste de l'onde est réfléchi. L'onde de choc transmise se réfléchit sur l'extrémité du tube et revient impacter la plaque. Sous l'effet de la surpression, la plaque est mise en oscillation, principalement selon son premier mode propre. Au long de l'expérience, des tourbillons se détachent du bord de la plaque sous l'effet de l'écoulement. Les profils de densité toutes les  $70 \mu\text{s}$  sont présentés sur les figures 6.17 et 6.18.

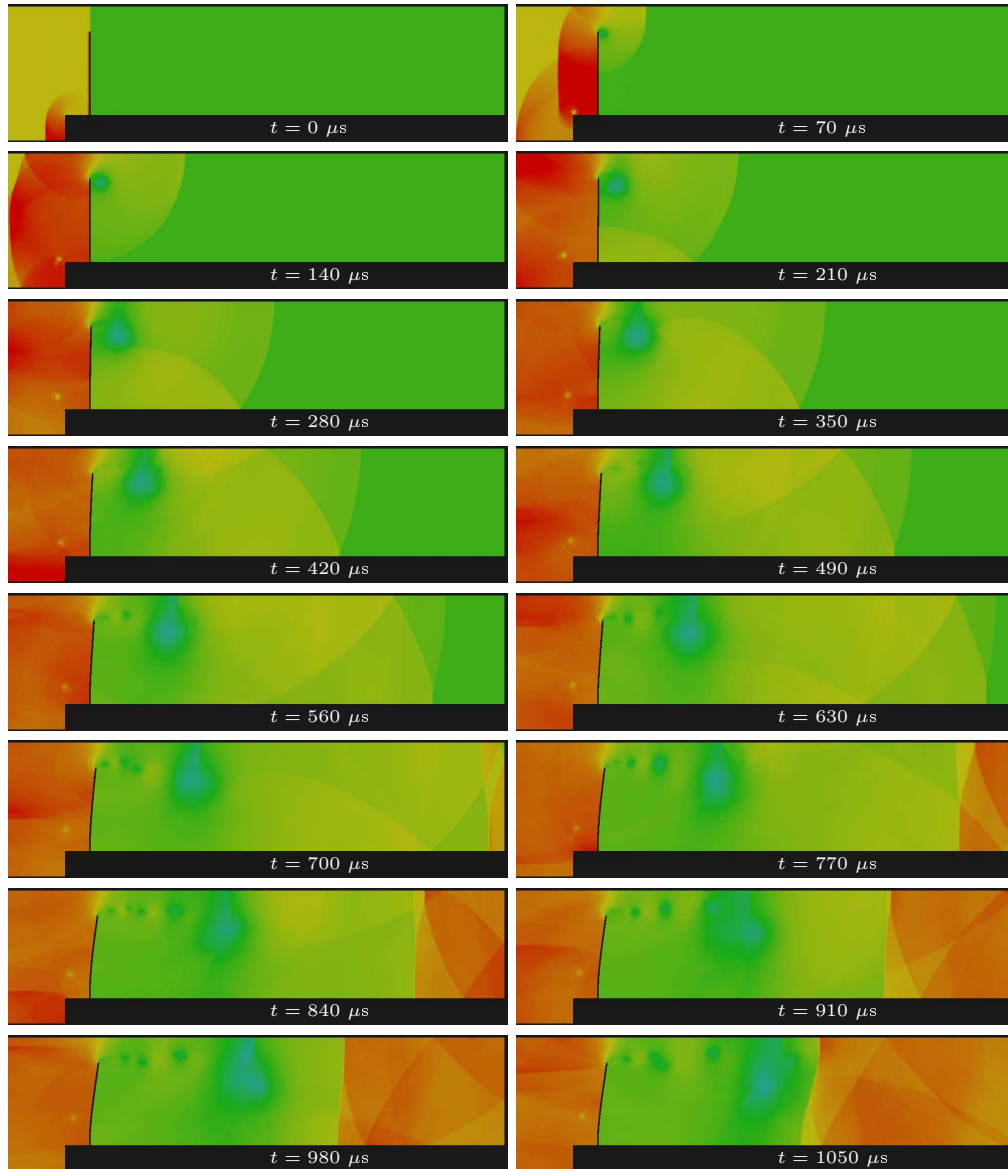


FIG. 6.17 – Profils de densité simulés autour de la plaque toutes les  $70 \mu\text{s}$  à partir de l'impact du choc sur la plaque ( $t = 0$ )



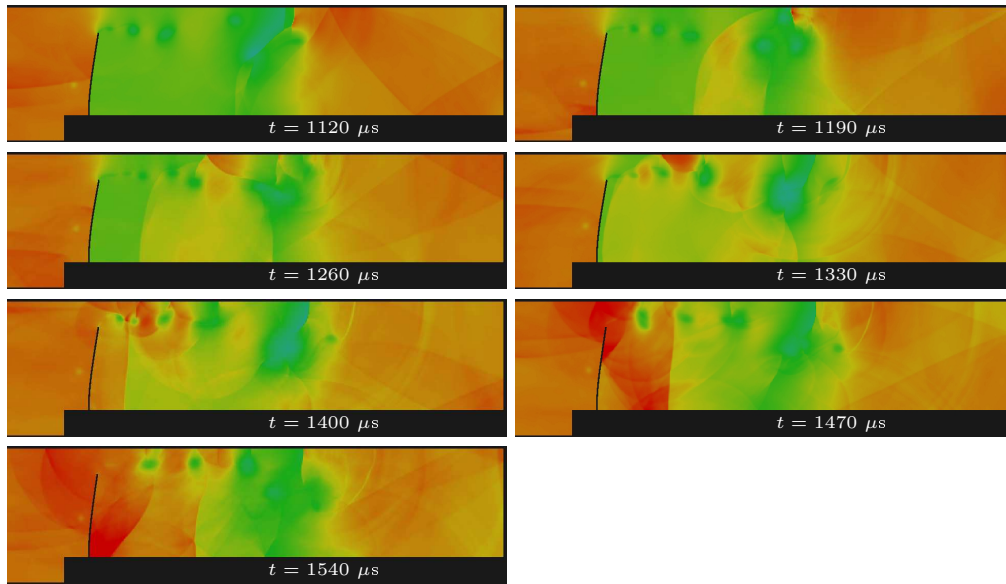


FIG. 6.18 – Profils de densité simulés autour de la plaque toutes les  $70 \mu s$  à partir de l'impact du choc sur la plaque ( $t = 0$ )

### 6.2.2.2 Description de la simulation numérique

Dans la simulation numérique, nous faisons encore une fois les simplifications physiques suivantes : l'écoulement est supposé bidimensionnel et non visqueux. Nous ne pourrions donc pas observer le passage d'une partie de l'onde transmise par les côtés de la plaque. De plus, la taille des tourbillons sera entièrement déterminée par la viscosité numérique puisqu'aucune viscosité physique n'est présente dans le fluide.

Nous nous limitons à la simulation de l'extrémité du tube à choc contenant le dispositif. Notre domaine de calcul est un domaine de  $300 \times 80 \text{ mm}$  : il s'étend donc de l'extrémité droite du tube jusqu'à  $50 \text{ mm}$  en amont de la plaque, et a la largeur du tube. Nos simulations ont utilisé un maillage assez grossier pour limiter le temps de calcul. Le maillage du solide se réduit à une particule dans l'épaisseur et 20 particules dans la hauteur. Nous prenons un maillage fluide de  $300 \times 80$  cellules, soit exactement une cellule dans l'épaisseur de la plaque. Nous allons voir que même dans ce cas extrême, nos simulations se comparent bien aux résultats expérimentaux. En particulier, nous pourrions comparer la qualité de nos résultats numériques à ceux obtenus dans [53]. Le maillage utilisé dans [53] est constitué de 80000 mailles non uniformes (à comparer à nos 24000 mailles uniformes), avec une taille transversale de maille près des murs égale à  $0,01 \text{ mm}$ .

Nous imposons à nouveau les conditions aux limites de Poinsot-Lele [119] sur le bord d'entrée et sortie du domaine. Nous utilisons comme pression à l'infini la

pression après le choc  $P_\infty = 154177$  Pa. Nous ne prenons donc pas en compte le retour des ondes de détente réfléchies sur l'extrémité gauche du tube, mais nous considérons que la pression dans le tube est constante au cours de la simulation et vaut  $P_\infty$ . Cette hypothèse est valable tant que les ondes de détente ne reviennent pas. L'extrémité du tube réfléchissante se trouvant à 0,75 m du diaphragme initial, les ondes de détente doivent parcourir 1,5 m de plus que l'onde de choc pour parvenir au dispositif expérimental. Si on considère l'hypothèse la plus pessimiste (vitesse des ondes de détente égale à la vitesse des ondes de choc, soit Mach 1,21), les ondes de détente arrivent sur la plaque au plus tôt 3,6 ms après les ondes de choc. L'hypothèse sera donc valable pour tous les signaux de pression considérés par la suite.

### 6.2.2.3 Analyse des résultats

**Plaque de 50 mm de long** Nous étudions tout d'abord l'interaction d'un choc  $M = 1,21$  avec une plaque de 50 mm de long.

La figure 6.19 présente l'évolution simulée de la pression au niveau du capteur pour une plaque de 50 mm de long et reprend les résultats expérimentaux et numériques de [53]. Nous retrouvons les caractéristiques principales des résultats expérimentaux, avec l'arrivée de l'onde de choc (à  $t = 0$  ms) suivie immédiatement d'une onde de choc réfléchie sur la plaque (à  $t = 0,082$  ms) puis le retour de l'onde de choc transmise et réfléchie à l'extrémité du tube (à  $t = 1,44$  ms). Les temps d'arrivée et les amplitudes des chocs correspondent bien aux résultats expérimentaux. Nous observons également que nous revenons bien aux mêmes niveaux de pression que les résultats expérimentaux après le passage des ondes de choc, contrairement aux résultats numériques présentés dans [53]. Nous attribuons cette différence non pas à l'arrivée des ondes de détente comme affirmé dans [53], mais plutôt à une meilleure prise en compte des conditions d'inflow/outflow au bord libre dans notre cas.

Le déplacement de l'extrémité de la plaque peut être également comparé aux résultats expérimentaux et numériques de [53] sur la figure 6.20. Nous observons une amplitude des oscillations comparable à celle mesurée expérimentalement, mais avec une période différente. Ce phénomène avait déjà été remarqué dans [53] pour la comparaison avec les résultats numériques, et est attribué soit à l'amortissement de la structure (mais qui devrait être négligeable pour la première période), soit à une déformation de la base servant de support à la poutre. Nous pouvons observer que nous obtenons un déplacement remarquablement proche du résultat numérique de [53]. La période d'oscillation que nous mesurons numériquement (2,8 ms) est la même que [53] et est très proche de la période théorique d'oscillation de la plaque seule dans son premier mode propre (2,87 ms), alors que la fréquence d'oscillation expérimentale est d'environ 4,8 ms.

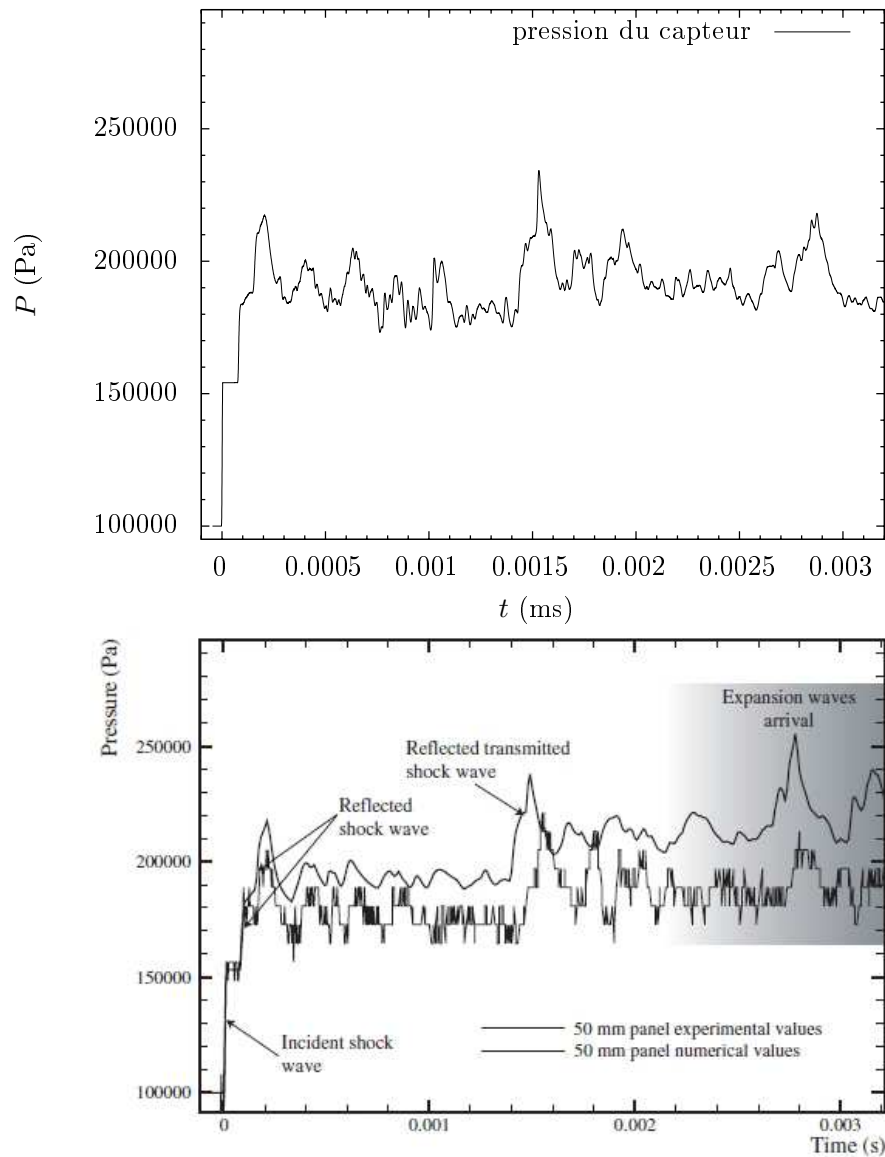


FIG. 6.19 – Évolution de la pression calculée du capteur pour une plaque de 50 mm de long et comparaison avec la pression expérimentale et numérique de référence (repris de [53])

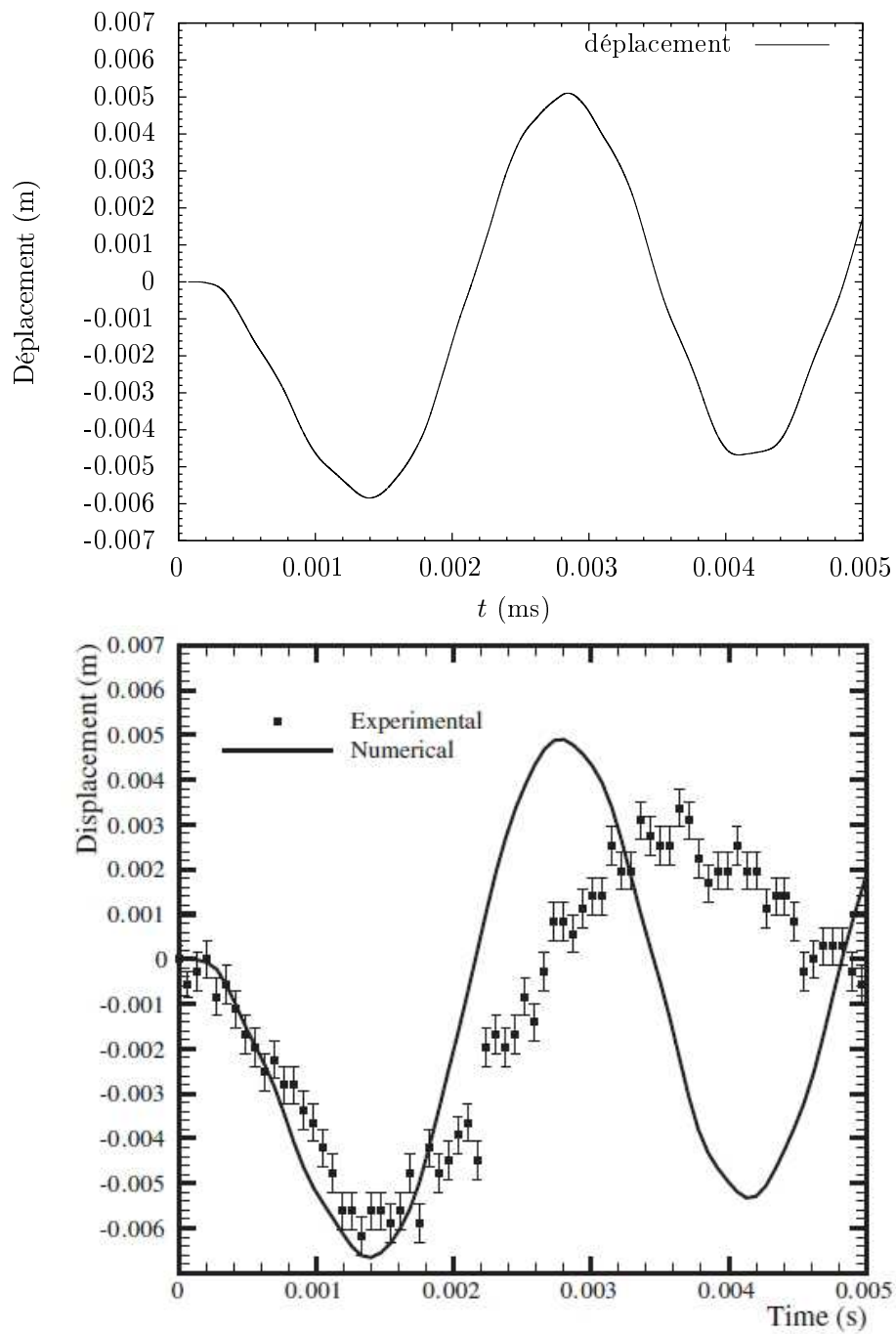


FIG. 6.20 – Déplacement calculé de l'extrémité de la plaque de 50 mm de long et comparaison avec le déplacement expérimental et numérique de référence (repris de [53])

**Plaque de 40 mm de long** Nous étudions maintenant le cas d'une plaque de 40 mm de long. Sa surface étant moins grande, la force de pression exercée sur la plaque est moins importante que dans le cas précédent, et nous pouvons donc anticiper une déformation moindre de la base portant la plaque. Les résultats numériques devraient donc être plus en accord avec l'expérience en ce qui concerne la déformation de la plaque.

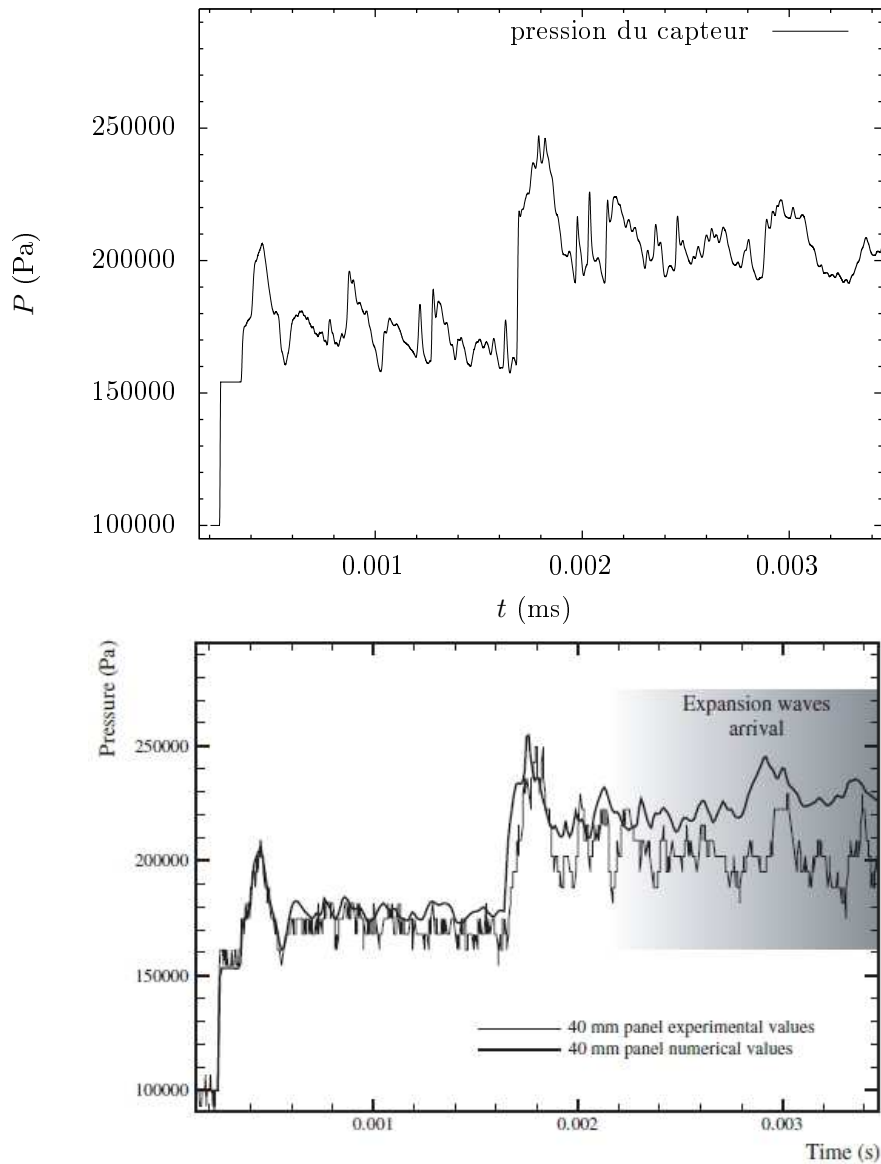


FIG. 6.21 – Évolution de la pression calculée du capteur pour une plaque de 40 mm de long et comparaison avec la pression expérimentale et numérique de référence (repris de [53])

La figure 6.21 présente l'évolution de la pression simulée au niveau du capteur

ainsi que les résultats expérimentaux et numériques de [53]. On peut observer l'arrivée de l'onde de choc incidente (à  $t = 0,25$  ms), puis l'onde de choc réfléchie sur la plaque (à  $t = 0,35$  ms) et enfin l'onde de choc transmise réfléchie à l'extrémité du tube (à  $t = 1,68$  ms). De nouveau, les temps d'arrivée et l'amplitude des ondes sont en bon accord avec l'expérience, ainsi que les niveaux de pression mesurés.

Nous pouvons observer sur la figure 6.22 que le déplacement de l'extrémité de la plaque est cette fois-ci en très bon accord avec les résultats expérimentaux et numériques présentés dans [53]. Il semble donc que ce soit bien la déformation de la base de la plaque, et non l'amortissement, qui est à l'origine des différences entre résultats numériques et résultats expérimentaux pour la plaque de 50 mm de long.

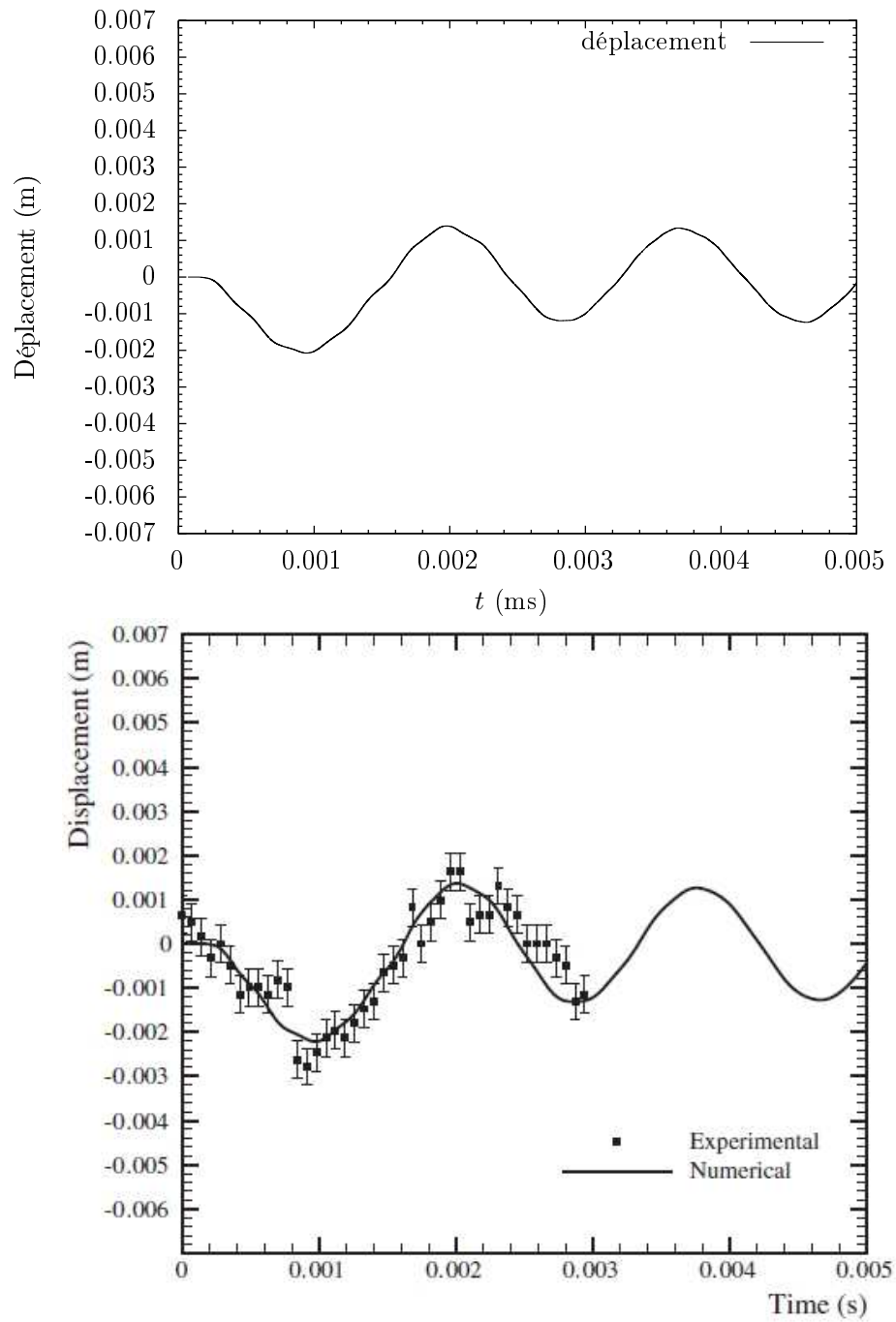


FIG. 6.22 – Déplacement calculé de l'extrémité de la plaque de 40 mm de long et comparaison avec le déplacement expérimental et numérique de référence (repris de [53])

#### 6.2.2.4 Conclusions

La comparaison des résultats numériques que nous avons obtenus avec les résultats expérimentaux et numériques de [53] montrent que les effets tridimensionnels et visqueux peuvent être négligés dans un premier temps pour obtenir une bonne estimation du comportement du système. De plus, il apparaît que notre méthode numérique donne des résultats d'une précision comparable ou meilleure que des résultats numériques obtenus avec une méthode de déformation de maillage, alors que nous nous sommes placés dans le cas *a priori* le plus défavorable (structure mince, avec un maillage grossier et une taille de maille de l'ordre de l'épaisseur de la structure).





# Conclusion

---

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à la simulation numérique de problèmes d'interaction fluide-structure dans le cas où le fluide est compressible non-visqueux et la structure déformable. Nous avons mis au point un schéma de couplage globalement explicite entre une méthode de Volumes Finis pour le fluide et une méthode d'Éléments Discrets pour le solide.

Nous avons tout d'abord passé en revue les méthodes permettant de traiter la déformation du domaine fluide lors du déplacement du solide. En vue de réaliser un couplage avec rupture du matériau, nous ne nous sommes pas tournés vers les méthodes de déformation de maillage de type ALE, mais nous avons choisi d'utiliser des méthodes de domaine fictif de type Frontières Immergées. Plus précisément, nous avons choisi de travailler avec la méthode *Embedded Boundaries* qui assure des propriétés de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie au niveau discret dans le fluide. Cette méthode s'écrit de façon naturelle en utilisant des Volumes Finis pour le fluide. Nous avons également vu que l'instabilité numérique causée par les phénomènes de masse ajoutée dans l'intégration temporelle des problèmes d'interaction structure/fluide incompressible ne touche pas les schémas de couplage avec un fluide compressible. Il est donc légitime pour nous d'utiliser un schéma de couplage globalement explicite.

Nous avons ensuite présenté la méthode d'Éléments Discrets utilisée dans le couplage. Nous avons montré que les forces et moments liant les particules permettent de retrouver les équations de l'élastodynamique lorsque le maillage est raffiné. De plus, en faisant dériver ces forces et moments d'un potentiel, nous assurons que le système solide discret est hamiltonien. Nous pouvons alors utiliser un schéma symplectique pour préserver l'énergie en temps long.

Nous avons ensuite étudié le couplage entre une méthode de Volumes Finis d'ordre élevé et un solide indéformable. Nous avons développé un schéma de couplage original, indépendant de la méthode utilisée pour le calcul des flux fluides, assurant une conservation exacte de la masse du fluide et un bilan exact de quantité de mouvement et d'énergie entre le fluide et le solide au cours du pas de temps. Ce schéma permet également la vérification de propriétés de consistance, telles que la conservation du mouvement uniforme d'un solide dans un écoulement de même vitesse et la conservation d'un écoulement parallèle à une paroi droite. Ces propriétés sont des indicateurs de la bonne prise en compte de la présence du solide par le fluide dans la méthode de domaines fictifs. Les résultats numériques obtenus et leur

comparaison avec les cas-tests existants nous permettent de vérifier la précision du schéma proposé.

Le couplage avec un solide indéformable était une première étape importante en vue du couplage avec un solide déformable, la méthode d'Éléments Discrets étant constituée d'un assemblage de particules indéformables. Nous avons montré alors que la principale difficulté intervenant dans le cas d'un solide déformable est la reconstruction d'une paroi solide autour de ces particules. Nous avons proposé une méthode efficace de reconstruction de la paroi solide. La paroi se déformant, il est nécessaire de décider à quel instant de l'algorithme de couplage sera intégrée la surface du solide. La vérification des conditions de conservation géométrique (GCL) liées aux propriétés de consistance combinée à la conservation de l'énergie implique le choix d'un schéma semi-implicite. La surface du solide au temps  $n+1$  est calculée implicitement puis utilisée pour le calcul des forces de pression du fluide sur le solide et dans la modification des flux dans le fluide. Cependant, ce calcul implicite peut se faire de façon extrêmement efficace : la procédure itérative de résolution n'utilise que les particules solides de l'interface sans nécessiter le calcul des forces et moments intérieurs du solide, et nous avons pu montrer que cette procédure converge géométriquement.

Enfin, nous avons appliqué notre schéma à des problèmes bidimensionnels réalistes. Un premier cas de validation numérique porte sur la limite de stabilité d'une plaque déformable dans un écoulement supersonique. Les propriétés de conservation de l'énergie trouvent tout leur intérêt dans ce type de problème et nous permettent d'obtenir la bonne limite de stabilité. Nous avons également comparé nos résultats numériques à deux expériences : l'ouverture d'une porte par un choc et la déformation d'un panneau en acier dans un tube à choc. Ces validations expérimentales démontrent la précision de la méthode et sa capacité à simuler des phénomènes réels.

Ce travail ouvre plusieurs perspectives. Tout d'abord, notre but ultime est le traitement de la fissuration du solide ainsi que le contact dynamique entre deux solides dans les phénomènes d'interaction fluide-structure. Le schéma a été conçu de façon à pouvoir intégrer ces aspects dans le couplage. La principale difficulté résidera sans doute, comme pour le passage du solide indéformable au déformable, dans la définition d'une paroi solide autour des particules à chaque pas de temps et dans l'établissement d'une application assurant la correspondance entre les parois au temps  $n$  et au temps  $n+1$ . Une question importante sera notamment liée au fait que, contrairement à ce qui précède, cette application ne sera plus nécessairement une bijection en raison de l'ouverture de fissures en un point.

D'un point de vue physique, l'extension du schéma à trois dimensions d'espace paraît souhaitable afin de pouvoir traiter des cas plus complexes et réalistes. Le

passage en trois dimensions consistera principalement dans l'évaluation des intersections de plans avec des pavés en lieu et place des intersections de droites avec des rectangles.

Le coût de calcul global, en revanche, augmentera fortement en trois dimensions d'espace du fait de la taille accrue des maillages fluide et solide utilisés. En revanche, le coût de calcul lié au couplage augmentera certainement de façon moins importante. D'un point de vue informatique, deux angles d'attaques, potentiellement combinés, peuvent être envisagés afin de réduire le coût de calcul du fluide et du solide : la parallélisation et le raffinement de maillage adaptatif. La méthode de couplage proposée ici est entièrement locale avec des échanges de plus proches voisins, et une parallélisation par décomposition de domaines nous paraît donc adaptée. Le raffinement de maillage adaptatif, quant à lui, concerne principalement le fluide. L'utilisation de la méthode *Embedded Boundaries* avec raffinement de maillage a déjà été réalisée par des travaux antérieurs [112, 22, 105] et semble une piste intéressante pour réduire le temps de calcul.

Enfin, des modèles physiques plus réalistes (viscosité, lois de comportement fluide et solide plus complexes que la loi des gaz parfaits et l'élasticité linéaire) pourraient être intégrés dans le schéma, en les incluant dans le calcul des flux fluides et des forces et moments solides. Nous estimons que leur intégration ne posera pas de sérieuses difficultés numériques, en raison de leur caractère dissipatif moins contraignant numériquement que les propriétés de conservation de l'énergie que nous avons traitées.



# Bibliographie

- [1] R. ABGRALL – « How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations : A quasi conservative approach », *J. Comput. Phys.* **125** (1996), p. 150–160. (Cité en pages [64](#) et [97](#).)
- [2] R. ABGRALL & S. KARNI – « Computations of compressible multifluids », *J. Comput. Phys.* **169** (2001), p. 594–623. (Cité en pages [22](#) et [23](#).)
- [3] H. C. ANDERSEN – « RATTLE : A "velocity" version of the SHAKE algorithm for molecular dynamics calculations », *J. Comput. Phys.* **52** (1983), no. 1, p. 24–34. (Cité en page [45](#).)
- [4] P. ANGOT, C.-H. BRUNEAU & P. FABRIE – « A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows », *Numer. Math.* **81** (1999), p. 497–520. (Cité en pages [14](#) et [15](#).)
- [5] C. ANTOCI, M. GALLATI & S. SIBILLA – « Numerical simulation of fluid-structure interaction by SPH », *Comput. Struct.* **85** (2007), no. 11–14, Sp. Iss. SI, p. 879–890, 4th MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, Cambridge, MA, JUN 13-15, 2007. (Cité en page [34](#).)
- [6] N. AQUELET, M. SOULI & L. OLOVSSON – « Euler-lagrange coupling with damping effects : Application to slamming problems », *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **195** (2006), no. 1-3, p. 110–132. (Cité en pages [16](#) et [64](#).)
- [7] R. ARIENTI, P. HUNG, E. MORANO & J. E. SHEPHERD – « A level set approach to Eulerian-Lagrangian coupling », *J. Comput. Phys.* **185** (2003), p. 213–251. (Cité en pages [23](#) et [86](#).)
- [8] M. ARORA & P. L. ROE – « On postshock oscillations due to shock capturing schemes in unsteady flows », *J. Comput. Phys.* **130** (1997), p. 25–40. (Cité en page [85](#).)
- [9] E. ARQUIS & J.-P. CALTAGIRONE – « Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d'une interface milieu fluide - milieu poreux : application à la convection naturelle », *C.R. Acad. Sci. Paris* **299** (1984), p. 1–4, Série II. (Cité en page [14](#).)
- [10] F. P. T. BAAIJENS – « A fictitious domain/mortar element method for fluid-structure interaction », *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **35** (2001), p. 743–761. (Cité en page [27](#).)
- [11] R. BECKER, P. HANSBO & R. STENBERG – « A finite element method for domain decomposition with non-matching grids », *M2AN Math. Model. Numer. Anal.* **37** (2003), p. 209–225. (Cité en page [29](#).)
- [12] L. BIAMINO, G. JOURDAN, C. MARIANI, O. IGRA, A. MASSOL & L. HOUAS – « Experimental investigation of door dynamic opening caused by impinging shock wave », *Shock Waves* **21** (2011), p. 19–28. (Cité en pages [123](#), [124](#), [126](#), [127](#) et [129](#).)

- [13] O. BOIRON, G. CHIAVASSA & R. DONAT – « A high-resolution penalization method for large mach number flows in the presence of obstacles », *J. Comp. Fluid* **38** (2009), no. 3, p. 703–714. (Cit  en pages 15, 64 et 65.)
- [14] J. BONET & T. S. L. LOK – « Variational and momentum preservation aspects of Smooth Particle Hydrodynamic formulations », *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **180** (1999), no. 1–2, p. 97–115. (Cit  en page 35.)
- [15] E. BURMAN & M. A. FERNANDEZ – « Stabilized explicit coupling for fluid-structure interaction using Nitsche’s method », *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I* **345** (2007), p. 467–472. (Cit  en page 29.)
- [16] — , « Stabilization of explicit coupling in fluid-structure interaction involving fluid incompressibility », *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **198** (2009), p. 766–784. (Cit  en pages 29 et 31.)
- [17] G. CARRE, S. DEL PINO, B. DESPRES & E. LABOURASSE – « A cell-centered Lagrangian hydrodynamics scheme on general unstructured meshes in arbitrary dimension », *J. Comput. Phys.* **228** (2009), no. 14, p. 5160–5183. (Cit  en page 10.)
- [18] P. CAUSIN, J.-F. GERBEAU & F. NOBILE – « Added-mass effect in the design of partitioned algorithms for fluid-structure problems », *Comput. Method Appl. Mech. Eng.* **194** (2005), p. 4506–4527. (Cit  en pages 29, 30 et 98.)
- [19] J.-I. CHOI, R. C. OBEROI, J. R. EDWARDS & J. A. ROSATI – « An immersed boundary method for complex incompressible flows », *J. Comput. Phys.* **224** (2007), no. 2, p. 757–784. (Cit  en page 65.)
- [20] A. J. CHORIN – « Numerical solution of the Navier-Stokes equations », *Math. Comp.* **22** (1968), p. 745–762. (Cit  en page 31.)
- [21] F. CIRAK, R. DEITERDING & S. P. MAUCH – « Large-scale fluid-structure interaction simulation of viscoplastic and fracturing thin-shells subjected to shocks and detonations », *Comput. Struct.* **85** (2007), no. 11–14, Sp. Iss. SI, p. 1049–1065, 4th MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, Cambridge, MA, JUN 13-15, 2007. (Cit  en page 23.)
- [22] P. COLELLA, D. T. GRAVES, B. J. KEEN & D. MODIANO – « A Cartesian grid embedded boundary method for hyperbolic conservation laws », *J. Comput. Phys.* **211** (2006), p. 347–366. (Cit  en pages 25, 26, 85, 97 et 145.)
- [23] P. A. CUNDALL & O. D. L. STRACK – « A discrete numerical model for granular assemblies », *Geotech.* **29** (1979), no. 1, p. 47–65. (Cit  en page 34.)
- [24] G. A. D’ADDETTA, F. KUN & E. RAMM – « On the application of a discrete model to the fracture process of cohesive granular materials », *Granul. Matter* **4** (2002), p. 77–90. (Cit  en pages 34 et 36.)
- [25] V. DARU & C. TENAUD – « High order one-step monotonicity-preserving schemes for unsteady compressible flow calculations », *J. Comput. Phys.* **193** (2004), no. 2, p. 563–594. (Cit  en pages 66, 68, 69, 85 et 98.)

- [26] — , « Numerical simulation of the viscous shock tube problem by using a high resolution monotonicity-preserving scheme », *Comput. Fluids* **38** (2009), no. 3, p. 664–676. (Cité en pages 68 et 69.)
- [27] A. T. DE HOOP – « A modification of Cagniard’s method for solving seismic pulse problem », *Appl. Sci. Res.* **B8** (1960), p. 349–356. (Cité en page 49.)
- [28] P. DE PALMA, M. D. DE TULLIO, G. PASCAZIO & M. NAPOLITANO – « An immersed-boundary method for compressible viscous flows », *Comp. Fluid* **35** (2006), no. 7, p. 693–702. (Cité en pages 21, 65 et 97.)
- [29] J. DONEA, S. GIULIANI & J.-P. HALLEUX – « An arbitrary Lagrangian Eulerian finite element method for transient dynamic fluid-structure interactions », *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg* **33** (1982), p. 689–723. (Cité en pages 9 et 64.)
- [30] Z. DRAGOJLOVIC, F. NAJMABADI & M. DAY – « An embedded boundary method for viscous, conducting compressible flow », *J. Comput. Phys.* **216** (2006), no. 1, p. 37–51. (Cité en page 77.)
- [31] A. C. ERINGEN – « Theory of micropolar elasticity », in *Fracture* (H. Liebowitz, éd.), vol. 2, Academic Press, New York, 1968, p. 621–729. (Cité en page 43.)
- [32] S. ETIENNE, A. GARON & D. PELLETIER – « Perspective on the geometric conservation law and finite element methods for ALE simulations of incompressible flow », *J. Comput. Phys.* **228** (2009), p. 2313–2333. (Cité en page 11.)
- [33] E. A. FADLUN, R. VERZICCO, P. ORLANDI & J. MOHD-YUSOF – « Combined immersed-boundary finite-difference methods for three-dimensional complex flow simulations », *J. Comput. Phys.* **161** (2000), no. 1, p. 35–60. (Cité en pages 20, 21 et 65.)
- [34] E. P. FAHRENTHOLD & B. A. HORBAN – « An improved hybrid particle-element method for hypervelocity impact simulation », *Int. J. Impact Engrg.* **26** (2001), p. 169–178, Symposium on Hypervelocity Impact, Galveston, Texas, Nov 06-10, 2000. (Cité en page 35.)
- [35] E. P. FAHRENTHOLD & R. SHIVARAMA – « Extension and validation of a hybrid particle-finite element method for hypervelocity impact simulation », *Int. J. Impact Eng.* **29** (2003), no. 1–10, p. 237–246, Hypervelocity Impact Symposium, Noordwijk, Netherlands, Dec 07-11, 2003. (Cité en page 35.)
- [36] J. FALCOVITZ, G. ALFANDARY & G. HANOCH – « A two-dimensional conservation laws scheme for compressible flows with moving boundaries », *J. Comput. Phys.* **138** (1997), p. 83–102. (Cité en pages 25, 65, 69, 76, 77, 79, 86 et 97.)
- [37] C. FARHAT, P. GEUZAINÉ & C. GRANDMONT – « The discrete geometric conservation law and the nonlinear stability of ALE schemes for the solution of flow problems on moving grids », *J. Comput. Phys.* **174** (2001), no. 2, p. 669 – 694. (Cité en page 11.)



- [38] C. FARHAT, K. G. VAN DER ZEE & P. GEUZAINÉ – « Provably second-order time-accurate loosely-coupled solution algorithms for transient nonlinear computational aeroelasticity », *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **195** (2006), p. 1973–2001. (Cit  en pages 29 et 64.)
- [39] C. FARHAT, A. RALLU & S. SHANKARAN – « A higher-order generalized ghost fluid method for the poor for the three-dimensional two-phase flow computation of underwater implosions », *J. Comput. Phys.* **227** (2008), p. 7674–7700. (Cit  en pages 22 et 23.)
- [40] N. FAVRIE, S. L. GAVRILYUK & R. SAUREL – « Solid-fluid diffuse interface model in cases of extreme deformation », *J. Comput. Phys.* **228** (2009), p. 6037–6077. (Cit  en pages 27, 64 et 97.)
- [41] R. P. FEDKIW – « Coupling an Eulerian fluid calculation to a Lagrangian solid calculation with the Ghost Fluid method », *J. Comput. Phys.* **175** (2002), p. 200–224. (Cit  en pages 22, 23, 65 et 97.)
- [42] R. P. FEDKIW, T. ASLAM, B. MERRIMAN & S. OSHER – « A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the Ghost Fluid method) », *J. Comput. Phys.* **152** (1999), p. 457–492. (Cit  en pages 19, 21, 22, 23, 65, 69 et 97.)
- [43] R. P. FEDKIW, A. MARQUINA & B. MERRIMAN – « An isobaric fix for the overheating problem in multimaterial compressible flows », *J. Comput. Phys.* **148** (1999), p. 545–578. (Cit  en page 21.)
- [44] Y. T. FENG, K. HAN, C. F. LI & D. R. J. OWEN – « Discrete thermal element modelling of heat conduction in particle systems : Basic formulations », *J. Comput. Phys.* **227** (2008), no. 10, p. 5072–5089. (Cit  en page 34.)
- [45] M. A. FERN NDEZ, J.-F. GERBEAU & C. GRANDMONT – « A projection semi-implicit scheme for the coupling of an elastic structure with an incompressible fluid », *Int. J. Numer. Meth. Engrg.* **69** (2007), p. 794–821. (Cit  en pages 29, 30, 31, 64, 97 et 98.)
- [46] M. A. FERN NDEZ & M. MOUBACHIR – « A Newton method using exact Jacobians for solving fluid-structure coupling », *Comp. Struct.* **83** (2005), p. 127–142. (Cit  en page 30.)
- [47] S. FOREST, F. PRADEL & K. SAB – « Asymptotic analysis of heterogeneous Cosserat media », *Int. J. Solids Struct.* **38** (2001), p. 4585–4608. (Cit  en page 44.)
- [48] H. FORRER & M. BERGER – *Flow simulation on cartesian grids involving complex moving geometries flows*, Int. Ser. Numer. Math., vol. 129, Birkh user, 1998. (Cit  en page 86.)
- [49] H. FORRER & R. JELTSCH – « A high-order boundary treatment for Cartesian-grid methods », *J. Comput. Phys.* **140** (1998), p. 259–277. (Cit  en page 85.)

- [50] J.-F. GERBEAU & M. VIDRASCU – « A quasi-Newton algorithm based on a reduced model for fluid-structure interaction problems in blood flows », *ESAIM : Math. Model. Numer. Anal.* **37** (2003), p. 631–648. (Cité en page 30.)
- [51] R. GHAS, R. MITTAL & H. DONG – « A sharp interface immersed boundary method for compressible viscous flows », *J. Comput. Phys.* **225** (2007), p. 528–553. (Cité en page 23.)
- [52] R. A. GINGOLD & J. J. MONAGHAN – « Smoothed Particle Hydrodynamics : Theory and application to nonspherical stars », *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **181** (1977), p. 375–389. (Cité en page 34.)
- [53] J. GIORDANO, G. JOURDAN, Y. BURTSCHHELL, M. MEDALE, D. E. ZEITOUN & L. HOUAS – « Shock wave impacts on deforming panel, an application of fluid-structure interaction », *Shock Waves* **14** (2005), p. 103–110. (Cité en pages 132, 134, 135, 136, 137, 138, 139, 140 et 141.)
- [54] J. GLIMM, X. LI, Y. LIU, Z. XU & N. ZHAO – « Conservative front tracking with improved accuracy », *SIAM J. Numer. Anal.* **39** (2003), p. 179–200. (Cité en pages 26, 65 et 77.)
- [55] R. GLOWINSKI, T.-W. PAN, T. I. HESLA, D. D. JOSEPH & J. PERIAUX – « A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for the simulation of flow around moving rigid bodies : application to particulate flow », *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **184** (2000), p. 241–267. (Cité en page 17.)
- [56] R. GLOWINSKI, T.-W. PAN, T. I. HESLA & J. PERIAUX – « A fictitious domain method for external incompressible viscous flow modeled by Navier-Stokes equations », *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **112** (1994), p. 133–148. (Cité en page 17.)
- [57] E. GODLEWSKI & P.-A. RAVIART – *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*, Applied Mathematical Sciences, vol. 118, Springer-Verlag, 1996. (Cité en page 9.)
- [58] O. GONZALEZ – « Exact energy and momentum conserving algorithms for general models in nonlinear elasticity », *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **190** (2000), p. 1763–1783. (Cité en page 35.)
- [59] J. T. GRÉTARSSON, N. KWATRA & R. FEDKIW – « Numerically stable fluid-structure interactions between compressible flow and solid structures », *J. Comput. Phys.* **230** (2011), p. 3062–3084. (Cité en pages 98 et 109.)
- [60] E. HAIRER, C. LUBICH & G. WANNER – *Geometric numerical integration : Structure-preserving algorithms for ordinary differential equations*, 2nd éd., Springer Series in Comput. Mathematics, vol. 31, Springer-Verlag, 2006. (Cité en pages 35, 36, 45, 46, 47, 48 et 67.)
- [61] E. HAIRER & G. VILMART – « Preprocessed discrete Moser-Veselov algorithm for the full dynamics of a rigid body », *J. Phys. A : Math. Gen.* **39** (2006), p. 13225–13235. (Cité en page 48.)

- [62] K. HAN, Y. T. FENG & D. R. J. OWEN – « Coupled lattice Boltzmann and discrete element modelling of fluid-particle interaction problems », *Comput. Struct* **85** (2007), no. 11–14, Sp. Iss. SI, p. 1080–1088, 4th MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, Cambridge, MA, JUN 13-15, 2007. (Cité en page 34.)
- [63] P. HANSBO, J. HERMANSSON & T. SVEDBERG – « Nitsche’s method combined with space-time finite elements for ALE fluid-structure interaction problems », *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **193** (2004), p. 4195–4206. (Cité en page 29.)
- [64] P. HAURET & P. LE TALLEC – « Energy-controlling time integration methods for nonlinear elastodynamics and low-velocity impact », *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **195** (2006), p. 4890–4916. (Cité en page 35.)
- [65] M. HEIL – « An efficient solver for the fully coupled solution of large-displacement fluid-structure interaction problems », *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **193** (2004), p. 1–23. (Cité en page 27.)
- [66] C. HELZEL, M. J. BERGER & R. J. LEVEQUE – « A high-resolution rotated grid method for conservation laws with embedded geometries », *SIAM J. Sci. Comput.* **26** (2005), p. 785–809. (Cité en page 85.)
- [67] D. L. HICKS, J. W. SWEGLE & S. W. ATTAWAY – « Conservative smoothing stabilizes discrete-numerical instabilities in SPH material dynamics computations », *Appl. Math. Comput.* **85** (1997), no. 2–3, p. 209–226. (Cité en page 34.)
- [68] W. G. HOOVER – *Smooth Particle Applied Mechanics : The state of the art*, Advanced Series in Nonlinear Dynamics, vol. 25, World Scientific, 2006. (Cité en page 34.)
- [69] W. G. HOOVER, W. T. ARHURST & R. J. OLNESS – « Two-dimensional studies of crystal stability and fluid viscosity », *J. Chem. Phys.* **60** (1974), p. 4043–4047. (Cité en page 34.)
- [70] X. Y. HU, B. C. KHOO, N. A. ADAMS & F. L. HUANG – « A conservative interface method for compressible flows », *J. Comput. Phys.* **219** (2006), no. 2, p. 553–578. (Cité en pages 25, 26, 65, 69, 77, 86, 88, 89 et 97.)
- [71] A. IBRAHIMBEGOVIC & A. DELAPLACE – « Microscale and mesoscale discrete models for dynamic fracture of structures built of brittle material », *Comput. Struct.* **81** (2003), no. 12, p. 1255–1265. (Cité en page 34.)
- [72] S. R. IDELSOHN, J. MARTI, A. LIMACHE & E. ONATE – « Unified Lagrangian formulation for elastic solids and incompressible fluids : Application to fluid-structure interaction problems via the PFEM », *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **197** (2008), no. 19–20, p. 1762–1776. (Cité en pages 64 et 97.)
- [73] G.-S. JIANG & C.-W. SHU – « Efficient implementation of Weighted ENO schemes », *J. Comput. Phys.* **126** (1996), p. 202–228. (Cité en page 85.)
- [74] S. JIN & J.-G. LIU – « The effects of numerical viscosities : I. Slowly moving shocks », *J. Comput. Phys.* **126** (1996), p. 373–389. (Cité en page 85.)

- [75] G. KALITZIN & G. IACCARINO – « Turbulence modeling in an immersed-boundary rans method », CTR Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2002. (Cit  en pages 21 et 65.)
- [76] — , « Towards immersed boundary simulation of high reynolds number flows », CTR Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2003. (Cit  en pages 21 et 65.)
- [77] B. KEEN & S. KARNI – « A second order kinetic scheme for gas dynamics on arbitrary grids », *J. Comput. Phys.* **205** (2005), p. 108–130. (Cit  en page 85.)
- [78] J. C. KOO & E. P. FAHRENTHOLD – « Discrete Hamilton’s equations for arbitrary Lagrangian-Eulerian dynamics of viscous compressible flow », *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **189** (2000), no. 3, p. 875–900. (Cit  en page 35.)
- [79] S. KOSHIZUKA, A. NOBE & Y. OKA – « Numerical analysis of breaking waves using the Moving Particle Semi-implicit method », *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **26** (1998), p. 751–769. (Cit  en page 35.)
- [80] S. KOSHIZUKA & Y. OKA – « Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid », *Nucl. Sci. Eng.* **123** (1996), p. 421–434. (Cit  en page 35.)
- [81] S. KOSHIZUKA, M. S. SONG & Y. OKA – « A particle method for three-dimensional elastic analysis », in *Proc. 6th World Cong. Computational Mechanics (WCCM VI), Beijing*, September 5-10 2004. (Cit  en page 35.)
- [82] F. KUN & H. HERRMANN – « A study of fragmentation processes using a discrete element method », *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.* **138** (1996), no. 1–4, p. 3–18. (Cit  en pages 34 et 36.)
- [83] H. LAMB – « On the propagation of tremors over the surface of an elastic solid », *Phil. Trans. R. Soc. London; Ser. A* **203** (1904), p. 1–42. (Cit  en page 49.)
- [84] T. A. LAURSEN & X. N. MENG – « A new solution procedure for application of energy-conserving algorithms to general constitutive models in nonlinear elastodynamics », *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **190** (2001), p. 6309–6322. (Cit  en page 35.)
- [85] P. LE TALLEC, J.-F. GERBEAU, P. HAURET & M. VIDRASCU – « Fluid structure interaction problems in large deformation », *C. R. Mecanique* **333** (2005), p. 910–920. (Cit  en pages 97 et 98.)
- [86] P. LE TALLEC & J. MOURO – « Fluid structure interaction with large structural displacements », *Comput. Method Appl. Mech. Eng.* **190** (2001), p. 3039–3067. (Cit  en pages 29, 30 et 98.)
- [87] P. LE TALLEC & M. D. TIDRIRI – « Convergence analysis of domain decomposition algorithms with full overlapping for the advection-diffusion problems », *Math. Comp.* **68** (1999), p. 585–606. (Cit  en page 18.)
- [88] C. J. K. LEE, H. NOGUCHI & S. KOSHIZUKA – « Fluid-shell structure interaction analysis by coupled particle and finite element method », *Comput.*

- Struct.* **85** (2007), no. 11–14, Sp. Iss. SI, p. 688–697, 4th MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, Cambridge, MA, JUN 13-15, 2007. (Cit  en page 35.)
- [89] B. J. LEIMKUHLER & R. D. SKEEL – « Symplectic numerical integrators in constrained hamiltonian systems », *J. Comput. Phys.* **112** (1994), no. 1, p. 117–125. (Cit  en page 45.)
- [90] M. LESOINNE & C. FARHAT – « Geometric conservation laws for flow problems with moving boundaries and deformable meshes, and their impact on aeroelastic computations », *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **134** (1996), p. 71–90. (Cit  en page 75.)
- [91] R. J. LEVEQUE – *Numerical methods for conservation laws*, Lectures in Mathematics, Birkh user-Verlag, 1990, ETH Z rich. (Cit  en page 9.)
- [92] R. J. LEVEQUE & Z. LI – « The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources », *SIAM J. Numer. Anal.* **31** (1994), no. 4, p. 1019–1044. (Cit  en pages 14, 18 et 64.)
- [93] — , « Immersed Interface Methods for Stokes Flow with Elastic Boundaries or Surface Tension », *SIAM J. Sci. Comput.* **18** (1997), no. 3, p. 709–735. (Cit  en pages 14 et 64.)
- [94] A. LEW, J. E. MARSDEN, M. ORTIZ & M. WEST – « Variational time integrators », *Int. J. Numer. Meth. Engrng* **60** (2004), p. 153–212. (Cit  en page 54.)
- [95] Z. LI & M.-C. LAI – « The immersed interface method for the navier-stokes equations with singular forces », *J. Comput. Phys.* **171** (2001), no. 2, p. 822–842. (Cit  en pages 14 et 97.)
- [96] L. D. LIBERSKY, A. G. PETSCHKEK, T. C. CARNEY, J. R. HIPPEL & F. A. ALLAHDADI – « High strain Lagrangian hydrodynamics : A three-dimensional SPH code for dynamic material response », *J. Comput. Phys.* **109** (1993), no. 1, p. 76–83. (Cit  en page 34.)
- [97] T. G. LIU, B. C. KHOO & K. S. YEO – « Ghost fluid method for strong shock impacting on material interface », *J. Comput. Phys.* **190** (2003), p. 651–681. (Cit  en page 23.)
- [98] R. L HNER, S. APPANABOYINA & J. R. CEBRAL – « Comparison of body-fitted, embedded and immersed solutions of low Reynolds-number 3-D incompressible flows », *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **57** (2008), p. 13–30. (Cit  en page 97.)
- [99] L. B. LUCY – « A numerical approach to the testing of the fission hypothesis », *Astron. J.* **82** (1977), p. 1013–1024. (Cit  en page 34.)
- [100] C. MARIOTTI – « Lamb’s problem with the lattice model Mka3D », *Geophys. J. Int.* **171** (2007), p. 857–864. (Cit  en pages 35 et 65.)
- [101] H. MATTHIES, R. NIEKAMP & J. STEINDORF – « Algorithms for strong coupling procedures », *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **195** (2006), p. 2028–2049. (Cit  en page 30.)

- [102] B. MAURY – « Direct simulations of 2D fluid-particle flows in bi-periodic domains », *J. Comput. Phys.* **156** (1999), p. 325–351. (Cit  en pages 11 et 97.)
- [103] — , « A Fat Boundary Method for the Poisson equation in a domain with holes », *J. Sci. Computing* **16** (2001), p. 319–339. (Cit  en page 18.)
- [104] R. MENIKOFF – « Errors when shock waves interact due to numerical shock width », *SIAM J. Sci. Comput.* **15** (1994), p. 1227–1242. (Cit  en page 21.)
- [105] G. H. MILLER & P. COLELLA – « A conservative three-dimensional Eulerian method for coupled solid-fluid shock capturing », *J. Comput. Phys.* **183** (2002), no. 1, p. 26–82. (Cit  en pages 25, 26, 77, 97 et 145.)
- [106] J. MOHD-YUSOF – « Combined immersed-boundary/b-spline methods for simulation of flow in complex geometries », CTR Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1997. (Cit  en pages 19, 20, 65 et 97.)
- [107] J. J. MONAGHAN – « Simulating free surface flows with SPH », *J. Comput. Phys.* **110** (1994), no. 2, p. 399–406. (Cit  en page 34.)
- [108] W. F. NOH – « Fundamental methods of hydrodynamics », *Methods of computational physics*, vol. 3, p. 117–179, *Methods of computational physics*, Academic Press, New York/London, 1964. (Cit  en pages 24, 65 et 71.)
- [109] — , « Errors for calculations of strong shocks using an artificial viscosity and an artificial heat flux », *J. Comput. Phys.* **72** (1987), p. 78–120. (Cit  en page 21.)
- [110] L. OLOVSSON – « On the arbitrary lagrangian-eulerian finite element method », Th ese, Link ping University, 2000, p. 130–132. (Cit  en page 64.)
- [111] A. PACCOU, G. CHIAVASSA, J. LIANDRAT & K. SCHNEIDER – « A penalization method applied to the wave equation », *C. R. M canique* **333** (2005), no. 1, p. 79–85. (Cit  en pages 15, 64 et 65.)
- [112] R. B. PEMBER, J. B. BELL, P. COLELLA, W. Y. CRUTCHFIELD & M. L. WELCOME – « An adaptive Cartesian grid method for unsteady compressible flow in irregular regions », *J. Comput. Phys.* **120** (1995), p. 278–304. (Cit  en pages 24, 25, 26, 65, 77, 85, 97, 98 et 145.)
- [113] C. S. PESKIN – « Flow patterns around heart valves : A digital computer method for solving the equations of motion. », Th ese, Albert Einstein College of Medicine, 1972. (Cit  en pages 12, 64 et 97.)
- [114] — , « The immersed boundary method », *Acta Numer.* **11** (2002), p. 1–39. (Cit  en pages 12, 13, 64 et 97.)
- [115] S. PIPERNO – « Simulation num rique de ph nom nes d’interaction fluide-structure », Th ese, Ecole Nationale des Ponts et Chauss es, 1995. (Cit  en pages 119, 120 et 121.)
- [116] — , « Explicit/implicit fluid/structure staggered procedures with a structural predictor and fluid subcycling for 2D inviscid aeroelastic simulations », *Int.*

- J. Numer. Meth. Fluids* **25** (1997), p. 1207–1226. (Cité en pages 29, 119, 120 et 121.)
- [117] S. PIPERNO & C. FARHAT – « Partitioned procedures for the transient solution of coupled aeroelastic problems - Part II : Energy transfer analysis and three-dimensional applications », *Comput. Method Appl. Mech. Eng.* **190** (2001), p. 3147–3170. (Cité en pages 29, 97 et 98.)
- [118] S. PIPERNO, C. FARHAT & B. LARROUTUROU – « Partitioned procedures for the transient solution of coupled aeroelastic problems - Part I : Model problem, theory and two-dimensional application », *Comput. Method Appl. Mech. Eng.* **124** (1995), p. 79–112. (Cité en pages 28, 29 et 97.)
- [119] T. J. POINSOT & S. K. LELE – « Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows », *J. Comput. Phys.* **101** (1992), p. 104–129. (Cité en pages 125 et 134.)
- [120] D. O. POTYONDY & P. A. CUNDALL – « A bonded-particle model for rock », *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* **41** (2004), p. 1329–1364. (Cité en page 34.)
- [121] A. QUAINI & A. QUARTERONI – « A semi-implicit approach for fluid-structure interaction based on an algebraic fractional step method », *Math. Models Meth. Appl. Sci.* **17** (2007), p. 957–983. (Cité en page 31.)
- [122] A. QUARTERONI, F. SALERI & A. VENEZIANI – « Analysis of the Yosida method for the incompressible Navier-Stokes equations », *J. Math. Pures Appl.* **78** (1999), p. 473–503. (Cité en page 31.)
- [123] A. RIES, D. E. WOLF & T. UNGER – « Shear zones in granular media : Three-dimensional contact dynamics simulation », *Phys. Rev. E* **76** (2007), no. 5, Part 1, p. 051301. (Cité en page 34.)
- [124] S. K. SAMBASIVAN & H. S. UDAYKUMAR – « Ghost Fluid method for strong shock interactions Part 2 : Immersed solid boundaries », *AIAA J.* **47** (2009), no. 12, p. 2923–2937. (Cité en pages 23, 86 et 97.)
- [125] J. C. SIMO, N. TARNOW & K. K. WONG – « Exact energy-momentum conserving algorithms and symplectic schemes for nonlinear dynamics », *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **100** (1992), p. 63–116. (Cité en page 35.)
- [126] A. SORIA & F. CASADEI – « Arbitrary Lagrangian-Eulerian multicomponent compressible flow with fluid-structure interaction », *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **25** (1997), p. 1263–1284. (Cité en page 97.)
- [127] G. STRANG – « On construction and comparison of difference schemes », *SIAM J. Numer. Anal.* **5** (1968), p. 506–516. (Cité en pages 69 et 72.)
- [128] Y. SUZUKI & S. KOSHIZUKA – « A Hamiltonian particle method for non-linear elastodynamics », *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **74** (2008), no. 8, p. 1344–1373. (Cité en page 35.)
- [129] J. W. SWEGLE, D. L. HICKS & S. W. ATTAWAY – « Smoothed Particle Hydrodynamics stability analysis », *J. Comput. Phys.* **116** (1995), no. 1, p. 123–134. (Cité en page 34.)

- [130] K. Y. SZE, X. H. LIU & S. H. LO – « Popular benchmark problems for geometric nonlinear analysis of shells », *Finite Elem. Anal. Des.* **40** (2004), p. 1551–1569. (Cit  en page 52.)
- [131] D. TAM, R. RADOVITZKY & R. SAMTANEY – « An algorithm for modelling the interaction of a flexible rod with a two-dimensional high-speed flow », *Int. J. Numer. Meth. Engrg.* **64** (2005), p. 1057–1077. (Cit  en page 97.)
- [132] R. TEMAM – « Une m thode d'approximation de la solution des  quations de Navier-Stokes », *Bull. Soc. Math. Fr.* **96** (1968), p. 115–152. (Cit  en page 31.)
- [133] F. TESSICINI, G. IACCARINO, M. FATICA, M. WANG & R. VERZICCO – « Wall modeling for large-eddy simulation using an immersed boundary method », CTR Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2002. (Cit  en page 21.)
- [134] P. D. THOMAS & C. K. LOMBARD – « Geometric conservation law and its application to flow computations on moving grids », *AIAA J.* **17** (1979), no. 10, p. 1030 – 1037. (Cit  en page 11.)
- [135] M. D. TIDRIRI – « Domain decomposition for compressible Navier-Stokes equations with different discretizations and formulations », *J. Comput. Phys.* **119** (1995), p. 271–282. (Cit  en page 18.)
- [136] E. F. TORO – *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics*, 2 me  d., Springer-Verlag, 1999. (Cit  en page 9.)
- [137] M. DE TULLIO & G. IACCARINO – « Immersed boundary technique for compressible flow simulations on semi-structured meshes », CTR Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2005. (Cit  en page 65.)
- [138] C. W. WANG, T. G. LIU & B. C. KHOO – « A real Ghost fluid method for the simulation of multimediuim compressible flow », *SIAM J. Sci. Comput.* **28** (2006), p. 278–302. (Cit  en page 23.)
- [139] H. WANG, J. CHessa, W. K. LIU & T. BELYTSCHKO – « The immersed/fictitious element method for fluid-structure interaction : Volumetric consistency, compressibility and thin members », *Int. J. Numer. Meth. Engrg.* **74** (2008), p. 32–55. (Cit  en page 97.)
- [140] K. WANG, A. RALLU, J.-F. GERBEAU & C. FARHAT – « Algorithms for interface treatment and load computation in embedded boundary methods for fluid and fluid-structure interaction problems », *Int. J. Numer. Meth. Fluids* (2010), p. 73–107. (Cit  en pages 23 et 97.)
- [141] P. WOODWARD & P. COLELLA – « The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks », *J. Comput. Phys.* **54** (1984), p. 115–173. (Cit  en page 85.)
- [142] S. XU & Z. J. WANG – « An immersed interface method for simulating the interaction of a fluid with moving boundaries », *J. Comput. Phys.* **216** (2006), no. 2, p. 454–493. (Cit  en pages 14 et 64.)



- [143] H. YSERENTANT – « A new class of particle methods », *Numer. Math.* **76** (1997), no. 1, p. 87–109. (Cité en page 35.)
- [144] Z. YU – « A DLM/FD method for fluide/flexible-body interactions », *J. Comput. Phys.* **207** (2005), p. 1–27. (Cité en page 17.)



## RESUME

Dans cette thèse, nous avons étudié la simulation numérique des phénomènes d'interaction fluide-structure entre un fluide compressible et une structure déformable. En particulier, nous nous sommes intéressés au couplage par une approche partitionnée entre une méthode de Volumes Finis pour résoudre les équations de la mécanique des fluides compressibles et une méthode d'Éléments discrets pour le solide, capable de prendre en compte la fissuration. La revue des méthodes existantes de domaines fictifs ainsi que des algorithmes partitionnés couramment utilisés pour le couplage conduit à choisir une méthode de frontières immergées conservative et un schéma de couplage explicite. Il est établi que la méthode d'Éléments Discrets utilisée permet de retrouver le comportement macroscopique du matériau et que le schéma symplectique employé assure la préservation de l'énergie du solide. Puis nous avons développé un algorithme de couplage explicite entre un fluide compressible non-visqueux et un solide indéformable. Nous avons montré des propriétés de conservation exacte de masse, de quantité de mouvement et d'énergie du système ainsi que de consistance du schéma de couplage. Cet algorithme a été étendu au couplage avec un solide déformable, sous la forme d'un schéma semi-implicite. Cette méthode a été appliquée à l'étude de problèmes d'écoulements non-visqueux autour de structures mobiles : les comparaisons avec des résultats numériques et expérimentaux existants démontrent la très bonne précision de notre méthode.

**Mots clés** : interaction fluide-structure – algorithme de couplage – frontières immergées – Volumes Finis – Éléments discrets

## ABSTRACT

This work aims at the numerical simulation of compressible fluid/deformable structure interactions. In particular, we have developed a partitioned coupling algorithm between a Finite Volume method for the compressible fluid and a Discrete Element method capable of taking into account fractures in the solid. A survey of existing fictitious domain methods and partitioned algorithms has led to choose an Embedded Boundary method and an explicit coupling scheme. We first showed that the Discrete Element method used for the solid yielded the correct macroscopic behaviour and that the symplectic time-integration scheme ensured the preservation of energy. We then developed an explicit coupling algorithm between a compressible inviscid fluid and an undeformable solid. Mass, momentum and energy conservation and consistency properties were proved for the coupling scheme. The algorithm was then extended to the coupling with a deformable solid, in the form of a semi-implicit scheme. Finally, we applied this method to unsteady inviscid flows around moving structures : comparisons with existing numerical and experimental results demonstrate the excellent accuracy of our method.

**Key words** : fluid-structure interaction – coupling algorithm – Embedded Boundaries – Finite Volume method – Discrete Element method