

Rapport de stage de fin d'études

La modélisation du séchage d'un milieu poreux

Par Laydine Youssouf

Sous la responsabilité de Magdalena Dymitrowska (IRSN),
Rafael Chaves Deptulski (IRSN) et Hakim Boumaza (LAGA)

30 septembre 2019

Résumé

Ce document expose les travaux effectués durant mon stage de fin d'études à l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire. Il reprend notamment quelques résultats issus d'articles de recherche sur la méthode Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) et propose des éclaircissements et des détails mathématiques quasi-introuvables dans la littérature d'aujourd'hui. Puis, il présente des résultats de résolution de l'équation de diffusion, implémentée dans un code de calcul SPH.

Table des matières

Introduction	2
1 La méthode Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)	3
1.1 Interpolation	3
1.2 Calcul de la dérivée première	4
1.3 Calcul de la dérivée seconde	8
1.3.1 En dimension 1	8
1.3.2 En dimension 2	9
1.3.3 En dimension 3	11
2 L'application à l'équation de diffusion	12
2.1 Le schéma SPH pour le calcul de concentrations	12
2.2 Simulations pour différents types de profils	13
2.2.1 Solution constante	13
2.2.2 Solution affine	15
2.2.3 Solution gaussienne	15
2.3 Courbe d'erreur et variantes SPH corrigées	18
Conclusion	19
3 Annexe de démonstrations	19
3.1 Formules (61) et (62) p.8	19
3.2 Formule (67) p.9	21
3.3 Formule (68) p.9	23
3.4 Formule (70) p.9	24
3.4.1 Formule (78) p.9	25
3.4.2 Formule (80) p.10	27

3.4.3	Formule (82) p.10	28
3.4.4	Formule (83) p.10	28

Introduction

Dans le cadre de ma formation d'ingénieur en Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique à Sup Galilée, j'ai été amené à effectuer un stage de fin de cursus à l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire de Fontenay-aux-Roses. Ce stage s'inscrit dans le contexte général de l'évaluation de la sûreté d'un stockage de déchets radioactifs en formation géologique profonde, dont l'un des enjeux consiste en l'évaluation de l'impact éventuel de la migration du gaz, principalement l'hydrogène produit par la corrosion des colis en acier, à l'intérieur du stockage et dans son environnement. La montée en pression de la phase gazeuse et la migration de l'hydrogène pourraient ralentir la saturation en eau des ouvrages et créer des perturbations. On pourra observer une fracturation de la roche hôte ou des barrières ouvragées, ainsi que l'ouverture des interfaces, ce qui peut contribuer à la diminution de l'efficacité de confinement du stockage. Le sujet du stage proposé vise essentiellement à améliorer les outils de compréhension de la migration des gaz au sein d'une telle installation.

La modélisation des écoulements diphasiques gaz-eau dans le contexte du stockage souterrain des déchets radioactifs est encore un sujet très largement ouvert. Tout d'abord, à cause de l'existence dans la roche hôte (l'argilite) de pores de taille submicronique et en raison de nombres capillaires extrêmement faibles (écoulements très lents), qui caractérisent ces écoulements. Il est crucial de déterminer avec une grande précision les propriétés macroscopiques (courbe de rétention, perméabilités relatives) dans la gamme des fortes saturations en eau, qui correspondent à la situation attendue dans le stockage. C'est précisément une gamme de saturation où l'acquisition de ces données par voie expérimentale est peu fiable. De plus, le passage de gaz s'accompagne de l'ouverture de chemins préférentiels, dont la nature serait proche des micro-fractures réversibles.

Grâce aux méthodes d'imagerie, telles que la micro-tomographie aux rayons X, ou encore FIB-SEM¹, il est possible d'obtenir des images 3D de l'espace porale des matériaux opaques, telles que les argilites. Ces « maquettes 3D » peuvent être utilisées pour mieux comprendre les phénomènes microscopiques régissant les écoulements diphasiques en leur sein. Cependant, tous les résultats qui seront présentés au fur et à mesure de ce document seront basés sur des simulations numériques dans des domaines de géométrie simple.

Le travail proposé dans le cadre de ce stage consiste à implémenter une manière de prendre en compte l'évaporation de l'eau liquide dans un milieu poreux en conditions de séchage. La quantité d'eau évaporée dépend principalement de la capacité du milieu à transporter la vapeur d'eau par diffusion. Il s'agira en premier lieu d'implémenter dans un code SPH une fonction de calcul de concentrations dans une phase donnée (liquide, gazeuse, solide et élastique). L'évolution de cette grandeur est modélisée par une équation de diffusion, ici sous forme de la loi de Fick, qui est la suivante

$$\frac{dC}{dt} = \text{div}(D\nabla C) \quad (1)$$

où D est un coefficient de diffusion. On la voit généralement écrite sous la forme

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(D\nabla C) \quad (2)$$

mais celle-ci est associée à une observation dite eulerienne, c'est-à-dire sans prise en compte de vitesse de déplacement.

La méthode de résolution choisie est la méthode SPH qui est un solveur lagrangien non maillé avec des moyennes non-locales des grandeurs d'intérêt (moyennes réalisées dans un domaine

1. Focused Ion Beam combined with Scanning Electron Microscopy

d'influence de points matériels). Elle est très adaptée à des problèmes en mécanique des milieux continus. La suite expose des outils permettant la résolution de l'équation précédente par cette méthode ainsi que des résultats obtenus.

1 La méthode Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)

1.1 Interpolation

Les équations de la mécanique des milieux continus sont de la forme suivante (cf. [1])

$$\frac{dA}{dt} = f(A, \nabla A, r) \quad (3)$$

où

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla \quad (4)$$

désigne la dérivée Lagrangienne, la dérivée suivant un mouvement, et A une quantité quelconque. f est une fonction, r une position et v une vitesse. En coordonnées cartésiennes,

$$r = (x, y, z)^t \quad (5)$$

$$v = (v_x, v_y, v_z)^t \quad (6)$$

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)^t \quad (7)$$

et

$$v \cdot \nabla = v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} + v_z \frac{\partial}{\partial z} \quad (8)$$

Si A est une fonction scalaire (par exemple la densité) alors

$$\nabla A = \left(\frac{\partial A}{\partial x}, \frac{\partial A}{\partial y}, \frac{\partial A}{\partial z} \right)^t \quad (9)$$

et si A est une fonction vectorielle (par exemple la vitesse) $A(r) = (A_x, A_y, A_z)^t$ alors

$$\nabla A = \begin{pmatrix} \frac{\partial A_x}{\partial x} & \frac{\partial A_x}{\partial y} & \frac{\partial A_x}{\partial z} \\ \frac{\partial A_y}{\partial x} & \frac{\partial A_y}{\partial y} & \frac{\partial A_y}{\partial z} \\ \frac{\partial A_z}{\partial x} & \frac{\partial A_z}{\partial y} & \frac{\partial A_z}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (10)$$

L'objectif est d'approximer les dérivées partielles de A par une méthode SPH dont les noeuds d'interpolation sont des points matériels en nombre fini pouvant se déplacer suivant leur vitesse. L'interpolation SPH de A notée A_I est une fonction de la position $r \in \mathbb{R}^3$ déterminée par la relation suivante (qu'on peut retrouver dans [1])

$$A_I(r) = \int A(r') W(r - r', h) dr' \quad (11)$$

W est une fonction noyau ou de lissage et h le noyau de lissage qui délimite son domaine d'influence. dr' est un élément de volume infinitésimal. La fonction W doit vérifier

$$\int W(x - x', h) dx' = 1 \quad \text{et} \quad W(r - r', h) = 0 \quad \text{si} \quad ||r - r'|| > h \quad (12)$$

et

$$\langle W, A \rangle \xrightarrow{h \rightarrow 0} \langle \delta, A \rangle \quad (13)$$

où δ est une distribution de Dirac. Ainsi le calcul dans (11) p.3 ne se limite qu'à un voisinage de la position considérée puisque W est nul au delà d'une distance h .

Pour appliquer cette interpolation à un milieu, on le représente par un groupe de points matériels. Le point a aura comme masse m_a , densité ρ_a et position r_a . La valeur du champ A pour cette particule a sera notée A_a . On commence par écrire, d'après [1], que

$$A(r') = \frac{A(r')}{\rho(r')} \rho(r') \quad (14)$$

et donc

$$\int A(r') dr' = \int \frac{A(r')}{\rho(r')} \rho(r') dr' \quad (15)$$

On injecte la relation (14) dans l'équation (11) p.3 pour avoir que

$$A_I(r) = \int \frac{A(r')}{\rho(r')} \rho(r') W(r - r', h) dr' = \int \frac{A(r')}{\rho(r')} W(r - r', h) \rho(r') dr' \quad (16)$$

$\rho = m/v$ et comme dr' est un élément de volume alors $\rho dr'$ est un élément de masse. Puisqu'on intègre sur un domaine comprenant un ensemble de points matériels, l'intégrale devient alors une somme et on a $\rho(r') \rightarrow \rho_b$, $A(r') \rightarrow A_b$ et $\rho(r') dr' \rightarrow m_b$ où b est un point quelconque dans l'ensemble des points matériels. Donc, on pose

$$A_s(r) = \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} W(r - r_b, h) \quad (17)$$

une approximation discrète de A_I On prend par exemple $A = \rho$, la fonction densité, dont la forme SPH est

$$\rho_s(r) = \sum_b m_b \frac{\rho_b}{\rho_b} W(r - r_b, h) = \sum_b m_b W(r - r_b, h) \quad (18)$$

On retrouve dans la suite de ce rapport des résultats de l'article de Monaghan [1] qui est une référence dans ce domaine.

1.2 Calcul de la dérivée première

Une première façon de faire est de partir de l'approximation SPH de A comme Joseph J. Monaghan dans son article [1]. Si W est différentiable alors

$$\frac{\partial A_s}{\partial x}(r) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} W(r - r_b, h) \right) \quad (19)$$

et par linéarité de la somme on a (cf. [1])

$$\frac{\partial A_s}{\partial x}(r) = \sum_b \frac{\partial}{\partial x} \left(m_b \frac{A_b}{\rho_b} W(r - r_b, h) \right) = \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} \frac{\partial W}{\partial x}(r - r_b, h) \quad (20)$$

On remarque que dans l'équation précédente, si A_s est constant alors $\partial A_s / \partial x = 0$ mais on n'a pas forcément $\sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} \frac{\partial W}{\partial x} = 0$ car $m_b, A_b, \rho_b \neq 0$ et il n'y a aucune raison pour que $\partial W / \partial x = 0$. On peut prendre par exemple la fonction suivante

$$W(r, h) = \begin{cases} 1 - |r| & \text{si } |r| < h \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (21)$$

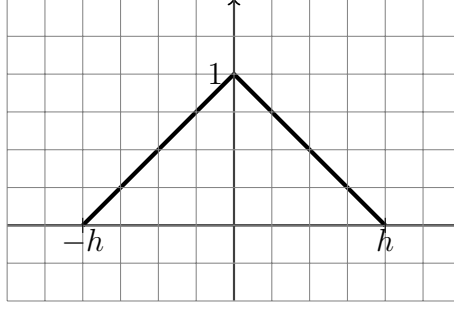


FIGURE 1 – Fonction noyau chapeau

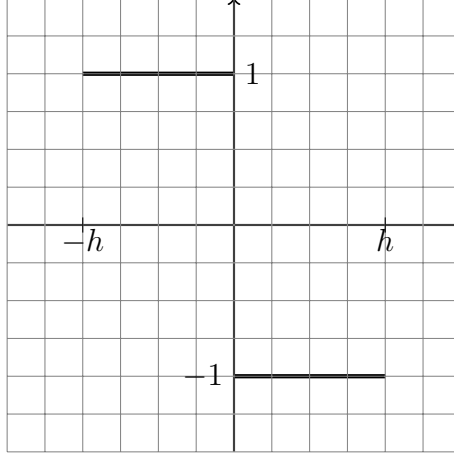


FIGURE 2 – Dérivée d'une fonction noyau chapeau

dont le graphe est donné à la figure 1. Sa dérivée par morceaux est donnée à la figure 2 et montre bien qu'on a $\partial W/\partial r \neq 0$.

Pour palier à ce problème, on pose, comme dans [1]

$$\frac{\partial A}{\partial x} = \frac{1}{\Phi} \left(\frac{\partial(\Phi A)}{\partial x} - A \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) \quad (22)$$

où Φ est une fonction différentiable. En effet,

$$\frac{\partial(\Phi A)}{\partial x} = A \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \Phi \frac{\partial A}{\partial x} \quad (23)$$

donc

$$\frac{\partial(\Phi A)}{\partial x} - A \frac{\partial \Phi}{\partial x} = A \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \Phi \frac{\partial A}{\partial x} - A \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \Phi \frac{\partial A}{\partial x} \quad (24)$$

et

$$\frac{1}{\Phi} \left(\frac{\partial(\Phi A)}{\partial x} - A \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) = \frac{1}{\Phi} \Phi \frac{\partial A}{\partial x} = \frac{\partial A}{\partial x} \quad (25)$$

On a bien montré la relation (22) et on applique (20) p.4 sur chaque terme.

$$\frac{\partial(\Phi A)}{\partial x}(r) = \sum_b m_b \frac{\Phi_b A_b}{\rho_b} \frac{\partial W}{\partial x}(r - r_b, h) \quad (26)$$

et

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x}(r) = \sum_b m_b \frac{\Phi_b}{\rho_b} \frac{\partial W}{\partial x}(r - r_b, h) \quad (27)$$

Sous forme SPH on a

$$\frac{\partial A}{\partial x} = \frac{1}{\Phi} \left(\sum_b m_b \frac{\Phi_b A_b}{\rho_b} \frac{\partial W}{\partial x} - A \sum_b m_b \frac{\Phi_b}{\rho_b} \frac{\partial W}{\partial x} \right) \quad (28)$$

$$= \frac{1}{\Phi} \left(\sum_b m_b \frac{\Phi_b A_b}{\rho_b} \frac{\partial W}{\partial x} - \sum_b m_b \frac{\Phi_b A}{\rho_b} \frac{\partial W}{\partial x} \right) \quad (29)$$

$$= \frac{1}{\Phi} \sum_b m_b \frac{\Phi_b}{\rho_b} (A_b - A) \frac{\partial W}{\partial x} \quad (30)$$

$$\frac{\partial A}{\partial x}(r) = \frac{1}{\Phi} \sum_b m_b \frac{\Phi_b}{\rho_b} (A_b - A) \frac{\partial W}{\partial x}(r - r_b, h) \quad (31)$$

Pour une particule a quelconque et avec $r_a = (x_a, y_a, z_a)$

$$\frac{\partial A}{\partial x}(r_a) = \frac{1}{\Phi_a} \sum_b m_b \frac{\Phi_b}{\rho_b} (A_b - A_a) \frac{\partial W}{\partial x}(r_a - r_b, h) \quad (32)$$

On note

$$\left(\frac{\partial A}{\partial x} \right)_a = \frac{\partial A}{\partial x}(r_a) \quad (33)$$

et

$$\frac{\partial W_{ab}}{\partial x} = \frac{\partial W}{\partial x}(r_a - r_b, h) \quad (34)$$

donc

$$\left(\frac{\partial A}{\partial x} \right)_a = \frac{1}{\Phi_a} \sum_b m_b \frac{\Phi_b}{\rho_b} (A_b - A_a) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \quad (35)$$

En prenant $\Phi = 1$, on a (cf. [1])

$$\left(\frac{\partial A}{\partial x} \right)_a = \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} (A_b - A_a) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \quad (36)$$

et si $\Phi = \rho$ alors,

$$\left(\frac{\partial A}{\partial x} \right)_a = \frac{1}{\rho_a} \sum_b m_b (A_b - A_a) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} = \sum_b \frac{m_b}{\rho_a} (A_b - A_a) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \quad (37)$$

On retrouve ici d'autres résultats des travaux de Monaghan se trouvant dans [1]. Considérons comme application, l'équation de continuité donnée par

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \operatorname{div}(v) \quad (38)$$

où

$$\operatorname{div}(v) = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right)^t \cdot (v_x, v_y)^t = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} \quad (39)$$

En une dimension, on a

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \frac{\partial v_x}{\partial x} \quad (40)$$

et par application de la formule (36) on a

$$\left(\frac{d\rho}{dt} \right)_a = -\rho_a \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} (v_{x_b} - v_{x_a}) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} = \rho_a \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} v_{x_{ab}} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \quad (41)$$

où

$$v_{xab} = v_{xa} - v_{xb} \quad (42)$$

Par application de la formule (37) p.6 on a

$$\left(\frac{d\rho}{dt}\right)_a = -\rho_a \sum_b \frac{m_b}{\rho_a} (v_{xb} - v_{xa}) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} = \sum_b m_b v_{xab} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \quad (43)$$

Une autre façon de faire, qui n'est pas présente par exemple dans l'article de Monaghan [1], est d'en revenir à la formule (11) p.3. On commence par l'appliquer au terme $T_1 = \frac{\partial(\Phi A)}{\partial x}$ et on a

$$T_{1I}(r) = \int \frac{\partial(\Phi A)}{\partial x} W(r - r', h) dr' \quad (44)$$

or

$$\frac{\partial}{\partial x}(\Phi A W(r - r', h)) = \frac{\partial(\Phi A)}{\partial x} W(r - r', h) + \Phi A \frac{\partial W}{\partial x}(r - r', h) \quad (45)$$

donc

$$\frac{\partial(\Phi A)}{\partial x} W(r - r', h) = \frac{\partial}{\partial x}(\Phi A W(r - r', h)) - \Phi A \frac{\partial W}{\partial x}(r - r', h) \quad (46)$$

alors

$$T_{1I}(r) = \int \frac{\partial}{\partial x}(\Phi A W(r - r', h)) dr' - \int \Phi A \frac{\partial W}{\partial x}(r - r', h) dr' \quad (47)$$

Par le théorème de la divergence et puisque W est à support compact on a

$$\int \frac{\partial}{\partial x}(\Phi A W(r - r', h)) dr' = 0 \quad (48)$$

donc

$$T_{1I}(r) = - \int \Phi A \frac{\partial W}{\partial x}(r - r', h) dr' \quad (49)$$

La forme SPH de (49) est

$$T_{1S}(r_a) = - \sum_b \Phi_b A_b \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \quad (50)$$

On fait maintenant de même pour le terme $\frac{\partial \Phi}{\partial x}$ et par un procédé analogue on montre que

$$T_{2I}(r) = - \int \Phi \frac{\partial W}{\partial x}(r - r', h) dr' \quad (51)$$

et sa forme SPH donne

$$T_{2S}(r_a) = - \sum_b \Phi_b \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \quad (52)$$

Finalement

$$\left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)_I(r) = -\frac{1}{\Phi} \int \Phi A \frac{\partial W}{\partial x}(r - r', h) dr' + \frac{1}{\Phi} A \int \Phi \frac{\partial W}{\partial x}(r - r', h) dr' \quad (53)$$

$$= \frac{1}{\Phi} \int (\Phi(r') A(r) - \Phi(r') A(r')) \frac{\partial W}{\partial x}(r - r', h) dr' \quad (54)$$

$$= \frac{1}{\Phi} \int \frac{1}{\rho(r')} (\Phi(r') A(r) - \Phi(r') A(r')) \frac{\partial W}{\partial x}(r - r', h) \rho(r') dr' \quad (55)$$

et sous forme SPH

$$\left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)_S(r_a) = \frac{1}{\Phi_a} \sum_b \frac{m_b \Phi_b}{\rho_b} (A_a - A_b) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \quad (56)$$

Lorsque $\Phi = 1$, on a

$$\left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)_s(r_a) = \sum_b \frac{m_b \Phi_b}{\rho_b} (A_a - A_b) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \quad (57)$$

et lorsque $\Phi = \rho$, on a

$$\left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)_s(r_a) = \frac{1}{\rho_a} \sum_b m_b (A_a - A_b) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \quad (58)$$

On applique maintenant les résultats précédents à l'équation de continuité 1D pour obtenir que

$$\left(\frac{d\rho}{dt}\right)_s(r_a) = -\rho_a \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} (v_a - v_b) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} = \rho_a \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} v_{ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \quad (59)$$

et

$$\left(\frac{d\rho}{dt}\right)_s(r_a) = -\sum_b m_b (v_a - v_b) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} = \sum_b m_b v_{ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x} \quad (60)$$

En dimension supérieure on aura

$$\left(\frac{d\rho}{dt}\right)_a = \rho_a \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} v_{ba} \cdot \nabla W_{ab} \quad (61)$$

et

$$\left(\frac{d\rho}{dt}\right)_a = \sum_b m_b v_{ba} \cdot \nabla W_{ab} \quad (62)$$

Si les formules (61) et (62) sont différentes de ce qu'on peut retrouver dans les références bibliographiques, il reste que le résultat important est la formule (35). Les expressions (61) et (62) sont démontrées en annexe.

1.3 Calcul de la dérivée seconde

1.3.1 En dimension 1

On peut directement obtenir une forme SPH de la deuxième dérivée en dérivant à nouveau l'expression de la première dérivée associée. Par exemple en 1D, la relation (20) p.4 devient

$$\frac{dA_s}{dx}(r) = \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} \frac{dW}{dx}(r - r_b, h) \quad (63)$$

donc

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{dA_s}{dx} \right) (r) = \frac{d}{dx} \left(\sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} \frac{dW}{dx}(r - r_b, h) \right) \quad (64)$$

et

$$\frac{d^2 A_s}{dx^2}(r) = \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} \frac{d^2 W}{dx^2}(r - r_b, h) \quad (65)$$

Pour une particule a :

$$\left(\frac{d^2 A_s}{dx^2} \right)_a = \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} \frac{d^2 W_{ab}}{dx^2} \quad (66)$$

Comme pour la forme (20) p.4, (66) présente beaucoup de désavantages notamment du fait que le transfert de la grandeur du problème considéré, entre une particule a et b , dépend du signe de la dérivée seconde de W qui lui peut varier (cf. [1]). Or, par exemple, pour le transfert thermique, l'échange ne s'effectue que d'un corps chaud vers un corps froid.

Une meilleure approche est de considérer des intégrales d'approximations (cf. [6]). Nous avons par exemple en une dimension

$$I(x) = \int \left(\frac{T(x') - T(x)}{x' - x} \right) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = \frac{1}{2} \frac{d^2 T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}(h^2) \quad (67)$$

Une autre intégrale d'approximation, qu'on retrouve dans [5], est la suivante

$$I(x) = \int \left(\frac{k(x) + k(x')}{x - x'} \right) (T(x) - T(x')) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = \frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right)(x) + \mathcal{O}(h^2) \quad (68)$$

avec

$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right)(x) = \frac{dk}{dx}(x) \frac{dT}{dx}(x) + k(x) \frac{d^2 T}{dx^2}(x) \quad (69)$$

Leurs démonstrations respectives se trouvent en annexe.

1.3.2 En dimension 2

Une forme plus générale associée à (68) est la suivante (donnée dans [1] et démontrée en annexe)

$$I(r) = \int (k(r) + k(r'))(T(r) - T(r'))F(r - r', h) dr' = \operatorname{div}(k \nabla T) + \mathcal{O}(h^2) \quad (70)$$

avec

$$\operatorname{div}(k \nabla T) = \nabla k \cdot \nabla T + k \Delta T \quad (71)$$

F est une fonction scalaire négative paire et symétrique telle que

$$\nabla W(v, h) = v F(v, h) \quad (72)$$

On remarque que

$$v \nabla W(v, h) = v \cdot v F(v, h) = \|v\|^2 F(v, h) \quad (73)$$

et donc

$$F(v, h) = \frac{v}{\|v\|^2} \nabla W(v, h) \quad (74)$$

div est l'opérateur divergence défini comme suit pour $v = (v_i)_{i \in \mathbb{N}}$

$$\operatorname{div}(v) = \nabla \cdot v = \sum_i^n \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (75)$$

et Δ l'opérateur Laplacien

$$\Delta T = \operatorname{div}(\nabla T) = \nabla \cdot \nabla T = \sum_i^n \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2} \quad (76)$$

Pour obtenir les dérivées partielles secondes, des intégrales de la forme suivante sont utilisées (cf. [1])

$$J_{xx}(r) = \int \frac{\Delta x \Delta x}{\Delta r^2} (k(r) + k(r'))(T(r) - T(r'))F(r - r', h) dr' \quad (77)$$

avec $\Delta x = x - x'$ et $\Delta r = \|r - r'\|^2$. On montre par la formule de Taylor-Young que

$$J_{xx} = k \left(\frac{3}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{3}{4} \frac{\partial k}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} + \mathcal{O}(h^2) \quad (78)$$

de même que pour

$$J_{yy}(r) = \int \frac{\Delta y \Delta y}{\Delta r^2} (k(r) + k(r')) (T(r) - T(r')) F(r - r', h) dr' \quad (79)$$

on a

$$J_{yy} = k \left(\frac{3}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) + \frac{3}{4} \frac{\partial k}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \mathcal{O}(h^2) \quad (80)$$

et pour

$$J_{xy}(r) = J_{yx}(r) = \int \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta r^2} (k(r) + k(r')) (T(r) - T(r')) F(r - r', h) dr' \quad (81)$$

on a

$$J_{xy} = \frac{1}{4} \left(2k \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y} + \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial k}{\partial y} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial k}{\partial x} \right) + \mathcal{O}(h^2) \quad (82)$$

On remarquera enfin que

$$J_{xx} + J_{yy} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial k}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial k}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} = \operatorname{div}(k \nabla T) + \mathcal{O}(h^2) = I \quad (83)$$

Les formules (78), (80), (82), et (83), qui sont nos résultats intermédiaires, sont toutes démontrées en annexe. Et de façon générale (cf. [1])

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j}(r) = \frac{1}{k} \int \left(\frac{2 \Delta x_i \Delta x_j}{\Delta r^2} - \frac{\delta_{ij}}{2} \right) (k(r) + k(r')) (T(r) - T(r')) F(r - r') dr' \quad (84)$$

$$= \frac{2}{k} \int \frac{\Delta x_i \Delta x_j}{\Delta r^2} (k(r) + k(r')) (T(r) - T(r')) F(r - r') dr' \quad (85)$$

$$- \frac{\delta_{ij}}{2k} \int (k(r) + k(r')) (T(r) - T(r')) F(r - r') dr' \quad (86)$$

où

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases} \quad (87)$$

On pose

$$J_{x_i x_j}(r) = \int \frac{\Delta x_i \Delta x_j}{\Delta r^2} (k(r) + k(r')) (T(r) - T(r')) F(r - r') dr' \quad (88)$$

et de par une démonstration se trouvant en annexe (voir p.28) on a

$$\int (k(r) + k(r')) (T(r) - T(r')) F(r - r') dr' = \operatorname{div}(k(r) \nabla T(r)) + \mathcal{O}(h^2) \quad (89)$$

donc

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j}(r) = \frac{2}{k} J_{x_i x_j}(r) - \frac{\delta_{ij}}{2k} \operatorname{div}(k(r) \nabla T(r)) \quad (90)$$

On ne proposera pas de démonstration de la formule (84) mais des exemples de vérification en deux dimensions. On considère $k = 1$ et $i = j = 1$.

$$I_1 = 2 \int \frac{2 \Delta x_1^2}{\Delta r^2} (T(r) - T(r')) F(r - r') dr' - \frac{1}{2} \operatorname{div}(\nabla T(r)) = 2 J_{x_1 x_1}(r) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2} \quad (91)$$

On rappelle que

$$J_{x_1 x_1}(r) = k(r) \left[\frac{3}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2}(r) + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2}(r) \right] + \frac{3}{4} \frac{\partial k}{\partial x_1}(r) \frac{\partial T}{\partial x_1}(r) + \frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial x_2}(r) \frac{\partial T}{\partial x_2}(r) \quad (92)$$

mais puisque $k = k(r) = 1$ on a $\frac{\partial k}{\partial x_1}(r) = 0$ et $\frac{\partial k}{\partial x_2}(r) = 0$ donc $J_{x_1 x_1}(r) = \frac{3}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2}(r) + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2}(r)$.

Alors

$$I_1 = \frac{3}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2}(r) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2}(r) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2}(r) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2}(r) = \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2}(r) \quad (93)$$

$i = j = 2$

$$I_2 = 2 \int \frac{2\Delta x_2^2}{\Delta r^2} (T(r) - T(r')) F(r - r') dr' - \frac{1}{2} \operatorname{div}(\nabla T(r)) = 2J_{x_2 x_2}(r) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2} \quad (94)$$

or

$$J_{x_2 x_2}(r) = k(r) \left[\frac{3}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2}(r) + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2}(r) \right] + \frac{3}{4} \frac{\partial k}{\partial x_2}(r) \frac{\partial T}{\partial x_2}(r) + \frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial x_1}(r) \frac{\partial T}{\partial x_1}(r) \quad (95)$$

$$= \frac{3}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2}(r) + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2}(r) \quad (96)$$

donc

$$I_2 = \frac{3}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2}(r) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2}(r) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2}(r) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2}(r) = \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2}(r) \quad (97)$$

$i = 1, j = 2$

$$I_3 = 2 \int \frac{2\Delta x_1 \Delta x_2}{\Delta r^2} (T(r) - T(r')) F(r - r') dr' = 2J_{x_1 x_2}(r) \quad (98)$$

or

$$J_{x_1 x_2}(r) = \frac{1}{4} \left[2k(r) \frac{\partial^2 T}{\partial x_1 \partial x_2}(r) + \frac{\partial T}{\partial x_1}(r) \frac{\partial k}{\partial x_2}(r) + \frac{\partial T}{\partial x_2}(r) \frac{\partial k}{\partial x_1}(r) \right] = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x_1 \partial x_2}(r) \quad (99)$$

donc

$$I_3 = \frac{\partial^2 T}{\partial x_1 \partial x_2}(r) \quad (100)$$

Puisque $\frac{\partial^2 T}{\partial x_1 \partial x_2} = \frac{\partial^2 T}{\partial x_2 \partial x_1}$ alors le cas $i = 2, j = 1$ est analogue au précédent.

1.3.3 En dimension 3

On définit ici, en plus de (78) et (80), l'intégrale suivante

$$J_{zz}(r) = \int \frac{\Delta z \Delta z}{\Delta r^2} (k(r) + k(r')) (T(r) - T(r')) F(r - r', h) dr' \quad (101)$$

On montre par la formule de Taylor-Young et en intégrant en trois dimensions que

$$J_{xx} = \frac{1}{5} k \left(3 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{5} \left(3 \frac{\partial k}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial k}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial k}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \mathcal{O}(h^2) \quad (102)$$

$$J_{xy} = \frac{1}{5} \left(2k \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y} + \frac{\partial k}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial k}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \mathcal{O}(h^2) \quad (103)$$

et

$$J_{xx} + J_{yy} + J_{zz} = \operatorname{div}(k \nabla T) + \mathcal{O}(h^2) \quad (104)$$

Les procédés étant finalement similaires qu'en dimension 2, les démonstrations en trois dimensions ne seront pas proposées dans ce document.

2 L'application à l'équation de diffusion

Dans cette section, on applique la méthode SPH à l'équation (1) p.2 et on présente des résultats de simulations numériques réalisées à l'IRSN.

2.1 Le schéma SPH pour le calcul de concentrations

On commence par écrire la forme SPH de (70) p.9 pour une particule a .

$$I(r) = \int \frac{1}{\rho(r')} (k(r) + k(r')) (T(r) - T(r')) F(r - r', h) \rho(r') dr' \quad (105)$$

donc

$$I_s(r_a) = \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} (k_a + k_b) (T_a - T_b) F(r_a - r_b, h) \quad (106)$$

On note $F_{ab} = F(r_a - r_b, h)$ et on associe k à D puis T à C et on a

$$\frac{dC}{dt}(r_a) = \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} (D_a + D_b) (C_a - C_b) F_{ab} \quad (107)$$

La formulation (106) ne garantit pas que le flux diffusif sera continu si k est discontinu. Cleary et Monaghan ont montré (cf. [4]), par une analyse de la discrétisation par différences finies du problème, qu'il peut être résolu en remplaçant $(D_a + D_b)$ par

$$\frac{4D_a D_b}{(D_a + D_b)} \quad (108)$$

Le flux diffusif est alors continu même avec des sauts d'un facteur 10^3 dans un milieu avec plusieurs coefficients de diffusivité. La formulation pour C devient donc

$$\frac{dC}{dt}(r_a) = \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} \frac{4D_a D_b}{(D_a + D_b)} (C_a - C_b) F_{ab} \quad (109)$$

$\frac{dC}{dt}$ représente une variation de concentration par analogie à $\frac{\partial C}{\partial t}$ en description eulerienne. Soit $\Delta t > 0$. Par un développement de Taylor-Young, on a

$$C(t_{n+1}, x_i) = C(t_n, x_i) + \Delta t \frac{dC}{dt}(t_n, x_i) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (110)$$

$$C(t_{n+1}, x_i) - C(t_n, x_i) = \Delta t \frac{dC}{dt}(t_n, x_i) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (111)$$

et

$$\frac{C(t_{n+1}, x_i) - C(t_n, x_i)}{\Delta t} = \frac{dC}{dt}(t_n, x_i) + \mathcal{O}(\Delta t) \quad (112)$$

On note $C_i^n \sim C(t_n, x_i)$ et on a

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = \left(\frac{dC}{dt} \right)_i^n \quad (113)$$

ou encore

$$C_i^{n+1} - C_i^n = \Delta t \left(\frac{dC}{dt} \right)_i^n \quad (114)$$

$$C_i^{n+1} = C_i^n + \Delta t \left(\frac{dC}{dt} \right)_i^n \quad (115)$$

La relation précédente est le schéma en temps implémenté qui n'est rien d'autre que le schéma d'Euler explicite. Le pas de temps doit obéir à deux conditions CFL (cf. [10]) qui sont les suivantes :

$$\Delta t \leq 0.125 \frac{h^2}{D} \quad (116)$$

et

$$\Delta t \leq 0.125 \frac{h^2}{9D} \quad (117)$$

L'inégalité (116) est basée sur une condition CFL classique pour la résolution de l'équation de diffusion par la méthode des différences finies. Cependant, le choix de la fonction noyau et la disposition des points matériels influencent les coefficients dans l'inégalité (116). On a adopté le modèle déjà existant dans le code SPH consistant à prendre $h/3$ au lieu de h dans la relation (116) pour obtenir la nouvelle inégalité (117). C'est celle-là qui a été privilégiée dans l'implémentation.

2.2 Simulations pour différents types de profils

Pour vérifier la véracité de l'implémentation, on se propose dans un premier temps d'établir plusieurs cas tests dont le profil de concentration est bien connu puis de comparer la solution numérique calculée avec la solution analytique. On se base essentiellement sur des tests de validation du logiciel *Melodie*² dans sa version 5.0 développé à l'IRSN par des ingénieurs de recherche de l'unité UEMIS³.

2.2.1 Solution constante

On considère un domaine cubique $50 \text{ m} \times 50 \text{ m} \times 50 \text{ m}$ périodique et découpé en petits cubes (blocs) d'un mètre de côté contenant des points matériels pour l'instant statiques. On choisit de placer deux points dans chaque direction (Ox , Oy et Oz) et on a donc $2^3 = 8$ points matériels dans un petit cube. A une altitude donnée, la représentation de la disposition de quatre points matériels a été faite à la figure 3. On impose des conditions de Dirichlet sur deux bords, la première sur toutes les particules d'abscisse $x = 0.25$ et la seconde à l'abscisse $x = 49.75$ avec $C = 1000 \text{ u}$, une concentration d'une unité arbitraire. La répartition initiale à l'intérieur du domaine est de $C = 0 \text{ u}$. Le coefficient de diffusivité est donné par

$$D = \frac{1 \ 875}{31 \ 536 \ 000} \text{ m}^2/\text{s} \simeq 5.96 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s} \quad (118)$$

Le pas de temps limite (117) étant de 233.6 s, on le choisit égal à 225 s qui est un diviseur de 63 072 000 s (la durée en secondes de deux années). La solution analytique à l'état stationnaire est

$$C(x) = 1000 \text{ u} \quad (119)$$

On visualise l'état initial du profil de concentration à la figure 4 p.14 avec deux lignées de points rouge montrant le lieu d'application de la condition de Dirichlet. Il s'agit donc de faire remonter le plateau de concentration de 0 u vers 1000 u et comme le montre la figure 5 p.14, la capture au temps final, les valeurs sont très proches de 1000 et sont environ égales à 999.972 u .

2. Modèle d'Evaluation à LOng terme des Déchets Irradiants Enterrés

3. Unité d'Expertise et de Modélisation des Installations de Stockage

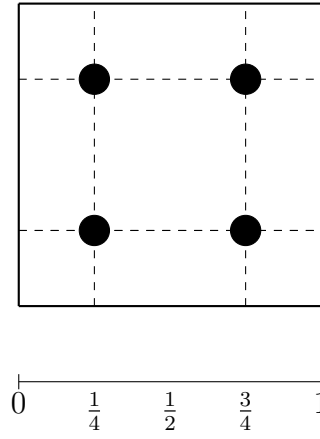


FIGURE 3 – Disposition de quatre points matériels sur une surface bidimensionnelle

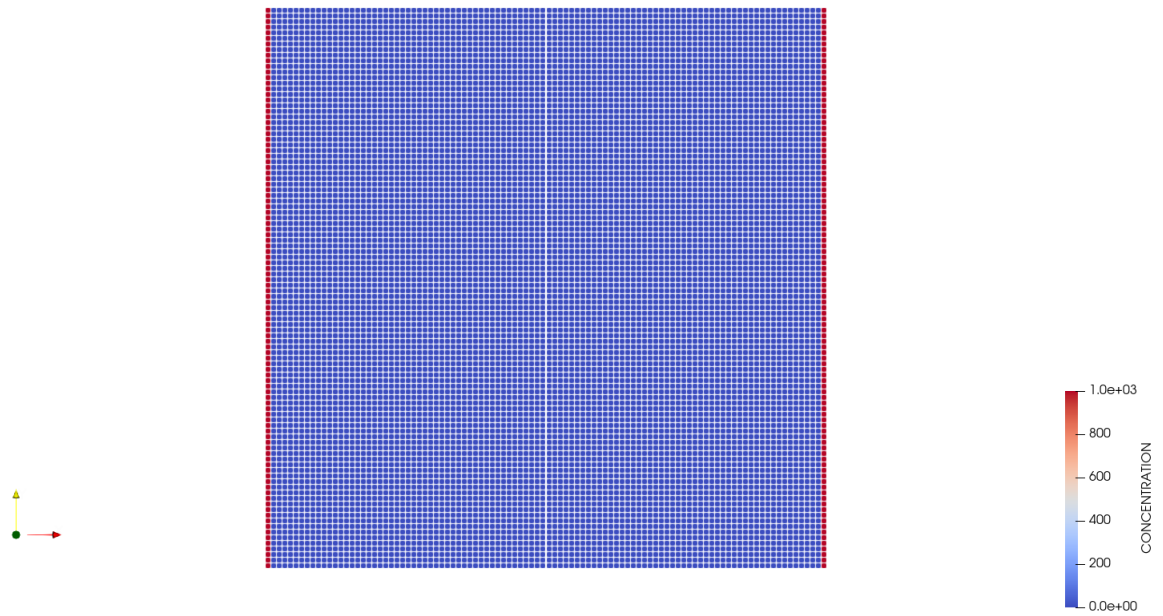


FIGURE 4 – Répartition initiale avec conditions de Dirichlet égales

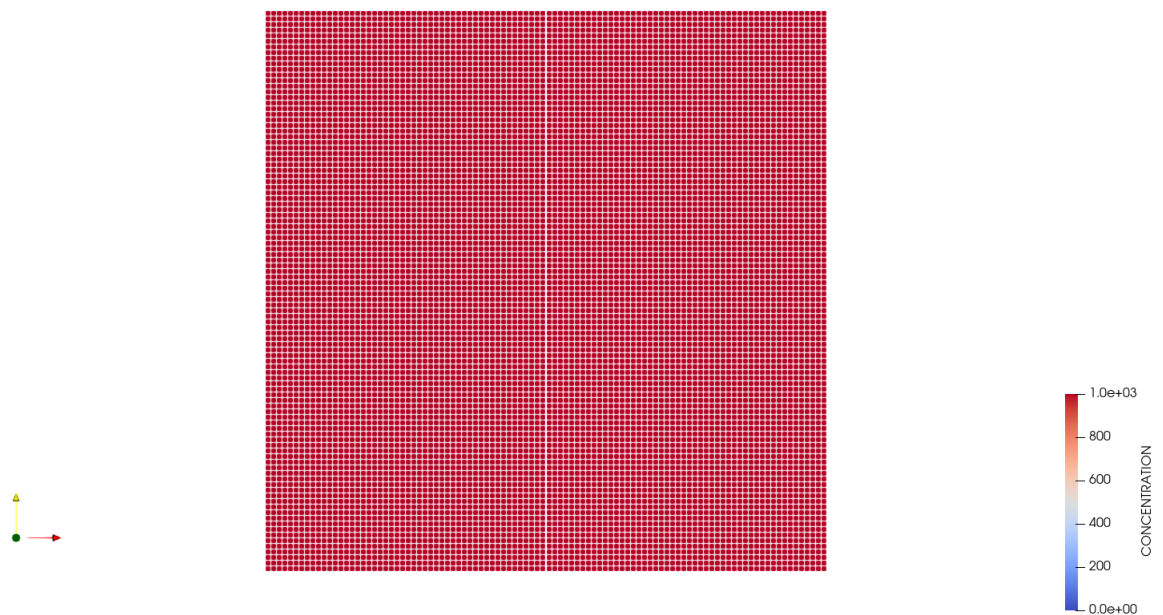


FIGURE 5 – Répartition finale du cas test de solution constante

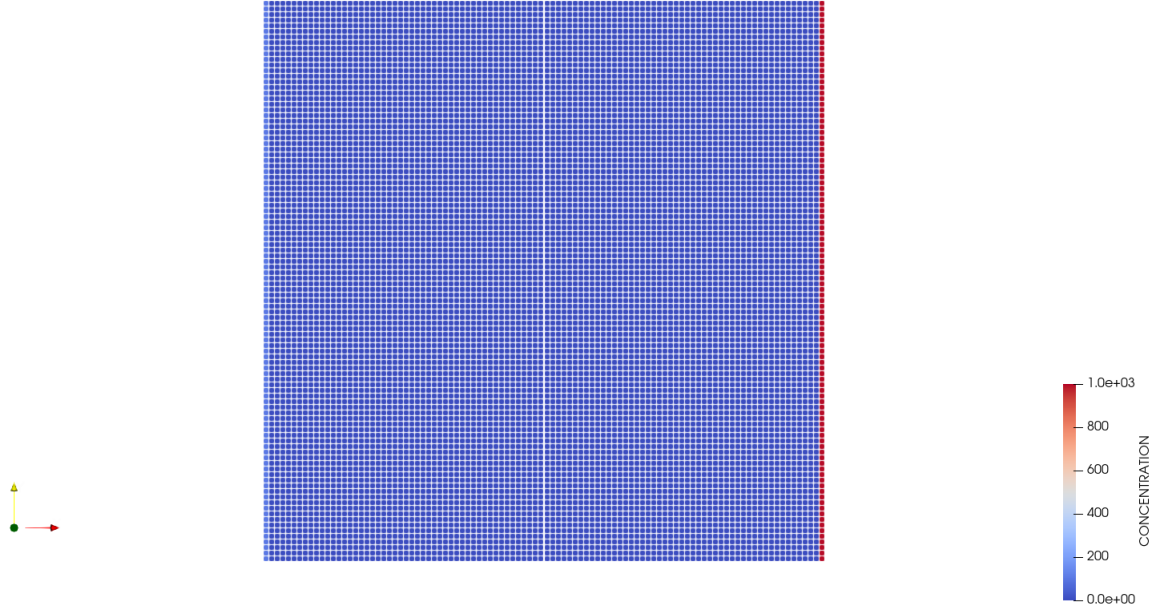


FIGURE 6 – Répartition initiale avec conditions de Dirichlet différentes

2.2.2 Solution affine

On reprend le cas test précédent mais on impose à gauche une concentration de $104.5 u$ et à droite $995.5 u$ pour avoir le profil suivant à l'équilibre

$$C(x) = 18x + 100, \quad x \in [0, 50] \quad (120)$$

La différence en coloration est à peine perceptible à gauche à la figure 6 p.15 mais le profil à l'état stationnaire est, comme attendu, bien affine dans les figures 7 et 8. On voit même que dans cette dernière, les courbes sont exactement confondues.

2.2.3 Solution gaussienne

On considère le même domaine que précédemment mais sans conditions de Dirichlet et toujours avec 2^3 particules dans chaque cube. On impose à l'instant initial une certaine concentration aux 8 particules centrales et on observe sa diffusion dans le reste du domaine avec des conditions de type flux nul aux limites. Le coefficient de diffusion est donné par

$$D = 15 \text{ m}^2/\text{an} = \frac{15}{31\,536\,000} \text{ m}^2/\text{s} \simeq 4.76 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s} \quad (121)$$

et le pas de temps est actualisé à 29 200 s mais toujours pour un temps final de deux années. La solution analytique s'écrit

$$C(t, x, y, z) = \frac{C_0}{8\omega(\pi t D)^{1.5}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt} - \frac{(y-y_0)^2}{4Dt} - \frac{(z-z_0)^2}{4Dt}\right), \quad x, y, z \in [0, 50] \quad (122)$$

ω est la porosité du milieu qu'on prend ici égale à 1, $C_0 = 1000 u$ et t désigne un instant de temps en secondes. Il est à noter qu'en 2D, le facteur 8 devant ω devient 4. Une coupe proche du centre est fournie à la figure 9 p.17 montrant quatre points rouges portant la concentration initiale. Elle va ensuite diminuer au fur et à mesure de façon symétrique en 3D jusqu'à atteindre l'état présenté à la figure 10 p.17. Une comparaison graphique des solutions est donnée à la figure 11 p.18 et on y constate un écart au centre du domaine entre la solution analytique et la solution numérique calculée. On constate cependant qu'à la capture précédente de la solution numérique, l'écart observé est beaucoup moins important.

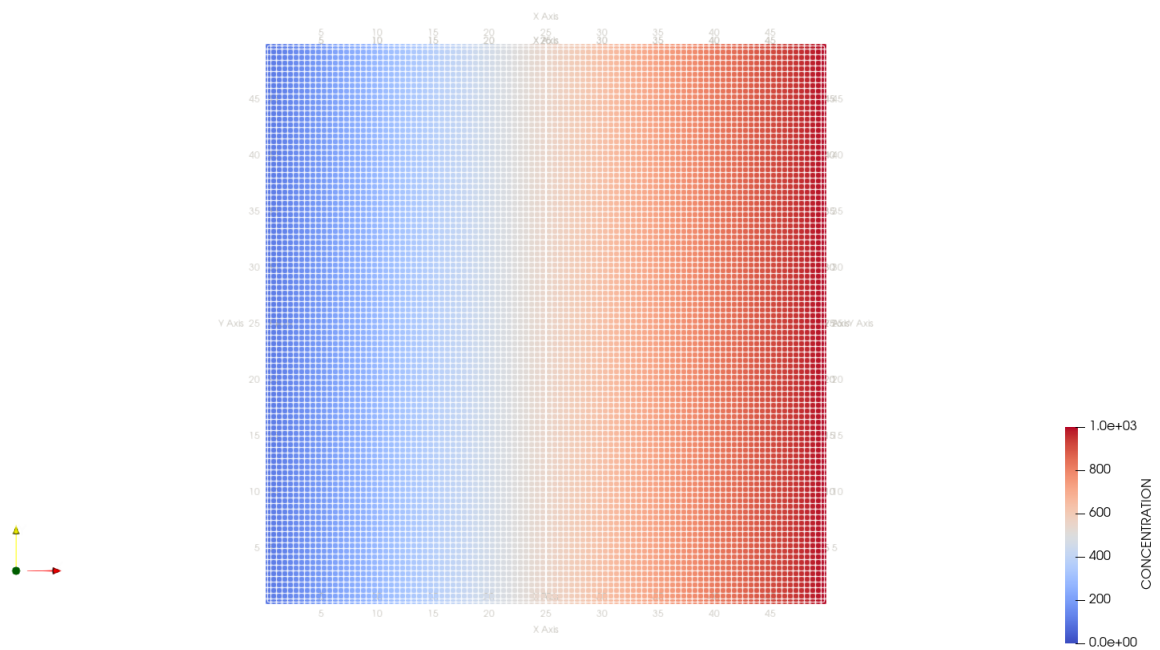


FIGURE 7 – Répartition finale du cas test de solution affine

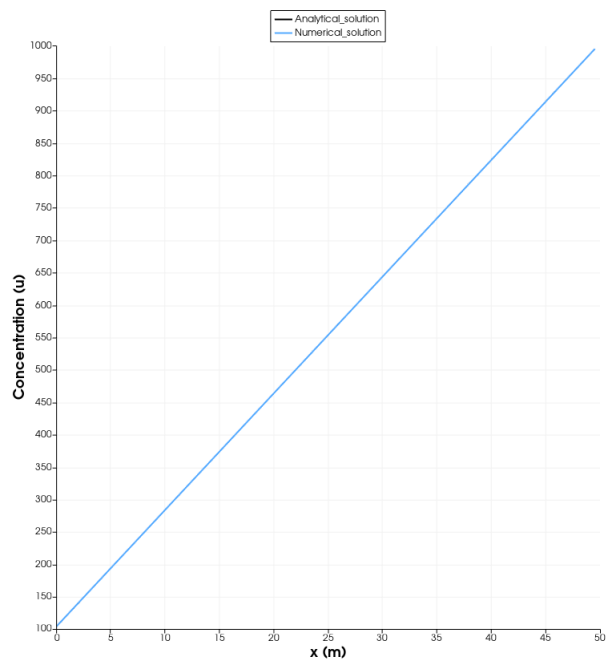


FIGURE 8 – Solution analytique et numérique confondues dans le cas affine

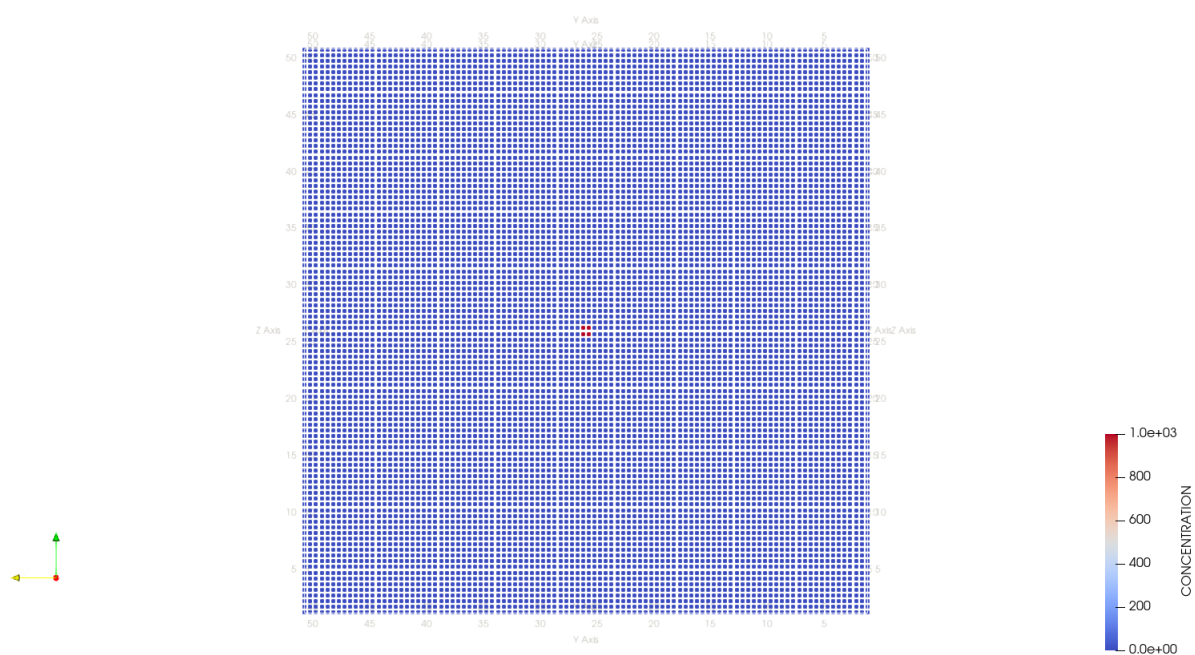


FIGURE 9 – Coupe centrale initiale du domaine avec dépôt instantané

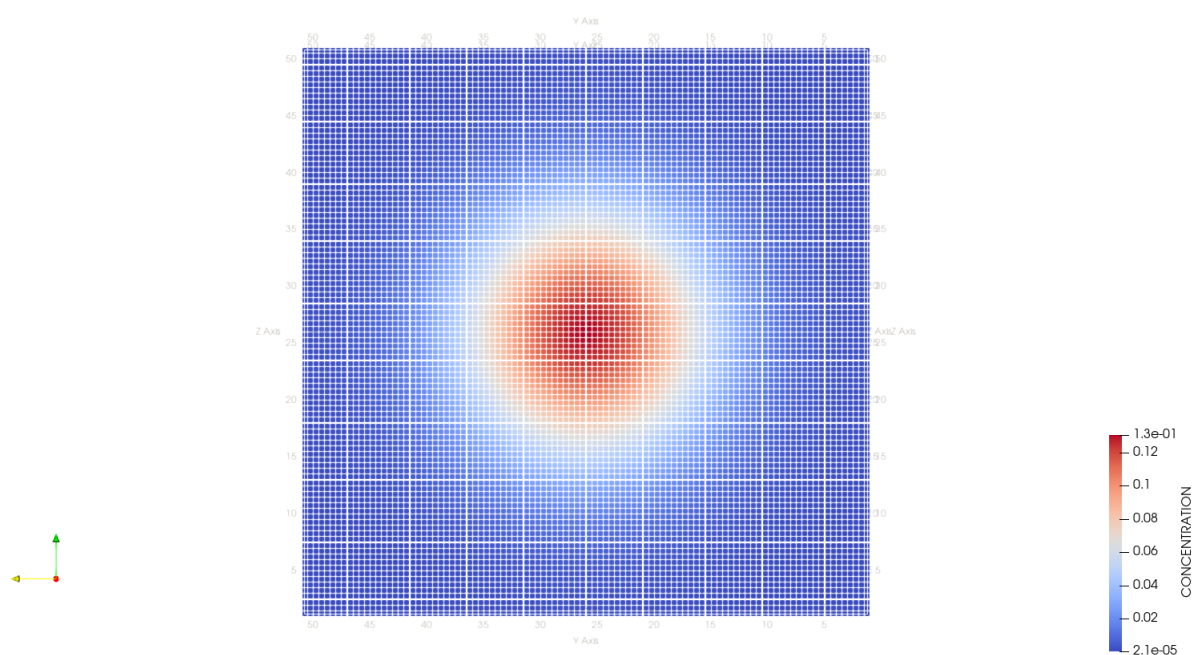


FIGURE 10 – Coupe centrale finale du domaine avec dépôt instantané

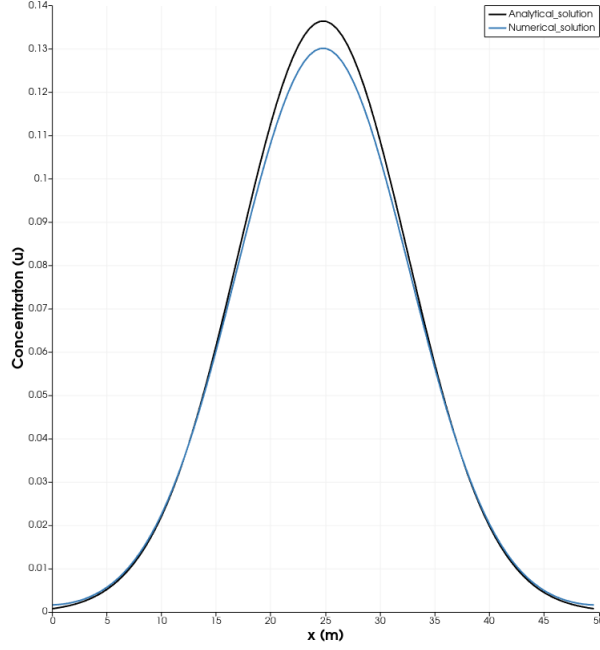


FIGURE 11 – Comparaison entre la solution analytique et numérique dans le cas test gaussien

2.3 Courbe d'erreur et variantes SPH corrigées

La formule (70) p.9 fait apparaître un terme en $\mathcal{O}(h^2)$ qui est un terme d'erreur dans l'approximation de $\text{div}(k\nabla T)$ par une intégrale. Cela indique qu'asymptotiquement, l'erreur commise entre cette intégrale et le terme qu'on cherche à approximer se comporte comme une puissance 2 de h . Notamment, lorsque l'on divise la taille de lissage h par 2, l'erreur globale est censée être divisée par 4. On s'est donc proposé de retrouver ce résultat numériquement et on utilise pour cela la formule suivante

$$\|C - C_n\|^2 = \frac{1}{N_p} \sum_{i,j,k=1}^{N_p} (C(t, x_i, y_j, z_k) - C_n(x_i, y_j, z_k))^2 \quad (123)$$

où C est la solution analytique, C_n la solution numérique calculée et N_p le nombre de points matériels. Les mesures ont été faites sur le cas test gaussien et les résultats sont présentés à la figure 12 où on voit que pour une taille de lissage inférieure à 2, le comportement de l'erreur commise suit $\mathcal{O}(h^2)$ en échelle logarithmique.

Après l'exécution par exemple du cas test gaussien, on s'est rendu compte que les densités finales qui avaient été fixées initialement à 1 000 kg/m³ pour tous les points matériels se retrouvent comprises, à la fin de la simulation entre [606.51, 999.972]. Ceci arrive car moins de particules rentrent en jeu au bord du domaine pour le calcul d'une somme SPH étant donné que le support du noyau diminue. On propose de remplacer l'évaluation du noyau W proche du bord dans (18) par

$$\widetilde{W}(r_a - r_b, h) = \frac{W(r_a - r_b, h)}{\sum_b W(r_a - r_b, h) \frac{m_b}{\rho_b}} \quad (124)$$

et puisque la diminution du support existe aussi dans les dérivées partielles du noyau, on peut dériver la relation précédente pour obtenir une correction du gradient de W qui est la suivante

$$\nabla \widetilde{W}_{ab} = \frac{\nabla W_{ab} \left(\sum_b W_{ab} \frac{m_b}{\rho_b} \right) - W_{ab} \left(\sum_b \nabla W_{ab} \frac{m_b}{\rho_b} \right)}{\left(\sum_b W_{ab} \frac{m_b}{\rho_b} \right)^2} \quad (125)$$

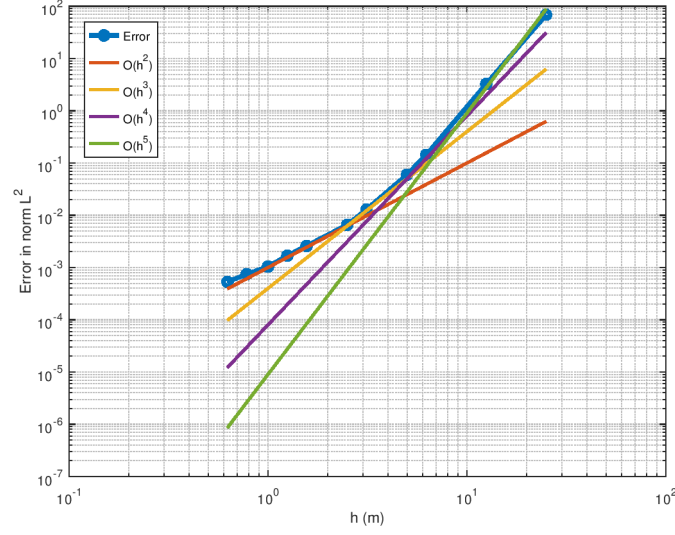


FIGURE 12 – Courbe d'erreur en norme L^2 en la taille de lissage

Les densités obtenues sont quasiment égales à $1\,000\text{ kg/m}^3$ mais l'implémentation de la formule (125) dégrade manifestement le profil de concentration dans le cas test gaussien comme on le voit à la figure 13 p.20. L'écart au centre est bien plus important mais l'erreur en norme L^2 est légèrement plus faible. Augmenter le nombre de particules n'améliore pas la situation. Une hypothèse serait que l'efficacité de la correction proposée dans (125) dépend du type de profil analytique de la concentration. S'il est de type constant ou affine alors elle sera efficace, rien n'est garanti pour les autres types de profil.

Conclusion

La première partie de ce document, qui était un travail préliminaire, nous a permis de mieux comprendre les outils mis en jeu dans la résolution de l'équation de diffusion par la méthode SPH. Nous avons ainsi mis la lumière sur la technique non dévoilée, instaurant ainsi une confiance. Si les résultats de simulation ont été satisfaisants pour des types de profils constants et affines, qui sont finalement assez simples, il reste néanmoins à faire des vérifications supplémentaires dans le cas gaussien. L'idée serait de refaire un travail sur le pas de temps afin de comprendre l'écart observé en fin de capture. Tout ceci permettrait ensuite de poursuivre l'ambition initiale de ce stage qui était de modéliser le séchage d'un milieu dans un premier temps composé d'un gaz et d'un liquide.

3 Annexe de démonstrations

3.1 Formules (61) et (62) p.8

On commence par écrire (22) p.5 pour A une quantité vectorielle en dimension supérieure

$$\text{div}(A) = \frac{1}{\Phi}(\text{div}(\Phi A) - A \cdot \nabla \Phi) \quad (126)$$

Puis on donne une approximation SPH de chaque terme dans la parenthèse. Par application de (11) p.3 au terme $\text{div}(\Phi A)$ on a

$$\text{div}(\Phi A)_I = \int \text{div}(\Phi A) W(r - r', h) dr' \quad (127)$$

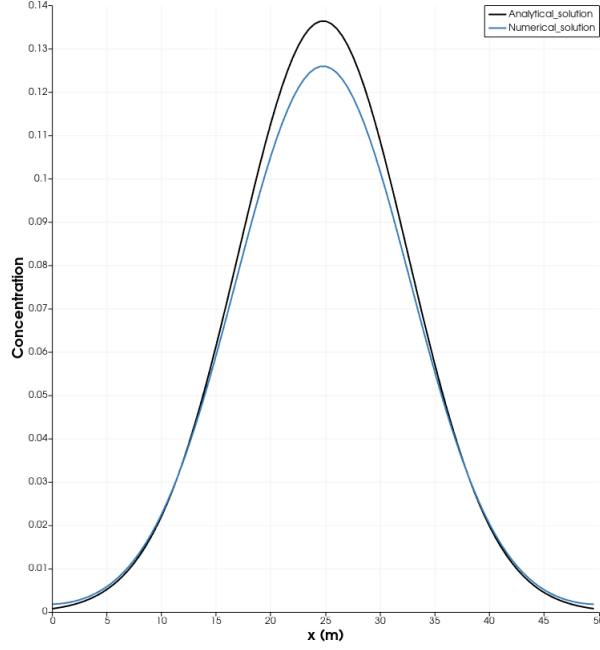


FIGURE 13 – Comparaison des solutions dans le cas test gaussien avec correction du gradient

Or, par l'identité de la divergence on a

$$\operatorname{div}(\Phi A W(r - r', h)) = \operatorname{div}(\Phi A) W(r - r', h) + \Phi A \cdot \nabla W(r - r', h) \quad (128)$$

donc

$$\operatorname{div}(\Phi A) W(r - r', h) = \operatorname{div}(\Phi A W(r - r', h)) - \Phi A \cdot \nabla W(r - r', h) \quad (129)$$

Alors

$$\operatorname{div}(\Phi A)_I = \int \operatorname{div}(\Phi A W(r - r', h)) \, dr' - \int \Phi A \cdot \nabla W(r - r', h) \, dr' \quad (130)$$

Et par le théorème de la divergence on a

$$\int \operatorname{div}(\Phi A W(r - r', h)) \, dr' = \int \Phi A W(r - r', h) n \, dS \quad (131)$$

où n est un vecteur unitaire normal sortant à la surface d'intégration et puisque W est une fonction à support compact on a

$$\int \Phi A W(r - r', h) n \, dS = 0 \quad (132)$$

Donc finalement

$$\operatorname{div}(\Phi A)_I = - \int \Phi A \cdot \nabla W(r - r', h) \, dr' = - \int \frac{\Phi}{\rho(r')} A(r') \cdot \nabla W(r - r', h) \rho(r') \, dr' \quad (133)$$

et sa forme SPH est la suivante

$$\operatorname{div}(\Phi A)_S(r_a) = - \sum_b \frac{m_b \Phi_b}{\rho_b} A_b \cdot \nabla W_{ab} \quad (134)$$

Par un raisonnement analogue, on montre que

$$(A \cdot \nabla \Phi)_I = A \cdot \int \nabla \Phi W(r - r', h) \, dr' = -A \cdot \int \Phi \nabla W(r - r', h) \, dr' \quad (135)$$

$$= -A \cdot \int \frac{\Phi}{\rho(r')} \nabla W(r - r', h) \rho(r') \, dr' \quad (136)$$

qui sous forme SPH donne

$$(A \cdot \nabla \Phi)_S(r_a) = - \sum_b \frac{m_b \Phi_b}{\rho_b} A_a \cdot \nabla W_{ab} \quad (137)$$

On regroupe maintenant les expressions pour avoir que

$$\operatorname{div}(A)_I = - \frac{1}{\Phi} \int \frac{\Phi}{\rho(r')} A(r') \cdot \nabla W(r - r', h) \rho(r') \, dr' + \frac{1}{\Phi} A \cdot \int \frac{\Phi}{\rho(r')} \nabla W(r - r', h) \rho(r') \, dr' \quad (138)$$

$$= \frac{1}{\Phi} \int \frac{1}{\rho(r')} (\Phi A(r) - \Phi A(r')) \cdot \nabla W(r - r', h) \rho(r') \, dr' \quad (139)$$

et sous forme SPH

$$\operatorname{div}(A)_S(r_a) = \frac{1}{\Phi_a} \sum_b \frac{m_b \Phi_b}{\rho_b} (A_a - A_b) \cdot \nabla W_{ab} \quad (140)$$

Enfin, on en déduit que

$$\left(\frac{d\rho}{dt} \right)_I = - \frac{\rho}{\Phi} \int \frac{1}{\rho(r')} (\Phi A(r) - \Phi A(r')) \cdot \nabla W(r - r', h) \rho(r') \, dr' \quad (141)$$

et sous forme SPH

$$\left(\frac{d\rho}{dt} \right)_S(r_a) = - \frac{\rho_a}{\Phi_a} \sum_b \frac{m_b \Phi_b}{\rho_b} (A_a - A_b) \cdot \nabla W_{ab} \quad (142)$$

Lorsqu'on considère A comme étant une vitesse et $\Phi = 1$ on obtient bien la formule (61) p.8 à savoir

$$\frac{d\rho}{dt}(r_a) = \rho_a \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} (v_b - v_a) \cdot \nabla W_{ab} \quad (143)$$

Et si $\Phi = \rho$ on obtient bien la formule (62) p.8

$$\frac{d\rho}{dt}(r_a) = \sum_b m_b (v_b - v_a) \cdot \nabla W_{ab} \quad (144)$$

3.2 Formule (67) p.9

Par la formule de Taylor-Young

$$T(x + h) = T(x) + h \frac{dT}{dx}(x) + \frac{h^2}{2} \frac{d^2T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}(h^3) \quad (145)$$

On pose $h = x' - x$ et on a $T(x + h) = T(x + x' - x) = T(x')$ donc

$$T(x') = T(x) + (x' - x) \frac{dT}{dx}(x) + \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{d^2T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^3) \quad (146)$$

$$T(x') - T(x) = (x' - x) \frac{dT}{dx}(x) + \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{d^2T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^3) \quad (147)$$

et

$$\frac{T(x') - T(x)}{x' - x} = \frac{dT}{dx}(x) + \frac{(x' - x)}{2} \frac{d^2T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^2) \quad (148)$$

On multiplie l'égalité précédente par $\frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h)$ et on a

$$\begin{aligned} \left(\frac{T(x') - T(x)}{x' - x} \right) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) &= \frac{dT}{dx}(x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) \\ &+ \frac{(x' - x)}{2} \frac{d^2 T}{dx^2}(x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) + \mathcal{O}((x' - x)^2) \end{aligned} \quad (149)$$

On majore $\mathcal{O}((x' - x)^2)$ par $\mathcal{O}(h^2)$ puis on intègre à gauche et à droite à l'intérieur du domaine.

$$I = \int \left(\frac{T(x') - T(x)}{x' - x} \right) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' \quad (150)$$

$$= \int \frac{dT}{dx}(x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' + \int \frac{(x' - x)}{2} \frac{d^2 T}{dx^2}(x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' + \mathcal{O}(h^2) \quad (151)$$

On calcule terme par terme.

$$I_1 = \int \frac{dT}{dx}(x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = \frac{dT}{dx}(x) \int \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' \quad (152)$$

On a pu sortir $\frac{dT}{dx}(x)$ de l'intégrale car cette quantité est indépendante de x' . De plus, W étant à support compact, on a par le théorème de la divergence

$$\int \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = 0 \quad (153)$$

donc

$$I_1 = 0 \quad (154)$$

Ensuite

$$I_2 = \int \frac{(x' - x)}{2} \frac{d^2 T}{dx^2}(x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = \frac{1}{2} \frac{d^2 T}{dx^2}(x) \int (x' - x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' \quad (155)$$

Puis on réalise une intégration par parties, on a

$$(x' - x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) = \frac{\partial}{\partial x}[(x' - x)W(x - x', h)] - \frac{\partial}{\partial x}(x' - x)W(x - x', h) \quad (156)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}[(x' - x)W(x - x', h)] + W(x - x', h) \quad (157)$$

On a

$$I_2 = \frac{1}{2} \frac{d^2 T}{dx^2}(x) \left(\int \frac{\partial}{\partial x}[(x' - x)W(x - x', h)] dx' + \int W(x - x', h) dx' \right) \quad (158)$$

Or W est à support compact et vérifie (12). Par le théorème de la divergence

$$\int \frac{\partial}{\partial x}[(x' - x)W(x - x', h)] dx' = 0 \quad (159)$$

et par conséquent

$$I_2 = \frac{1}{2} \frac{d^2 T}{dx^2}(x) \int W(x - x', h) dx' \quad (160)$$

Finalement

$$I = I_1 + I_2 = \frac{1}{2} \frac{d^2 T}{dx^2}(x) \int W(x - x', h) dx' + \mathcal{O}(h^2) \quad (161)$$

ou encore

$$\int \left(\frac{T(x') - T(x)}{x' - x} \right) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = \frac{1}{2} \frac{d^2 T}{dx^2}(x) \int W(x - x', h) dx' + \mathcal{O}(h^2) \quad (162)$$

3.3 Formule (68) p.9

D'une part, par un développement de Taylor-Young on a

$$k(x') = k(x) + (x' - x) \frac{dk}{dx}(x) + \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{d^2k}{dx^2}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^3) \quad (163)$$

et

$$k(x') + k(x) = 2k(x) + (x' - x) \frac{dk}{dx}(x) + \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{d^2k}{dx^2}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^3) \quad (164)$$

D'autre part on a

$$T(x') = T(x) + (x' - x) \frac{dT}{dx}(x) + \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{d^2T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^3) \quad (165)$$

$$-T(x') = -T(x) + (x - x') \frac{dT}{dx}(x) - \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{d^2T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^3) \quad (166)$$

et

$$T(x) - T(x') = (x - x') \frac{dT}{dx}(x) - \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{d^2T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^3) \quad (167)$$

On pose $E_1 = (k(x) + k(x'))(T(x) - T(x'))$ et on calcule ce produit.

$$\begin{aligned} E_1 &= 2k(x)(x - x') \frac{dT}{dx}(x) - \frac{2k(x)}{2} (x' - x)^2 \frac{d^2T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^3) \\ &\quad + (x' - x) \frac{dk}{dx}(x)(x - x') \frac{dT}{dx}(x) - \frac{(x' - x)}{2} \frac{dk}{dx}(x)(x' - x)^2 \frac{d^2T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^4) \\ &\quad + \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{d^2k}{dx^2}(x)(x - x') \frac{dT}{dx}(x) - \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{d^2k}{dx^2}(x) \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{d^2T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^5) \\ &\quad + \mathcal{O}((x' - x)^4) + \mathcal{O}((x' - x)^5) + \mathcal{O}((x' - x)^6) \end{aligned} \quad (168)$$

Après simplification, on a

$$\begin{aligned} E_1 &= 2(x - x')k(x) \frac{dT}{dx}(x) - (x' - x)^2 k(x) \frac{d^2T}{dx^2}(x) - (x' - x)^2 \frac{dk}{dx}(x) \frac{dT}{dx}(x) \\ &\quad - \frac{(x' - x)^3}{2} \frac{dk}{dx}(x) \frac{d^2T}{dx^2}(x) - \frac{(x' - x)^3}{2} \frac{d^2k}{dx^2}(x) \frac{dT}{dx}(x) - \frac{(x' - x)^4}{4} \frac{d^2k}{dx^2}(x) \frac{d^2T}{dx^2}(x) \\ &\quad + \mathcal{O}((x' - x)^3) \end{aligned} \quad (169)$$

On divise E_1 par $x - x'$ et on pose $E_2 = E_1/(x - x')$

$$\begin{aligned} E_2 &= 2k(x) \frac{dT}{dx}(x) + (x' - x)k(x) \frac{d^2T}{dx^2}(x) + (x' - x) \frac{dk}{dx}(x) \frac{dT}{dx}(x) + \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{dk}{dx}(x) \frac{d^2T}{dx^2}(x) \\ &\quad + \frac{(x' - x)^2}{2} \frac{d^2k}{dx^2}(x) \frac{dT}{dx}(x) + \frac{(x' - x)^3}{4} \frac{d^2k}{dx^2}(x) \frac{d^2T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^2) \end{aligned} \quad (170)$$

On néglige les termes d'ordre supérieur ou égal à 2 pour avoir que

$$E_2 = 2k(x) \frac{dT}{dx}(x) + (x' - x)k(x) \frac{d^2T}{dx^2}(x) + (x' - x) \frac{dk}{dx}(x) \frac{dT}{dx}(x) + \mathcal{O}((x' - x)^2) \quad (171)$$

Ensuite, on majore $\mathcal{O}((x' - x)^2)$ par $\mathcal{O}(h^2)$, on multiplie I_2 par $\frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h)$ et on intègre terme par terme.

$$I_1 = \int 2k(x) \frac{dT}{dx}(x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = 2k(x) \frac{dT}{dx}(x) \int \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = 0 \quad (172)$$

$$I_2 = \int (x' - x)k(x) \frac{d^2T}{dx^2}(x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = k(x) \frac{d^2T}{dx^2}(x) \int (x' - x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' \quad (173)$$

et

$$\int (x' - x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = \int \frac{\partial}{\partial x}[(x' - x)W(x - x', h)] dx' - \int \frac{\partial}{\partial x}(x' - x)W(x - x', h) dx' \quad (174)$$

On a d'une part que

$$\int \frac{\partial}{\partial x}[(x' - x)W(x - x', h)] dx' = 0 \quad (175)$$

et d'autre part que

$$- \int \frac{\partial}{\partial x}(x' - x)W(x - x', h) dx' = \int W(x - x', h) dx' = 1 \quad (176)$$

Donc

$$I_2 = k(x) \frac{d^2T}{dx^2}(x) \quad (177)$$

$$I_3 = \int (x' - x) \frac{dk}{dx}(x) \frac{dT}{dx}(x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = \frac{dk}{dx}(x) \frac{dT}{dx}(x) \int (x' - x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' \quad (178)$$

et puisque

$$\int (x' - x) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = 1 \quad (179)$$

On a alors

$$I_3 = \frac{dk}{dx}(x) \frac{dT}{dx}(x) \quad (180)$$

Finalement, on a bien montré que

$$I = I_1 + I_2 + I_3 = \frac{dk}{dx}(x) \frac{dT}{dx}(x) + k(x) \frac{d^2T}{dx^2}(x) + \mathcal{O}(h^2) \quad (181)$$

ou encore

$$\int \left(\frac{k(x) + k(x')}{x - x'} \right) (T(x) - T(x')) \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = \frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) (x) + \mathcal{O}(h^2) \quad (182)$$

3.4 Formule (70) p.9

On considère les fonctions suivantes (cf. [8])

$$W(r) = \frac{105}{16\pi h^3} \left(1 + \frac{3r}{h} \right) \left(1 - \frac{r}{h} \right)^3 \quad (183)$$

$$\tilde{F}(r) = \frac{315}{4\pi h^5} \left(1 - \frac{r}{h} \right)^2 \quad (184)$$

et

$$F(r) = -\tilde{F}(r) \quad (185)$$

Pour montrer (70) on doit montrer (78) p.9, (80) p.10, et (83) p.10. On pose $h = b - a$ et on a

$$f(b) = f(a) + \sum_{i=1}^n (b_i - a_i) \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n (b_i - a_i)(b_j - a_j) \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(a) + o(\|b - a\|^2) \quad (186)$$

et sous forme vectorielle

$$f(b) = f(a) + \nabla f(a) \cdot (b - a) + \frac{1}{2}H(f, a)(b - a) \cdot (b - a) + o(\|b - a\|^2) \quad (187)$$

mais dans toute la suite, on utilisera la forme

$$f(b) = f(a) + \nabla f(a) \cdot (b - a) + \frac{1}{2}H(f, a)(b - a) \cdot (b - a) + \mathcal{O}(\|b - a\|^3) \quad (188)$$

On pose $v = b - a$ et on applique le développement (188) pour les fonctions k et T

$$T(b) = T(a) + \nabla T(a) \cdot v + \frac{1}{2}H(T, a)v \cdot v + \mathcal{O}(\|v\|^3) \quad (189)$$

et

$$k(b) = k(a) + \nabla k(a) \cdot v + \frac{1}{2}H(k, a)v \cdot v + \mathcal{O}(\|v\|^3) \quad (190)$$

On en déduit que

$$T(a) - T(b) = -\nabla T(a) \cdot v + \frac{1}{2}H(T, a)v \cdot v + \mathcal{O}(\|v\|^3) \quad (191)$$

et

$$k(a) + k(b) = 2k(a) + \nabla k(a) \cdot v + \frac{1}{2}H(k, a)v \cdot v + \mathcal{O}(\|v\|^3) \quad (192)$$

puis on calcule E_1 le produit de ces deux développements.

$$\begin{aligned} E_1 = & -2k(a)\nabla T(a) \cdot v - k(a)H(T, a)v \cdot v + 2k(a)\mathcal{O}(\|v\|^3) - (\nabla k(a) \cdot v)(\nabla T(a) \cdot v) \\ & - \frac{1}{2}(\nabla k(a) \cdot v)(H(T, a)v \cdot v) + (\nabla k(a) \cdot v)\mathcal{O}(\|v\|^3) - \frac{1}{2}(H(k, a)v \cdot v)(\nabla T(a) \cdot v) \\ & - \frac{1}{4}(H(k, a)v \cdot v)(H(T, a)v \cdot v) + \frac{1}{2}(H(k, a)v \cdot v)\mathcal{O}(\|v\|^3) - (\nabla T(a) \cdot v)\mathcal{O}(\|v\|^3) \\ & - \frac{1}{2}(H(T, a)v \cdot v)\mathcal{O}(\|v\|^3) + \mathcal{O}(\|v\|^6) \end{aligned} \quad (193)$$

et après négligence des termes d'ordre supérieur ou égal à 3 on a

$$E_1 = -2k(a)\nabla T(a) \cdot v - k(a)H(T, a)v \cdot v - (\nabla k(a) \cdot v)(\nabla T(a) \cdot v) + \mathcal{O}(\|v\|^3) \quad (194)$$

3.4.1 Formule (78) p.9

Soit maintenant $v = (v_1, v_2)^t$. On montre ici l'expression (78) en traitant chaque terme de l'égalité (194) successivement. Premièrement, on a

$$\nabla T(a) \cdot v = \frac{\partial T}{\partial x}(a)v_1 + \frac{\partial T}{\partial y}(a)v_2 \quad (195)$$

$$I_1 = - \int \frac{v_1^2}{\|v\|^2} 2k(a)(\nabla T(a) \cdot v)F(v) dv \quad (196)$$

$$= -2k(a)\frac{\partial T}{\partial x}(a) \int \frac{v_1^3}{\|v\|^2}F(v) dv - 2k(a)\frac{\partial T}{\partial y}(a) \int \frac{v_1^2v_2}{\|v\|^2}F(v) dv \quad (197)$$

Par symétrie et isotropie de F on a

$$\int \frac{v_1^3}{\|v\|^2}F(v) dv = \int \frac{v_1^2v_2}{\|v\|^2}F(v) dv = 0 \quad (198)$$

donc

$$I_2 = 0 \quad (199)$$

Deuxièmement, on a

$$E_2 = (\nabla k(a) \cdot v)(\nabla T(a) \cdot v) = \left(\frac{\partial k}{\partial x}(a)v_1 + \frac{\partial k}{\partial y}(a)v_2 \right) \left(\frac{\partial T}{\partial x}(a)v_1 + \frac{\partial T}{\partial y}(a)v_2 \right) \quad (200)$$

$$= \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a)v_1^2 + \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a)v_1v_2 + \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a)v_1v_2 + \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a)v_2^2 \quad (201)$$

On donne ici, sans démonstration, des égalités vérifiées par la fonction F définie par (185) p.24 en dimension 2.

$$\int \frac{v_1^4}{\|v\|^2} F(v) dv = -\frac{3}{4} \quad (202)$$

$$\int \frac{v_1^2 v_2^2}{\|v\|^2} F(v) dv = -\frac{1}{4} \quad (203)$$

Puis on calcule

$$I_2 = \int E_2 \frac{v_1^2}{\|v\|^2} F(v) dv \quad (204)$$

et on a

$$I_3 = \int \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \frac{v_1^4}{\|v\|^2} F(v) dv = \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \int \frac{v_1^4}{\|v\|^2} F(v) dv = -\frac{3}{4} \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \quad (205)$$

$$I_4 = \int \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \frac{v_1^3 v_2}{\|v\|^2} F(v) dv = \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \int \frac{v_1^3 v_2}{\|v\|^2} F(v) dv = 0 \quad (206)$$

$$I_5 = \int \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \frac{v_1^3 v_2}{\|v\|^2} F(v) dv = \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \int \frac{v_1^3 v_2}{\|v\|^2} F(v) dv = 0 \quad (207)$$

$$I_6 = \int \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \frac{v_1^2 v_2^2}{\|v\|^2} F(v) dv = \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \int \frac{v_1^2 v_2^2}{\|v\|^2} F(v) dv = -\frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \quad (208)$$

Donc

$$I_2 = I_3 + I_4 + I_5 + I_6 = -\frac{3}{4} \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) - \frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \quad (209)$$

Troisièmement, on a

$$H(T, a)v = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a) & \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a) \\ \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a) & \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a)v_1 + \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a)v_2 \\ \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a)v_1 + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a)v_2 \end{pmatrix} \quad (210)$$

$$E_3 = k(a)H(T, a)v \cdot v = k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a)v_1^2 + 2k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a)v_1v_2 + k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a)v_2^2 \quad (211)$$

et

$$I_7 = \int E_3 \frac{v_1^2}{\|v\|} F(v) dv \quad (212)$$

Calcul des intégrales terme par terme.

$$I_8 = \int k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a) \frac{v_1^4}{\|v\|^2} F(v) dv = k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a) \int \frac{v_1^4}{\|v\|^2} F(v) dv = -\frac{3}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a) \quad (213)$$

$$I_9 = \int 2k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a) \frac{v_1^3 v_2}{\|v\|^2} F(v) dv = 2k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a) \int \frac{v_1^3 v_2}{\|v\|^2} F(v) dv = 0 \quad (214)$$

$$I_{10} = \int k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a) \frac{v_1^2 v_2^2}{||v||^2} F(v) dv = k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a) \int \frac{v_1^2 v_2^2}{||v||^2} F(v) dv = -\frac{1}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a) \quad (215)$$

Donc

$$I_7 = I_8 + I_9 + I_{10} = -\frac{3}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a) - \frac{1}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a) \quad (216)$$

Et finalement

$$\int E_1 \frac{v_1^2}{||v||^2} F(v) dv = \frac{3}{4} \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) + \frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) + \frac{3}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a) + \frac{1}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a) + \mathcal{O}(h^2) \quad (217)$$

On a bien montré (78) p.9 et on fait de même pour (80) p.10.

3.4.2 Formule (80) p.10

$$I_1 = - \int \frac{v_2^2}{||v||^2} 2k(a) (\nabla T(a) \cdot v) F(v) dv \quad (218)$$

$$= -2k(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \int \frac{v_1 v_2^2}{||v||^2} F(v) dv - 2k(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \int \frac{v_2^3}{||v||^2} F(v) dv = 0 \quad (219)$$

$$I_2 = \int E_2 \frac{v_2^2}{||v||^2} F(v) dv \quad (220)$$

$$I_3 = \int \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \frac{v_1^2 v_2^2}{||v||^2} F(v) dv = \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \int \frac{v_1^2 v_2^2}{||v||^2} F(v) dv = -\frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \quad (221)$$

$$I_4 = \int \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \frac{v_1 v_2^3}{||v||^2} F(v) dv = 0 \quad (222)$$

$$I_5 = \int \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \frac{v_1 v_2^3}{||v||^2} F(v) dv = 0 \quad (223)$$

$$I_6 = \int \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \frac{v_2^4}{||v||^2} F(v) dv = \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \int \frac{v_2^4}{||v||^2} F(v) dv = -\frac{3}{4} \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \quad (224)$$

$$I_2 = I_3 + I_4 + I_5 + I_6 = -\frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) - \frac{3}{4} \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \quad (225)$$

$$I_7 = \int E_3 \frac{v_2^2}{||v||} F(v) dv \quad (226)$$

$$I_8 = \int k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a) \frac{v_1^2 v_2^2}{||v||^2} F(v) dv = k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a) \int \frac{v_1^2 v_2^2}{||v||^2} F(v) dv = -\frac{1}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a) \quad (227)$$

$$I_9 = \int 2k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a) \frac{v_1 v_2^3}{||v||^2} F(v) dv = 0 \quad (228)$$

$$I_{10} = \int k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a) \frac{v_2^4}{||v||^2} F(v) dv = k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a) \int \frac{v_2^4}{||v||^2} F(v) dv = -\frac{3}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a) \quad (229)$$

$$I_7 = I_8 + I_9 + I_{10} = -\frac{1}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a) - \frac{3}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a) \quad (230)$$

Et finalement

$$\int E_1 \frac{v_2^2}{||v||^2} F(v) dv = \frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) + \frac{3}{4} \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) + \frac{1}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a) + \frac{3}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a) + \mathcal{O}(h^2) \quad (231)$$

On a bien montré (80) p.10 et on fait de même pour (82) p.10.

3.4.3 Formule (82) p.10

$$I_1 = - \int \frac{v_1 v_2}{\|v\|^2} 2k(a)(\nabla T(a) \cdot v) F(v) dv \quad (232)$$

$$= -2k(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \int \frac{v_1^2 v_2}{\|v\|^2} F(v) dv - 2k(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \int \frac{v_1 v_2^2}{\|v\|^2} F(v) dv = 0 \quad (233)$$

$$I_2 = \int E_2 \frac{v_1 v_2}{\|v\|^2} F(v) dv \quad (234)$$

$$I_3 = \int \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \frac{v_1^3 v_2}{\|v\|^2} F(v) dv = 0 \quad (235)$$

$$I_4 = \int \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \frac{v_1^2 v_2^2}{\|v\|^2} F(v) dv = \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \int \frac{v_1^2 v_2^2}{\|v\|^2} F(v) dv = -\frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \quad (236)$$

$$I_5 = \int \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \frac{v_1^2 v_2^2}{\|v\|^2} F(v) dv = \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \int \frac{v_1^2 v_2^2}{\|v\|^2} F(v) dv = -\frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \quad (237)$$

$$I_6 = \int \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) \frac{v_1 v_2^3}{\|v\|^2} F(v) dv = 0 \quad (238)$$

$$I_2 = I_3 + I_4 + I_5 + I_6 = -\frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) - \frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) \quad (239)$$

$$I_7 = \int E_3 \frac{v_1 v_2}{\|v\|} F(v) dv \quad (240)$$

$$I_8 = \int k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(a) \frac{v_1^3 v_2}{\|v\|^2} F(v) dv = 0 \quad (241)$$

$$I_9 = \int 2k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a) \frac{v_1^2 v_2^2}{\|v\|^2} F(v) dv = 2k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a) \int \frac{v_1^2 v_2^2}{\|v\|^2} F(v) dv = \frac{2}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a) \quad (242)$$

$$I_{10} = \int k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(a) \frac{v_1 v_2^3}{\|v\|^2} F(v) dv = 0 \quad (243)$$

$$I_7 = I_8 + I_9 + I_{10} = -\frac{2}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a) \quad (244)$$

Et finalement

$$\int E_1 \frac{v_1 v_2}{\|v\|^2} F(v) dv = \frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial x}(a) \frac{\partial T}{\partial y}(a) + \frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial y}(a) \frac{\partial T}{\partial x}(a) + \frac{2}{4} k(a) \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}(a) + \mathcal{O}(h^2) \quad (245)$$

On a bien montré (82) p.10.

3.4.4 Formule (83) p.10

$$\begin{aligned} J_{xx}(r) + J_{yy}(r) &= \int \frac{\Delta x \Delta x}{\Delta r^2} (k(r) + k(r')) (T(r) - T(r')) F(r - r', h) dr' \\ &\quad + \int \frac{\Delta y \Delta y}{\Delta r^2} (k(r) + k(r')) (T(r) - T(r')) F(r - r', h) dr' \end{aligned} \quad (246)$$

Or

$$\frac{\Delta x \Delta x}{\Delta r^2} + \frac{\Delta y \Delta y}{\Delta r^2} = \frac{(x - x')^2}{\Delta r^2} + \frac{(y - y')^2}{\Delta r^2} = \frac{\Delta r^2}{\Delta r^2} = 1 \quad (247)$$

Donc

$$J_{xx}(r) + J_{yy}(r) = \int (k(r) + k(r'))(T(r) - T(r'))F(r - r', h) dr' \quad (248)$$

D'autre part,

$$\begin{aligned} J_{xx} + J_{yy} = k \left(\frac{3}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{3}{4} \frac{\partial k}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} \\ + k \left(\frac{3}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) + \frac{3}{4} \frac{\partial k}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{1}{4} \frac{\partial k}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} \end{aligned} \quad (249)$$

$$J_{xx} + J_{yy} = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial k}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial k}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} = k \Delta T + \nabla k \cdot \nabla T = \operatorname{div}(k(r) \nabla T(r)) + \mathcal{O}(h^2) \quad (250)$$

et on montre par la même occasion que

$$\int (k(r) + k(r'))(T(r) - T(r'))F(r - r') dr' = \operatorname{div}(k(r) \nabla T(r)) + \mathcal{O}(h^2) \quad (251)$$

Références

- [1] J.J. Monaghan, Smoothed particle hydrodynamics, 2005 *Rep. Prog. Phys.* 68 1703
- [2] J.J. Monaghan, Smoothed particle hydrodynamics, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* 1992.30 :543-74
- [3] Carlos Alberto Dutra Fraga Filho, Smoothed Particle Hydrodynamics, Fundamentals and Basic Applications in Continuum Mechanics, Springer, 2019
- [4] P.W. Cleary, J.J. Monaghan, Conduction Modelling Using Smoothed Particle Hydrodynamics, *Journal of Computational Physics* 148, 227–264 (1999)
- [5] L. Brookshaw, Solving the Heat Diffusion Equation in SPH, 1994
- [6] L. Brookshaw, A Method of Calculating Radiative Heat Diffusion in Particle Simulations, *Proc.ASA* 6(2) 1985
- [7] F. Aristodemo, I. Federico, P. Veltri, A. Panizzo, Two-phase SPH modelling of advective diffusion processes, *Environ Fluid Mech* (2010) 10 :451–470, Springer
- [8] P. Espanol, M. Revenga, Smoothed dissipative particle dynamics, *Physical Review E* 67, 026705 (2003)
- [9] A. M. Tartakovsky, N. Trask, K. Pan, B. Jones, W. Pan, J. R. Williams, Smoothed particle hydrodynamics and its applications for multiphase flow and reactive transport in porous media, *Comput Geosci* (2016) 20 :807–834, Springer
- [10] J. P. Morris, P. J. Fox, Y. Zhu, Modeling low Reynolds number incompressible flows using SPH, *J. Comput. Phys.* 136(1), 214– 226 (1997)