Raffinement du modèle

Les objectifs de cette séance sont :

- Gérer les conditions aux limites.
- Complexifier le modèle avec un autre type de force.
- Se questionner sur la robustesse du code.

1 Conditions aux limites

Dans la suite, nous allons utiliser plusieurs types de conditions aux limites, différentes selon les configurations et les bords du domaine :

- Réflexion : une paroi avec une condition à la limite réflexive implique que la particule rebondit de manière symétrique. Les composantes de la vitesse dans les directions perpendiculaires à la paroi changent de signe.
- Absorption : les particules disparaissent lorsqu'elles rencontrent la paroi.
- Périodique : cette condition s'applique par paire de paroi. Une particule qui rencontre une paroi symétrique est transportée, sans modification de trajectoire sur la paroi à l'opposée du domaine.

Question 1.
Implémenter chacune de ces conditions aux limites.

Question 2.
Tester chacune de ces conditions aux limites.

Conditions aux limites reflexives avec potentiel

Pour la condition à la limite reflexive, il est possible de la définir à l'aide d'un potentiel. Ainsi, dans le cas d'un domaine parallélépipédique, la condition réflexive sur un bord du domaine s'écrit, pour la particule i :

$$F_i = -24\varepsilon \frac{1}{2r} \left(\frac{\sigma}{2r}\right)^6 \cdot \left(1 - 2\left(\frac{\sigma}{2r}\right)^6\right)$$

avec r la distance au bord. Le rayon de coupure est dans ce potentiel $r_{cut} = 2^{1/6}\sigma$.

Question 3.
Implémenter ce potentiel pour les différents bords.

Question 4.
Comparer les résultats pour les deux implémentations des conditions aux limites réflexives.

2 Potentiel gravitationnel

Dans certaines applications, nous avons besoin d'ajouter des potentiels supplémentaires. Dans un premier temps, nous allons ajouter le potentiel gravitationnel.

Le potentiel gravitationnel est un champ uniforme qui s'applique à l'ensemble des particules et qui agit dans la direction verticale. Il intervient comme une force extérieure dans le modèle.

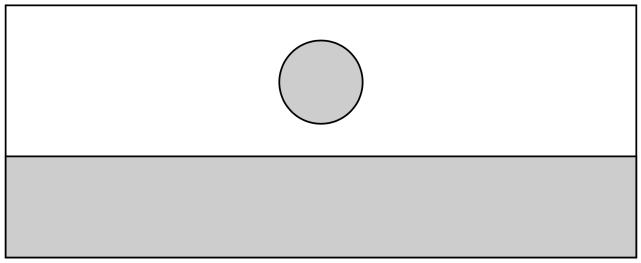
$$\mathbf{F}_i^G = (0, m_i \times G)$$

avec m_i la masse de la particule i et G l'intensité du champ gravitationnel.

Question 5.
Ajouter le champ gravitationnel dans le modèle.

3 Application : collision de deux objets

On souhaite simuler la chute d'une goutte dans une bassine remplie comme sur la figure.



3.1 Simulation de l'état initial

Dans un premier temps, il faut simuler la bassine. Les particules vont être compressées entre elles avec la gravité et des instabilités peuvent émerger. On commence par laisser tourner la simulation sans la goutte jusqu'à t_1 pour obtenir un fluide stationnaire. De plus, pour limiter les instabilités numériques, on souhaite limiter la divergence de la vitesse. Pour cela, on impose une énergie cinétique cible, c'est à dire que l'on souhaite garder sous contrôle la valeur

$$E_c = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} m_i \left(\mathbf{v}_i^n\right)^2 .$$

Si on choisit d'imposer une énergie cinétique limite au système, la vitesse doit être mise à l'échelle régulièrement avec le coefficient

$$\beta = \sqrt{\frac{E_c^D}{E_c}}.$$

On mettra à jour la vitesse toutes 1000 itérations en le multipliant par le facteur β

$$v_i^n = \beta v_i^n.$$

Une dose d'aléatoire peut être introduite pour les positions initiales des particules de la bassine.

3.2 Chute de la goutte

Dans un deuxième temps, on enlève la contrainte sur l'énergie cinétique, et la goutte commence à subir la gravité à partir de t_1



Ce qui permettra d'obtenir les résultats de simulation suivant, à l'instant t_2



et en fin de simulation t_3.



Afin de réaliser cette simulation, on considère les paramètres suivants :

$$\begin{array}{rlrl} L_1 & = 250, & L_2 & = 180, \\ \varepsilon & = 1, & \sigma & = 1, \\ m & = 1, & \mathbf{G} & = (0, -12), \\ N_1 & = 395, & N_2 & = 17227, \\ r_{cut} & = 2.5\sigma, & \delta t & = 0.0005 \\ E_c^D & = 0.005 * (N_1 + N_2) & & \end{array}$$

Question 6.
Réaliser la simulation sans la goutte jusqu'à $t_1 = 15$.

Question 7.
Ajouter la goutte puis réaliser la simulation jusqu'à $t_3 = 29.5$.

4 Gestion des erreurs

Question 8.
Mettre en place un mécanisme de gestion des erreurs.

Question 9.
Evaluer les forces et les faiblesses de ce mécanisme.