Éléments finis stabilisés pour le remplissage en fonderie à haut Reynolds

Guillaume François

▶ **To cite this version:**

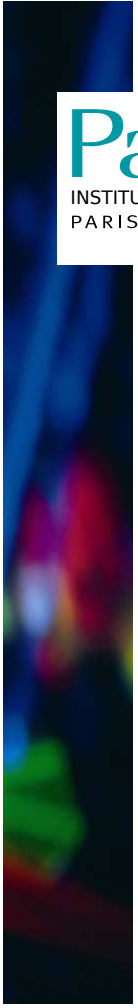
Guillaume François. Éléments finis stabilisés pour le remplissage en fonderie à haut Reynolds. Matériaux. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2011. Français. NNT : 2011ENMP0073 . pastel-00679698

HAL Id: pastel-00679698
https://pastel.hal.science/pastel-00679698

Submitted on 16 Mar 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.



ParisTech
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
PARIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY

MINES ParisTech

École doctorale n°364 : Sciences Fondamentales et Appliquées

Doctorat ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École nationale supérieure des mines de Paris

Spécialité « Mécanique Numérique »

présentée et soutenue publiquement par

Guillaume FRANÇOIS

le 14 décembre 2011

Éléments Finis Stabilisés
Pour le Remplissage en Fonderie à Haut Reynolds

Directeur de thèse : **Thierry COUPEZ**
Co-encadrement de la thèse : **Elie HACHEM**

Jury

Pr. Aziz HAMDOUNI, LEPTIAB, Université La Rochelle, La Rochelle	Rapporteur
Pr. Emmanuel MAITRE, ENSIMAG, INP, Grenoble	Rapporteur
Dr. Marc ANTONICELLI, Transvalor, Sophia Antipolis	Examinateur
Dr. Isabelle POITRAULT, Arcelor Mittal, Le Creusot	Examinateur
Pr. Thierry COUPEZ, CEMEF, MINES ParisTech, Sophia Antipolis	Directeur de thèse
Dr. Elie HACHEM, CEMEF, MINES ParisTech, Sophia Antipolis	Co-encadrant de thèse

MINES ParisTech
Centre de Mise En Forme des Matériaux - UMR CNRS 7635
Rue Claude DAUNESSE, BP 207, 06 904 Sophia Antipolis Cedex - FRANCE

T H È S E

Table des matières

1 Introduction générale **9**

1.1 Les enjeux de la simulation numérique 10

1.2 État de l'art 11

1.3 Objectifs de la thèse 11

Bibliographie **13**

I Écoulements multifluides turbulents **15**

2 Resolution éléments finis du problème de Navier Stokes **17**

2.1 Introduction 18

2.2 Formulation des équations de Navier Stokes incompressibles 18

2.2.1 Formulation forte 18

2.2.2 Formulation Variationnelle 20

2.2.2.1 Notations 20

2.2.2.2 Forme faible 20

2.3 Discrétisation et Résolution 21

2.3.1 Méthode de Galerkin 21

2.3.2 Méthode éléments finis stabilisés 22

2.3.2.1 Stabilisation bulle P1+/P1 22

2.3.2.2 Linéarisation du problème 23

Schémas temporels d'Euler 24

Linéarisation du terme d'advection 25
2.3.2.3 Formulation matricielle 27
2.3.3 Approche Variational-Multi-Scale (VMS) 28
2.3.3.1 Formulation des équations 28
2.3.3.2 Formulation matricielle 31
2.4 Applications numériques 33
2.5 Conclusions 36

Bibliographie **37**

3 Écoulements multifluides **39**
3.1 Introduction 40
3.2 Méthodes numériques pour le suivi d'interface 41
3.2.1 Méthodes de type front tracking 42
3.2.1.1 La méthode des marqueurs 42
3.2.1.2 La méthode de maillage mobile 42
3.2.2 Méthodes de type front capturing 43
3.2.2.1 Méthode Volume of Fluid 43
3.2.2.2 Méthode Level-Set 46
3.2.2.3 Méthode VoF-LS 46
3.2.3 Méthodes sans maillage 47
3.2.4 Capture/Suivi d'interface et interfaces complexes 47
3.2.5 Méthode Level Set 48
3.2.5.1 La fonction Level-Set 48
3.2.5.2 Résolution de l'équation de transport continue 50
Formulation forte 50
Formulation variationnelle 51
Formulation discrète 51
Stabilisation numérique 52

3.2.5.3 Réinitialisation - Equations de Hamilton Jacobi 54
3.2.5.4 Méthode Level Set locale à réinitialisation convective . 56
Fonction Level-Set 56
Reinitialisation convective 57
Implémentation numérique 58
3.3 Approche monolithique 59
3.3.1 Équations de Navier Stokes multifluide 59
3.3.1.1 Fonctions caractéristiques 59
3.3.1.2 Mélange de la masse volumique 62
3.3.1.3 Mélange de la viscosité dynamique 62
3.3.2 Prise en compte de la tension de surface 66
3.3.3 Pas de temps adaptatif 68
3.4 Application Numérique au remplissage 68
3.4.1 Instabilité de Rayleigh-Taylor 68
3.4.2 Écroulement de barrage dans une cavité 69
3.5 Conclusion 70

Bibliographie **75**

4 Résolution de la turbulence **79**
4.1 Introduction 80
4.2 Méthodes Reynolds Average Navier Stokes (RANS) 80
4.2.1 Introduction aux méthodes statistiques 80
4.2.2 Système pour les champs moyens 81
4.2.3 Conclusions 83
4.3 Large Eddy Simulations (L.E.S.) 84
4.3.1 Principe 84
4.3.2 Opérateurs de filtrage 84
4.3.3 Filtrage multi-phasique - Opérateur de filtrage massique 85

4.3.4 Écriture des équations filtrées 86
4.3.5 Évaluation des termes de sous maille 87
4.3.6 Modélisation des termes de sous maille 87
4.3.6.1 Viscosité turbulente 87
4.3.6.2 Modèle statique de Smagorinsky 88
4.3.6.3 Procédure dynamique de Germano 90
4.4 Applications Numériques 92
4.4.1 L'écroulement de barrage 92
4.4.2 Écroulement de barrage dans une cavité 93
4.4.3 Remplissage 3D 97
4.4.3.1 Introduction 97
4.4.3.2 Dispositif expérimental 98
4.4.3.3 Modèle numérique 100
4.4.3.4 Etude des différents paramètres de la turbulence . . . 100
Modèle statique de Smagorinsky 100
Modèle dynamique sans facteur d'échelle 102
Modèle dynamique avec facteur d'échelle 103
4.4.3.5 confrontation des résultats 103
4.5 Conclusion 106

Bibliographie **107**

II Étude de la thermique 109

5 Résolution de la thermique turbulente 111

5.1 Introduction 112
5.2 Résolution des équations de la thermique 112
5.2.1 Convection/diffusion instationnaire 112

5.2.2 Conditions initiales et conditions aux limites spatio-temporelles 113
5.2.2.1 Condition initiale . . . 113
5.2.2.2 Conditions aux limites . . . 114
5.2.3 Résolution classique du problème thermique : la méthode de Galerkin standard . . . 115
5.2.3.1 Formulation forte du problème . . . 115
5.2.3.2 Formulation faible . . . 115
5.2.3.3 Formulation discrète . . . 116
Discrétisation temporelle . . . 116
Discrétisation spatiale . . . 117
5.2.3.4 Limitation de la méthode Galerkin standard . . . 118
Convection dominante . . . 118
Diffusion pure et choc thermique . . . 119
5.2.4 Méthodes de stabilisation . . . 120
5.2.4.1 La méthode SUPG . . . 120
5.2.4.2 SCPG . . . 120
5.2.4.3 Application et résultats numériques . . . 121
5.3 Intégration de la turbulence dans l'équation de la thermique . . . 124
5.4 Applications numériques . . . 126
5.4.1 Convection turbulente naturelle et forcée . . . 126
5.4.2 Remplissage d'une cavité . . . 128
5.5 Conclusions . . . 132

Bibliographie **133**

6 Résolution du changement de phase **135**
6.1 Introduction . . . 136
6.1.1 Méthodes à grille mobile . . . 136
6.1.2 Méthodes à grille fixe . . . 136

6.1.2.1 Méthode de la chaleur spécifique équivalente 137
6.1.2.2 Résolution en enthalpie 137
6.1.2.3 Méthode de germination-croissance 138
6.2 Traitement de l'interface solide/liquide 139
6.2.1 Introduction 139
6.2.2 Equation de Gibbs-Thomson 139
6.2.3 Applications numériques 141
6.2.3.1 Croissance d'une boule 141
6.2.3.2 Interpolation au niveau macroscopique 141
6.2.3.3 Application numérique avec convection naturelle . . . 142
6.2.4 Calcul dynamique du coefficient cinétique 143
6.2.4.1 Calcul de la vitesse d'avancée du front de température 143
6.2.4.2 Calcul de l'avancée du front de solidification 144
6.2.4.3 Application numérique 145
6.3 Thermique et changement de phase 145
6.3.1 Équations 146
6.3.2 application numérique 147
6.4 Applications numériques 150
6.4.1 Solidification dans un coin 150
6.4.2 Solidification de l'étain 151
6.4.3 Calcul triphasique avec solide mobile 152
6.4.3.1 Calcul 2D 152
Calcul sans chaleur latente 152
Calcul avec chaleur latente 156
6.4.3.2 Calcul 3D 156
Calcul sans chaleur latente 159
Calcul avec chaleur latente 160
6.5 Conclusion 161

Bibliographie **163**

7 Conclusion et Perspectives **165**

7.1 Conclusions 166

7.2 Perspectives 167

Bibliographie **171**

Chapitre 1

Introduction générale

Contents

1.1 Les enjeux de la simulation numérique 10
1.2 État de l'art 11
1.3 Objectifs de la thèse 11

1.1 Les enjeux de la simulation numérique

De nos jours, la simulation numérique occupe une place très importante dans le monde de l'industrie. Celle-ci n'a cessé d'évoluer depuis que les moyens informatiques ont rendu possible la résolution de problèmes relativement complexes. On peut alors distinguer deux types de simulation lors de la conception d'un produit : la première sera la simulation de l'utilisation du produit, permettant d'optimiser la conception (forme, matériaux, etc.) ; la deuxième est la simulation du procédé de fabrication, qui permet de limiter les défauts tout en optimisant le procédé.

Les enjeux de la simulation numérique sont particulièrement importants dans les domaines où l'expérimentation n'est pas toujours possible ou bien limitée, tels que l'aérospatial ou la défense. De nombreux secteurs industriels se tournent également vers cette solution qui permet de limiter les coûts d'essai et de prototypage (fabrication des moules ou des matrices, matière première, main d'œuvre, etc.) très élevés, particulièrement pour des pièces de très grande taille. La simulation possède également divers avantages sur l'expérimentation. En effet, elle permet la prédiction des champs dans tout le volume du domaine étudié, chose qui n'est pas toujours possible sans procédé intrusif ; cette prédiction est importante notamment lors de procédés thermiques afin de définir les paramètres optimums (temps de refroidissement, masselottes, etc.). De la même manière, il est possible de prédire l'état de la matière en tout point du domaine (micro-structure, micro-ségrégations, etc.), ainsi que la formation de nombreux défauts importants et difficilement repérables sur une pièce physique (contraintes résiduelles, bulles d'air, etc.). Nous mentionnerons également que la réduction des expérimentations a un enjeu écologique important étant donné que la simulation d'un essai représente un coût énergétique négligeable par rapport à sa réalisation physique.

FIGURE 1.1 – Atelier de fonderie et exemple de pièce fondue (source : aciers.free.fr)

D'une manière plus générale, la simulation numérique des procédés permet avant tout une meilleure appréhension des phénomènes qui mènent à la mise en forme et aux défauts qu'elle engendre, ceci afin d'optimiser le processus avant de passer à la phase de prototypage.

1.2 État de l'art

Actuellement, le domaine de la mise en forme par déformation bénéficie de nombreuses études et est très largement représenté dans les codes par éléments finis. Certains codes s'intéressent également à la phase de refroidissement des pièces fondues, cependant ils sont basés sur une approximation très visqueuse de la partie liquide et ne prennent pas en compte la phase de remplissage qui induit des variations sur les résultats finaux ; ces variations sont d'autant plus importantes pour les pièces de grandes dimensions étant donné que la solidification peut déjà avoir débuté.

Plusieurs travaux sur le remplissage en général, principalement appliqué aux matériaux polymères, ont été réalisés au Cemef. Notamment la thèse de Saez [3], qui utilise une approche eulérienne Volume of Fluid pour simuler la phase liquide et la phase gazeuse, ainsi que la thèse de Ville [4] qui introduit une approche eulérienne Level-Set. Gaston [1] s'est quant à elle intéressée au remplissage des métaux, mais avec une approche lagrangienne. On notera également la thèse de Hachem [2] qui traite de la résolution des équations de Navier-Stokes et des équations de la thermique turbulentes.

1.3 Objectifs de la thèse

Comme l'illustre la figure 1.2, la simulation numérique du remplissage en fonderie fait intervenir de nombreux phénomènes physiques et requiert l'utilisation de méthodes numériques adaptées.

Tout d'abord, afin de décrire l'écoulement du fluide dans la cavité, il faut résoudre les équations non linéaires de Navier-Stokes. Le caractère hyperbolique de ces équations requiert l'utilisation d'une stabilisation adaptée, de plus, le remplissage de grandes pièces pouvant atteindre un nombre de Reynolds de l'ordre de 10^6, l'emploi d'un modèle de turbulence est indispensable.
Il est également important de prendre en compte les différentes phases en présence (air/liquide) et de décrire correctement l'évolution des interfaces et les phénomènes qui y sont liés tels que la tension de surface.
Le remplissage de grandes pièces pouvant durer plusieurs minutes, voire plusieurs heures, l'écoulement ne peut pas être considéré comme isotherme, il faut donc intégrer un calcul de transferts thermiques.
L'évolution de la thermique au sein de la pièce en cours de remplissage peut mener à des zones de solidification qu'il faut pouvoir prendre en compte lors de la simulation.

Cette thèse est divisée en deux grandes parties. La première partie traite des écoulements multifluides turbulents : la résolution stabilisée des équations de Navier-Stokes est d'abord présentée, nous introduisons ensuite notre formulation monolithique permettant de prendre en compte l'hétérogénéité des écoulements, puis nous présentons une méthode de turbulence multifluides de type L.E.S..

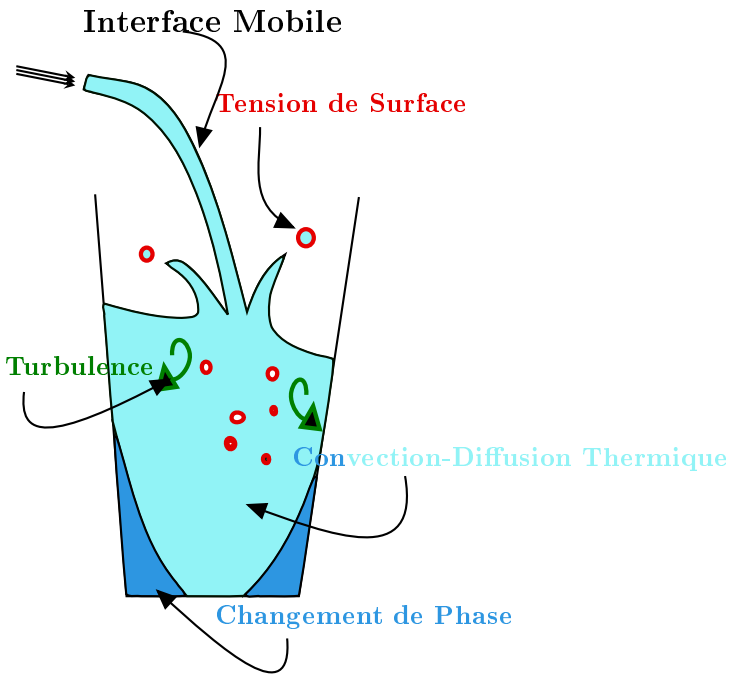


FIGURE 1.2 – Problématiques liées au remplissage en fonderie

La deuxième partie est axée quant à elle sur l'aspect thermique de l'écoulement : nous voyons dans un premier temps la méthode de résolution des équations de la thermique pour un écoulement turbulent, puis nous présentons une méthode novatrice permettant de prendre en compte le changement de phase.

Bibliographie

[1] L. Gaston. *Simulation Numérique Par Éléments Finis Bidimensionnels Du Remplissage De Moules De Fonderie Et Étude Expérimentale Sur Maquette Hydraulique*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 1997.

[2] Elie Hachem. *Stabilized Finite Element Method For Heat Transfer And Turbulent Flows Inside Industrial Furnaces*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 2009.

[3] E. Saez. *Étude Numérique Du Remplissage 3D En Fonderie*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 2003.

[4] L. Ville. *Modélisation Multiphasique Et Calcul D'interface Dans Les Procédés De Mise En Oeuvre Des Propergols*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 2009.

Première partie

Écoulements multifluides turbulents

Chapitre 2

Resolution éléments finis du problème de Navier Stokes

Contents

2.1 Introduction 18
2.2 Formulation des équations de Navier Stokes incompressibles 18
2.2.1 Formulation forte 18
2.2.2 Formulation Variationnelle 20
2.3 Discrétisation et Résolution 21
2.3.1 Méthode de Galerkin 21
2.3.2 Méthode éléments finis stabilisés 22
2.3.3 Approche Variational-Multi-Scale (VMS) 28
2.4 Applications numériques 33
2.5 Conclusions 36

2.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de développer l'élément essentiel à la simulation du remplissage en fonderie et de tout écoulement. Le solveur Navier-Stokes développé ici est basé sur une approche eulérienne appliquée aux fluides newtoniens incompressibles.
Il existe dans la littérature de nombreux solveurs permettant de résoudre les équations de Stokes, cependant l'introduction de l'inertie introduit de nombreux problèmes de stabilité, notamment lorsque la viscosité du fluide devient très faible. Nous allons pour celà voir une méthode de résolution par éléments finis permettant de simuler des nombres de Reynolds relativement élevés.

2.2 Formulation des équations de Navier Stokes incompressibles

2.2.1 Formulation forte

Considérons l'écoulement d'un fluide newtonien dans une cavité Ω de dimension finie et de frontière $\partial\Omega$, sur un intervalle de temps $[0, T]$. L'écoulement dans la cavité est régi par trois équations :

- la loi de comportement qui exprime le tenseur des contraintes σ en fonction des inconnues que sont la vitesse $\boldsymbol{u}(x,t)$ et la pression $p(x,t)$, pour $x \in \Omega$ et $t \in [0,T]$:

$$\sigma = F(\boldsymbol{u}(x,t), p(x,t)) \tag{2.1}$$

- l'équation d'équilibre qui exprime la relation entre les contraintes, l'inertie et les forces volumiques $f^v(x,t)$ telles que la gravité :

$$\rho\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}(x,t)}{\partial t} + \boldsymbol{u}(x,t)\nabla\boldsymbol{u}(x,t)\right) - \nabla\cdot\sigma = f^v(x,t) \tag{2.2}$$

- l'équation de continuité qui exprime la conservation de la matière :

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho\nabla\cdot\boldsymbol{u}(x,t) = 0 \tag{2.3}$$

Dans les conditions de température et de pression de la fonderie, on considère que les variations volumiques des fluides en présence sont très faibles, notamment étant donné que les vitesses d'écoulement sont négligeables face à la vitesse de propagation du son. On peut le considérer comme incompressible, ce qui revient à réexprimer l'équation de continuité (2.3) en fonction de la vitesse seule :

$$\nabla\cdot\boldsymbol{u}(x,t) = 0 \tag{2.4}$$

On peut également noter que bien que les variations de volume soient négligées dans (2.4), celà n'exclut pas d'introduire dans l'équation de l'équilibre (2.2) une masse volumique

variable (dépendant par exemple de la température) pouvant entraîner des mouvements de convection naturelle, mais n'ayant aucune répercussion sur le volume total.
Nous faisons également le choix dans ce manuscrit de ne pas prendre en compte les phénomènes complexes de germination et de cristallisation au sein du métal liquide, en le considérant comme un liquide newtonien. La loi de comportement (2.1) d'un fluide newtonien exprime la partie déviatorique du tenseur des contraintes en fonction du tenseur des taux de déformation $\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla \boldsymbol{u} + \nabla \boldsymbol{u}^T)$ et de la viscosité dynamique du fluide η :

$$\sigma^d = 2\eta \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) \tag{2.5}$$

L'équation (2.4) permet de vérifier que $Tr(\sigma^d) = Tr(\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})) = \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0$. On peut maintenant écrire l'expression de la contrainte en fonction de la vitesse et de la pression hydrostatique $p(x,t)$:

$$\sigma = 2\eta \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) - p\mathbb{1} \tag{2.6}$$

Cette fermeture permet de réduire le système à deux équations dites de "Navier Stokes" :

$$\begin{cases} \rho\left(\dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \boldsymbol{u}\nabla\boldsymbol{u}\right) - \nabla(2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})) + \nabla p = f^v \\ \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \end{cases} \tag{2.7}$$

La formulation différentielle de ces équations est dite *"formulation forte"*. Il convient maintenant de fermer le problème à l'aide de conditions initiales et conditions aux limites. Les conditions aux limites appliquées sur $\partial\Omega$ peuvent être de type Dirichlet sur la vitesse $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_g$, ou de type Neumann avec une force surfacique $\sigma\boldsymbol{n} = f^s$.

On définit le nombre de Reynolds Re, sans dimension, qui correspond au rapport des grandeurs d'inertie sur les grandeurs visqueuses :

$$Re = \frac{\rho U L}{\eta} \tag{2.8}$$

où U et L sont respectivement la vitesse caractéristique et la longueur caractéristique du problème considéré.

Lorsque $Re << 1$ l'effet de la viscosité est prépondérant face à l'inertie, l'écoulement est dit laminaire.

Lorsque $Re >> 1$, l'inertie est dominante et l'écoulement est dit turbulent. Dans ce dernier cas le terme non linéaire $\boldsymbol{u}\nabla\boldsymbol{u}$ devient prépondérant face aux autres termes et il cause des difficultés dans la résolution. Il convient de le traiter de manière adéquate. L'écoulement se caractérise par de grandes variations des champs de pression et de vitesse à l'échelle spatiale et temporelle. Nous verrons dans le prochain chapitre comment peuvent être traitées ces petites échelles.

A noter également que lorsque $Re << 1$, on peut négliger les termes d'inertie afin d'obtenir les équations de Stokes :

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})) + \nabla p = f^v \\ \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \end{cases} \tag{2.9}$$

2.2.2 Formulation Variationnelle

2.2.2.1 Notations

Les espaces fonctionnels suivants sont nécessaires pour établir la formulation faible des équations de Navier-Stokes :

$$\mathcal{V} = (\mathcal{H}^1(\Omega))^d \tag{2.10}$$
$$\mathcal{V}^0 = \left(\mathcal{H}_0^1(\Omega)\right)^d \tag{2.11}$$
$$\mathcal{P} = \mathcal{L}^2(\Omega) \tag{2.12}$$

où $\mathcal{L}^2(\Omega)$ est l'espace de Lebesgue des fonctions carrées sommables sur un domaine Ω, et $\mathcal{H}^1(\Omega)$ est l'espace de Sobolev inclus dans $\mathcal{L}^2(\Omega)$:

$$\mathcal{L}^2(\Omega) = \left\{q, \int_\Omega q^2 dV < \infty\right\} \tag{2.13}$$
$$\mathcal{H}^1(\Omega) = \left\{q \in \mathcal{L}^2(\Omega), \nabla q \in (\mathcal{L}^2(\Omega))^d\right\} \tag{2.14}$$
$$\mathcal{H}_0^1(\Omega) = \left\{q \in \mathcal{H}^1(\Omega), q = 0 \text{ sur } \partial\Omega\right\} \tag{2.15}$$

On définit le produit scalaire dans $\mathcal{L}^2(\Omega)$:

$$(f_1, f_2) = \int_\Omega f_1 f_2 dV \qquad \forall f_1, f_2 \in \mathcal{L}^2(\Omega) \tag{2.16}$$

2.2.2.2 Forme faible

On recherche un champ de vitesse $\boldsymbol{u}$ dans l'espace fonctionnel $\mathcal{V}$ et un champ de pression p dans l'espace fonctionnel $\mathcal{P}$. On choisit pour cela des *fonctions test* $\boldsymbol{w}$ et q dans $\mathcal{V}^0$ et $\mathcal{P}$. Avec la relation :

$$\varepsilon(\boldsymbol{u}) : \nabla \boldsymbol{w} = \varepsilon(\boldsymbol{u}) : \varepsilon(\boldsymbol{w}) \tag{2.17}$$

et des intégrations par partie (formule de Green) qui se simplifient grâce au choix de la fonction test $\boldsymbol{w}$ ($\boldsymbol{w} = 0$ sur $\partial\Omega$) :

$$\int_\Omega \nabla p.\boldsymbol{w} dV = -\int_\Omega p.\nabla \cdot \boldsymbol{w} dV + \int_{\partial\Omega} p\boldsymbol{w}.\boldsymbol{n} dS = -\int_\Omega p \nabla \cdot \boldsymbol{w} dV \tag{2.18}$$

Le problème variationnel consiste à trouver $(\boldsymbol{u}, p) \in (V, P)$ quels que soient $(\boldsymbol{w}, p) \in (V^0, P)$ tels que :

$$\begin{cases} \int_\Omega \rho \dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}.\boldsymbol{w} dV + \int_\Omega \rho \boldsymbol{u} \nabla \boldsymbol{u}.\boldsymbol{w} dV + \int_\Omega 2\eta \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}) dV - \int_\Omega p \nabla \cdot \boldsymbol{w} dV = \int_\Omega f^v.\boldsymbol{w} dV \\ \int_\Omega q \nabla \cdot \boldsymbol{u} dV = 0 \end{cases} \tag{2.19}$$

En appliquant la notation (2.16), on obtient :

$$\begin{cases} \rho\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}, \boldsymbol{w}\right) + \rho\left(\boldsymbol{u}\nabla\boldsymbol{u}, \boldsymbol{w}\right) + \left(2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w})\right) - \left(p, \nabla\cdot\boldsymbol{w}\right) = \left(f^v, \boldsymbol{w}\right) \\ \left(\nabla\cdot\boldsymbol{u}, q\right) = 0 \end{cases} \tag{2.20}$$

2.3 Discrétisation et Résolution

2.3.1 Méthode de Galerkin

La méthode de Galerkin, associée avec la méthode des éléments finis, peut être décrite comme l'approximation de la formulation variationnelle d'un système d'équations aux dérivées partielles sur des espaces fonctionnels approchés engendrés par des fonctions polynomiales par morceaux.
Ainsi, la méthode de Galerkin consiste à chercher les inconnues dans des espaces approchés $\mathcal{V}_h$ et $\mathcal{P}_h$, sous espaces de dimension finie de $\mathcal{V}$ et $\mathcal{P}$, engendrés par des fonctions continues polynomiales par morceaux. On définit de même l'espace $\mathcal{V}_h^0$, sous espace de $\mathcal{V}^0$. Ces espaces sont obtenus à partir d'une décomposition du domaine de calcul Ω en volumes élémentaires K : c'est la triangulisation $\mathcal{T}_h(\Omega)$ du maillage [14].
Les éléments K de $\mathcal{T}_h(\Omega)$ sont dans notre cas des *d-simplexes* (triangles en 2D, tétraèdres en 3D), représentant la géométrie la plus simple pouvant être définie en dimension d. Ils respectent les propriétés suivantes :

- L'union de tous les éléments K correspond à l'ensemble du domaine :

$$\bigcup_{K\in\mathcal{T}(\Omega)} K \;=\; \Omega_h \tag{2.21}$$

  où Ω_h coïncide parfaitement avec Ω si la frontière du domaine est constituée uniquement de faces planes, ou à la taille de maille près si la frontière du domaine est constitué de surfaces complexes (exemple : sphère).
- L'intersection de deux éléments est soit nulle, soit correspond à une face du maillage, son volume est de mesure nulle.

On peut définir h comme la taille de maille définie par le maximum des diamètres du maillage :

$$h = \max_{K\in\mathcal{T}(\Omega)} diam(K) \tag{2.22}$$

Plus la taille de maille est petite, plus l'approximation des espaces fonctionnels est précise, soit :

$$\lim_{h\to 0} \mathcal{V}_h^0 \;=\; \mathcal{V}^0 \tag{2.23}$$

$$\lim_{h\to 0} \mathcal{V}_h \;=\; \mathcal{V} \tag{2.24}$$

$$\lim_{h\to 0} \mathcal{P}_h \;=\; \mathcal{P} \tag{2.25}$$

2.3.2 Méthode éléments finis stabilisés

2.3.2.1 Stabilisation bulle P1+/P1

Pour assurer l'existence et l'unicité de la solution du problème de Navier-Stokes, mais aussi pour que la solution du problème discret converge vers la solution du problème continu, les espaces d'approximation de $\boldsymbol{u}$ et de p doivent respecter la condition de Brezzi-Babuška [2], aussi appelée condition inf-sup :

$$\inf_{q_h \in \mathcal{P}_h} \sup_{\boldsymbol{u}_h \in \mathcal{V}_h^0} \frac{(\nabla \cdot \boldsymbol{u}_h, q_h)}{|q_h|\,|\boldsymbol{u}_h|} \geq \beta > 0 \tag{2.26}$$

où β est une contante indépendante de h, ce qui indique que le critère de convergence de la solution du problème discret ne dépend pas du maillage.

Cette condition permet de construire des "éléments compatibles", c'est à dire des interpolations et des espaces fonctionnels valides et appropriés au problème. Si celle ci est négligée, il est possible que la méthode ne converge pas , ou qu'elle converge vers une solution erronée [2].

Il existe différents types d'éléments stables vérifiant la condition de Brezzi-Babuška, citons notamment l'élément de Taylor-Hood $P2/P1$, ou encore l'élement de Crouzeix-Raviart $P2+/P1$, cependant ceux ci requièrent une augmentation du temps de calcul non négligeable. Nous retiendrons d'abord l'approche mini-élément, introduite dans [1, 9] avec un ordre $P1+/P1$, puis nous étudierons également l'approche Variational-Multi-Scale (VMS) [15].

Dans la méthode dite du mini élément, les champs de vitesse et de pression sont interpolés linéairement à partir des valeurs aux sommets des éléments (interpolation de type $P1$). Le champ de vitesse est enrichi par l'ajout d'un degré de liberté supplémentaire (appelé fonction bulle) au centre des éléments. Il se décompose en une partie linéaire $\boldsymbol{u}$ et une partie bulle b. On définit l'espace d'interpolation des bulles de la manière suivante :

$$\mathcal{V}_h^b = \{b_h, b_{h|K} \in P^k(K) \cap \mathcal{H}_0^1(K)\ \forall K \in \mathcal{T}(\Omega)\} \tag{2.27}$$

avec $P^k(K)$ l'espace des polynômes de degré k sur l'élément K
Le nouvel espace pour la vitesse est tel que :

$$\tilde{\mathcal{V}}_h = \mathcal{V}_h \oplus \mathcal{V}_h^b \tag{2.28}$$

La vitesse est décomposée en deux parties distinctes :

$$\tilde{\boldsymbol{u}}_h = \boldsymbol{u}_h + b_h \tag{2.29}$$

De plus la bulle, nulle sur les bords de l'élément, respecte la condition d'orthogonalité [10] :

$$\forall K \in \mathcal{T}(\Omega) \quad \int_K \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(b_h) d\Omega = 0 \ \ \forall \boldsymbol{u}_h \in P^1(K) \tag{2.30}$$

La fonction bulle vaut 1 au centre de l'élément et s'annule sur sa frontière, une sous discrétisation des éléments doit être créée :

FIGURE 2.1 – Sous discrétisation des éléments 2D

Avec la décomposition de la vitesse, la forme faible du problème devient :

$$\begin{cases} \left(\rho\dfrac{d\tilde{\boldsymbol{u}}_h}{dt}, \tilde{\boldsymbol{w}}_h\right) + (2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(\tilde{\boldsymbol{u}}_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\tilde{\boldsymbol{w}}_h)) - (p_h, \nabla\cdot\tilde{\boldsymbol{w}}_h) = (f_h^v, \tilde{\boldsymbol{w}}_h) \\ (\nabla\cdot\tilde{\boldsymbol{u}}_h, q_h) = 0 \end{cases} \tag{2.31}$$

En remplaçant $\tilde{\boldsymbol{u}}_h$ par $\boldsymbol{u}_h + b_h$, on obtient la formule suivante :

$$\begin{cases} \left(\rho\dfrac{d\boldsymbol{u}_h}{dt}, \boldsymbol{w}_h\right) + \left(\rho\dfrac{db_h}{dt}, \boldsymbol{w}_h\right) + (2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h)) + (2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(b_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h)) - (p_h, \nabla\cdot\boldsymbol{w}_h) = (f_h^v, \boldsymbol{w}_h) \\ \left(\rho\dfrac{d\boldsymbol{u}_h}{dt}, \boldsymbol{w}_h^b\right) + \left(\rho\dfrac{db_h}{dt}, \boldsymbol{w}_h^b\right) + (2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h^b)) + (2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(b_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h^b)) - (p_h, \nabla\cdot\boldsymbol{w}_h^b) = (f_h^v, \boldsymbol{w}_h) \\ (\nabla\cdot\boldsymbol{u}_h, q_h) + (\nabla\cdot b_h, q_h) = 0 \end{cases} \tag{2.3}$$

Selon les hypothèses de [3, 16, 6] sur les termes non linéaires et la variation de la bulle en temps, on peut se ramener à l'équation suivante : :

$$\begin{cases} \left(\rho\dfrac{d\boldsymbol{u}_h}{dt}, \boldsymbol{w}_h\right) + (2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h) - (p_h, \nabla\cdot\boldsymbol{w}_h) = (f_h^v, \boldsymbol{w}_h) \\ \left(\rho\dfrac{db_h}{dt}, \boldsymbol{w}_h^b\right) + (2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(b_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h^b)) - (p_h, \nabla\cdot\boldsymbol{w}_h^b) = (f_h^v, \boldsymbol{w}_h^b) \\ (\nabla\cdot\boldsymbol{u}_h, q_h) + (\nabla\cdot b_h, q_h) = 0 \end{cases} \tag{2.33}$$

où $(\boldsymbol{u}_h, b_h, p_h) \in (\mathcal{V}_h, \mathcal{V}_h^b, \mathcal{P}_h)\ \forall(\boldsymbol{w}_h, \boldsymbol{w}_h^b, p_h) \in (\mathcal{V}_h^0, \mathcal{V}_h^{0b}, \mathcal{P}_h)$.
Selon [3], une manière d'approximer le terme de bulle $\left(\rho\dfrac{db_h}{dt}, \boldsymbol{w}_h^b\right)$ sans avoir besoin de garder et stocker la solution bulle est la suivante :

$$\left(\rho\frac{db_h}{dt}, \boldsymbol{w}_h^b\right) \simeq \left(\frac{\rho}{\Delta t}, \boldsymbol{w}_h^b\right) \tag{2.34}$$

Ce dernier terme est important pour respecter la conservation de la masse.
On résout alors l'équation sur la partie bulle de la vitesse (deuxième ligne de l'équation (2.33)), et on remplace leur effet dans les 2 autres équations. Cette technique, développée dans les paragraphes suivants, s'appelle la condensation statique de la bulle.

2.3.2.2 Linéarisation du problème

Avec le terme de convection, le problème de Navier-Stokes incompressible est non linéaire. Il est donc nécessaire de trouver des procédés de linéarisation des équations, et

notamment à partir de sa discrétisation temporelle. Celle ci peut s'effectuer soit par une méthode de différences finies, soit par une méthode d'éléments finis [18]. Ces dernières sont basées sur des formulations espace-temps des éléments finis et ne sont pas traitées ici. Dans la littérature, les schémas temporels par différences finies les plus utilisés pour les équations de Navier-Stokes sont ceux d'Euler et de Runge Kutta. C'est le premier que nous choisissons d'implémenter dans notre solveur mécanique.

Schémas temporels d'Euler Pour décrire la discrétisation temporelle d'Euler, un problème de Cauchy est introduit sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}(t)}{\partial t} = f(\boldsymbol{u}, t) \tag{2.35}$$

où $t \in [0, T],\ T > 0$ est la durée du phénomène, et les conditions initiales de l'inconnue sont $\boldsymbol{u}(t = 0) = \boldsymbol{u}_0$.
Tout d'abord, l'espace temps $[0, T]$ est décomposé en N intervalles réguliers de manière suivante : $[0, T] = \bigcup_n [t_{n-1}, t_n]$, Δt étant le pas de temps tel que $\delta t = \frac{T}{N}$.
Le schéma temporel le plus simple est :

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}(t)}{\partial t} \simeq= \frac{\boldsymbol{u}(t_n) - \boldsymbol{u}(t_{n-1})}{\Delta t} \tag{2.36}$$

En posant $\boldsymbol{u}(t_n) = \boldsymbol{u}^n$, nous avons :

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}(t)}{\partial t} \simeq \frac{\boldsymbol{u}^n - \boldsymbol{u}^{n-1}}{\Delta t} \tag{2.37}$$

Plusieurs schémas en temps sont issus de cette approximation : le schéma d'Euler implicite et le schéma d'Euler explicite. Lorsque les conditions de convergence sont remplies, il est montré que les schémas d'Euler sont d'ordre 1. Cela veut dire qu'il existe un réel C tel que l'on peut majorer l'erreur due à l'approximation par rapport à la solution exacte par :

$$\left|\boldsymbol{u}^{exact} - \boldsymbol{u}^{approche}\right| < C\Delta t \tag{2.38}$$

Il existe également un troisième schéma en temps : le schéma de Crank Nicolson, étant lui d'ordre 2.

Le schéma d'Euler explicite

$$\frac{\boldsymbol{u}^n - \boldsymbol{u}^{n-1}}{\Delta t} \simeq f(\boldsymbol{u}^{n-1}, t^{n-1}) \qquad \forall n \leq N \tag{2.39}$$

La stabilité est conditionnée par le critère de Courant-Friedrich-Lewy sur le pas de temps :

$$\Delta t < \frac{\max\limits_{\Omega} |\boldsymbol{u}|}{h} \tag{2.40}$$

Ce schéma implique clairement la linéarisation du problème de Cauchy. En l'appliquant au terme non linéaire des équations de Navier Stokes, nous obtenons :

$$\frac{d\boldsymbol{u}}{dt} \simeq \frac{\boldsymbol{u}}{\Delta t} - \frac{\boldsymbol{u}^-}{\Delta t} + \nabla \boldsymbol{u}^- \cdot \boldsymbol{u}^- \tag{2.41}$$

où $\boldsymbol{u}^-$ est la vitesse calculée au pas de temps précédent.

Le schéma de Crank Nicolson

$$\frac{\boldsymbol{u}^n - \boldsymbol{u}^{n-1}}{\Delta t} \simeq \frac{1}{2}\left(f(\boldsymbol{u}^n, t^n) + f(\boldsymbol{u}^{n-1}, t^{n-1})\right) \qquad \forall n \leq N \tag{2.42}$$

Le schéma de Crank Nicolson est un schéma d'ordre 2, entre le schéma d'Euler explicite et le schéma d'Euler implicite. Comme le schéma d'Euler implicite, il est inconditionnellement stable, cependant il est assez dispersif et ne permet pas d'atténuer les erreurs numériques déja commises. De plus, la linéarisation du problème n'est pas complète étant donné qu'il reste à traîter le terme d'advection $\nabla \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u}$.

Le schéma d'Euler implicite

$$\frac{\boldsymbol{u}^n - \boldsymbol{u}^{n-1}}{\Delta t} \simeq f(\boldsymbol{u}^n, t^n) \qquad \forall n \leq N \tag{2.43}$$

L'avantage de ce schéma est qu'il est inconditionnellement stable. Le pas de temps Δt n'est donc pas limité. Cependant, un pas de temps trop grand peut causer des imprécisions importantes de par l'ordre du schéma. De plus, cette approche ne linéarise pas non plus le problème par elle même. Elle nécessite donc le traitement du terme d'advection $\nabla \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u}$.

$$\frac{d\boldsymbol{u}}{dt} \simeq \frac{\boldsymbol{u}}{\Delta t} + \nabla \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} - \frac{\boldsymbol{u}^-}{\Delta t} \tag{2.44}$$

Linéarisation du terme d'advection Pour linéariser le terme d'advection non linéaire, nous appliquons une méthode qui consiste à substituer la vitesse $\boldsymbol{u}$ par $\boldsymbol{v} + \boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}$ où $\boldsymbol{u}$ est l'inconnue à trouver et $\boldsymbol{v}$ est la vitesse connue. $\boldsymbol{v}$ peut être soit la vitesse calculée au pas de temps précedent, dans ce cas le système n'est résolu qu'une seule par pas de temps, soit la vitesse calculée à l'incrément précédent à l'aide d'une méthode itérative de Newton.
Initialement, à la première itération de Newton, $\boldsymbol{v}$ a la valeur de la vitesse calculée au pas de temps précédent. Pendant les itérations de Newton, lorsque $\boldsymbol{u}$ et $\boldsymbol{v}$ sont assez proches, on considère que le système a convergé, et que la solution du problème de Navier-Stokes approximé est trouvé pour un temps t donné.

Voici le développement qui amène à la formule qu'il faut utiliser pour linéariser le terme $\nabla \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u}$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u} &= \boldsymbol{v} + (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) \qquad \text{où } \boldsymbol{v} \text{ est connu} && (2.45)\\ \nabla \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} &= \nabla(\boldsymbol{v} + (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v})) \cdot (\boldsymbol{v} + (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v})) && (2.46)\\ \nabla \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} &= \nabla \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} + \nabla \boldsymbol{v} \cdot (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) + \nabla(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) \cdot \boldsymbol{u} + \nabla(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) \cdot (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) && (2.47) \end{aligned}$$

Le terme de second ordre $\nabla(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) \cdot (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v})$ est négligé. Il nous reste :

$$\begin{aligned} \nabla \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} &\simeq \nabla(\boldsymbol{v} + \boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) \cdot \boldsymbol{v} + \nabla \boldsymbol{v} \cdot (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) && (2.48)\\ \nabla \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} &\simeq \nabla \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} + \nabla \boldsymbol{v} \cdot (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) && (2.49) \end{aligned}$$

Au final, nous avons :

$$\nabla \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} \simeq \nabla \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} + \nabla \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{u} - \nabla \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} \qquad (2.50)$$

En substituant ce résultat dans la formule (2.44) du schéma implicite d'Euler, on obtient :

$$\frac{d\boldsymbol{u}}{dt} \simeq \frac{\boldsymbol{u}}{\Delta t} + \nabla \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} + \nabla \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{u} - \frac{\boldsymbol{u}^-}{\Delta t} - \nabla \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} \qquad (2.51)$$

Enfin, la forme faible du problème de Navier-Stokes linéarisé par un schéma d'Euler implicite et par un algorithme de Newton s'écrit :

$$\begin{cases} \rho\left(\dfrac{\boldsymbol{u}_h}{\Delta t}, \boldsymbol{w}_h\right) + \rho\left(\boldsymbol{u}_h \nabla \boldsymbol{v}_h, \boldsymbol{w}_h\right) + \rho\left(\boldsymbol{v}_h \nabla \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{w}_h\right) + \left(2\eta \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h)\right) - \left(p_h, \nabla \cdot \boldsymbol{w}_h\right) \\ \qquad\qquad = \left(f^v, \boldsymbol{w}_h\right) + \rho\left(\dfrac{\boldsymbol{u}_h^-}{\Delta t}, \boldsymbol{w}_h\right) + \rho\left(\boldsymbol{v}_h \nabla \boldsymbol{v}_h, \boldsymbol{w}_h\right) \\ \left(\nabla \cdot \boldsymbol{u}_h, q\right) = 0 \end{cases} \qquad (2.52)$$

où $\boldsymbol{u}_h^-$ est la solution trouvée au pas de temps précédent, et v_h est l'approximation de la vitesse à l'itération de Newton précédent.
Un avantage important de cette formulation est qu'elle se montre plus robuste en terme de convergence et pas de temps que celle d'un schéma d'Euler explicite. Le pas de temps dépend toujours de la nature du problème, mais il est moins limité.
Dans le cadre de la fonderie, où les écoulements sont à convection dominante, la linéarisation du terme advectif se révèle très importante afin d'éviter les instabilités de calcul. Cependant l'utilisation d'un algorithme itératif de Newton nécessite plusieurs résolutions successives du système linéaire, ce qui s'avère coûteux en temps de calcul et ne semble pas apporter d'amélioration évidente à la stabilité du problème.

2.3.2.3 Formulation matricielle

La formulation discrète du problème de Navier-Stokes linéarisé par un schéma temporel implicite et un algorithme de Newton pour linéariser le terme d'advection est la suivante :

$$\begin{cases} \rho\left(\frac{\boldsymbol{u}_h}{\Delta t}, \boldsymbol{w}_h\right) + \rho\left(\boldsymbol{u}_h \nabla \boldsymbol{v}_h, \boldsymbol{w}_h\right) + \rho\left(\boldsymbol{v}_h \nabla \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{w}_h\right) + \left(2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h)\right) - \left(p_h, \nabla \cdot \boldsymbol{w}_h\right) \\ \qquad = \left(f^v, \boldsymbol{w}_h\right) + \rho\left(\frac{\boldsymbol{u}_h^-}{\Delta t}, \boldsymbol{w}_h\right) + \rho\left(\boldsymbol{v}_h \nabla \boldsymbol{v}_h, \boldsymbol{w}_h\right) \\ \left(\frac{\rho}{\Delta t}, \boldsymbol{w}_h^b\right) + \left(2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(b_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h)\right) - \left(p_h, \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{w}_h^b}\right) \\ \qquad = \left(f^v, \boldsymbol{w}_h^b\right) \\ \left(\nabla \cdot \boldsymbol{u}_h, q_h\right) + \left(\nabla \cdot b_h, q_h\right) = 0 \end{cases} \tag{2.53}$$

La formulation matricielle équivalente est :

$$\begin{pmatrix} A_{vv} & 0 & A_{vp}^T \\ 0 & A_{bb} & A_{bp}^T \\ A_{vp} & A_{bp} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_h \\ b_h \\ p_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_v \\ B_b \\ B_p \end{pmatrix} \tag{2.54}$$

avec :

$$\boldsymbol{w}_h A_{vv} \boldsymbol{u}_h = \rho\left(\frac{\boldsymbol{u}_h}{\Delta t}, \boldsymbol{w}_h\right) + \rho\left(\boldsymbol{u}_h \nabla \boldsymbol{v}_h, \boldsymbol{w}_h\right) + \rho\left(\boldsymbol{v}_h \nabla \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{w}_h\right) + \left(2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h)\right) \tag{2.55}$$

$$q_h A_{vp} \boldsymbol{u}_h = \left(\nabla \cdot \boldsymbol{u}_h, q_h\right) \tag{2.56}$$

$$\boldsymbol{w}_b A_{bb} b_h = \left(\frac{\rho}{\Delta t}, \boldsymbol{w}_{bh}\right) + \left(2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(b_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_{bh})\right) \tag{2.57}$$

$$q_h A_{bp} b_h = \left(\nabla \cdot b_h, q_h\right) \tag{2.58}$$

et :

$$B_v = \rho g + \rho \frac{\boldsymbol{u}_h^-}{\Delta t} - \rho \nabla \boldsymbol{v}_h \cdot \boldsymbol{v}_h \tag{2.59}$$

$$B_p = 0 \tag{2.60}$$

$$B_b = \rho g \tag{2.61}$$

avec la sous discrétisation des éléments, il est possible de calculer la bulle localement sur chaque élément :

$$b_h = A_{bb}^{-1} b_b - A_{bb}^{-1} A_{bp}^T p_h \tag{2.62}$$

Ensuite, avec une technique de condensation, elle peut être utilisée pour calculer v_h que l'on considère alors comme la vitesse calculable globalement sur le domaine discrétisé Ω_h. Ainsi, les degrés de liberté liés aux fonctions bulles sont éliminés, et seuls ceux placés sur les nœuds restent à calculer :

$$\begin{pmatrix} A_{vv} & A_{vp}^T \\ A_{vp} & -C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_h \\ p_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_v \\ b'_p \end{pmatrix} \tag{2.63}$$

où C vient de la condensation de la bulle avec $C = A_{bp} A_{bb}^{-1} A_{bp}^T$.

Cette technique, appelée *MINI-élément*, est stable selon les conditions de Brezzi-Babuška. Elle est considérée comme une méthode mixte stabilisée, dans laquelle l'opérateur de stabilisation est obtenu par condensation des termes de bulle à l'intérieur de chaque élément. Les termes de nature elliptique rajoutés au problème préservent la consistance de celui-ci.

Dans cette formulation, les termes de convection $\rho(\boldsymbol{u}_h \nabla \boldsymbol{v}_h, \boldsymbol{w}_h) + \rho(\boldsymbol{v}_h \nabla \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{w}_h)$ entraînent la non symétrie du problème au niveau de la matrice A_{vv} ; une méthode de résolution telle que le résidu minimal généralisé doit être utilisée.

La technique de préconditionnement de Cholesky incomplet dite ILU(k) peut être utilisée, notamment pour des écoulements assez turbulents. Cette dernière se montre très robuste et stable, même lorsque la nature du problème à résoudre entraîne un mauvais conditionnement de la matrice. Elle a notamment la particularité de permettre une adaptation avec le paramètre k qui définit le niveau de remplissage de la matrice creuse.

Le code de calcul CimLib, dans lequel le solveur Navier-Stokes est implémenté, fait appel à PETSC (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation) [20]. C'est une bibliothèque composée d'un ensemble de procédures permettant de résoudre aussi bien en séquentiel qu'en parallèle des équations aux dérivées partielles et des problèmes d'algèbre linéaire par des méthodes numériques itératives. Elle propose donc des solutions intéressantes dans le domaine du calcul scientifique parallèle. Plus précisément, des méthodes entièrement parallélisées sont disponibles dans le cadre de la résolution des systèmes linéaires, incluant des préconditionneurs et des méthodes de résolution de type Krylov. La création des matrices locales est réalisée par CimLib, sous forme de solveur local. Ensuite, elles sont prises en charge par PETSC pour le préconditionnement.

2.3.3 Approche Variational-Multi-Scale (VMS)

2.3.3.1 Formulation des équations

La stabilisation bulle présentée dans le paragraphe précédent est basée sur l'enrichissement de la vitesse par une fonction bulle et requiert certaines approximations pas toujours vérifiées. La résolution de ces équations reste encore relativement instable pour des nombres de Reynolds modérément élevés. Afin de mieux prendre en compte les termes bulles et de stabiliser la partie convective des équations de Navier-Stokes, nous développons dans cette partie l'approche Variational-Multi-Scale (VMS). Dans cette approche,

nous enrichissons l'espace des vitesses ainsi que l'espace des pressions par des espaces-bulle qui corrigent les instabilités liés à un écoulement dominé par la convection.
Suivant [17, 22, 15], on considère une décomposition du champ de vitesse et du champ de pression en une somme des grandes échelles, résolvables, et des petites échelles, irrésolvables :

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}' \tag{2.64}$$
$$p = p_h + p' \tag{2.65}$$

De même, on applique la même décomposition pour les fonctions tests :

$$\boldsymbol{w} = \boldsymbol{w}_h + \boldsymbol{w}' \tag{2.66}$$
$$q = q_h + q' \tag{2.67}$$

La condensation statique consiste à substituer la solution des petites échelles dans le problème des grandes échelles par l'apport de termes supplémentaires, en fonction d'un paramètre de stabilisation local et dépendant du temps, qui améliore la stabilité et la précision de la formulation Galerkin standard pour les équations de Navier-Stokes instationnaires. Ainsi, en séparant les deux échelles et en intégrant par partie dans chaque élément, on obtient le problème des grandes échelles :

$$\begin{cases} \rho\left(\partial_t(\boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}'), \boldsymbol{w}_h\right)_K + \rho\left((\boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}') \cdot \nabla(\boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}'), \boldsymbol{w}_h\right)_K \\ \qquad + \left(2\eta\ \dot{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h) : \dot{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h)\right)_K - \left((p_h + p'), \nabla \cdot \boldsymbol{w}_h\right)_K \\ \qquad = (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{w}_h)_K \qquad\qquad \forall \boldsymbol{w}_h \in \mathcal{V}_h^0 \\ \left(\nabla \cdot (\boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}'), q_h\right)_K = 0 \qquad \forall q_h \in \mathcal{P}_h^0 \end{cases} \tag{2.68}$$

ainsi que le problème des petites échelles :

$$\begin{cases} \rho\left(\partial_t(\boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}'), \boldsymbol{w}'\right)_K + \rho\left((\boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}') \cdot \nabla(\boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}'), \boldsymbol{w}'\right)_K \\ \qquad + \left(2\eta\ \dot{\varepsilon}(\boldsymbol{u}') : \dot{\epsilon}(\boldsymbol{w}')\right)_K - \left((p_h + p'), \nabla \cdot \boldsymbol{w}'\right)_K \\ \qquad = (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{w}')_K \qquad \forall \boldsymbol{w}' \in V_0' \\ \left(\nabla \cdot (\boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}'), q'\right)_K = 0 \quad \forall q' \in Q_0' \end{cases} \tag{2.69}$$

Pour dériver notre formulation stabilisée, on résout d'abord le problème des petites échelles, défini comme somme sur l'intérieur des éléments et écrit en terme de variables des grandes échelles, dépendantes du temps [13, 19, 4]. On intègre donc la solution des petites échelles dans le problème des grandes échelles., éliminant par conséquent l'apparition des petites échelles, tout en modélisant leurs effets [6, 8, 5]. A ce niveau, certaines remarques et hypothèses importantes doivent être faites de manière à prendre en compte la dépendance en temps et la non linéarité de l'équation du moment du système des petites échelles.

- en utilisant des fonctions d'interpolation linéaires, les dérivées secondes s'annulent, ainsi que tous les termes impliquant une intégrale sur les frontières intérieures de l'élément ;

- comme l'espace des petites échelles est supposé orthogonal à l'espace des éléments finis, les termes croisés disparaissent dans (2.68) et (2.69) [9] ;
- les petites échelles ne sont pas suivies en temps, on fait l'hypothèse de la quasi-staticité [11] ; cependant, celle-ci restent dépendantes du temps étant donné qu'elles sont pilotées par les grandes échelles ;
- la vitesse de transport du terme non linéaire dans (2.69) peut être approchée en n'utilisant que les grandes échelles, de telle manière que :

$$(\boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}\,') \cdot \nabla(\boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}\,') \approx \boldsymbol{u}_h \cdot \nabla(\boldsymbol{u}_h + \boldsymbol{u}\,') \tag{2.70}$$

Par conséquence, en réarrangeant les termes des petites échelles, on obtient :

$$\begin{cases} \rho\,(\boldsymbol{u}_h \cdot \nabla \boldsymbol{u}\,', \boldsymbol{w}')_K + (2\eta\ \dot{\epsilon}(\boldsymbol{u}\,') : \dot{\varepsilon}(\boldsymbol{w}\,'))_K + (\nabla p', \boldsymbol{w}\,')_K \\ \qquad\qquad = (\mathcal{R}_{\text{M}}, \boldsymbol{w}\,')_K \qquad \forall \boldsymbol{w}\,' \in \mathcal{V}^0\,' \\ (\nabla \cdot \boldsymbol{u}\,', q')_K = (\mathcal{R}_{\text{C}}, q')_K \quad \forall q' \in \mathcal{P}^0\,' \end{cases} \tag{2.71}$$

avec $\boldsymbol{\mathcal{R}}_{\text{M}}$ et $\mathcal{R}_{\text{C}}$ respectivement résidu de l'équation du moment et résidu de l'équation de continuité.

Il est connu, d'après les travaux de Wall et al [25] et Tezduyar et Ozawa [24], que considérer la pression de petite échelle comme une variable supplémentaire permet de respecter la condition de continuité au niveau des petites échelles. Ceci apporte une stabilité supplémentaire, spéciallement lorsqu'on augmente le nombre de Reynolds. Cependant, résoudre les équations des petites échelles pour la vitesse et la pression est en quelque sorte compliqué. Franca et al [12] propose une séparation technique des inconnues des petites échelles. Ils ont remplacé l'équation de continuité des petites échelles par l'équation de pression de Poisson des petites échelles. Etant donné que seul l'effet de la pression de Poisson des petites échelles sur l'équation des grandes échelles doit être retenue, Franca et Oliveira [13] ont montré que plutôt que de résoudre cette équation, celle ci peut être approximée par le biais d'un terme supplémentaire à la manière d'un terme de stabilisation comme :

$$p' \approx \tau_{\text{C}} \mathcal{R}_C \tag{2.72}$$

Pour l'implémentation numérique, on adopte la définition proposée par Codina [6] pour le coefficient de stabilisation :

$$\tau_{\text{C}} = \left(\left(\frac{\mu}{\rho} \right)^2 + \left(\frac{c_2}{c_1} \frac{\|\boldsymbol{u}\|_K}{h} \right)^2 \right)^{1/2} \tag{2.73}$$

où $c_1 = 1$ et $c_2 = 2$ sont deux constantes. Une fois que ce coefficient de stabilisation a été défini, l'expression (2.72) peut être introduite dans l'équation des grandes échelles (2.68). Il reste maintenant à traiter l'équation du moment des petites échelles. Codina a montré dans [6] que la vitesse des petites échelles est pilotée uniquement par le résidu de l'équation du moment des grandes échelles et non par le résidu de l'équation de continuité. Sans perdre de généralité, en suivant le travail de Masud et Khurram [19] et en supposant

le résidu du moment des grandes échelles est constant, la vitesse des petites échelles peut s'écrire :

$$\boldsymbol{u}' = \tau_K \boldsymbol{\mathcal{R}}_{\mathrm{M}} \tag{2.74}$$

où τ_K est le terme de stabilisation qui a été naturellement obtenu après la résolution du sous problème des petites échelles. L'effet de la bulle est maintenant condensé dans ce paramètre élémentaire. Evidemment, le choix des fonctions bulle affecte la valeur du paramètre de stabilité. On peut trouver des détails à propos du choix des bulles dans [15, ?, 19].
En appliquant une intégration par partie au troisième terme de la première équation de (2.68) et au second terme dans la deuxième équation, puis en remplaçant les expressions de la pression de petite échelle (2.72) et la vitesse de petite échelle (2.73), on obtient :

$$\begin{cases} \rho\left(\partial_t \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{w}_h\right)_\Omega + \left(\rho \boldsymbol{u}_h \cdot \nabla \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{w}_h\right)_\Omega \\ \quad - \sum_{K \in \Omega_h} \left(\tau_K \boldsymbol{\mathcal{R}}_{\mathrm{M}}, \rho \boldsymbol{u}_h \nabla \boldsymbol{w}_h\right)_K + \left(2\eta\ \dot{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h) : \dot{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h)\right)_\Omega \\ \quad - \left(p_h, \nabla \cdot \boldsymbol{w}_h\right)_\Omega + \sum_{K \in \Omega_h} \left(\tau_{\mathrm{C}} \mathcal{R}_{\mathrm{C}}, \nabla \cdot \boldsymbol{w}_h\right)_K \\ \qquad\qquad = \left(\boldsymbol{f}, \boldsymbol{w}_h\right)_\Omega \ \ \forall \boldsymbol{w}_h \in V_{h,0} \\ \\ \left(\nabla \cdot \boldsymbol{u}_h, q_h\right)_\Omega - \sum_{K \in \Omega_h} \left(\tau_K \boldsymbol{\mathcal{R}}_{\mathrm{M}}, \nabla q_h\right)_K = 0 \quad \forall q_h \in Q_{h,0} \end{cases} \tag{2.75}$$

En comparant à la méthode Galerkin standard, la formulation stabilisée proposée implique de nouvelles intégrales qui sont évaluées sur chaque élément. Ces termes supplémentaires, obtenus en remplaçant $\boldsymbol{u}'$ et p' approchés dans l'équation des grandes échelles, représentent l'effet des petites échelles et sont intégrés d'une manière consistante dans la formulation de Galerkin. Tous ces termes permettent de contrôler les instabilités de la formulation classique qui apparaissent dans les écoulements pilotés par la convection, mais aussi de satisfaire la condition de Brezzi-Babuška pour les interpolations de la vitesse et de la pression. De plus, le dernier terme de l'équation (2.75) apporte une stabilité supplémentaire à haut nombre de Reynolds [4].
Il faut aussi noter que beaucoup d'estimations des paramètres de stabilisation peuvent être trouvés dans la littérature. Pour illustration, la définition la plus commune utilisée pour les équations de Navier-Stokes instationnaires avec éléments linéaires vient des références [24, 7, 5] .

$$\tau_K = \left(\frac{1}{\left(\frac{2}{\Delta t}\right)^2 + \left(\frac{4\eta}{h^2}\right)^2 + \left(\frac{4|u_k|}{h}\right)^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \tag{2.76}$$

2.3.3.2 Formulation matricielle

Ecrivons maintenant la formulation variationnelle stabilisée de manière matricielle.

La formulation matricielle équivalente est :

$$\begin{pmatrix} A_{vv} & A_{vp} \\ A_{pv} & A_{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_h \\ p_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_v \\ B_p \end{pmatrix} \tag{2.77}$$

avec :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{w}_h A_{vv} \boldsymbol{u}_h &= \rho\left(\frac{\boldsymbol{u}_h}{\Delta t}, \boldsymbol{w}_h\right) + \rho\left(\boldsymbol{u}_h \nabla \boldsymbol{v}_h, \boldsymbol{w}_h\right) + \rho\left(\boldsymbol{v}_h \nabla \boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{w}_h\right) \\ &\quad + \left(2\eta\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{w}_h)\right) + \left(\tau_C \nabla \cdot \boldsymbol{u}_h, \nabla \cdot \boldsymbol{w}_h\right) \\ &\quad + \sum_{K \in \Omega_h} \tau_K \left(\rho \frac{\partial \boldsymbol{u}_h}{\partial t} + \rho \boldsymbol{u}_h . \nabla \boldsymbol{u}_h + \nabla \cdot 2\eta\varepsilon(\boldsymbol{u}_h), \rho \boldsymbol{v}_h . \nabla \boldsymbol{w}_h\right) \end{aligned} \tag{2.78}$$

$$\boldsymbol{w}_h A_{vp} p_h = -(\nabla \cdot \boldsymbol{w}_h, p_h) - \tau_K \left(p_h, \rho \boldsymbol{v}_h . \nabla \boldsymbol{w}_h\right) \tag{2.79}$$

$$\boldsymbol{u}_b A_{pv} q_h = (\nabla \cdot \boldsymbol{u}_h, q_h) + \sum_{K \in \Omega_h} \tau_K \left(\rho \frac{\partial \boldsymbol{u}_h}{\partial t} + \rho \boldsymbol{u}_h . \nabla \boldsymbol{u}_h + \nabla \cdot 2\eta\varepsilon(\boldsymbol{u}_h), \nabla q_h\right) \tag{2.80}$$

et :

$$B_v = \rho g + \rho \frac{\boldsymbol{u}_h^-}{\Delta t} - \rho \nabla \boldsymbol{v}_h \cdot \boldsymbol{v}_h \tag{2.81}$$

$$B_b = \rho g + \rho \frac{\boldsymbol{v}_h}{\Delta t} + \rho \nabla \boldsymbol{v}_h \cdot \boldsymbol{v}_h \tag{2.82}$$

La prise en compte locale de l'influence des petites échelles non résolues en vitesse et pression dans les grandes échelles a introduit de nouveaux termes de stabilisation et modifié les composantes de la matrice. Ces termes semblent jouer un rôle important particulièrement pour les grands nombres de Reynolds.

2.4 Applications numériques

Afin d'étudier la robustesse et la justesse de notre code, nous nous intéressons maintenant au cas de la cavité entraînée3D. L'écoulement est confiné dans une cavité cubique de 1 m de côté. on applique une vitesse constante sur le plan supérieur, comme le montre la figure 2.2. Bien que la géométrie soit simple, des phénomènes physiques complexes ont lieu dans la cavité. Il est montré dans la littérature que de nombreux tourbillons apparaîssent près des parois latérales amont et aval.

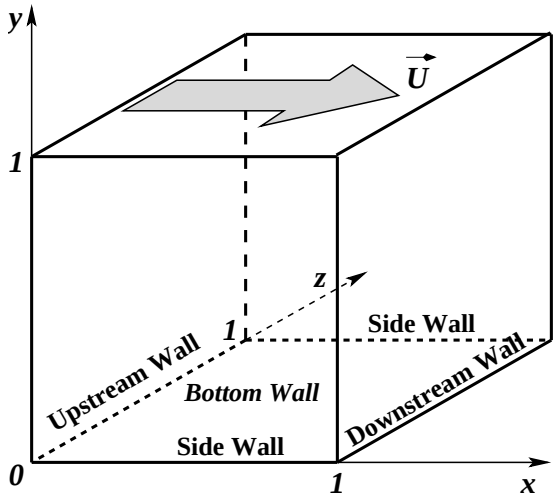


FIGURE 2.2 – Problème de la cavité entraînée 3D

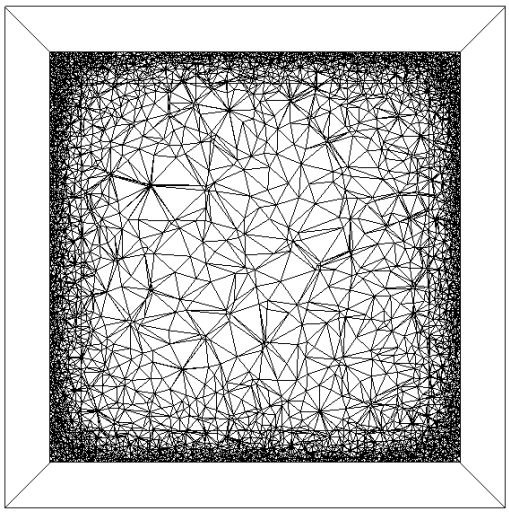


FIGURE 2.3 – Maillage isotrope hétérogène de la cavité entraînée 3D

La figure 2.3 montre le maillage utilisé pour la simulation. Les vitesses initiales sont nulles partout à l'exception de la surface supérieure. On règle ensuite la viscosité du fluide pour faire varier le nombre de Reynolds.

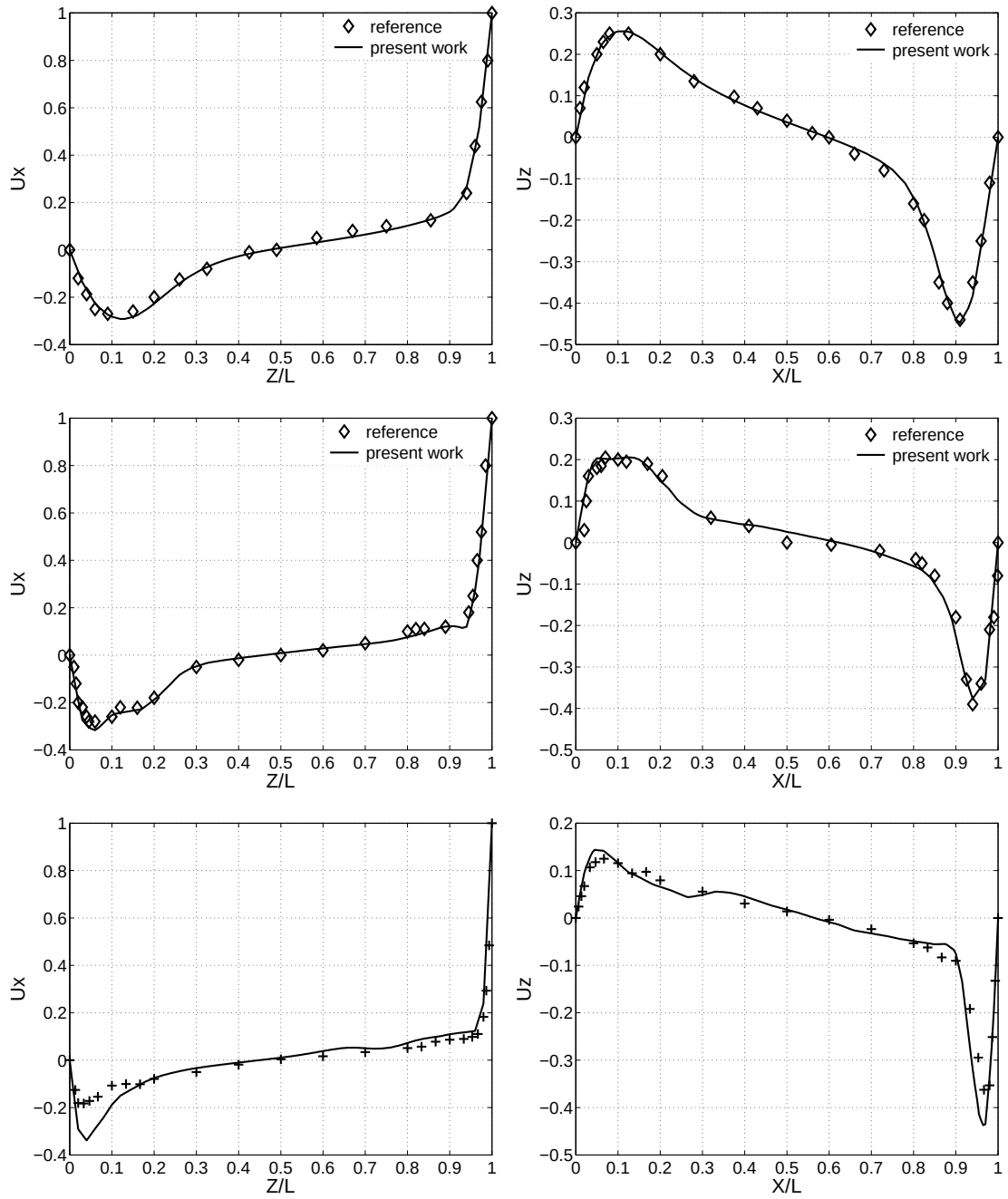


FIGURE 2.4 – Comparaison des profils de vitesse dans le plan médian $y = 0.5$ avec les résultats de [23] pour $\mathrm{Re} = 1,000$ (en haut), [26] pour $\mathrm{Re} = 3,200$ (au milieu) et [21] pour $\mathrm{Re} = 12,000$ (en bas). A gauche : valeur moyenne de la vitesse dans la direction x. A droite : valeur moyenne de la vitesse dans la direction z.

La figure 2.4 montre la comparaison de nos résultats pour les nombres de Reynolds $\mathrm{Re} = 1\,000$, $\mathrm{Re} = 3\,200$ et $\mathrm{Re} = 12\,000$ avec les résultats de [23], [26] et [21] respectivement. Les profils de vitesse moyenne dans le plan médian sont tracés et comparés aux solutions de référence. Tous nos résultats sont en bonne adéquation avec les profils de référence jusqu'à $\mathrm{Re} = 3\,200$. Les différences pour $\mathrm{Re} = 12\,000$ sont liées au fait que le maillage utilisé ne permet pas de décrire l'écoulement de manière assez fine. Un modèle de turbulence de type LES peut alors être utilisé.

2.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons montré comment développer les équations de Navier Stokes et les résoudre par une méthode par éléments finis. Nous avons présenté une première méthode de stabilisation avec permettant de respecter la condition de Brezzi Babuška. Cette méthode, dite P1+/P1, introduit dans chaque élément un degré de liberté supplémentaire pour la vitesse à l'aide d'une fonction bulle. La condensation de l'équation bulle dans la formulation matricielle fait apparaître un terme de stabilisation, sans ajouter d'inconnue supplémentaire.
L'approche Variational Multi-Scale développée dans la deuxième partie de ce chapitre est basée sur une description plus fine des petites échelles. Les différentes modélisations des comportements de ces petites échelles permet de se ramener à une formulation matricielle simplifiée. Cette dernière, bien que légèrement plus complexe que la précédente, permet de simuler des écoulement plus turbulents.
Enfin, l'application numérique de la cavité entraînée 3D a permis de montrer les bons résultats obtenus avec l'approche VMS pour des nombres de Reynolds pouvant monter jusqu'à 12 000.

Bibliographie

[1] D. Arnold, F. Brezzi, and M. Fortin. A stable finite element for the stokes equations. *Calcolo*, 23(4) :337–344, 1984.

[2] I. Babuska. The finite element method with lagrangian multipliers. *Numerirsche Mathematik*, 20 :179–192, 1973.

[3] O. Basset. *Simulation Numérique D'écoulements Multi-Fluides Sur Grille De Calcul*. PhD thesis, École Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 2006.

[4] Ma Behr, Lp Franca, and Te Tezduyar. Stabilized finite-element methods for the velocity pressure stress formulation of incompressible flows. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 104(1) :31–48, Apr 1993.

[5] R. Codina, , and J. Blasco. Analysis of a stabilized finite element approximation of the transient convection-diffusion-reaction equation using orthogonal subscales. *Comput. Visual. Sci.*, 4(3) :167–174, 2002.

[6] R Codina. Stabilization of incompressibility and convection through orthogonal subscales in finite element methods. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 190(13-14) :1579–1599, 2000.

[7] R Codina. Stabilized finite element approximation of transient incompressible flows using orthogonal subscales. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 191(39-40) :4295–4321, 2002.

[8] Ramon Codina. Stabilized finite element method for the transient Navier- Stokes equations based on a pressure gradient projection. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 182(3-4) :277–300, 2000.

[9] T. Coupez. Stable-stabilized finite element for 3 D forming calculation. Technical report, Cemef, 1996.

[10] T. Coupez and S. Marie. From direct solver to a parallel iterative solver in 3 D forming simulation. *International Journal Of Supercomputer Applications And High Performance Computing*, 11(4) :277–285, 1997.

[11] T. Dubois, F. Jauberteau, and R. Temam. *Dynamic Multilevel Methods And The Numerical Simulation Of Turbulence*. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.

[12] Lp Franca, A Nesliturk, and M Stynes. On the stability of residual-free bubbles for convection-diffusion problems and their approximation by a two-level finite element method. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 166(1-2) :35–49, Nov 13 1998.

[13] Lp Franca and Sp Oliveira. Pressure bubbles stabilization features in the stokes problem. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 192(16-18) :1929–1937, 2003.

[14] C. Gruau. *Génération De Métriques Pour Adaptation Anisotrope De Maillages, Applications à La Mise En Forme Des Matériaux*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Sup ÉRieure Des Mines De Paris, 2004.

[15] E. Hachem, B. Rivaux, T. Kloczko, H. Digonnet, and T. Coupez. Stable/stabilized mixed-finite element method for incompressible flows with high reynolds number. *Submitted To Journal Of Computational Physics*, December 2009.

[16] Elie Hachem. *Stabilized Finite Element Method For Heat Transfer And Turbulent Flows Inside Industrial Furnaces*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 2009.

[17] Tjr Hughes, Gr Feijoo, L Mazzei, and Jb Quincy. The variational multiscale method - a paradigm for computational mechanics. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 166(1-2) :3–24, Nov 13 1998.

[18] B. Magnin. *Modélisation Du Remplissage Des Moules D'injection Pour Les Polymères Thermoplastiques Par Une Méthode Eulérienne-Legrangienne Arbitraire*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 1994.

[19] A Masud and Ra Khurram. A multiscale/stabilized finite element method for the advection-diffusion equation. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 193(21-22) :1997–2018, 2004. 6th Japan-United States Symposium On Flow Simulation And Modeling, Kyushu, Japan, May 29-31, 2002.

[20] L.C. Mcinnes, S. Balay, W.D. Gropp, and B.F. Smith. Petsc user manual. Technical Report - Revision 2.1.3 Anl-95/11, Argonne National Laboratory, 1995.

[21] A. K. Prasad and J. R. Koseff. Reynolds number and end-wall effects on a lid-driven cavity flow. *Physics Of Fluids*, A1 :208–218, 1989.

[22] G. Scovazzi. A discourse on galilean invariance, supg stabilization, and the variational multiscale framework. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 196(4-6) :1108–1132, 2007.

[23] L. Q. Tang, T. Cheng, and T. T. H. Tsang. Transient solutions for three-dimensional lid-driven cavity flows by a least-squares finite element method. 21 :413–432, 1995.

[24] Te Tezduyar and Y Osawa. Finite element stabilization parameters computed from element matrices and vectors. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 190(3-4, Sp. Iss. Si) :411–430, 2000. 4th Japan-Us Symposium On Finite Element Methods In Latge-Scale Computational Fluid Dynamics, Nihon, Japan, Apr 02-04, 1998.

[25] Wa Wall, M Bischoff, and E Ramm. A deformation dependent stabilization technique, exemplified by eas elements at large strains. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 188(4) :859–871, 2000. 4th World Congress On Computational Mechanics, Buenos Aires, Argentina, Jun 29-Jul 02, 1998.

[26] Y. Zang, R. L. Street, and J. R. Koseff. A dynamic mixed subgrid-scale model and its application to turbulent recirculating flows. *Physics Of Fluids*, A5 :3186–3196, 1993.

Chapitre 3

Écoulements multifluides

Contents

3.1 Introduction 40
3.2 Méthodes numériques pour le suivi d'interface 41
3.2.1 Méthodes de type front tracking 42
3.2.2 Méthodes de type front capturing 43
3.2.3 Méthodes sans maillage 47
3.2.4 Capture/Suivi d'interface et interfaces complexes 47
3.2.5 Méthode Level Set 48
3.3 Approche monolithique 59
3.3.1 Équations de Navier Stokes multifluide 59
3.3.2 Prise en compte de la tension de surface 66
3.3.3 Pas de temps adaptatif 68
3.4 Application Numérique au remplissage 68
3.4.1 Instabilité de Rayleigh-Taylor 68
3.4.2 Écroulement de barrage dans une cavité 69
3.5 Conclusion 70

3.1 Introduction

Les calculs d'interfaces et de surfaces libres sont cruciaux lorsque l'on parle de problèmes d'écoulements multifluides. Ils permettent l'observation de l'évolution que peuvent avoir les différentes phases les unes par rapport aux autres, tout au long d'une simulation. Le solveur d'écoulement présenté dans le chapitre précédent à partir des équations incompressibles de Navier-Stokes n'inclut pas le mouvement des interfaces. Ainsi, il apparaît naturellement le besoin d'introduire une méthode de couplage entre ces équations et un autre type de modèle. La prédiction numérique du mouvement d'une interface dans un milieu continu pose de nombreux problèmes, auxquelles des solutions très diverses ont été apportées, aussi bien dans un contexte lagrangien [21, 29] qu'eulérien. Et même, plusieurs techniques intermédiaires visent à compenser les défauts propres à ces deux approches [6, 14, 38]. Parmi les différentes méthodes qui existent aujourd'hui, on trouve les méthodes de suivi d'interface (interface tracking)[29] et Marker and Cell [35], ou d'autres de capture d'interface (interface capturing) comme Volume of Fluid (VoF)[3] ou Level-Set [1, 41].

Les applications dans ce domaine sont diverses et incluent les problèmes de solidification (solide/liquide), extrusion de polymères (fluide/fluide), remplissage de moules (liquide/gazeux), etc.. De nombreux critères doivent être étudiés afin d'évaluer la qualité d'une méthode de calcul d'interface. Parmi ces critères, on peut citer les propriétés purement géométriques, à savoir la capacité à décrire correctement le mouvement d'une interface dans un champ de vitesse donné. Il est important que la méthode soit robuste et qu'elle converge vers la solution physique. Ainsi pour résumer, les méthodes de calcul d'interface doivent allier des propriétés de haute résolution, de souplesse d'utilisation, et de robustesse, pour supporter des simulations très complexes dans la mécanique des fluides.

Notons Ω un domaine borné et régulier de l'espace, de frontière $\partial\Omega$. Ce domaine se décompose en deux parties $\Omega_1(t)$ et $\Omega_2(t)$ séparées par une interface mobile $\Gamma(t)$.

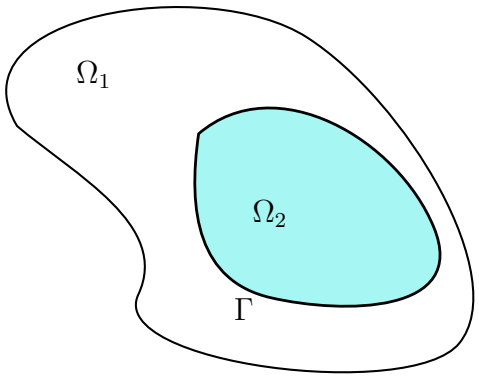


FIGURE 3.1 – Représentation d'un système diphasique à interface

Pour pouvoir simuler correctement des écoulements multiphasiques tels qu'ils ont été décrits précédemment, il est nécessaire de :

- déterminer le où les modèles permettant de décrire le plus fidèlement possible chaque phase ;
- choisir la méthode numérique à mettre en œuvre pour représenter l'interface.

Autant du point de vue de la description de chaque phase que du suivi de l'interface, nous verrons dans les prochaines sections qu'il est possible d'envisager différentes approches dont nous discuterons les avantages et les inconvénients.

3.2 Méthodes numériques pour le suivi d'interface

Il existe dans la littérature différentes méthodes numériques dédiées au suivi d'interface qui peuvent être classées selon :

- qu'elles représentent l'interface de manière diffuse ou exacte ;
- qu'elles s'appuient ou non sur un maillage fixe ou mobile ;
- qu'elles suivent explicitement ou capturent implicitement l'interface.

Nous allons détailler ces différents points par la suite.

Afin de décrire l'évolution de l'interface, il est nécessaire de passer de sa représentation continue à sa formulation discrète. Dans de nombreux cas, les méthodes de suivi d'interface s'appuient sur l'utilisation du maillage employé pour la discrétisation spatiale des inconnues de l'écoulement. Dans ce contexte, des maillages mobiles se déformant avec l'écoulement et dont les éléments épousent la forme de l'interface peuvent être retenus. Cette approche a priori très naturelle peut devenir très coûteuse et complexe à mettre en œuvre lorsque le maillage subit de grandes déformations. Pour contourner cette difficulté, il est fréquent d'utiliser un maillage fixe. Dans ce cas, il est nécessaire de représenter de manière explicite ou implicite 'interface. Enfin, il existe également des méthodes dites "sans maillage" [24, 25].

Parmi les méthodes s'appuyant sur un maillage, on peut distinguer les méthodes dites de "front tracking" et les méthodes dites de "front capturing". Les premières s'appuient sur un suivi explicite de l'interface à l'aide d'objets la représentant (particules par exemple). Ces méthodes sont à opposer à celle de "front capturing" qui capturent l'interface en la représentant de manière implicite à l'aide de la ligne de niveau d'un champ scalaire ou d'une fraction volumique sur tout le domaine.

Parmi les méthodes de suivi d'interface les plus connues on citera les méthodes de "marqueurs" et de "maillage mobile" classées dans les méthodes de "front tracking". Les approches dites de "front capturing" regroupent quant à elles la méthode "Volume of Fluid" et la méthode "Level Set". Il existe également d'autres types d'approches dont les

méthodes “sans maillage” [2].

Une rapide synthèse sur les propriétés de ces méthodes est donnée dans les paragraphes qui viennent.

3.2.1 Méthodes de type front tracking

3.2.1.1 La méthode des marqueurs

En 3D, l'interface est une surface se mouvant dans l'espace et dans le temps. Intuitivement, la première idée à laquelle on pense pour discrétiser l'interface est de positionner des marqueurs tout le long de la surface qui la représente. Pour la déplacer, il suffit donc de faire évoluer chaque point et de reconstruire par interpolation l'interface. C'est le principe de la méthode des marqueurs, utilisée par Tryggvason [35, 20] pour laquelle l'interface est repérée par des marqueurs advectés par l'équation différentielle ordinaire :

$$\frac{d\boldsymbol{x}_k}{dt} = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_k, t), \qquad \boldsymbol{x}_k \in \Gamma \tag{3.1}$$

Chaque particule k de l'interface Γ est repérée par sa coordonnée $\boldsymbol{x}_k$ qui vérifie l'équation ci-dessus, où $\boldsymbol{u}_k$ est la vitesse de la particule k. Cette méthode de type Lagrangien est très précise tant que les particules ne sont pas trop écartées. Dans le cas contraire, il est nécessaire de redistribuer les marqueurs le long de l'interface. L'interpolation du champ de vitesse $\boldsymbol{u}_k$ depuis le maillage du domaine vers chaque marqueur est cependant une opération relativement complexe et coûteuse. De plus, les changements topologiques (fusion ou séparation de bulles par exemple) ne s'effectuent pas naturellement. Enfin, l'extension au 3D est plutôt complexe.

3.2.1.2 La méthode de maillage mobile

Le suivi du front est réalisé grâce à une description explicite de l'interface, au sens où l'interface est décrite par un ensemble d'objets qui seront transportés dans le domaine de calcul à la vitesse locale. Autrement dit, les surfaces font partie intégrante des bords du domaine de calcul, et donc du maillage ; et la déformation dynamique des contours du maillage constitue aussi exactement (aux erreurs de calcul et d'interpolation près) l'évolution de l'interface. La reconnection d'un ensemble d'objets donné permettra de reconstruire la géométrie globale, incluant l'interface. Cette approche est naturelle pour des problèmes de surface libre dans le sens où la condition limite appropriée (une contrainte nulle imposée) peut être appliquée facilement sur les bords connus du maillage. Cependant, ce dernier doit évoluer de la même manière que le fluide, et la distorsion des éléments ou le changement de topologie de surface demandent une procédure très complexe.

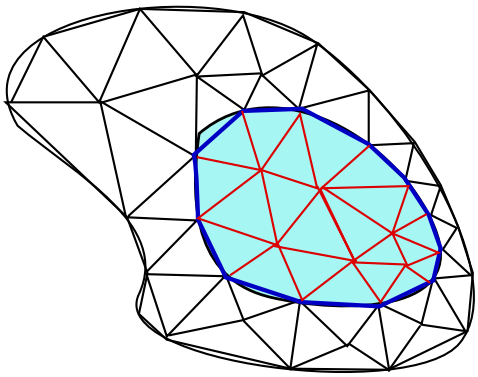


FIGURE 3.2 – Maillage avec une méthode Lagrangienne

3.2.2 Méthodes de type front capturing

Décrire la surface et la paramétrer est facile lorsqu'elle est une partie du bord du maillage ou encore décrite par des particules de type marqueurs. Mais on peut aussi modéliser les surfaces libres sans pour autant devoir les localiser précisément à l'aide de la frontière d'un maillage. Il est possible d'aborder les problèmes de mouvement de surfaces libres et d'interfaces de manière Eulérienne [17]. Pour cela, on considère un champ scalaire qui évolue en fonction du temps grâce à une équation de transport et un champ de vitesse. Ces méthodes sont appelées "capture d'interface". Contrairement aux méthodes d'"interface tracking", la capture d'interface a une approche globale qui considère de façon Eulérienne tous les sous domaines présents dans un écoulement en même temps. Pour traiter le calcul des surfaces libres et des interfaces de façon Eulérienne, le domaine de calcul Ω est supposé fixe au cours du temps. Par contre, il est composé de plusieurs sous domaines qui eux ne sont pas fixes et qui dépendent du temps. Alors que dans les méthodes d'interface tracking l'interface est suivie explicitement par les bords du maillage, celle-ci passe à travers les éléments du maillage dans les méthodes de capture d'interface (figure 3.3).

Il reste maintenant à introduire une fonction servant à différencier les sous domaines et à capturer l'interface. Deux différentes techniques permettent cela : le Volume of Fluid et la Level-Set.

3.2.2.1 Méthode Volume of Fluid

Plutôt que de suivre directement l'évolution de l'interface, les méthodes de type Volume of Fluid sont basées sur la description locale de la phase en présence.
On construit pour cela une fonction caractéristique $F(\boldsymbol{x}, t)$, constante par élément et représentant le taux de remplissage de chaque élément (1 lorsqu'il est entièrement rempli,

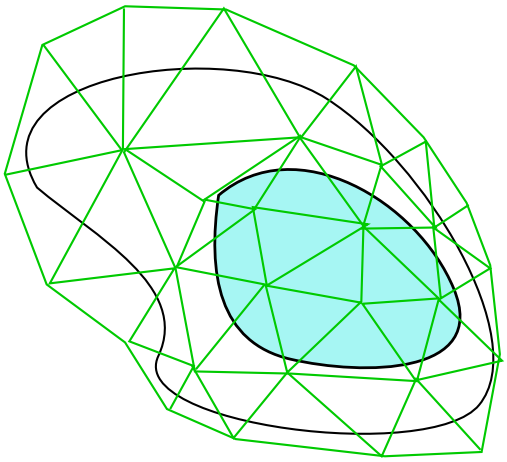


FIGURE 3.3 – Maillage avec une méthode Eulérienne

0 lorsqu'il est vide et intermédiaire s'il est traversé). L'interface peut ensuite être reconstruite en suivant les isovaleurs de la fonction VoF. Cette méthode permet de prendre en compte de manière naturelle les changements topologiques d'interface tels que les recollements ou séparations.

L'évolution de la fonction VoF est décrite par une équation de transport :

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla F \;=\; 0 \qquad \text{avec } F \in [0,1] \tag{3.2}$$

La convection de la fonction F constante par élément se fait grâce à une méthode de type Galerkin discontinu, en résolvant la conservation des flux dans chaque élément, ce qui permet d'assurer par construction la conservation des phases en présence [3, 28]. Cette méthode est également inconditionnellement stable, ce qui la rend très robuste pour décrire des écoulements complexes.

Cependant, l'utilisation d'une fonction P0 ne permet pas de décrire à chaque instant et de manière exacte la position de l'interface. Les éléments contenant des valeurs intermédiaires de la fonction VoF deviennent de plus en plus nombreux à chaque incrément, ce qui crée une grande diffusion numérique et perturbe le résultat final. Pour limiter cette diffusion, on peut avoir recours à des méthodes d'adaptation de maillage autour de l'interface [6].

Bien que la robustesse de cette méthode soit un atout indéniable, ce dernier inconvénient ne permet pas de décrire de manière réaliste un écoulement complexe et sur un grand nombre d'incréments, comme le montre la figure 3.4.

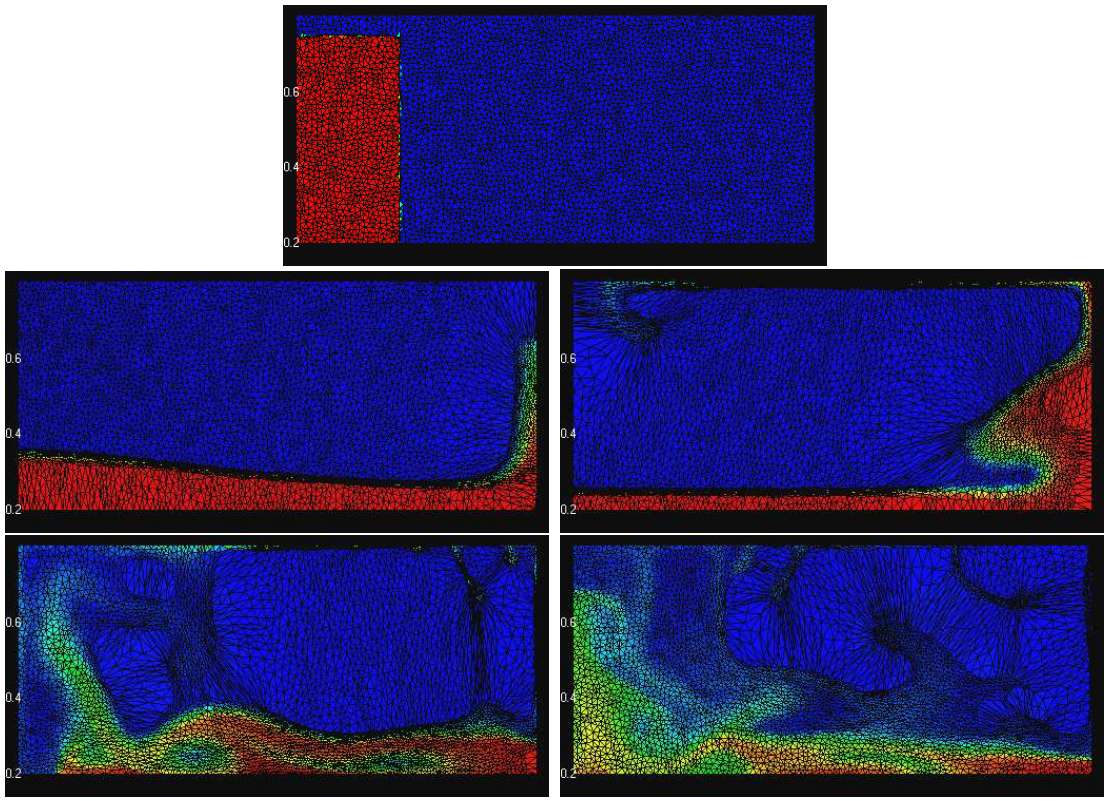


FIGURE 3.4 – Ecroulement de barrage avec méthode Volume of Fluid et adaptation de maillage anisotrope [11]

3.2.2.2 Méthode Level-Set

La méthode Level-Set a été initialement développée en 88 par [26] pour décrire la propagation de fronts de flamme. Elle a ensuite été élargie aux écoulements multifluides et améliorée par de nombreux auteurs [10, 27, 31]. La fonction utilisée par la méthode level-set, contrairement à la fonction VoF qui est liée à chaque phase en présence, est liée directement à l'interface : elle est définie sur chaque nœud du domaine comme la distance signée à l'interface (positive à l'intérieur du domaine et négative à l'extérieur). A partir de cette fonction continue, linéaire par élément, on peut reconstruire à tout instant l'interface comme l'isosurface de valeur 0. Celle-ci est décrite de manière exacte et permet de délimiter distinctement deux domaines sans aucune diffusion numérique. Le caractère régulier de cette fonction la rend également intéressante pour traîter numériquement de nombreux phénomènes proches de l'interface.

De même que la fonction VoF, la fonction level-set est transportée via une équation de convection pure, cette méthode permet donc également de prendre en compte de manière naturelle les changements topologiques tels que les recouvrements ou les séparations. Cependant, la résolution de l'équation de transport n'est pas aussi simple que la précédente, étant donné que la fonction est définie sur les nœuds du domaines et non les éléments. Le caractère hyperbolique de l'équation la rend difficile à résoudre par une méthode Galerkin standard, il faut pour cela utiliser une stabilisation adaptée [15].

Un autre inconvénient initial de la méthode level-set était la détérioration de ses propriétés algébriques lorsque celle-ci est transportée dans un écoulement complexe tel qu'un écoulement turbulent. Cette détérioration altère d'une part la stabilité de la méthode, et empêche l'utilisation de ses particularités intéressantes. Il est alors nécessaire d'effectuer une réinitialisation de la fonction grâce aux équations de Hamilton-Jacobi qui lui permettent de retrouver un caractère régulier.

De nombreuses améliorations, tant sur la résolution du transport, de la réinitialisation, que sur la forme de la fonction, ont permis de rendre la méthode stable, peu coûteuse, et facile à implémenter. Ces différentes améliorations, ainsi que la possibilité de pouvoir décrire de manière exacte l'interface en font une méthode intéressante et efficace pour décrire de nombreux phénomènes multiphasiques [40, 41], de fronts instables [17], de solidification [39, 30, 34, 18] ou encore d'écoulements turbulents.

vvitesse donné. Cependant, bien que cette équation soit exactement

3.2.2.3 Méthode VoF-LS

Il existe également une méthode mixte VoF/Level-Set, développée par Sussman et al [32] ayant pour but de compenser la perte de masse induite par la fonction Level-Set grâce une fonction VoF. La méthode consiste à transporter à chaque incrément une fonction

VoF et une fonction Level-Set, la fonction Level-Set transportée est ensuite corrigée selon la fonction VoF transportée. On reconstruit après la nouvelle fonction VoF à partir de la Level-Set corrigée
Bien que cette méthode permette de corriger la conservation liées aux erreurs lors de la résolution de l'équation de transport, elle n'évite pas les pertes liées à la situation représentée figure 3.5. Cette méthode n'est de plus pas avantageuse au niveau du temps de calcul étant donnée qu'elle requiert la résolution du transport VoF ainsi que du transport Level-Set.

3.2.3 Méthodes sans maillage

Il existe un dernier type de méthode qui diffère des approches du type front tracking ou front capturing. Il s'agit des méthodes dites "meshless methods" parmi lesquelles on distingue la méthode "smoothed particle hydrodynamics" [24, 25] qui est de nos jours la plus utilisée. Initialement introduit en astrophysqiue, ce type de méthode a été par la suite utilisé pour la simulation d'écoulements en mécanique des fluides comme le déferlement de vague ou bien l'effondrement d'un colonne d'eau. Le principe de cette approche est de représenter le fluide par un nombre fini de particules auxquelles on associe un certain nombre de propriétés physiques. Les particules doivent évoluer dans le domaine en respectant des lois d'interaction réalistes qui peuvent s'avérer délicates à construire. Enfin, cette méthode ne permet pas de raffiner autant qu'on le souhaite à un endroit précis du domaine.

3.2.4 Capture/Suivi d'interface et interfaces complexes

Il est important de noter que pour toutes les méthodes de capture et de suivi d'interface, la représentation d'une interface complexe est limitée à la taille de maille utilisée pour le calcul par éléments finis, ce quelle que soit la précision et la convergence du calcul.

On peut prendre l'exemple d'une géométrie plus fine que le maillage, telle que représentée figure 3.5. La méthode Volume of Fluid estimera le taux de remplissage de chaque élément, cependant l'interface est généralement reconstruite en utilisant l'iso valeur 0.5 qui est inexistante si la géométrie représente moins de la moitié du volume d'un élément. De même, avec une méthode level-set, les valeurs de la fonction à tous les nœuds seront positives et l'isovaleur nulle n'existera pas. Pour une méthode sans maillage, on ne pourra pas déterminer de manière exacte le volume représenté par une particule isolée.

Il est pour celà indispensable d'utiliser des maillages adaptés pour chaque type de géométrie à représenter. Les méthodes dites d'adaptation de maillage [23] sont une bonne solution pour optimiser la représentation.

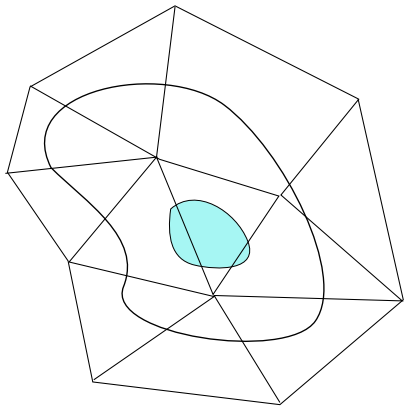


FIGURE 3.5 – Géométrie non détectée par la linéarisation de la Level-Set

3.2.5 Méthode Level Set

Jusqu'à présent, nous avons présenté de manière comparative les diverses méthodes numériques qui permettent de représenter l'interface. A présent, nous allons préciser le choix que nous avons fait.
Premièrement, nous avons choisi une méthode Eulérienne, afin de pouvoir travailler sur un maillage fixe. Deuxièmement, la méthode que nous avons choisi doit pouvoir nous permettre de représenter des transformations complexes de l'interface, notamment des changements de topologie et grandes déformations. Dans ce cas, seule une approche de type interface capturing peut être envisagée. Enfin, cette approche permet de calculer simplement la courbure et la normale à l'interface. Ces quantités peuvent s'avérer utiles lorsque l'on souhaite représenter les effets de la tension de surface. Compte tenu de ces trois aspects, nous avons naturellement convergé vers la méthode Level-Set, dont nous allons détailler les aspects importants dans ce paragraphe.

3.2.5.1 La fonction Level-Set

Nous allons introduire dans ce paragraphe la méthode level-set standard, introduite initialement par [26]. On s'intéresse au domaine de calcul Ω, divisé en plusieurs sous domaines $\Omega_i(t)$ tels que l'ensemble de ces sous domaines représente Ω :

$$\Omega = \bigcup \Omega_i(t) \tag{3.3}$$

Chaque sous domaine $\Omega_i(t)$ peut avoir une frontière mobile, déformable et non connexe.
Lors d'un écoulement multiphasique, chacun représente une phase en présence (solide/liquide/gazeuse). On considère également qu'ils sont tous parfaitement distincts :

$$\bigcap \Omega_i(t) = 0 \tag{3.4}$$

Pour N $\Omega_i'(t)$ sous domaines, il est possible de diviser Ω grâce à $N-1$ sous domaines

intermédiaires $\Omega'_i(t)$, tels que :

$$\Omega_1 = \Omega \setminus \bigcup_{0<i<N} \Omega' i \tag{3.5}$$

$$\Omega_i = \Omega'_{i-1} \setminus \bigcup_{i\leq j<N} \Omega' j \qquad \text{pour } 1 < i \leq N \tag{3.6}$$

La division du domaine Ω en N sous domaines peut donc se faire par l'introduction $N-1$ interfaces $\Gamma_i(t)$ correspondant aux frontières des sous domaines intermédiaires $\Omega'_i(t)$. On établit alors un ordre de priorité croissant entre les interfaces afin de respecter la relation (3.5).

A chaque interface $\Gamma_i(t)$, on peut définir en chaque point du domaine une fonction level-set $\alpha_i(t)$ correspondant à la fonction distance signée à l'interface :

$$\begin{cases} \alpha_i(\boldsymbol{x},t) &= dist(\boldsymbol{x},\Gamma_i(t)) & \text{dans } \Omega'_i(t) \\ \alpha_i(\boldsymbol{x},t) &= 0 & \text{sur } \Gamma_i(t) \\ \alpha_i(\boldsymbol{x},t) &= -dist(\boldsymbol{x},\Gamma_i(t)) & \text{dans } \Omega \setminus \Omega'_i(t) \end{cases} \tag{3.7}$$

où $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$, $t \in \mathbb{R}^+$ et d est la dimension spatiale. A partir de cette fonction continue, linéaire par élément, on peut reconstruire à tout instant l'interface en tant qu'isosurface 0 :

$$\Gamma_i(t) = \{\boldsymbol{x} \ ; \ \alpha_i(\boldsymbol{x},t) = 0\} \tag{3.8}$$

La fonction level-set initiale peut être facilement calculée si la forme est de type analytique, mais demande l'utilisation d'algorithmes plus coûteux pour des sous domaines de forme complexe. Un exemple de cette fonction est représenté figure 3.6.

Lorsqu'un point est initialement positionné sur l'interface, il est logique de considérer qu'il reste sur l'interface tout au long de la transformation. On peut donc poser l'équation de convection pure :

$$\left.\frac{d\alpha(\boldsymbol{x},t)}{dt}\right|_{\boldsymbol{x}\in\Gamma_i(t)} = 0 \tag{3.9}$$

On peut alors généraliser l'équation sur l'ensemble du domaine :

$$\frac{d\alpha(\boldsymbol{x},t)}{dt} = 0 \qquad \forall \boldsymbol{x} \in \Omega \tag{3.10}$$

La fonction level-set peut alors être transportée par un champ de vitesse $\boldsymbol{v}$ quelconque, généralement calculé par les équations de Navier-Stokes. L'interface $\Gamma_i(t)$ peut être reconstruite à chaque instant t grâce à l'isosurface de valeur nulle.

Cependant, une particule initialement proche de l'interface peut se retrouver à un instant donné beaucoup plus éloignée, et inversement. L'équation de convection pur ne

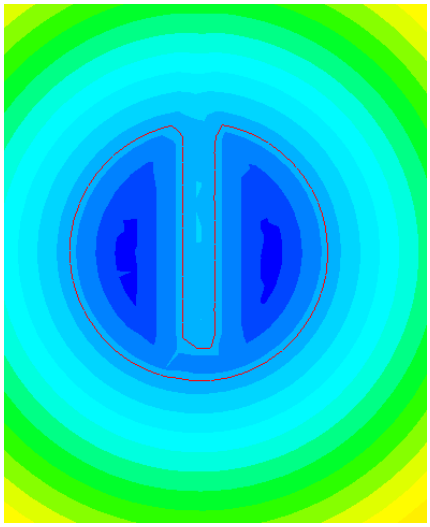


FIGURE 3.6 – Représentation de la fonction Level-Set sur une géométrie simple

permet pas de prendre en compte ce type de changement, en effet à chaque particule est associée une fonction distance qui n'évolue pas au cours du temps. Cette erreur entraîne une détérioration de la fonction level-set, qui peut être ratrappée en ayant recours à des techniques de réinitialisation basées sur les équations de Hamilton-Jacobi.

3.2.5.2 Résolution de l'équation de transport continue

Un des avantages de la méthode level-set est la simplicité de l'équation à résoudre pour suivre le déplacement des interfaces. Cette équation est facilement implémentable dans un code éléments finis, à condition de disposer d'une méthode de résolution robuste et d'y intégrer une stabilisation adaptée, que nous allons développer dans ce paragraphe.

Formulation forte

L'objectif de la méthode level-set est de pouvoir décrire l'évolution d'une interface mobile dans un champ de vitesse $\boldsymbol{u}$ donné. Ce champ peut être directement la solution de l'équation de Navier-Stokes, ou encore correspondre à une vitesse de propagation, ou de croissance, comme montré dans le chapitre 6.5.

La fonction level-set α est transportée par l'équation de convection pure suivante :

$$\frac{d\alpha(\boldsymbol{x},t)}{dt} = 0 \tag{3.11}$$

Comme tout système d'équation aux dérivées partielles, il faut y associer des conditions initiales et des conditions aux limites. Dans le cadre d'une équation de convection pure, ces dernières sont de type Dirichlet et appliquée aux frontières de Ω où la vitesse est entrante :

$$\left\{ \begin{array}{rcll} \dfrac{\partial \alpha(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} + \nabla\alpha(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{u} &=& 0 & \text{dans } \Omega \\ \alpha(\boldsymbol{x},0) &=& \alpha_0 & \text{dans } \Omega \\ \alpha(\boldsymbol{x},t) &=& g & \text{sur } \partial\Omega^- \end{array} \right. \tag{3.12}$$

où $\partial\Omega^- = \{\boldsymbol{x} \in \partial\Omega \ ; \ \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{n} < 0\}$ représente la partie de la frontière où les vitesses sont entrantes, sur laquelle on impose une condition aux limites.

Formulation variationnelle

On définit les espaces $\mathcal{A}$ et $\mathcal{A}_0^-$ de la manière suivante :

$$\mathcal{A} = \mathcal{H}^1(\Omega) = \{ \ q \in \mathcal{L}^2(\Omega) \ ; \ \nabla q \in \mathcal{L}^2(\Omega) \ \} \tag{3.13}$$

$$\mathcal{A}_0^- = \{ \ q \in \mathcal{H}^1(\Omega) \ ; \ q = 0 \text{ sur } \partial\Omega^- \ \} \tag{3.14}$$

où $\mathcal{L}^2(\Omega)$ est l'espace de Lebesgue des fonction carrées sommables sur un domaine Ω, et $\mathcal{H}^1(\Omega)$ est l'espace de Sobolev inclus dans $\mathcal{L}^2(\Omega)$:

$$\mathcal{L}^2(\Omega) = \left\{ q \ ; \ \int_\Omega q^2 dV < \infty \right\} \tag{3.15}$$

Dans $\mathcal{L}^2(\Omega)$, le produit scalaire est défini par :

$$(f_1, f_2) = \int_\Omega f_1 f_2 dV \qquad \forall f_1, f_2 \in \mathcal{L}^2(\Omega) \tag{3.16}$$

Soit α^* une fonction test quelconque appartenant à l'espace $\mathcal{A}_0^-$, pour écrire la formulation variationnelle du problème de convection pure, on réalise le produit scalaire au sens $\mathcal{L}^2(\Omega)$ de l'équation avec α^*. La forme faible du probleme est la suivante :
touver $\alpha \in \mathcal{A}$ tel que

$$\int_\Omega \frac{\partial \alpha}{\partial t}.\alpha^* dV + \int_\Omega (\boldsymbol{u}\nabla\alpha).\alpha^* dV = 0 \qquad \forall \alpha^* \in \mathcal{A}_0^- \tag{3.17}$$

soit :

$$\left(\frac{\partial \alpha}{\partial t}, \alpha^*\right) + (\boldsymbol{u}\nabla\alpha, \alpha^*) = 0 \qquad \forall \alpha^* \in \mathcal{A}_0^- \tag{3.18}$$

Formulation discrète

Pour résoudre le problème par une approche éléments finis, on décompose le domaine de calcul Ω en un ensemble de simplexes (triangle en 2D, tétraèdres en 3D) K de dimension h. L'ensemble de ces simlpexes constitue le maillage $\mathcal{T}_h(\Omega)$ de Ω. On peut alors construire les espaces vectoriels discrétisés $\mathcal{A}_h$ et $\mathcal{A}_h^0$ de dimensions finies.

La focntion level-set α est approchée par une fonction $\alpha_h \in \mathcal{A}_h$ continue et linéaire par élément. La formulation discrète de l'équation de transport est la suivante :
trouver $\alpha_h \in \mathcal{A}_h$ tel que

$$\left(\frac{\partial \alpha_h}{\partial t}, \alpha_h^*\right) + (\boldsymbol{u}\nabla\alpha_h, \alpha_h^*) = 0 \qquad \forall \alpha_h^* \in \mathcal{A}_0^- \tag{3.19}$$

Stabilisation numérique

Bien que les méthodes éléments finis se montrent très stables et robustes pour de nombreuses applications, la résolution d'un système d'équations à caractère hyperbolique dominant, tels que l'équation de convection, peut engendrer des problèmes d'oscillations numériques, altérant ainsi la solution du problème, comme le montre la figure 3.7. C'est pout cette raison qu'il est important d'introduire une méthode de stabilisation, afin d'atténuer les instabilités numériques sans modifier l'équation résolue.

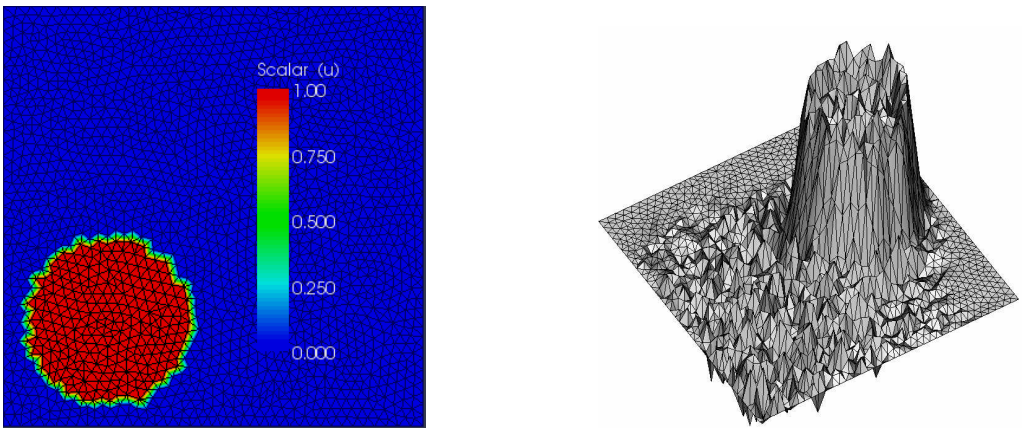


FIGURE 3.7 – Convection d'une fonction raide par une méthode Galerkin standard [16]

Il est imoprtant également de noter que la convection d'une fonction régulière de type level-set engendre beaucoup moins d'oscillations qu'une fonction raide comme celle présentée figure 3.7. Néanmoins, les méthodes de stabilisation de type "Streamline-Upwind-Petrov–Galerkin" (SUPG) ou encore "Residual Free Bubbles" (RFB) [8] s'avèrent très utiles à la résolution du problème.

Nous nous intéressons dans ce paragraphe à la stabilisation de l'équation générale suivante :

$$(L(\boldsymbol{u}_h), \boldsymbol{w}_h) = (f, \boldsymbol{w}_h) \tag{3.20}$$

où $L(\boldsymbol{u}_h)$ fait intervenir des termes de convection et éventuellement de diffusion.

De manière générale, la stabilisation consiste à ajouter un terme de diffusion le long des lignes de courant. Ce terme supplémentaire est fonction du résidu r, d'un opérateur L_op appliqué aux fonctions test ainsi que d'un paramètre de stabilisation τ_K constant par élément :

$$(L(\boldsymbol{u}_h), \boldsymbol{w}_h) + \sum_K \tau_K (r, L_{op}(\boldsymbol{w}_h))_K = (f, \boldsymbol{w}_h) \tag{3.21}$$

Le terme de stabilisation introduit s'annule donc avec le résidu lorsque la solution du problème est atteinte. Cette propriété permet de conserver la convergence du problème, soit que la solution du problème discret converge vers la solution du problème continu.

Dans ce paragraphe, nous ne détaillerons que la méthode SUPG utilisée pour stabiliser la convection de la fonction Level-Set. La méthode RFB [8] également classiquement utilisée dans la littérature s'avère en effet similaire en terme d'implémentation et d'effet sur la stabilisation.

La technique "Streamline Upwind Petrov Galerkin", introduite par [9], consiste à utiliser pour les fonctions test un espace vectoriel $\widetilde{\mathcal{A}}_h$ différent de l'espace vectoriel $\mathcal{A}_h$ utilisé pour le champ solution. La formulation faible du problème discret devient :

$$\begin{array}{c} \text{Trouver } \alpha_h \in \mathcal{A}_h, \forall \widetilde{\alpha}_h^* \in \widetilde{\mathcal{A}}_h \text{ tel que :} \\ \left(\dfrac{\partial \alpha_h}{\partial t} \ , \ \widetilde{\alpha}_h^*\right) + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla \alpha_h \ , \ \widetilde{\alpha}_h^*) = 0 \end{array} \tag{3.22}$$

Les fonctions test utilisées par la méthode SUPG sont de la forme suivante :

$$\widetilde{\alpha}_h^* = \alpha_h^* + \tau_K^{SUPG} \boldsymbol{u} \cdot \nabla \alpha_h^* \tag{3.23}$$

Le paramètre de stabilisation τ_K^{SUPG} est défini constant par élément et dépend de la taille de maille dans la direction de l'écoulement $h_K = \dfrac{\boldsymbol{u} \cdot \nabla N_i}{|\boldsymbol{u}|}$ et de la vitesse moyenne dans l'élément $\boldsymbol{u}|_K$.

$$\tau_K^{SUPG} = \frac{1}{2} \frac{h_K}{\boldsymbol{u}|_K} \tag{3.24}$$

L'ajout du terme de stabilisation dans la fonction test permet de faire apparaître une diffusion numérique dans la direction de la vitesse, ce qui permet d'atténuer le caractère hyperbolique de l'équation.

Si on développe les produits de la formule (3.22), on obtient :

$$\left(\frac{\partial \alpha_h}{\partial t} \ , \ \alpha_h^* + \tau_K^{SUPG} \nabla \alpha_h^* \cdot \boldsymbol{u}\right) + \left(\nabla \alpha_h \cdot \boldsymbol{u} \ , \ \alpha_h^* + \tau_K^{SUPG} \nabla \alpha_h^* \cdot \boldsymbol{u}\right) = 0 \tag{3.25}$$

Puis

$$\begin{aligned} &\underbrace{\left(\frac{\partial \alpha_h}{\partial t} \ , \ \alpha_h^*\right) + (\boldsymbol{u} \nabla \alpha_h \ , \ \alpha_h^*)}_{(1)} + \underbrace{\tau_K^{SUPG} \left(\frac{\partial \alpha_h}{\partial t} \ , \ \nabla \alpha_h^* \cdot \boldsymbol{u}\right)}_{(2)} \\ &\qquad + \underbrace{\tau_K^{SUPG} \left(\nabla \alpha_h \cdot \boldsymbol{u} \ , \ \nabla \alpha_h^* \cdot \boldsymbol{u}\right)}_{(3)} = 0 \end{aligned} \tag{3.26}$$

On retrouve alors la partie Galerkin standard (terme (1)), ainsi que deux termes supplémentaires (terme (2) et terme (3)). Le terme (2) est quasiment le symétrique du terme advectif de la partie Galerkin ; la partie (3) est un terme symétrique, à caractère elliptique,

qui crée la diffusion numérique recherchée le long des lignes de courant.

On peut maintenant relancer le cas de convection pure présenté dans la figure 3.7, qui faisait apparaître de nombreuses oscillations avec la méthode de Galerkin standard. La figure 3.8 nous montre le même cas obtenu avec la méthode de stabilisation SUPG développée dans ce paragraphe.

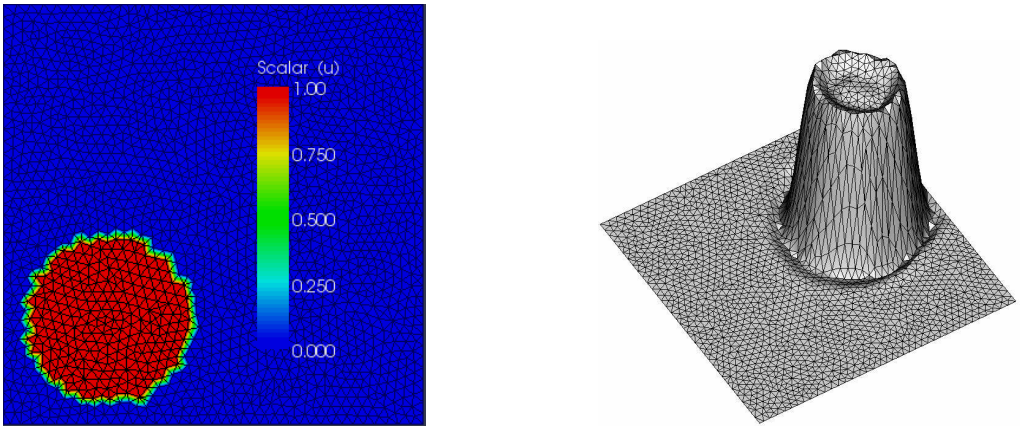


FIGURE 3.8 – Convection d'une fonction abrupte par une méthode SUPG [16]

On remarque que la solution obtenue est nettement améliorée, même si quelques oscillations persistent. Néanmoins, ces oscillations résiduelles seront limitées par l'utilisation d'une fonction Level-Set régulière.

3.2.5.3 Réinitialisation - Equations de Hamilton Jacobi

Avec une méthode de type Level-Set présentée précédemment, une fonction Level-Set $\alpha(\boldsymbol{x}, t)$ est initialisée comme une fonction distance signée à l'interface :

$$\alpha(\boldsymbol{x}, t = 0) \;=\; dist(\boldsymbol{x}, \Gamma(t = 0)) \tag{3.27}$$

Ainsi, l'interface initiale $\Gamma(t = 0)$ est représentée par le niveau zéro de $\alpha(\boldsymbol{x}, t = 0)$. Puis, alors que cette fonction est transportée par l'équation de convection pure vue précédemment, l'interface est capturée implicitement à l'instant t avec le niveau zéro de $\alpha(\boldsymbol{x}, t)$:

$$\Gamma(t) \;=\; \{\; \boldsymbol{x} \;;\; \alpha(\boldsymbol{x}, t) = 0 \;\} \tag{3.28}$$

Cependant, le champ de vitesse solution d'un solveur d'écoulements incompressibles étant généralement fortement cisaillé dans les applications que l'on veut simuler, le transport de l'interface fait que $\alpha(\boldsymbol{x}, t)$ peut se détériorer rapidement. Finalement, la fonction Level-Set devient trop altérée pour que l'interface soit transportée efficacement, et ce même avec une stabilisation de type SUPG. De fait, une telle fonction fait apparaître des gradients trop importants localement, proche de l'interface, et cause des oscillations résultantes d'une instabilité numérique grandissante.

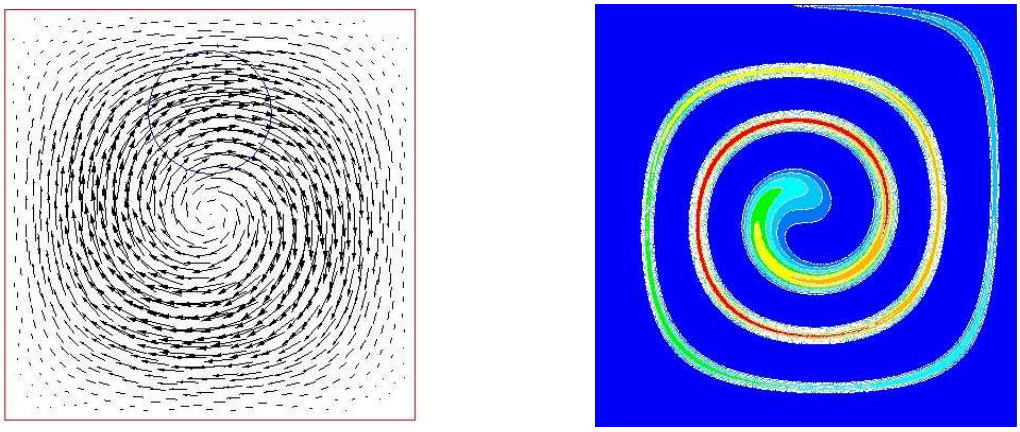


FIGURE 3.9 – Transport d'une fonction Level-Set dans un vortex

La figure 3.9 représente une fonction Level-Set altérée par son transport dans un vortex. On remarque clairement que la fonction ainsi transportée ne s'apparente plus à une fonction distance.

Il existe plusieurs méthodes de réinitialisation qui ont pour but de redéfinir la fonction level-set comme une fonction distance, tout en gardant la position de l'interface. Une façon naturelle serait de localiser explicitement l'interface avec une technique d'interpolation, puis de calculer la distance à cette interface en tout point du maillage [22]. Cette approche brutale a pour avantage de ne pas changer l'interface au delà de la précision du schéma d'interpolation, mais elle a l'inconvénient d'être très coûteuse et de pouvoir introduire des irrégularités approximatives aux données, et notamment dans le cas de fortes courbures. Une procédure de lissage est donc souvent nécessaire pour améliorer cette approche. D'autre part, une solution plus élégante est présentée dans [33], c'est celle ci que nous choisissons d'étudier.
Dans cet article, un algorithme de réinitialisation est mis au point. Celui-ci se présente sous la forme d'une équation au dérivées partielles instationnaire que l'on doit résoudre jusqu'à ce qu'on aboutisse à un état stationnaire qui correspond à une réinitialisation complète de la fonction α dans l'ensemble du domaine.

L'idée de base est de redonner à la fonction Level-Set α ses deux propriétés les plus importantes :

- $|\nabla \alpha| = 1$
- $\alpha(\boldsymbol{x}, t) = 0$ si et seulement si $\boldsymbol{x} \in \Gamma(t)$

Pour réaliser cela, à un instant t fixé de l'écoulement, on considère un espace temps fictif, de paramètre $\tau \in \mathbb{R}^+$. On souhaite obtenir une fonction $\alpha_r(\boldsymbol{x}, t)$ respectant les propriétés précédentes à partir de la fonction altérée $\alpha(\boldsymbol{x}, t)$. On utilise une fonction Level-Set paramètre $\phi(\boldsymbol{x}, \tau)$ sur laquelle on effectue la phase de réinitialisation. On souhaite

donc :

$$\left\{\begin{array}{rcll} \phi(\boldsymbol{x},\tau=0) & = & \alpha(\boldsymbol{x},t) & \\ \phi(\boldsymbol{x},\tau)=0 & \Longleftrightarrow & \alpha(\boldsymbol{x},t)=0 & \forall \boldsymbol{x},\tau \\ \lim\limits_{\tau\to\infty}\phi(\boldsymbol{x},\tau) & = & \alpha_r(\boldsymbol{x},t) & \\ |\nabla\alpha_r(\boldsymbol{x},t)|=1 & \forall \boldsymbol{x} & & \end{array}\right. \tag{3.29}$$

On corrige ensuite localement la valeur de ϕ en fonction de la valeur de son gradient en posant l'équation de Hamilton-Jacobi :

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} \;=\; S(\phi)\,(1-|\nabla\phi|) \tag{3.30}$$

où $S(\phi)$ est la fonction signe de ϕ :

$$S(\phi)=\left\{\begin{array}{ll} -1 & \text{si } \phi<0 \\ 0 & \text{si } \phi=0 \\ 1 & \text{si } \phi>0 \end{array}\right. \tag{3.31}$$

La résolution de cette équation jusqu'à un état stationnaire ($\frac{\partial\phi}{\partial t}=0$) permet d'obtenir une fonction respectant les conditions précédentes, comme le montre la figure 3.10

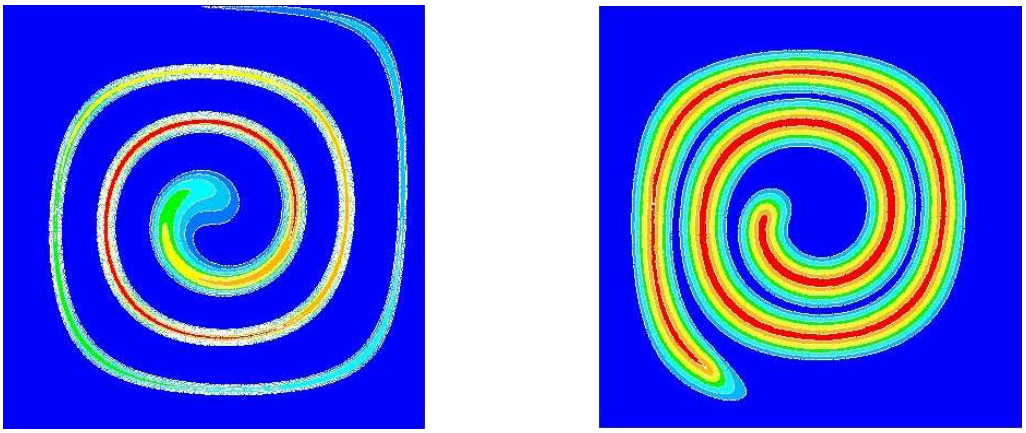


FIGURE 3.10 – Réinitialisation d'une fonction Level-Set locale

3.2.5.4 Méthode Level Set locale à réinitialisation convective

Dans ce paragraphe, nous allons présenter la méthode Level-Set utilisée dans nos travaux, la "méthode Level-Set locale à réinitialisation convective" [37].

Fonction Level-Set

La fonction Level-Set utilisée ici est la fonction aux niveaux sinusoïdaux suivante :

$$\alpha=\left\{\begin{array}{ll} 2E/\pi & \text{pour } \phi>E \\ \dfrac{2E}{\pi}\sin\left(\dfrac{\pi}{2E}\phi\right) & \text{pour } |\phi|<E \\ -2E/\pi & \text{pour } \phi<-E \end{array}\right. \tag{3.32}$$

où ϕ est la fonction Level-Set standard et E est une distance constante fixée en fonction du maillage ; typiquement $E \simeq 20.h$ afin d'assurer la régularité de la fonction tout en limitant sa zone de variation. Cette fonction, représentée figure 3.11, est équivalente à une

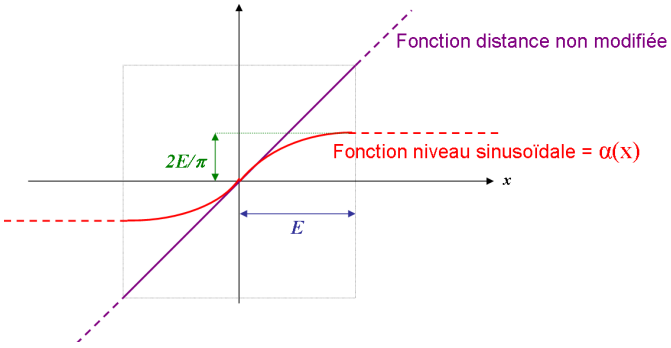


FIGURE 3.11 – Fonction Level-Set aux niveaux sinusoïdaux

fonction distance aux alentours de l'interface, ce qui permet de définir correctement le niveau zéro représentant l'interface, ainsi que construire les différents paramètres comme sa normale $\boldsymbol{n} = |\alpha|$, ou encore les lois de mélange associées (cf. section suivante).
Pour une distance à l'interface supérieure à la variable E, la fonction Level-Set est constante, ce qui annule tous les termes de l'équation de transport. L'utilisation d'une telle fonction locale permet donc de limiter la résolution de l'équation de transport aux alentours de l'interface, ce qui diminue grandement le coût de calcul, en particulier pour les grands maillages.

La nouvelle fonction introduite n'étant plus une fonction distance signée ($|\nabla\alpha| \neq 1$), l'équation de Hamilton-Jacobi introduite en (3.30) n'est plus valide. En effet, dans notre cas, on a :

$$|\nabla\alpha| = \sqrt{1 - \left(\frac{\pi}{2E}\alpha\right)^2} \neq 1 \tag{3.33}$$

Afin de réinitialiser une fonction Level-Set aux niveaux sinusoïdaux altérée, il suffit de modifier l'équation de Hamilton-Jacobi (3.30) à l'aide de l'équation (3.33) :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{\partial\phi}{\partial\tau} & = & S(\phi)\left(\sqrt{1 - \left(\dfrac{\pi}{2E}\phi\right)^2} - |\nabla\phi|\right) \\ \phi(\boldsymbol{x}, \tau = 0) & = & \alpha(\boldsymbol{x}, t) \end{array} \right. \tag{3.34}$$

Reinitialisation convective
Lorsque la fonction Level-Set est altérée, l'étape de réinitialisation demande l'arrêt du calcul de l'écoulement pour la résolution de l'équation de Hamilton Jacobi. Ceci demande donc un critère de réinitialisation ainsi qu'un coût de calcul supplémentaire. Ainsi, l'équation de réinitialisation de la Level-Set aux niveaux sinusoïdaux (3.34) peut être pénalisée

dans l'équation de transport, afin de prévenir son altération lors du transport et par conséquence se relâcher de l'étape de réinitialisation. On obtient :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \alpha}{\partial t} + \boldsymbol{u}.\nabla\alpha + \lambda S(\alpha)\left(|\nabla\alpha| - \sqrt{1-\left(\dfrac{\pi}{2E}\alpha\right)^2}\right) = 0 \\ \alpha(t=0,x) = \alpha_0(x) \end{cases} \tag{3.35}$$

où λ est le paramètre de pénalisation, homogène à une vitesse : $\lambda = \dfrac{h}{\Delta t}$.

Sur l'interface, $(S(\alpha) = 0)$, on respecte bien l'équation de transport (3.9). De plus, la pénalisation de l'équation de Hamilton-Jacobi permet de conserver à tout moment et en tout point du domaine la forme de la fonction Level-Set telle que définie en (3.32).

Implémentation numérique

De manière générale dans un modèle éléments finis, l'interface ne coïncide pas avec les nœuds du maillage, pour être sûr de ne pas modifier la position de l'isovaleur zéro avec le nouveau terme introduit, il convient d'agir sur la fonction signe $S(\alpha)$. On définit alors la fonction signe élargie avec une épaisseur d'interface $L_{min} \simeq 2.h$:

$$S(\alpha) = \begin{cases} -1 & \text{si } \alpha < -L_{min} \\ 0 & \text{si } -L_{min} < \alpha < L_{min} \\ 1 & \text{si } \alpha > L_{min} \end{cases} \tag{3.36}$$

De plus, on peut poser $|\nabla\alpha| = \dfrac{\nabla\alpha \cdot \nabla\alpha}{|\nabla\alpha|}$, ce qui nous donne la formule suivante :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \left(\boldsymbol{u} + \lambda S(\alpha)\frac{\nabla\alpha}{|\nabla\alpha|}\right)\nabla\alpha = \lambda S(\alpha)\sqrt{1-\left(\frac{\pi}{2E}\alpha\right)^2} \tag{3.37}$$

En posant $g(\alpha) = \lambda S(\alpha)\sqrt{1-\left(\dfrac{\pi}{2E}\alpha\right)^2}$ et $\boldsymbol{U} = \lambda S(\alpha)\dfrac{\nabla\alpha}{|\nabla\alpha|}$, la formule simplifiée est la suivante :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + (\boldsymbol{u} + \boldsymbol{U}) \cdot \nabla\alpha = g(\alpha) \tag{3.38}$$

où les deux termes $\boldsymbol{U}$ et $g(\alpha)$ sont intégrés de manière implicite avec les résultats du pas de temps précédent.

La réinitialisation convective est donc ramenée à une simple équation de convection avec terme source résolue avec la méthode de stabilisation de type SUPG présentée précédemment. Cette équation suffit à elle seule à transporter la fonction et à faire respecter son caractère sinusoïdal. La vitesse de convection est enrichie d'un nouveau terme $\boldsymbol{U}$ pointant vers l'extérieur, de manière à propager le processus de réinitialisation depuis les points les plus proches de l'interface vers les points les plus éloignés.

3.3 Approche monolithique

3.3.1 Équations de Navier Stokes multifluide

Dans la méthode de résolution d'écoulements multifluides, l'équation résolue reste la même que pour un calcul monofluide :

$$\begin{cases} \rho^{eq}\left(\dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \boldsymbol{u}\nabla\boldsymbol{u}\right) - \nabla(2\eta^{eq}\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})) + \nabla p = f^v \\ \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \end{cases} \tag{3.39}$$

Plutôt que de décomposer le système en plusieurs sous-domaines distincts et de résoudre l'écoulement pour chaque sous-domaine séparément, puis de traiter les interactions et continuités, la méthode monolithique considère le domaine entier comme un seul fluide possédant des propriétés physiques variables dans le temps mais aussi dans l'espace.
Ainsi, l'équation (3.91), résolue une seule fois pour tout le domaine, fait intervenir une masse volumique et une viscosité dépendant de la phase dont fait partie chaque point du domaine. Nous allons voir par la suite comment définir ces paramètres en fonction des masses volumiques et viscosité moléculaires de chaque phase en fonction des fonctions Level-Set définies dans le paragraphe précédent.

3.3.1.1 Fonctions caractéristiques

La première étape afin de déterminer les propriétés physiques équivalentes est de définir les fonction caractéristiques H^i de chaque phase Ω_i. Dans la théorie, on a :

$$H^i(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \boldsymbol{x} \in \Omega_i \\ 0 & \text{si } \boldsymbol{x} \notin \Omega_i \end{cases} \tag{3.40}$$

Dans la pratique, les interfaces n'étant généralement pas coïncidentes avec les nœuds du maillage, il est impossible de définir de telles fonctions. De plus, ce type de fonction n'est compatible qu'avec une interpolation discontinue. On utilise des fonctions caractéristiques régularisées, dépendant de chaque Level-Set α^i.

Pour un écoulement avec n fluides en présence, $n-1$ fonctions Level-Set suffisent à définir les fonctions caractéristiques. Pour deux fluides, une seule fonction α suffit donc et on peut définir plusieurs types de fonction caractéristique :

– une fonction continue linéaire par élément :

$$H(\alpha_h) = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha_h > \epsilon \\ \dfrac{1}{2}\left(1 + \dfrac{\alpha_h}{2\epsilon}\right) & \text{si } -\epsilon < \alpha_h < \epsilon \\ 0 & \text{si } \alpha_h > \epsilon \end{cases} \tag{3.41}$$

où ϵ représente l'épaisseur de la fonction de mélange, de l'ordre de la taille de maille mais toujours supérieur (typiquement $\epsilon = 1.5h$).

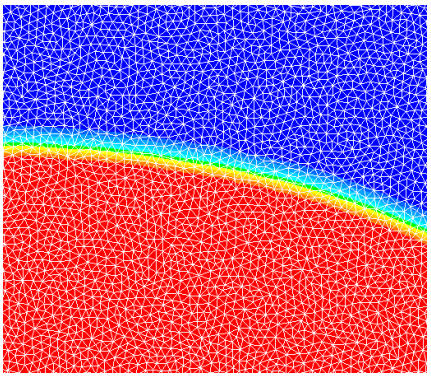


FIGURE 3.12 – Fonction Heavyside linéaire par élément

Cette première forme, représentée figure 3.12, permet d'avoir une fonction très régulière, assurant la stabilité de la transition.
Si le maillage utilisé est anisotrope non adapté à l'interface, il est nécessaire d'utiliser une épaisseur de mélange dépendant de la métrique locale, mais également de l'orientation de l'interface : en effet, si on choisit la valeur de taille de maille la plus petite, on risque de se trouver en dessous de la précision du maillage dans certaines zones, si on choisit la plus grande taille de maille, on perd l'intérêt de l'adaptation. Pour ce faire, il est utile de connaître la taille de maille dans la direction de la normale à l'interface. Si l'on considère que la métrique définit une ellipsoïde de dimensions $h_1 \times h_2 \times h_3$, alors la coordonnée radiale $r(\boldsymbol{n})$ associée au vecteur unitaire $\boldsymbol{n}(n_1, n_2, n_3)$ s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{1}{r^2(\boldsymbol{n})} = \frac{n_1^2}{h_1^2} + \frac{n_2^2}{h_2^2} + \frac{n_3^2}{h_3^2} \tag{3.42}$$

ce qui revient a écrire la forme matricielle :

$$\frac{1}{r^2(\boldsymbol{n})} = \boldsymbol{n}^T \mathbb{M} \boldsymbol{n} \tag{3.43}$$

Cette valeur représente la taille de maille directionnelle associée au vecteur $\boldsymbol{n}$ Au final, l'épaisseur de mélange est définie en fonction du produit scalaire associé à la métrique $\mathbb{M}$:

$$\epsilon \;=\; z \frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{n}_\Gamma^T \mathbb{M} \boldsymbol{n}_\Gamma}} \tag{3.44}$$

où z est le paramètre définissant le nombre d'éléments sur lesquels la loi de mélange est définie ($z \sim 2$ éléments).
Cette loi de mélange anisotrope, représentée figure 3.13, permet d'adapter l'épaisseur de mélange en fonction d'un maillage anisotrope non adapté à la Level-Set.

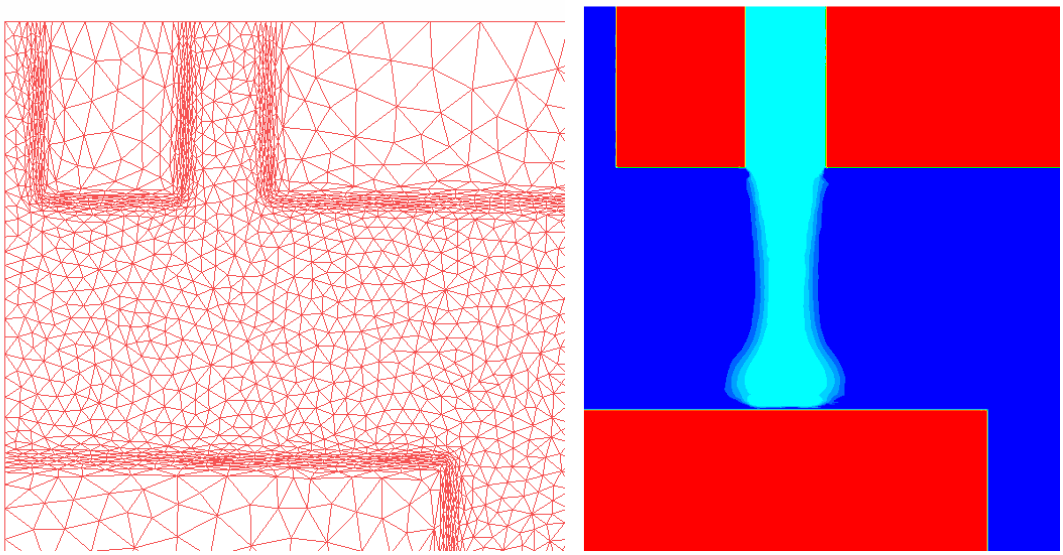


FIGURE 3.13 – Loi de mélange anisotrope

– une fonction discontinue constante par élément K :

$$H(\alpha)|_K = \frac{Volume(\Omega_1 \cap K)}{Volume(K)} \tag{3.45}$$

Cette fonction prend la valeur 1 pour les éléments totalement remplis par Ω_1, 0 pour les éléments totalement vides, et ne prend des valeurs intermédiaires que pour les éléments traversés par l'interface. Cette forme, représentée figure 3.14, s'approche

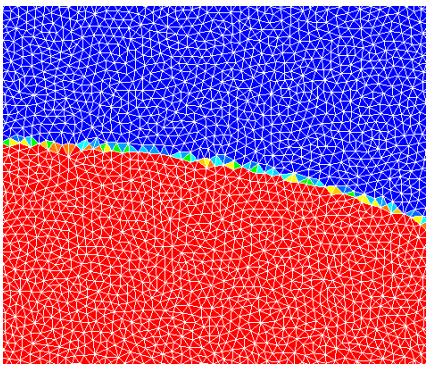


FIGURE 3.14 – Fonction caractéristique constante par élément

quant à elle d'une fonction de type Volume of Fluid, et permet d'obtenir une transition plus rapide et plus fine de l'interface qu'avec la fonction précédente. Elle a également l'avantage de ne dépendre d'aucune épaisseur prédéfinie.

Toujours pour un calcul bi-fluides, on peut définir les deux fonctions caractéristique de la manière suivante :

$$H^1(\alpha) = H(\alpha) \tag{3.46}$$
$$H^2(\alpha) = 1 - H(\alpha) \tag{3.47}$$

Pour un nombre plus élevé de phases en présence, on ne peut pas définir chaque fonction caractéristique uniquement en fonction de sa fonction Level-Set associée. En effet, afin de rester consistant, il convient de respecter la relation suivante :

$$\sum_i H^i = 1 \tag{3.48}$$

La manière la plus naturelle et la plus simple pour un système de trois fluides en présence serait de définir les fonctions caractéristiques de la manière suivante :

$$\begin{aligned} H^1(\alpha_1, \alpha_2) &= H(\alpha_1) && (3.49)\\ H^2(\alpha_1, \alpha_2) &= H(\alpha_2) && (3.50)\\ H^3(\alpha_1, \alpha_2) &= 1 - H(\alpha_1 - H(\alpha_2) && (3.51) \end{aligned}$$

Cependant, cette formule ne prend pas en compte la possibilité que H^1 et H^2 se superposent à cause d'erreurs lors de la résolution du transport ou simplement compte tenu de l'initialisation de chacun chacun des domaines. Pour veiller que la relation (3.48) soit toujours vérifiée, on définit un ordre de priorité entre les phases. On utilisera alors par exemple :

$$\begin{aligned} H^1(\alpha_1, \alpha_2) &= H(\alpha_1) && (3.52)\\ H^2(\alpha_1, \alpha_2) &= (1 - H(\alpha_1))H(\alpha_2) && (3.53)\\ H^3(\alpha_1, \alpha_2) &= (1 - H(\alpha_1))(1 - H(\alpha_2)) && (3.54) \end{aligned}$$

3.3.1.2 Mélange de la masse volumique

Lorsque plusieurs phases sont en présence dans une cellule, l'inertie équivalente du système correspond à la moyenne arithmétique des phases en présence, on obtient donc naturellement :

$$\rho^{eq} = \sum_i H^i \rho^i \tag{3.55}$$

3.3.1.3 Mélange de la viscosité dynamique

Lorsque deux phases sont en présence dans une cellule, la viscosité équivalente du système dépend de l'orientation de la contrainte de cisaillement par rapport à l'interface.

Pour un cisaillement orthogonal à l'interface, la force totale $\overrightarrow{F}$ appliquée au système est la somme des forces appliquées à chaque fluide :

$$\overrightarrow{F} = \overrightarrow{F}_1 + \overrightarrow{F}_2 \tag{3.56}$$

on écrit la loi de comportement pour chaque fluide ainsi que pour le système équivalent :

$$F_1 = L_1\tau_1 = L_1\eta_1\frac{u}{y} = L_1\eta_1\frac{V}{H} \tag{3.57}$$

$$F_2 = L_2\tau_2 = L_1\eta_2\frac{u}{y} = L_2\eta_2\frac{V}{H} \tag{3.58}$$

$$F = (L_1 + L_2)\eta^{eq}\frac{V}{H} \tag{3.59}$$

$$F = F_1 + F_2 \tag{3.60}$$

$$\eta_{\perp}^{eq} = \sum_i H^i\eta^i \tag{3.61}$$

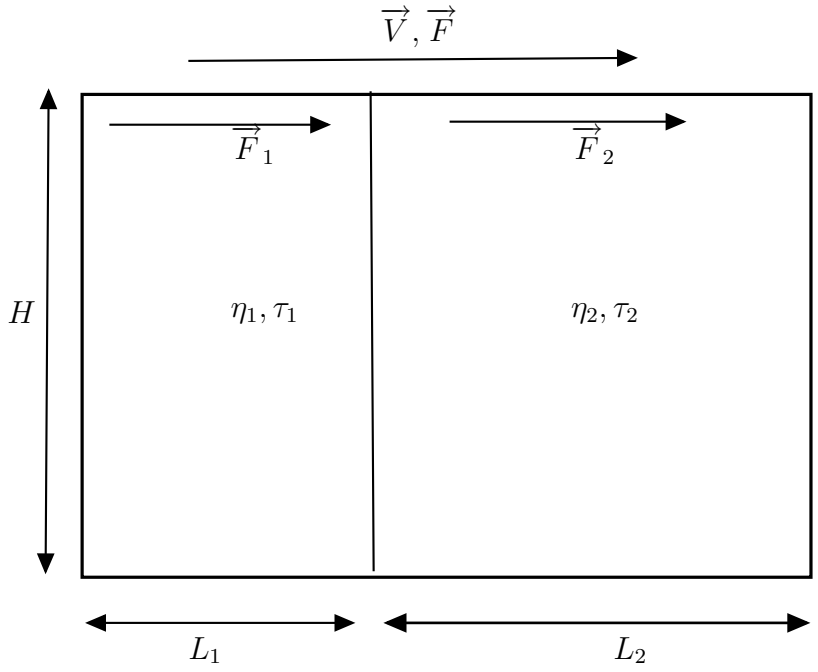


FIGURE 3.15 – Écoulement biphasique Orthogonal

Pour un cisaillement parallèle (figure 3.16), la contrainte de cisaillement est homogène dans tout le domaine, soit $\tau^{eq} = \tau_1 = \tau_2$. Si l'on écrit la loi de viscosité dans chacun des fluides, on a :

$$\tau_1 = \eta_1\frac{d\boldsymbol{u}}{dy} = \eta_1\frac{V - V_I}{H_1} \tag{3.62}$$

$$\tau_2 = \eta_2\frac{d\boldsymbol{u}}{dy} = \eta_2\frac{V_I}{H_1} \tag{3.63}$$

$$\tau^{eq} = \eta^{eq}\frac{V}{H_1 + H_2} \tag{3.64}$$

on a ensuite :

$$V_I = \frac{H_2 \tau}{\eta_2} \tag{3.65}$$

$$\tau = \eta_1 \frac{V - \frac{H_2 \tau}{\eta_2}}{H_1} \tag{3.66}$$

$$\left(1 + \frac{H_2 \eta_1}{H_1 \eta_2}\right) \tau = \frac{\eta_1}{H_1} V \tag{3.67}$$

soit :

$$\tau = \frac{\eta_1 \eta_2}{H_1 \eta_2 + H_2 \eta_1} V \tag{3.68}$$

ce qui revient à :

$$\frac{\eta^{eq}}{H_1 + H_2} = \frac{\eta_1 \eta_2}{H_1 \eta_2 + H_2 \eta_1} \tag{3.69}$$

ou encore :

$$\frac{1}{\eta^{eq}} = \frac{H_1}{(H_1 + H_2)\eta_1} + \frac{H_2}{(H_1 + H_2)\eta_2} \tag{3.70}$$

De manière plus générale :

$$\frac{1}{\eta_{\|}^{eq}} = \sum_i \frac{H^i}{\eta^i} \tag{3.71}$$

Pour prendre en compte le cas général, il faut donc utiliser un modèle qui prenne en compte les orientations des contraintes et des interfaces.

Afin d'obtenir une viscosité équivalente, on cherche à décomposer la contrainte de cisaillement en fonction de l'orientation de l'interface, on définit pour cela la normale à l'interface $\boldsymbol{n}_\Gamma$:

$$\boldsymbol{n}_\Gamma = \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \tag{3.72}$$

On peut maintenant développer le tenseur des contraintes en une partie orthogonale $\boldsymbol{\sigma}_o$ et une partie parallèle $\boldsymbol{\sigma}_p$:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_o + \boldsymbol{\sigma}_p \tag{3.73}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_o = (\boldsymbol{n}_\Gamma \otimes \boldsymbol{n}_\Gamma)\boldsymbol{\sigma} \tag{3.74}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_p = (\mathbb{1} - \boldsymbol{n}_\Gamma \otimes \boldsymbol{n}_\Gamma)\boldsymbol{\sigma} \tag{3.75}$$

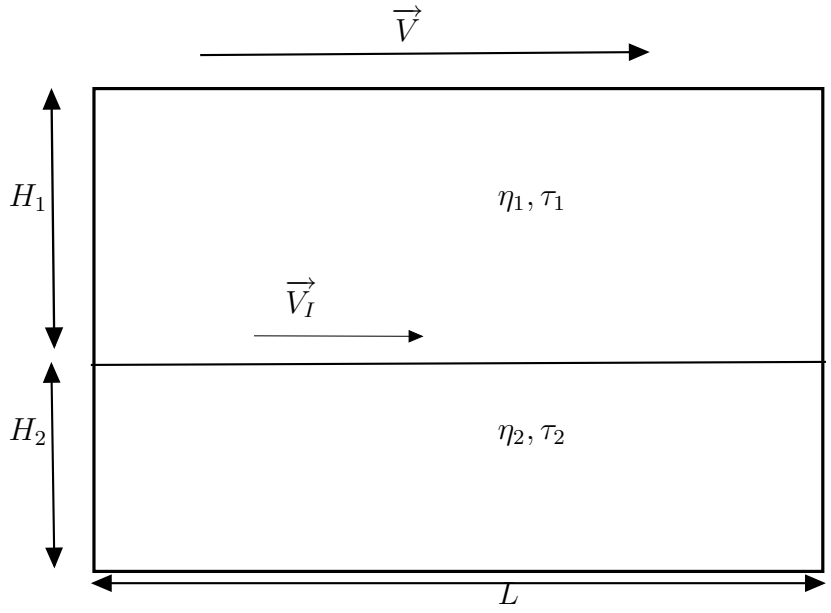


FIGURE 3.16 – Écoulement biphasique parallèle

On obtient alors une nouvelle relation entre le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ et le tenseur des taux de vitesses de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ en fonction de la normale à l'interface $\boldsymbol{n}_\Gamma$, et des viscosités équivalentes définies en (3.61) et (3.71) :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{E}\boldsymbol{\varepsilon} \tag{3.76}$$

$$\mathbb{E} = 2\eta_o^{eq}(\boldsymbol{n}_\Gamma \otimes \boldsymbol{n}_\Gamma) + 2\eta_p^{eq}(\mathbb{1} - \boldsymbol{n}_\Gamma \otimes \boldsymbol{n}_\Gamma) \tag{3.77}$$

Si l'on veut prendre en compte rigoureusement l'effet de l'hétérogénéité dans une cellule de calcul, il faut donc intégrer une viscosité tensorielle prenant en compte l'orientation du cisaillement par rapport à l'interface. Cependant, pour un écoulement turbulent, les effets inertiels sont prépondérants face aux effets visqueux, on peut donc se contenter de la loi additive introduite en (3.61).
Pour prendre en compte de cette orientation tout en gardant une viscosité scalaire, on peut introduire la viscosité anisotrope η_a^{eq} suivante :

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\eta_a^{eq}\boldsymbol{\varepsilon} \tag{3.78}$$

$$\eta_a^{eq} = \frac{|\mathbb{E}|}{|\boldsymbol{\varepsilon}|} \tag{3.79}$$

$$\mathbb{E} = 2\eta_o^{eq}(\boldsymbol{n}_\Gamma \otimes \boldsymbol{n}_\Gamma) + 2\eta_p^{eq}(\mathbb{1} - \boldsymbol{n}_\Gamma \otimes \boldsymbol{n}_\Gamma) \tag{3.80}$$

où $|\mathbb{E}| = \sqrt{\sum E_i^2}$
Cette dernière viscosité permet en effet d'obtenir une loi de mélange additive pour un cisaillement orthogonal et une loi harmonique pour un cisaillement parallèle, tout en gardant le caractère scalaire de la viscosité.

3.3.2 Prise en compte de la tension de surface

La tension de surface est utilisée pour modéliser les effets globaux des forces de cohésion au sein d'un fluide et près de son interface avec un autre fluide. Elle est représentée par une force surfacique, fonction linéaire de la courbure d'interface :

$$\boldsymbol{F}^{TS} = \gamma\kappa\boldsymbol{n}_\Gamma \tag{3.81}$$

où γ est une constante physique donnée dépendant des deux fluides considérés, $\boldsymbol{n}_\Gamma$ est la normale à l'interface et κ sa courbure.

La courbure moyenne d'une surface Γ est mathématiquement définie comme la divergence surfacique de sa normale :

$$\kappa = -\nabla_S \cdot \boldsymbol{n}_\Gamma \tag{3.82}$$

Le premier problème rencontré dans le calcul de la tension de surface est de calculer la courbure d'une surface non coïncidente avec un maillage volumique. Comme il a été démontré dans [4], celle-ci peut être calculée directement à partir d'un champ vectoriel unitaire $\boldsymbol{n}$ défini dans tout le volume du domaine tel que :

$$\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x} \in \Gamma) \;=\; \boldsymbol{n}_\Gamma \tag{3.83}$$

A partir de ce terme volumique, Beliveau et al [4] montrent que l'on peut étendre la définition de la courbure de manière volumique en appliquant une divergence volumique à tout champ défini tel que ci-dessus :

$$\kappa = -\nabla \cdot \boldsymbol{n} \tag{3.84}$$

La manière la plus naturelle de définir ce champ $\boldsymbol{n}$ est de calculer le gradient de la fonction Level-Set :

$$\boldsymbol{n} = \frac{\nabla\alpha}{|\nabla\alpha|} \tag{3.85}$$

A noter que le gradient de la fonction Level-Set est théoriquement unitaire, cependant, la discrétisation par éléments finis avec une interpolation linéaire ne permet pas de respecter cette condition, d'autant plus que le rayon de courbure augmente. Afin d'obtenir un calcul plus précis de la courbure d'interface, il est habituel de normaliser le gradient avant de construire la normale.

Pour une représentation linéaire de la fonction level-set, on obtient une interpolation de la normale constante par élément, soit une courbure nulle. Il reste nécessaire de projeter la formulation de la normale dans l'espace des fonctions continues et linéaires par élément. Pour cela, sur chaque nœud du maillage, on effectue la moyenne des valeurs du champ sur les éléments dont le nœud fait partie. La normalisation du champ vecteur doit alors

se faire une fois la projection réalisée.
La forme volumique de la tension de surface est donc la suivante :

$$f^{TS} = -\gamma \left[\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \right) \right] \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \tag{3.86}$$

La deuxième étape dans l'intégration de la tension de surface est de pouvoir intégrer un terme surfacique dans une formulation volumique, étant donné la non-coïncidence de l'interface. Le modèle "Continuum Surface Force" introduit dans [7] nous permet de transformer ce terme directement en terme volumique. La méthode consiste à utiliser une fonction dirac de la Level-Set δ_Γ pour multiplier la forme volumique de la tension de surface et l'intégrer comme une force volumique. En d'autre termes :

$$\int_\Gamma F^{TS} dS \;=\; \int_\Omega f^{TS} \delta_\Gamma dV \tag{3.87}$$

La fonction dirac utilisée est en fait une fonction discrète et lissée de façon trigonométrique sur une épaisseur $E^{TS} = 2.h$:

$$\delta_\Gamma(\alpha) = \begin{cases} 0 & \text{si } |\alpha| > E^{TS} \\ \dfrac{1}{2E^{TS}} \left[1 + \cos\left(\dfrac{\pi \alpha}{2E^{TS}} \right) \right] & \text{si } |\alpha| < E^{TS} \end{cases} \tag{3.88}$$

Afin de compenser les variations de $|\nabla \alpha|$ lorsque la fonction level-set est dégradée, on choisit d'intégrer à la manière de [10] un nouveau facteur dans la formule (3.89) :

$$\int_\Gamma F^{TS} dS \;=\; \int_\Omega f^{TS} \delta_\Gamma \left| \nabla \alpha \right| dV \tag{3.89}$$

Enfin, pour permettre une meilleure intégration de ce terme dans l'équation de Navier-Stokes, on peut transformer le terme volumique en un terme massique, comme montré dans [36] :

$$f^{TS-final} = -\gamma \delta(\alpha) \frac{\rho}{\bar{\rho}} \left[\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \right) \right] \nabla \alpha \tag{3.90}$$

où $\bar{\rho} = \dfrac{\rho_1 + \rho_2}{2}$ est la masse volumique moyenne des deux fluides considérés.

Pour un système de deux fluides avec tension de surface, on se rapporte au final au système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \rho^{eq} \left(\dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \boldsymbol{u} \nabla \boldsymbol{u} \right) - \nabla (2\eta^{eq} \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})) + \nabla p = \rho \left(g - f^{TS-massique} \right) \\ f^{TS-massique} = \gamma \dfrac{\delta(\alpha)}{\bar{\rho}} \left[\nabla \cdot \left(\dfrac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \right) \right] \nabla \alpha \\ \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \end{cases} \tag{3.91}$$

Nous avons ainsi pu définir un terme de tension de surface uniquement grâce à la fonction Level-Set. Il est pour cela important que cette dernière reste la plus régulière possible, un trop fort gradient ne permettant plus de capter l'épaisseur d'interface E^{TS} sur les nœuds du maillage, alors qu'un gradient trop faible étendrait la fonction dirac sur une trop grande zone, lui faisant perdre son caractère "localisé".

3.3.3 Pas de temps adaptatif

La résolution de systèmes linéaire avec une approche de type Euler explicite nécessite le respect d'une contrainte dite de Courant Friedrich Lewy [12]. Cette condition sur le pas temps est nécessaire pour assurer la stabilité du système.ette contrainte impose qu'on ne traverse pas plus d'un seul élément à chaque pas de temps, soit :

$$\Delta t^{CFL} = \min_{\Omega} \frac{h}{|\boldsymbol{u}|} \tag{3.92}$$

Les approches de type implicite et de Crank Nicolson sont quant à elles inconditionnellement, cependant, afin de limiter les erreurs numériques, il convient de rester dans l'ordre de grandeur de cette condition. On pourra dans un permier temps réaliser une simulation en calculant à chaque pas de temps la contrainte CFL, puis en déterminer un pas de temps fixe optimum pour les simulations suivantes de ce même cas, de manière à éviter les valeurs trop petites du pas de temps qui peuvent rallonger grandement le temps de calcul.

Lorsque l'on utilise un maillage anisotrope, la taille de maille h utilisée dans la formule (3.92) peut être choisie comme la plus petite épaisseur d'élément, cependant cela n'est pas optimum lorsque la vitesse est dirigée dans le sens de la longueur. Il convient donc, de la même manière que dans le paragraphe 3.3.1.1, de prendre en compte la direction de l'écoulement et la métrique, soit :

$$h^{CFL} = \sqrt{\frac{1}{\boldsymbol{n}^T \mathbb{M} \boldsymbol{n}}} \tag{3.93}$$

avec $\boldsymbol{n} = \dfrac{\boldsymbol{u}}{|\boldsymbol{u}|}$, ce qui donne :

$$\Delta t^{CFL} = \min_{\Omega} \sqrt{\frac{1}{\boldsymbol{u}^T \mathbb{M} \boldsymbol{u}}} \tag{3.94}$$

3.4 Application Numérique au remplissage

3.4.1 Instabilité de Rayleigh-Taylor

Afin de valider notre approche, on s'est dans un premier temps intéressé au cas de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, dont l'approche analytique est décrite dans [5]. Lorsqu'un

fluide est supporté par un fluide plus léger, une instabilité de Rayleigh-Taylor apparaît. Pour une perturbation de longueur d'onde K, l'évolution de l'interface pour de petites amplitudes suit la loi suivante :

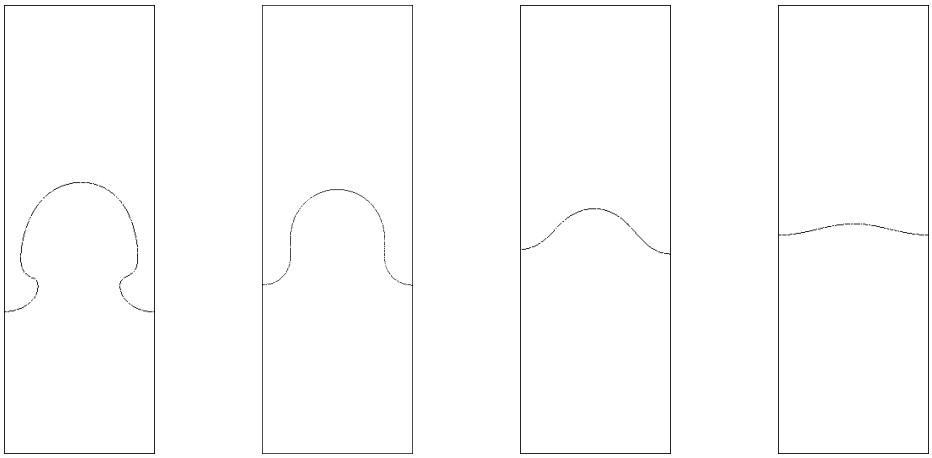
$$y_\Gamma(x) = Ce^{nt}\cos\left(\frac{2\pi}{K}x\right) \tag{3.95}$$

le coefficient de croissance n prend la valeur suivante lorsque les deux fluides ont une viscosité nulle :

$$n^2 = Kg\left[A - \frac{K^2\gamma}{g(\rho_1+\rho_2)}\right] \tag{3.96}$$

avec C une constante dépendant de la perturbation initiale, ρ_1 la masse volumique du fluide lourd, ρ_2 la masse volumique du fluide léger, g la gravité, et $A = \frac{\rho_1-\rho_2}{\rho_1+\rho_2}$.

Le domaine considéré est un rectangle de largeur 2π et de hauteur 6π, la perturbation est initiée avec une vitesse de $0.005m.s^{-1}$. Ainsi que montré dans [19], le terme turbulent $\boldsymbol{\tau}_3$ lié à la tension de surface peut être négligé. On réalise une simulation sur un maillage fixe isotrope homogène de 14 000 nœuds, avec un pas de temps de $0.01s$. La figure 3.17 montre l'évolution de la surface à $t = 10s$ pour différentes valeurs de la tension de surface.



(a) $\gamma = 0.1Nm^{-1}$ (b) $\gamma = 0.3Nm^{-1}$ (c) $\gamma = 0.45Nm^{-1}$ (d) $\gamma = 0.7Nm^{-1}$

FIGURE 3.17 – Chapitre2/Instabilité de Rayleigh Taylor, t=10s

Dans la figure 3.18, l'évolution de l'amplitude de l'instabilité en fonction du temps est représentée. On note une bonne corrélation entre les résultats analytiques et les résultats numériques tant que l'amplitude reste petite, l'évolution se fait ensuite plus lente lorsque l'hypothèse des petites amplitudes n'est plus valable.

3.4.2 Écroulement de barrage dans une cavité

Dans ce paragraphe, nous allons étudier le cas développé par Cruchaga et al [13]. Dans ce dernier article, des données expérimentales sont disponibles, mais également une série

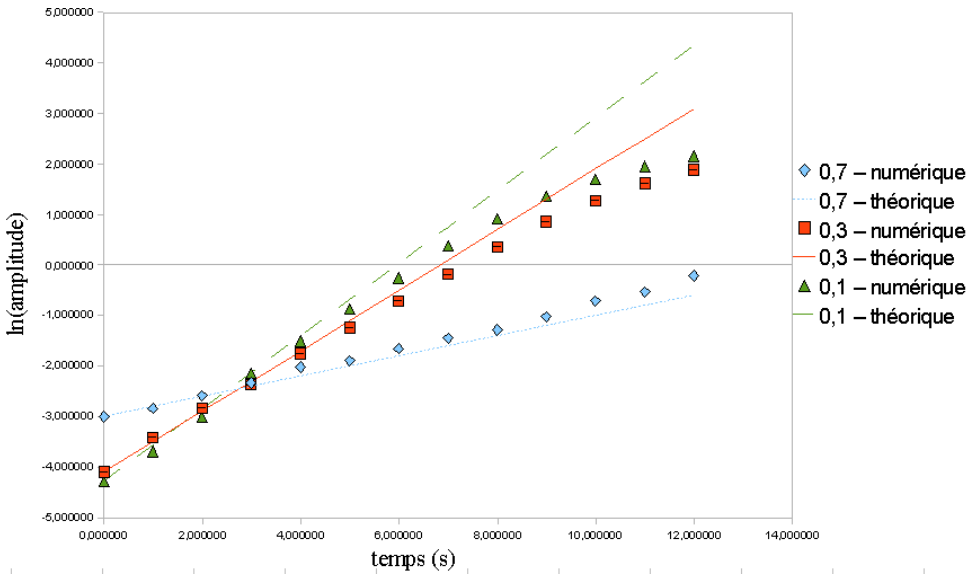


FIGURE 3.18 – Amplitude de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en fonction du temps

de résultats numériques.

Le domaine de simulation est une cavité de $42 * 42 * 11.4$ cm de côté. A l'instant initial, une colonne d'eau de $22.8 * 11.4$ cm est présente dans le coin gauche de la cavité. Le but est d'étudier l'écroulement de la colonne dans la cavité.
Pour réaliser la simulation, Cruchaga et al utilisent un modèle de turbulence LES statique (voir chapitre 4). Le modèle de résolution des équations de Navier-Stokes Variational Multi Scale nous permet de réaliser cette simulation sans aucun modèle de turbulence, alors que le solveur Navier Stokes stabilisé P1+/P1 n'en est pas capable. La figure 3.19 nous présente les résultats obtenus en 3D.

Les figures 3.20 et 3.21 compare les résultats expérimentaux et numériques de Cruchaga et al à nos résultats pour une simulation VMS 2D sur un maillage fixe homogène et isotrope de 9 000 éléments et un pas de temps de 0.001 s.

Ces résultats montrent la capacité du solveur VMS avec une approche monolithique à décrire de manière réaliste un écoulement avec un nombre de Reynolds modérément élevé. On remarque notamment que nos résultats, bien que légèrement retardés dans le temps par rapport à l'expérience, sont assez proches des résultats numériques de Cruchaga et al, avec une dissipation minimisée.

3.5 Conclusion

Nous avons développé dans ce chapitre une méthode innovante pour réaliser un calcul multifluides à l'aide d'un solveur d'écoulement eulérien stabilisé tel que développé dans le chapitre . Cette approche monolithique, couplée à une méthode de capture d'interface de type Level-Set, regroupe en une seule équation le comportement de plusieurs fluides

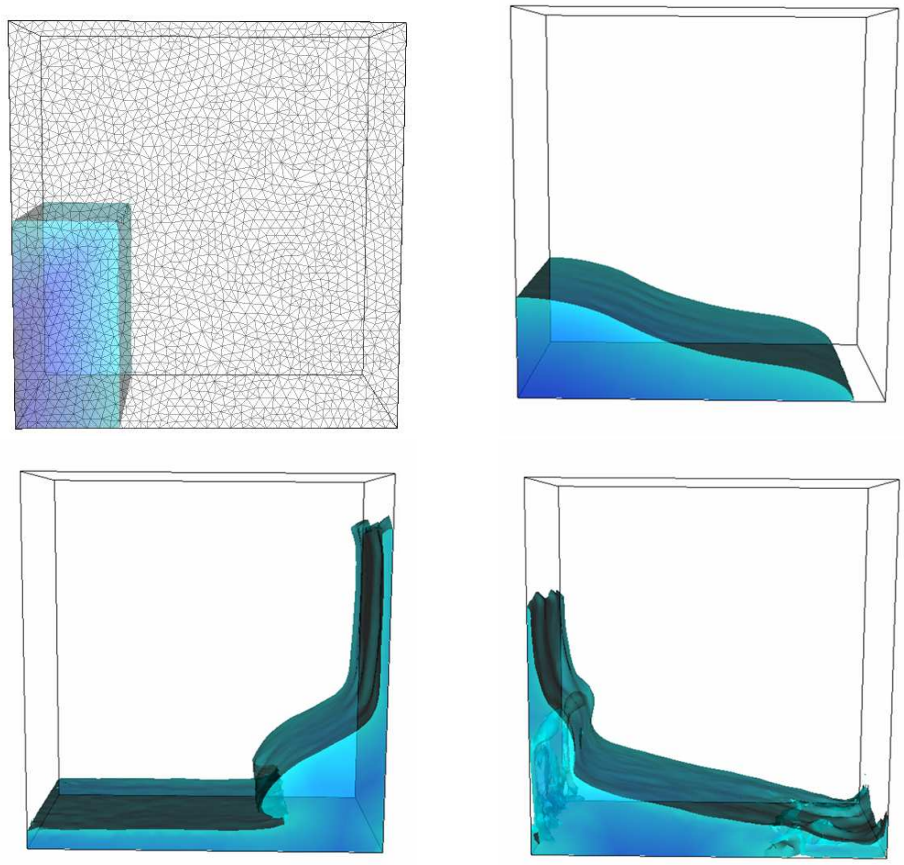


FIGURE 3.19 – Dam breaking - 3D Numerical results for $t = 0\ s$, $t = 0.2\ s$, $t = 0.624\ s$ and $t = 1.024\ s$

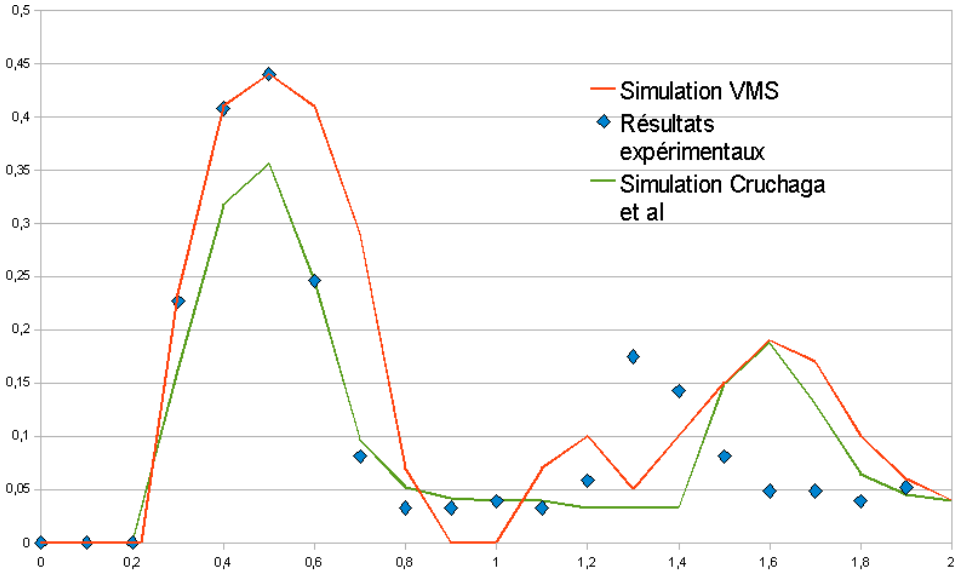


FIGURE 3.20 – Comparaison des résultats - Hauteur de front sur le plan droit

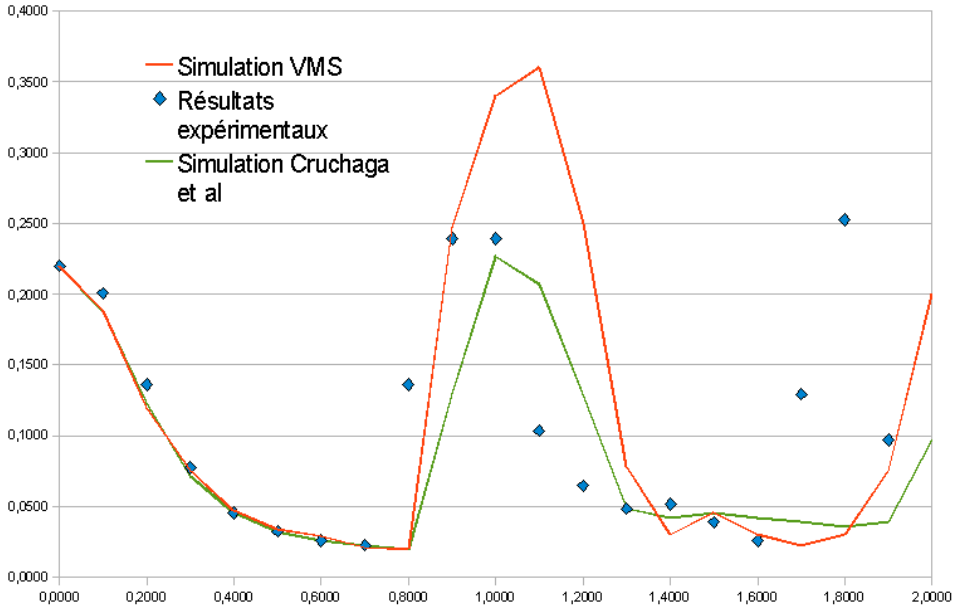


FIGURE 3.21 – Comparaison des résultats - Hauteur de front sur le plan droit

newtoniens avec des paramètres physiques pouvant être très différents. Celà a pour avantage principal de ne pas avoir recours à des techniques de remaillage de type lagrangien ou ALE, très complexes pour des écoulements turbulents, notamment au niveau de la prise en compte des contacts et recouvrements, et coûteux en terme de temps de calcul. L'intégration de l'air se fait également naturellement, celui-ci étant considéré à juste titre comme fluide newtonien dans les conditions typiques de remplissage en fonderie.

La méthode eulérienne de capture d'interface introduite, basée sur une approche Level-Set, permet de décrire de manière précise la position des différentes interfaces. La mise à jour de la position de chaque interface est résolue grâce à une unique équation dite de réinitialisation convective, permettant également d'assurer le caractère régulier de la fonction Level-Set. De plus, nous avons introduit une fonction de type sinusoïdale proche de l'interface et constante au delà, afin de localiser la résolution du déplacement et par conséquent limiter le temps de calcul.

Nous avons également présenté comment la forme de type distance de la fonction Level-Set permettait de construire les différentes lois de mélange associées au différents domaines, mais également d'intégrer naturellement la tension de surface dans les équations de l'écoulement.

Finalement, les différentes simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, puis de l'écroulement de barrage, ont pu attester la robustesse de notre code ainsi que sa ca-

pacité à reproduire des écoulements complexes.

Bibliographie

[1] D Adalsteinsson and Ja Sethian. A fast level set method for propagating interfaces. *Journal Of Computational Physics*, 118(2) :269–277, May 1995.

[2] Bart Adams, Mark Pauly, Richard Keiser, and Leonidas J. Guibas. Adaptively sampled particle fluids. *Acm Transactions On Graphics*, 26(3), Jul 2007. Acm Siggraph 2007 Conference, San Diego, Ca, Aug 05, 2007-Aug 09, 2008.

[3] S. Batkam. *Thermique Multidomaine En Simulation Numérique Du Remplissage 3d.* PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 2002.

[4] A Beliveau, A Fortin, and Y Demay. A two-dimensional numerical method for the deformation of drops with surface tension. *International Journal Of Computational Fluid Dynamics*, 10(3) :225–240, 1998.

[5] R. Bellman and R.H. Pennington. Effect of surface tension and viscosity on taylor instability. *Q. Applied Methods*, 12 :151–162, 1954.

[6] E. Bigot. *Simulation Tridimensionnelle Du Remplissage De Corps Minces Par Injection.* Thèse de doctorat, Ecole Nationale Sup ÉRieure Des Mines De Paris, 2001.

[7] Ju Brackbill, Db Kothe, and C Zemach. A continuum method for modeling surface-tension. *Journal Of Computational Physics*, 100(2) :335–354, Jun 1992.

[8] F. Brezzi and A. Russo. Choosing bubbles for advection-diffusion problems. *Mathematical Models And Methods In Applied Sciences*, 4 :571–587, 1994.

[9] A. Brooks and T. Hughes. Streamline upwind /petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navier-stokes equations. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 32 :199–259, 1982.

[10] Yc Chang, Ty Hou, B Merriman, and S Osher. A level set formulation of eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. *Journal Of Computational Physics*, 124(2) :449–464, Mar 15 1996.

[11] T Coupez, J Bruchon, and S Batkam. Complex free surface and interface dynamics in material forming computation. In *Fifth World Congress on Computational Mechanics*, 2002.

[12] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy. Uber die partiellen diefferenzengleichungen der mathematischen physik. *Mathematische Annalen*, 100(1) :32–74, 1928.

[13] M.A. Cruchaga, D. J. Celentano, and T.E. Tezduyar. Collapse of a liquid coumn : Numerical simulation and experimental validation. *Comput. Mech.*, 39 :453–476, 2007.

[14] D Enright, F Losasso, and R Fedkiw. A fast and accurate semi-lagrangian particle level set method. *Computers & Structures*, 83(6-7) :479–490, Feb 2005.

[15] Lp Franca and A Russo. Recovering supg using petrov-galerkin formulations enriched with adjoint residual-free bubbles. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 182(3-4) :333–339, 2000. 4th World Congress On Computational Mechanics, Buenos Aires, Argentina, Jun 29-Jul 02, 1998.

[16] E. Hachem, B. Rivaux, T. Kloczko, H. Digonnet, and T. Coupez. Stable/stabilized mixed-finite element method for incompressible flows with high reynolds number. *Submitted To Journal Of Computational Physics*, December 2009.

[17] E Harabetian, S Osher, and Cw Shu. An eulerian approach for vortex motion using a level set regularization procedure. *Journal Of Computational Physics*, 127(1) :15–26, Aug 1996.

[18] A.R. Karev, M. Farzaneh, and E.P. Lozowski. Character and stability of a wind-driven supercooled water film on an icing surface - i. laminar heat transfer. *International Journal Of Thermal Sciences*, 42 :481–498, 2003.

[19] E. Labourasse, D. Lacanette, A. Toutant, P. Lubin, S. Vincent, O. Lebaigue, J. p. Caltagirone, and P. Sagaut. Towards large eddy simulation of isothermal two-phase flows : Governing equations and a priori tests. *International Journal Of Multiphase Flow*, 33(1) :1–39, Jan 2007.

[20] Jiacai Lu, Souvik Biswas, and Gretar Tryggvason. A dns study of laminar bubbly flows in a vertical channel. *International Journal Of Multiphase Flow*, 32(6) :643–660, Jun 2006.

[21] J Magnaudet, M Rivero, and J Fabre. Accelerated flows past a rigid sphere or a spherical bubble .1. steady straining flow. *Journal Of Fluid Mechanics*, 284 :97–135, Feb 10 1995.

[22] B Merriman, Jk Bence, and Sj Osher. Motion of multiple junctions - a level set approach. *Journal Of Computational Physics*, 112(2) :334–363, Jun 1994.

[23] Youssef Mesri, Walid Zerguine, Hugues Digonnet, Luisa Silva, and Thierry Coupez. Dynamic parallel adaption for three dimensional unstructured meshes : Application to interface tracking. In Rv Garimella, editor, *Proceedings Of The 17th International Meshing Roundtable*, pages 195–212, Heidelberger Platz 3, D-14197 Berlin, Germany, 2008. Springer-Verlag Berlin. 17th International Meshing Roundtable, Pittsburgh, Pa, Oct 12-15, 2008.

[24] Jj Monaghan. An introduction to sph. *Computer Physics Communications*, 48(1) :89–96, Jan 1988.

[25] Jj Monaghan. Simulating free-surface flows with sph. *Journal Of Computational Physics*, 110(2) :399–406, Feb 1994.

[26] S Osher and Ja Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed - algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal Of Computational Physics*, 79(1) :12–49, Nov 1988.

[27] D. Peng, B. Merriman, S. Osher, H. Zhao, and M. Kang. A Pde- based fast local level set method. *J. Comput. Phys.*, 155 :410–438, 1999.

[28] E Pichelin and T Coupez. A taylor discontinuous galerkin method for the thermal solution in 3d mold filling. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 178(1-2) :153–169, Jul 27 1999.

[29] W.J. Rider and D.B. Kothe. Stretching and tearing interface tracking methods. In *12th Aiaa Cfd Conference Paper*, 1995.

[30] Dipayan Sanyal, P. Ramachandrarao, and O. P. Gupta. A fast strategy for simulation of phase change phenomena at multiple length scales. *Computational Materials Science*, 37(1-2) :166–177, Aug 2006. 14th International Workshop On Computational Mechanics Of Materials, Goa, India, Sep 23-25, 2004.

[31] M Sussman, As Almgren, Jb Bell, P Colella, Lh Howell, and Ml Welcome. An adaptive level set approach for incompressible two-phase flows. *Journal Of Computational Physics*, 148(1) :81–124, Jan 1 1999.

[32] M Sussman and Eg Puckett. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal Of Computational Physics*, 162(2) :301–337, Aug 10 2000.

[33] M Sussman, P Smereka, and S Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible 2-phase flow. *Journal Of Computational Physics*, 114(1) :146–159, Sep 1994.

[34] Lijian Tan and Nicholas Zabaras. A level set simulation of dendritic solidification of multi-component alloys. *Journal Of Computational Physics*, 221(1) :9–40, Jan 20 2007.

[35] Hiroshi Terashima and Gretar Tryggvason. A front-tracking/ghost-fluid method for fluid interfaces in compressible flows. *Journal Of Computational Physics*, 228(11) :4012–4037, Jun 20 2009.

[36] Sp Van Der Pijl, A Segal, C Vuik, and P Wesseling. A mass-conserving level-set method for modelling of multi-phase flows. *International Journal For Numerical Methods In Fluids*, 47(4) :339–361, Feb 10 2005.

[37] Laurence Ville, Luisa Silva, and Thierry Coupez. Convected level set method for the numerical simulation of fluid buckling. *International Journal For Numerical Methods In Fluids*, 2010.

[38] S Vincent and Jp Caltagirone. Efficient solving method for unsteady incompressible interfacial flow problems. *International Journal For Numerical Methods In Fluids*, 30(6) :795–811, Jul 30 1999.

[39] Y Yang and Hs Udaykumar. Sharp interface cartesian grid method iii : Solidification of pure materials and binary solutions. *Journal Of Computational Physics*, 210(1) :55–74, Nov 20 2005.

[40] Hk Zhao, T Chan, B Merriman, and S Osher. Variational level set approach to multiphase motion. *Journal Of Computational Physics*, 127(1) :179–195, Aug 1996.

[41] Hk Zhao, B Merriman, S Osher, and L Wang. Capturing the behavior of bubbles and drops using the variational level set approach. *Journal Of Computational Physics*, 143(2) :495–518, Jul 1 1998.

Chapitre 4

Résolution de la turbulence

Contents

4.1 Introduction 80
4.2 Méthodes Reynolds Average Navier Stokes (RANS) . . . 80
4.2.1 Introduction aux méthodes statistiques 80
4.2.2 Système pour les champs moyens 81
4.2.3 Conclusions 83
4.3 Large Eddy Simulations (L.E.S.) 84
4.3.1 Principe 84
4.3.2 Opérateurs de filtrage 84
4.3.3 Filtrage multi-phasique - Opérateur de filtrage massique . . 85
4.3.4 Écriture des équations filtrées 86
4.3.5 Évaluation des termes de sous maille 87
4.3.6 Modélisation des termes de sous maille 87
4.4 Applications Numériques 92
4.4.1 L'écroulement de barrage 92
4.4.2 Écroulement de barrage dans une cavité 93
4.4.3 Remplissage 3D 97
4.5 Conclusion 106

4.1 Introduction

A l'heure actuelle, les modèles de description de la turbulence vont de la *Direct Numerical Simulation* (DNS), seule à prendre en compte toutes les échelles de l'écoulement, aux méthodes statistiques stationnaires *Reynolds Average Navier Stokes* (RANS) basées sur des moyennes statistiques spatialles et temporelles, les *modèles Large Eddy Simulations* (LES) se situant entre les deux approches du point de vue de la représentation explicite des échelles.

La description par moyenne statistique a longtemps constitué la seule voie d'approche et de prédiction des écoulements turbulents notamment dans un contexte industriel. Cette approche repose sur des modèles comme les modèles RANS. Les progrès réalisés dans la puissance des calculateurs ont modifié cette approche et permis dans certains cas la résolution numérique directe des équations de Navier-Stokes gouvernant la vitesse instantanée sans avoir à introduire de vitesse moyenne statistique. Les méthodes DNS sont appropriées pour l'analyse d'écoulements aussi complexes que ceux présents dans une cavité de remplissage. En effet, la complexité de ces écoulements implique la formation de nombreuses structures turbulentes dont la résolution exacte implique une simulation précise. Néanmoins, cette approche nécessite un nombre de nœuds du maillage de l'ordre de $Re^{3/4}$ dans chaque direction de l'écoulement. De ce fait, à grand nombre de Reynolds, il est impossible de résoudre toutes les échelles du mouvement fluctuant car le nombre de degrés de liberté dans l'espace discret est trop grand par rapport aux capacités mémoire et CPU des ordinateurs actuels. La LES est une technique intermédiaire entre la simulation directe des écoulements turbulents et la solution des équations de Reynolds moyennes avec les approximations qu'elles comportent. Elle est basée sur la séparation des échelles turbulentes, les grandes échelles sont résolues exactement tandis que les petites échelles sont modélisées.

4.2 Méthodes Reynolds Average Navier Stokes (RANS)

L'utilisation de la simulation numérique directe étant fortement limitée par le coût de calcul, il est possible malgré le caractère aléatoire de la turbulence de modéliser les écoulements turbulents par une approche statistique.

4.2.1 Introduction aux méthodes statistiques

Les méthodes RANS sont des méthodes statistiques qui consistent à moyenner spatiallement et/ou temporellement les champs. Dans ces méthodes, seule la partie moyenne du champ est calculée. Les équations portent uniquement sur cette partie et par là même le nombre de degrés de liberté se trouve réduit. Cette approche présente le gros avantage de voir le coût de calcul fortement réduit, mais les inconvénients sont multiples. Un effort de modélisation important doit être fourni et il doit être renouvelé sur chaque cas de

simulation. D'autre part, les phénomènes instationnaires à large bande de même que les instabilités non découplées de la turbulence ne peuvent être captées par ces méthodes.
Le passage des équations déterministes aux équations statistiques repose sur la décomposition de Reynolds. Tout champ ϕ peut se décomposer en un champ moyen $\bar{\phi}$ et un champ fluctuant ϕ' de moyenne nulle.

$$\phi(\boldsymbol{x}, t) = \bar{\phi}(\boldsymbol{x}, t) + \phi'(\boldsymbol{x}, t) \tag{4.1}$$

Le champ moyen est obtenu par le filtrage temporel suivant :

$$\phi(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \phi(\boldsymbol{x}, \tau) d\tau \tag{4.2}$$

dans cette opération de filtrage, l'intervalle de temps T est supposé grand par rapport au temps caractéristiques des fluctuations et, dans le cas instationnaire, petit comparé au temps de variation de la valeur moyenne.

Il est à noter que l'opération moyenne vérifie les propriétés classiques de linéarité, de commutativité avec les opérations de dérivation, d'intégration et d'idempotence :

$$\overline{\bar{f}.g} = \bar{f}.\bar{g} \tag{4.3}$$

La moyenne est à l'origine une moyenne stochastique, c'est à dire qu'elle est prise sur un ensemble d'expériences effectuées dans des conditions identiques.

Favre [5] introduit l'hypothèse d'ergodicité, hypothèse selon laquelle il est équivalent de considérer une expérience répétée une infinité de fois ou une seule expérience menée à l'infini dans le temps. Cette hypothèse permet le passage à des moyennes temporelles, et par conséquent par un traitement statistique des équations. Les équations ne sont alors a priori valables que pour des écoulements stationnaires. Il s'avère que dans la pratique elles sont largement utilisées également pour les cas instationnaires.

4.2.2 Système pour les champs moyens

Pour des systèmes à faible nombre de Mach, on a coutume de considérer comme négligeables les fluctuations de la masse volumique [18] :

$$\rho = \bar{\rho} \tag{4.4}$$

On utilise la relation (4.3) pour remplacer dans les équations de Navier-Stokes les expressions instantanées des champs. En moyennant les expressions obtenues, on parvient au système :

$$\nabla \cdot \bar{\boldsymbol{u}} = 0 \tag{4.5}$$

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \bar{\boldsymbol{u}} \cdot \nabla \bar{\boldsymbol{u}}) \right) + \nabla(\rho \overline{\boldsymbol{u}' \otimes \boldsymbol{u}'}) = \nabla \cdot \bar{\sigma} + \rho g \tag{4.6}$$

La non-linéarité des équations de Navier-Stokes implique l'apparition d'inconnues supplémentaires. Cette corrélation double ($\rho\overline{\boldsymbol{u}' \otimes \boldsymbol{u}'}$) rend le système ouvert. Parmi les méthodes de fermeture proposées dans la littérature et répertoriées pour la plupart dans les ouvrages de Favre et al. [5] et Launders [12], le concept de viscosité turbulente est le plus couramment utilisé.

En considérant que l'interaction entre le champ moyenné et le champ fluctuant se réduit à un terme de dissipation et en suivant une approche analogue à celle développée pour exprimer le terme des contraintes visqueuses dans le cas des fluides newtoniens, les contraintes de Reynolds peuvent être modélisées par la relation de Boussinesq suivante :

$$\rho\overline{\boldsymbol{u}' \otimes \boldsymbol{u}'} \;=\; -\frac{2}{3}\rho k\delta_{ij} + \mu_t(\nabla\bar{\boldsymbol{u}} + \nabla\bar{\boldsymbol{u}}^T) \tag{4.7}$$

avec :

$$k \;=\; \frac{1}{2}\overline{\boldsymbol{u}' \cdot \boldsymbol{u}'} \tag{4.8}$$

k représente l'énergie cinétique turbulente moyenne par unité de masse et joue le rôle d'une pression turbulente due aux mouvements d'agitation.
La viscosité turbulente μ_t est définie comme le produit de la masse volumique par le carré d'une vitesse et d'un temps caractéristique de l'écoulement. Les modèles reposant sur ce concept consistent donc à expliciter des relations algébriques ou bien des équations pour ces deux nouvelles variables k et μ_t.

Les équations de Navier-Stokes se réécrivent ainsi :

$$\rho\left(\frac{\partial\bar{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \bar{\boldsymbol{u}}\cdot\nabla\bar{\boldsymbol{u}})\right) + \nabla\left(p + \frac{2}{3}\rho k\right) + \nabla\cdot((\mu+\mu_t)(\nabla\bar{\boldsymbol{u}} + \nabla\bar{\boldsymbol{u}}^T)) = \rho g \tag{4.9}$$

La viscosité turbulente et l'énergie cinétique turbulente restent alors à évaluer. Différents modèles cherchent à réaliser cette évalutation. Le plus répandu est le modèle $k-\varepsilon$. Il est simple, robuste et facile à mettre en œuvre. Dans ce modèle, k représente l'énergie cinétique turbulente moyenne définie à la relation (4.8) tandis que ε correspond au taux de dissipation visqueuse de l'énergie cinétique turbulente donné par la relation suivante :

$$\varepsilon = \mu\overline{\nabla\boldsymbol{u}' : \nabla\boldsymbol{u}'^T} \tag{4.10}$$

Ainsi, la viscosité turbulente μ_t est modélisée comme le produit d'une vitesse caractéristique $\sqrt{k}$ et d'une longueur caractéristique $\dfrac{k^{3/2}}{\varepsilon}$:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{4.11}$$

Le calcul de la viscosité turbulente est censé modéliser l'effet des vitesses fluctuantes non résolues $\boldsymbol{u}'$. Les quantités turbulentes k et ε nécessaires pour ce calcul doivent respecter les équations de transport en tout point du domaine :

$$\rho\left(\frac{\partial k}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\nabla k\right)-\nabla\cdot\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\nabla k\right]-\mu_t P+\rho\varepsilon = 0 \quad (4.12)$$

$$\rho\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\nabla \varepsilon\right)-\nabla\cdot\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\nabla \varepsilon\right]-C_{\varepsilon 1}\frac{\varepsilon}{k}\mu_t P+C_{\varepsilon 2}\rho\frac{\varepsilon^2}{k} = 0 \quad (4.13)$$

Les valeurs standards des cinq constantes empiriques du modèle sont données dans [13] :

$$C_\mu = 0.09 \quad (4.14)$$

$$\sigma_k = 1.0 \quad (4.15)$$

$$\sigma_\varepsilon = 1.3 \quad (4.16)$$

$$C_{\varepsilon 1} = 1.44 \quad (4.17)$$

$$C_{\varepsilon 2} = 1.92 \quad (4.18)$$

et P représente la production de turbulence :

$$P = \nabla\boldsymbol{u} : (\nabla\boldsymbol{u}+\nabla\boldsymbol{u}^T) \quad (4.19)$$

Au final, le système d'équations à résoudre est le suivant :

$$\rho\left(\frac{\partial \bar{\boldsymbol{u}}}{\partial t}+\bar{\boldsymbol{u}}\cdot\nabla\bar{\boldsymbol{u}})\right)+\nabla\tilde{p}+\nabla\cdot((\mu+\mu_t)(\nabla\bar{\boldsymbol{u}}+\nabla\bar{\boldsymbol{u}}^T)) = \rho g \quad (4.20)$$

$$\nabla\cdot\bar{\boldsymbol{u}} = 0 \quad (4.21)$$

$$\rho\left(\frac{\partial k}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\nabla k\right)-\nabla\cdot\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\nabla k\right] = \mu_t P-\rho\varepsilon \quad (4.22)$$

$$\rho\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\nabla \varepsilon\right)-\nabla\cdot\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\nabla \varepsilon\right] = C_{\varepsilon 1}\frac{\varepsilon}{k}\mu_t P-C_{\varepsilon 2}\rho\frac{\varepsilon^2}{k} \quad (4.23)$$

où la pression a été modifiée en $\tilde{p}$ pour prendre en compte la partie isotrope du tenseur des contraintes de Reynolds :

$$\tilde{p}=\bar{p}+\frac{2}{3}k \quad (4.24)$$

4.2.3 Conclusions

Les méthodes RANS sont très largement utilisées dans la littérature, de par leur robustesse et leur capacité à représenter efficacement les interactions entre les variables fluctuantes et les variables moyennes [9, 6]. C'est cette robustesse qui permet de simuler des écoulements très turbulents malgré des maillages plutôt grossiers. Cependant, ces méthodes ont la particularité d'être assez approximatives quel que soit le maillage utilisé, ce qui ne permet pas d'accéder aux détails de l'écoulement. C'est pour cela que nous développerons une méthode plus aisée à mettre en œuvre et moins dissipative dans la section suivante.

4.3 Large Eddy Simulations (L.E.S.)

4.3.1 Principe

Le principe des méthodes des grandes échelles, ou "Large Eddy Simulations" (L.E.S) consiste à ne résoudre que les échelles supérieures à une longueur de coupure correspondant à la taille de maille. Les plus petites échelles, appelées échelles de sous mailles, sont modélisées de manière à être prises en compte dans la résolution des grandes échelles. D'un point de vue théorique, la simulation des grandes échelles peut être formalisée comme une solution filtrée des équations de Navier-Stokes. Cependant, si le filtrage des variables se fait de manière relativement aisée, il est plutôt difficile de résoudre de manière directe les équations filtrées, nous devrons pour cela réaliser un certain nombre d'approximations.

4.3.2 Opérateurs de filtrage

Chaque variable de flux $u(x,t)$ est décomposée en une partie résolue $\bar{u}(x,t)$ et une partie de sous maille $u'(x,t)$:

$$u(x,t) = \bar{u}(x,t) + u'(x,t) \tag{4.25}$$

La partie résolue est obtenue par application du filtre passe haut en espace G, de longueur de coupure $\Delta(x,t)$, comme produit de convolution :

$$\bar{u}(x,t) = \int_{\Omega} G(\Delta(x,t), x - x', t).u(x',t)dx' \tag{4.26}$$

Il existe plusieurs types de filtres communément utilisés :

– le filtre Gaussien :

$$G(x) = \sqrt{\frac{6}{\pi\Delta}} exp\left(\frac{-6x^2}{\Delta^2}\right) \tag{4.27}$$

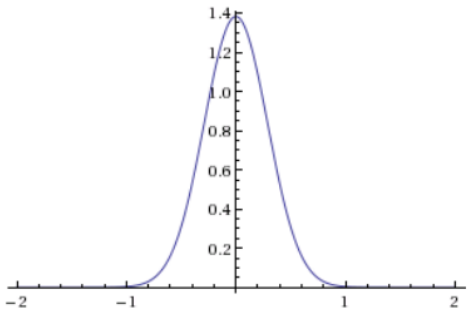


FIGURE 4.1 – filtre Gaussien

– le filtre de Fourrier :

$$G(x) = \frac{2cos\left(\frac{\pi x}{2\Delta}\right)}{\pi x}, x \in [-\Delta, \Delta] \tag{4.28}$$

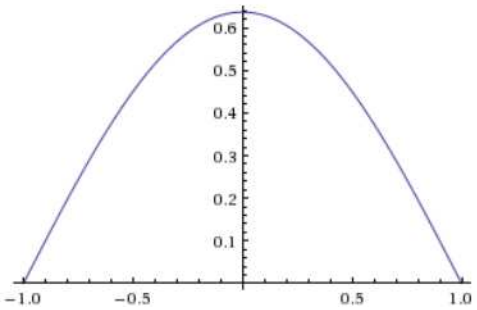


FIGURE 4.2 – filtre de Fourrier

– le filtre chapeau :

$$G(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta} & \text{si } |x| < \frac{\Delta}{2} \\ 0 & \text{si } |x| > \frac{\Delta}{2} \end{cases} \tag{4.29}$$

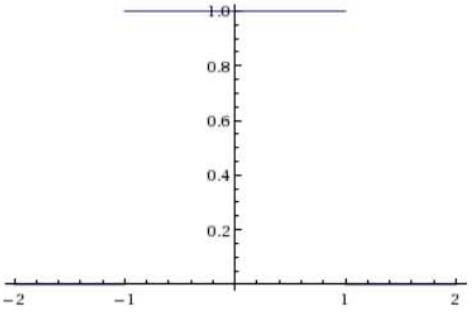


FIGURE 4.3 – filtre Chapeau

Il est couramment admis en éléments finis que le filtrage est appliqué dans le volume de chaque élément. La longueur de coupure est de l'ordre de la taille de maille

4.3.3 Filtrage multi-phasique - Opérateur de filtrage massique

Soit χ^k la fonction caractéristique du fluide k, identiquement unitaire à l'intérieur du fluide, strictement nulle en dehors. On peut alors définir la variable lissée H^k :

$$H^k = \bar{\chi^k} \tag{4.30}$$

ce qui permet de reconstruire les lois de mélange pour la masse volumique :

$$\rho = \sum \chi^k \rho^k \tag{4.31}$$

$$\bar{\rho} = \sum H^k \rho^k \tag{4.32}$$

de même pour la viscosité :

$$\mu = \sum \chi^k \mu^k \tag{4.33}$$

$$\bar{\mu} = \sum H^k \mu^k \tag{4.34}$$

Cette formulation valide de plus l'utilisation d'une fonction caractéristique lissée, calculée par moyenne dans chaque élément.

Sagaut et Germano [17] ont montré que le filtrage des variables à travers des discontinuités telles que l'interface définie par la fonction Level-Set pouvaient mener à des instabilités numériques indésirables, c'est dans l'optique de limiter ces instabilités que Labourasse et al. [11] ont introduit la fonction de filtrage massique suivante (appliquée à une variable quelconque Φ) :

$$\tilde{\Phi} = \frac{\overline{\rho\Phi}}{\bar{\rho}} \tag{4.35}$$

4.3.4 Écriture des équations filtrées

L'application du filtrage aux équations de Navier-Stokes nous donne le système suivant :

$$\begin{cases} \overline{\nabla \cdot \boldsymbol{u}} = 0 \\ \overline{\rho \dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}} + \overline{\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u})} + \overline{\nabla \cdot (-2\mu\boldsymbol{\varepsilon} + p\mathbb{1})} - \bar{\rho}\boldsymbol{g} - \overline{\sigma\kappa\boldsymbol{n}_\Gamma}\delta(\alpha) = 0 \end{cases} \tag{4.36}$$

On peut alors réarranger les termes de manière à appliquer l'équation aux variables filtrées :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = \sigma_0 \\ \bar{\rho}\dfrac{\partial \tilde{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}) + \nabla \cdot (-2\bar{\mu}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \bar{p}\mathbb{1}) - \bar{\rho}\boldsymbol{g} - \bar{\sigma}\bar{\kappa}\bar{\boldsymbol{n}}_\Gamma\delta = \sum_{i=0}^{3} \boldsymbol{\tau_i} \end{cases} \tag{4.37}$$

Ce réarrangement fait apparaître les différents termes de sous maille :

$$\boldsymbol{\tau}_0 = -\frac{\partial \overline{\boldsymbol{\rho u}}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}}{\partial t} \tag{4.38}$$

$$\boldsymbol{\tau}_1 = -\nabla \cdot (\overline{\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}} - \bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}) \tag{4.39}$$

$$\boldsymbol{\tau}_2 = -\nabla \cdot (\overline{\mu\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})} - \bar{\mu}\boldsymbol{\varepsilon}(\bar{\boldsymbol{u}})) \tag{4.40}$$

$$\boldsymbol{\tau}_3 = \sigma\overline{\kappa\boldsymbol{n}_\Gamma}\delta - \sigma\bar{\kappa}\bar{\boldsymbol{n}}_\Gamma\delta \tag{4.41}$$

On remarque notamment que pour un écoulement mono-fluide, seul le terme τ_1 est non nul, les autres termes étant tous liés à l'hétérogénéité du système. on a alors :

$$\boldsymbol{\tau}_0 = 0 \tag{4.42}$$
$$\boldsymbol{\tau}_1 = -\rho\nabla\cdot(\overline{\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u}} - \bar{\boldsymbol{u}}\otimes\bar{\boldsymbol{u}}) \tag{4.43}$$
$$\boldsymbol{\tau}_2 = 0 \tag{4.44}$$
$$\boldsymbol{\tau}_3 = 0 \tag{4.45}$$

L'utilisation du filtrage massique $\tilde{u}$ permet d'annuler le terme lié à la dérivée temporelle τ_0. Cependant, celui-ci n'est pas à divergence nulle, un terme σ_0 apparaît dans l'équation (4.37).
Le terme τ_1 est le terme classiquement modélisé dans les simulations à simple fluide, lié à l'inertie des petites échelles.
Le terme τ_2 correspond aux contributions visqueuses des petites échelles près de l'interface.
Enfin, le terme τ_3 représente l'erreur d'estimation de la tension superficielle.

4.3.5 Évaluation des termes de sous maille

Afin d'évaluer l'ordre de grandeur des différents termes de sous maille précités, Labourasse et al [11] ont mené une série de simulations directes (sans modèle de turbulence) 2D puis 3D. Ils ont ensuite filtré les résultats à l'aide de différents types de filtre, puis reconstruit les termes σ_0 et τ_i.

- Les termes de compressibilité σ_0 et de viscosité τ_2 sont d'ordre négligeable, il n'est pas utile dans un premier temps de les modéliser.
- Le terme τ_1, lié à l'inertie des petites échelles est du même ordre de grandeur que les termes des grandes échelles. Celui-ci reflète directement le caractère turbulent de l'écoulement. C'est le terme le plus important à modéliser, nous verrons par la suite les différentes méthodes présentes dans la littérature.
- Le terme d'erreur d'évaluation de la tension superficielle τ_3 devient relativement important lorsque l'interface est fortement perturbée. Cependant, son évaluation semble relativement compliqué, celui ci étant lié directement à l'erreur d'interpolation de l'interface.

4.3.6 Modélisation des termes de sous maille

4.3.6.1 Viscosité turbulente

Le modèle de simulation des grandes échelles le plus largement utilisé dans la littérature est le modèle statique de Smagorinsky [19]

L'hypothèse suivante est faite [16] : le mécanisme de transfert d'énergie des échelles résolues aux échelles de sous-maille est analogue au mécanisme moléculaire représenté par le terme de diffusion dans lequel la viscosité apparaît. Cette hypothèse fait apparaître le concept de viscosité de sous-maille. Le concept de viscosité turbulente existe depuis bien

longtemps pour modéliser l'action du champ turbulent sur le champ moyen (Boussinesq). Ce concept a été naturellement réintroduit pour modéliser l'action des petites échelles sur les échelles résolues. Le sens physique réside dans l'analogie entre l'agitation moléculaire traduite par un terme de viscosité dans l'équation de Navier-Stokes et l'agitation turbulente dont le terme correspondant sera d'un ordre plus élevé. En effet, dans le processus de cascade énergétique l'action des petites échelles est de dissiper l'énergie contenue dans les grandes. Dans la LES, les grandes échelles étant les seules à être calculées explicitement, on compense le niveau de dissipation énergétique en augmentant la valeur de la viscosité. Ainsi, le mécanisme de cascade énergétique est modélisé par un terme ayant une formulation mathématique identique à celle de la diffusion moléculaire mais dans laquelle la viscosité moléculaire est remplacée par une viscosité turbulente ou viscosité de sous-maille notée μ_t. L'équation de Navier-Stokes filtrée est réécrite en introduisant cette viscosité :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = 0 \\ \bar{\rho}\dfrac{\partial \tilde{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}) + \nabla \cdot (-2(\bar{\mu} + \mu_t)\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + p^* \mathbb{1}) - \bar{\rho}\boldsymbol{g} - \bar{\sigma}\bar{\kappa}\bar{\boldsymbol{n}}_{\boldsymbol{\Gamma}}\delta = 0 \end{cases} \tag{4.46}$$

En d'autres termes, on modélise l'inertie de sous maille comme la contribution d'un tenseur T dont la partie déviatorique est un tenseur de contraintes visqueuse :

$$\tau_1 = \nabla \cdot (\mathbb{T}) \tag{4.47}$$

$$\mathbb{T} - \frac{1}{3}Tr(\mathbb{T})\mathbb{1} = 2\mu_t \varepsilon(\tilde{\boldsymbol{u}}) \tag{4.48}$$

$$p^* = \bar{p} + \frac{1}{3}Tr(\mathbb{T}) \tag{4.49}$$

La partie hydrostatique du tenseur de contrainte $\mathbb{T}$ vient s'ajouter au terme de pression statique filtré, il n'a pas à être modélisé. Cependant la pression résolue peut prendre des valeurs assez différentes de la pression filtrée [10].

Cette approche est assez intéressante étant donné qu'elle peut être directement intégrée dans le solveur stabilisé de Navier-Stokes. Il suffit alors d'ajouter la viscosité turbulente à la viscosité moléculaire du fluide.

4.3.6.2 Modèle statique de Smagorinsky

Le modèle statique de Smagorinsky a été développé dans le but de simuler les mouvements à grandes échelles de l'atmosphère. Il suppose que la viscosité turbulente dépend d'une longueur et d'un temps caractéristiques :

$$\nu_t = \frac{\mu_t}{\rho} = \frac{l_0^2}{t_0} \tag{4.50}$$

La longueur caractéristique est directement liée à la longueur de coupure du filtre :

$$l_0 = C_S \Delta \tag{4.51}$$

où la constante de Smagorinsky C_S est calculée de manière analytique à partir de la théorie de Kolmogorov sur les spectres inertiels. Sa valeur est généralement fixée entre 0.1 et 0.24, mais en réalité elle dépend de chaque type d'écoulement.
La longueur de coupure Δ est prise de l'ordre de la taille de maille, d'une manière générale on pourra choisir la valeur suivante [14] :

$$\Delta = |K|^{\frac{1}{d}} \tag{4.52}$$

où $|K|$ est le volume de chaque élément K, d est la dimension de l'espace considéré.
Cette valeur est applicable à tout type de maillage, y compris lorsque celui-ci est anisotrope. Cependant, cette forme ne prend pas en compte la direction de l'écoulement par rapport à la forme de l'élément ; une autre forme devra être développée pour des maillages à anisotropie élevée.

Le temps caractéristique t_0 correspondant aux échelles non résolues est considéré comme égal à celui des échelles résolues, soit le temps de retournement d'une structure, donné par le tenseur des taux de déformations :

$$t_0 = \frac{1}{\sqrt{2\bar{\varepsilon}_{ij}\bar{\varepsilon}_{ij}}} \tag{4.53}$$

Cette relation nous donne une estimation de la viscosité turbulente ν_t :

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \, |\bar{\varepsilon}| \tag{4.54}$$

Le calcul de la viscosité turbulente se fait de manière locale et explicite. De cette manière, le coût de calcul additionnel est négligeable face à la résolution des équations de l'écoulement. C'est pour cette raison que ce modèle est très largement utilisé dans la littérature pour des écoulements simple fluide et multifluides [3, 4]. Il représente en effet une bonne alternative aux modèles RANS pour des écoulements à nombre de Reynolds modéré.
Cependant, le caractère arbitraire de la constante C_S ne permet pas de prendre en compte l'hétérogénéité de l'écoulement. Cette approche peut être améliorée en ayant recours à la procédure dynamique de Germano [7] permettant un calcul local de C_S, en fonction de la physique de l'écoulement.

4.3.6.3 Procédure dynamique de Germano

La procédure dynamique de Germano [7] est basée sur l'utilisation d'un second filtre, dont la longueur de coupure est plus grande que la première. La corrélation entre les grandeurs résolues et leurs valeurs filtrées permet de déterminer la valeur de C_S dans chaque élément. Le calcul de la viscosité turbulente est plus précis et la dissipation associée est limitée.

Soient $\tilde{.}$ et $\hat{.}$ les filtres de premier et second ordre, de longueurs de coupure respectives Δ et $\widehat{\Delta}$ ($\widehat{\Delta} > \Delta$). Leur domaine d'application est tel que représenté figure 4.4.

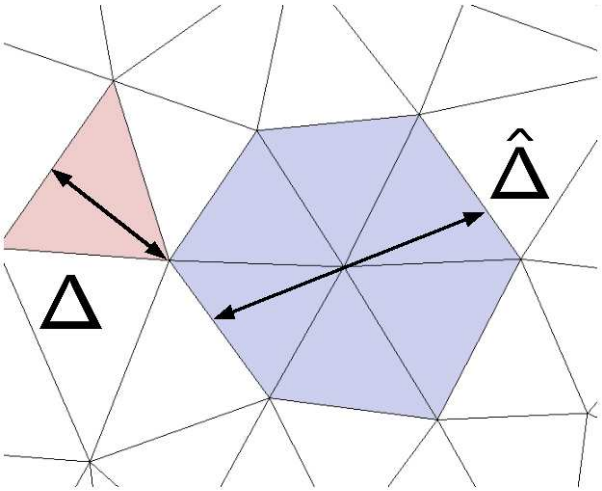


FIGURE 4.4 – 1^{st} and 2^{nd} order filters application domain

De même manière que (4.37), on applique le filtre de second ordre sur les équations déjà filtrées. Selon les hypothèses précédentes, on obtient un terme de sous T_1 :

$$\frac{\partial \widehat{\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\widehat{\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}} \otimes \widehat{\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}}}{\widehat{\bar{\rho}}} \right) + \nabla \cdot (-2\bar{\mu}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \bar{p}\mathbb{1}) - \bar{\rho}\boldsymbol{g} - \bar{\sigma}\bar{\kappa}\bar{\boldsymbol{n}}_{\boldsymbol{\Gamma}}\delta = T_1 \tag{4.55}$$

avec :

$$T_1 = \widehat{\tau_1} - \nabla \cdot \left(\widehat{\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}} - \frac{\widehat{\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}} \otimes \widehat{\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}}}{\widehat{\bar{\rho}}} \right) \tag{4.56}$$

selon le modèle de Smagorinsky, on peut maintenant écrire τ_1 comme la contribution d'une contrainte visqueuse :

$$\tau_1 = 2\nabla \cdot \left[\bar{\rho} (C_S \Delta)^2 \left| \bar{\varepsilon} \right| \bar{\varepsilon} \right] \tag{4.57}$$

de la même manière, on suppose que l'on peut également modéliser le terme T_1 :

$$T_1 = 2\nabla \cdot [\widehat{\bar{\rho}}(C'_S\hat{\Delta})^2 \left|\widehat{\bar{\varepsilon}}\right| \widehat{\bar{\varepsilon}}] \tag{4.58}$$

Il est important de noter que la constante C'_S utilisée dans l'équation (4.58) est a priori différente de la constante C_S de l'équation (4.57). On peut définir la variable de variance d'échelle ξ :

$$\xi = \left(\frac{C'_S}{C_S}\right)^2 = 1 \tag{4.59}$$

Classiquement, on suppose qu'il y a invariance d'échelle, soit $\xi = 1$. Cependant, on peut observer des valeurs assez différentes [2], notamment près des interfaces. Il est donc important d'être capable d'évaluer ce critère. Bhushan [2] propose de comparer deux méthodes d'approximation de ξ.

- La première, introduite par Meneveau et Lund [15], évalue ξ en fonction d'un nombre de Reynolds local :

$$\xi = 10^{-3.23(Re_{\hat{\Delta}}^{-0.92} - Re_{\Delta}^{-0.92})} \tag{4.60}$$

  où $Re_\Delta = \frac{1}{\nu}\Delta^2(2\boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon})$
- La deuxième méthode suppose que la dissipation de sous maille doit être égale aux deux échelles :

$$(C'_S\hat{\Delta})^2(\widehat{\bar{\varepsilon}} : \widehat{\bar{\varepsilon}})^{3/2} = (C_S\Delta)^2(\bar{\varepsilon} : \bar{\varepsilon})^{3/2} \tag{4.61}$$

  de cette manière, on peut évaluer la variance :

$$\xi = \frac{\Delta^2(\bar{\varepsilon} : \bar{\varepsilon})^{3/2}}{\hat{\Delta}^2(\widehat{\bar{\varepsilon}} : \widehat{\bar{\varepsilon}})^{3/2}} \tag{4.62}$$

L'application de ces hypothèses à différentes simulations et la comparaison aux modèles classiques de Smagorisnky statique ou dynamique avec invariance ont montré que la deuxième hypothèse est la plus réaliste. Nous garderons donc la formule (4.62) pour la suite de nos calculs.

On peut maintenant définir deux tenseurs $\mathbb{L}$ et $\mathbb{M}$ tels que :

$$\mathbb{L} = \widehat{\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}} - \frac{\widehat{\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}} \otimes \widehat{\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}}}{\widehat{\bar{\rho}}} \tag{4.63}$$

$$\mathbb{M} = \Delta^2(\widehat{\bar{\rho}\left|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\right|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}) - \xi\widehat{\bar{\rho}}\hat{\Delta}^2\left|\widehat{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}\right|\widehat{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \tag{4.64}$$

Pour simplifier le problème, on pose l'hypothèse que la variable C_S est suffisamment régulière sur le maillage par rapport à la variation de vitesse, en d'autres termes :

$$(\widehat{C_S\bar{\rho}\left|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\right|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}) = C_S(\widehat{\bar{\rho}\left|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\right|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}) \tag{4.65}$$

Cette hypothèse assez forte peut être évitée en utilisant la méthode de Ghosal et al [8]. Celle-ci permet notamment d'éliminer certaines oscillations qui apparaissent lors du calcul dynamique. Cependant, le calcul intégral requis est relativement complexe. La méthode décrite dans ce document donnant des résultats plutôt satisfaisant, nous ne développerons pas ce calcul.

Il est maintenant possible d'écrire l'équation suivante :

$$\mathbb{L} = 2C_S^2\mathbb{M} \tag{4.66}$$

$$\tag{4.67}$$

où les tenseurs $\mathbb{L}$ et $\mathbb{M}$ sont calculés uniquement à partir des variables résolues. On peut en déduire la valeur de C_S à la manière de Lilly [14], en projetant le tenseur calculé $\mathbb{L}$ sur le tenseur $\mathbb{M}$:

$$C_S^2 = \frac{\mathbb{L} : \mathbb{M}}{2\mathbb{M} : \mathbb{M}} \tag{4.68}$$

Afin d'éliminer les valeurs négatives qui pourraient apparaître et de lisser le résultat obtenu, on filtre les valeurs de C_S négatives en les fixant nulles, puis on filtre le champ obtenu.

Au final, on résout le système suivant :

$$\text{Trouver } \tilde{\boldsymbol{u}}, p^* \text{ tels que :} \tag{4.69}$$

$$\begin{cases} \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = 0 \\ \bar{\rho}\dfrac{\partial \tilde{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}) + \nabla \cdot (-2(\bar{\mu} + \mu_t)\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + p^*\mathbb{1}) - \bar{\rho}\boldsymbol{g} - \bar{\sigma}\bar{\kappa}\bar{\boldsymbol{n}}_\Gamma\delta = 0 \end{cases} \tag{4.70}$$

$$\nu_t = (C_S\Delta)^2 \left|\bar{\varepsilon}\right| \tag{4.71}$$

$$C_S^2 = \frac{\mathbb{L} : \mathbb{M}}{2\mathbb{M} : \mathbb{M}} \tag{4.72}$$

$$\mathbb{L} = \widehat{\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}} - \frac{\widehat{\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}} \otimes \widehat{\bar{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}}}{\widehat{\bar{\rho}}} \tag{4.73}$$

$$\mathbb{M} = \Delta^2(\widehat{\bar{\rho}\left|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\right|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}) - \xi\widehat{\bar{\rho}}\widehat{\Delta}^2\left|\widehat{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}\right|\widehat{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \tag{4.74}$$

Les deux premières équations sont résolues par le modèle éléments finis présenté dans les chapitres précédents, alors que les autres termes sont simplement calculés de manière explicite en fonction des valeurs de $\tilde{\boldsymbol{u}}$ et $\bar{\rho}$ calculées au pas de temps précédent. Nous verrons par la suite l'influence de cette "explicité" sur la stabilité de la résolution.

4.4 Applications Numériques

4.4.1 L'écroulement de barrage

Dans ce paragraphe, nous allons étudier les capacités du solveur de Navier Stokes associé au calcul grandes échelles. Nous allons pour cela référer à l'écroulement de barrage

3D présenté dans la thèse d'Olivier Basset [1].

Le domaine est un parallélépipède rectangle de dimension $1.5 \times 1.0 \times 2.0$ mètres. La position initiale du fluide est une colonne de dimension $0.6 \times 0.6 \times 1.8$ mètres contre les deux plans de symétrie de la cavité. On s'intéresse à l'écoulement lors des 3 premières secondes.

Le calcul présenté par Basset [1] a été réalisé sur un maillage fixe de 12 500 000 éléments. Afin de rendre possible la résolution directe par Navier-Stokes, la viscosité du liquide a été élevée à 5 $Pa.s$. Le solveur Navier Stokes est stabilisé uniquement avec une fonction bulle de type P1+/P1. Les résultats sont montrés figure 4.5.

Le calcul présenté figure 4.6 a été réalisé sur un maillage fixe de 490 000 éléments. Nous avons également utilisé le solveur stabilisé à l'aide de la fonction bulle P1+/P1, auquel nous avons ajouté le calcul de la viscosité turbulente. Grâce à la simulation LES, nous avons pu appliquer la viscosité réelle de l'eau et de l'air (respectivement 10^{-3} $Pa.s$ et 10^{-6} $Pa.s$).

Ce premier cas test permet de se rendre compte de la capacité de la méthode LES à stabiliser un solveur Navier-Stokes afin de représenter des écoulements turbulents réalistes sans avoir à multiplier le nombre d'éléments. Nous avons pu simuler un nombre de Reynolds supérieur à 5.10^6 à l'aide d'un maillage de 490 000 éléments lorsqu'un maillage de 12 000 000 d'éléments était nécessaire à la simulation d'un nombre de Reynolds de l'ordre de 1 000.

On peut constater que l'écoulement de l'eau semble réaliste et la dissipation due au modèle de turbulence limitée à en juger les remontées du liquide le long des parois verticales de la cavité mais également sur la paroi supérieure. On remarque également la présence de nombreuses gouttelettes.

Cependant, il n'existe pas de résultats expérimentaux permettant de valider ce cas test, ce qui nous a motivé à nous intéresser à divers cas de la littérature.

4.4.2 Écroulement de barrage dans une cavité

Dans ce paragraphe, nous allons reprendre le cas développé par Cruchaga et al [4] et étudié dans le chapitre précédent. Nous étudierons ainsi si l'introduction d'un modèle de turbulence dans la résolution des équations de Navier-Stokes fait apparaître de grands écarts dans les résultats.

Le premier calcul a été réalisé avec le solveur Navier Stokes stabilisé P1+/P1 avec modèle de Smagorinsky dynamique. Le caractère explicite de la viscosité dynamique n'a

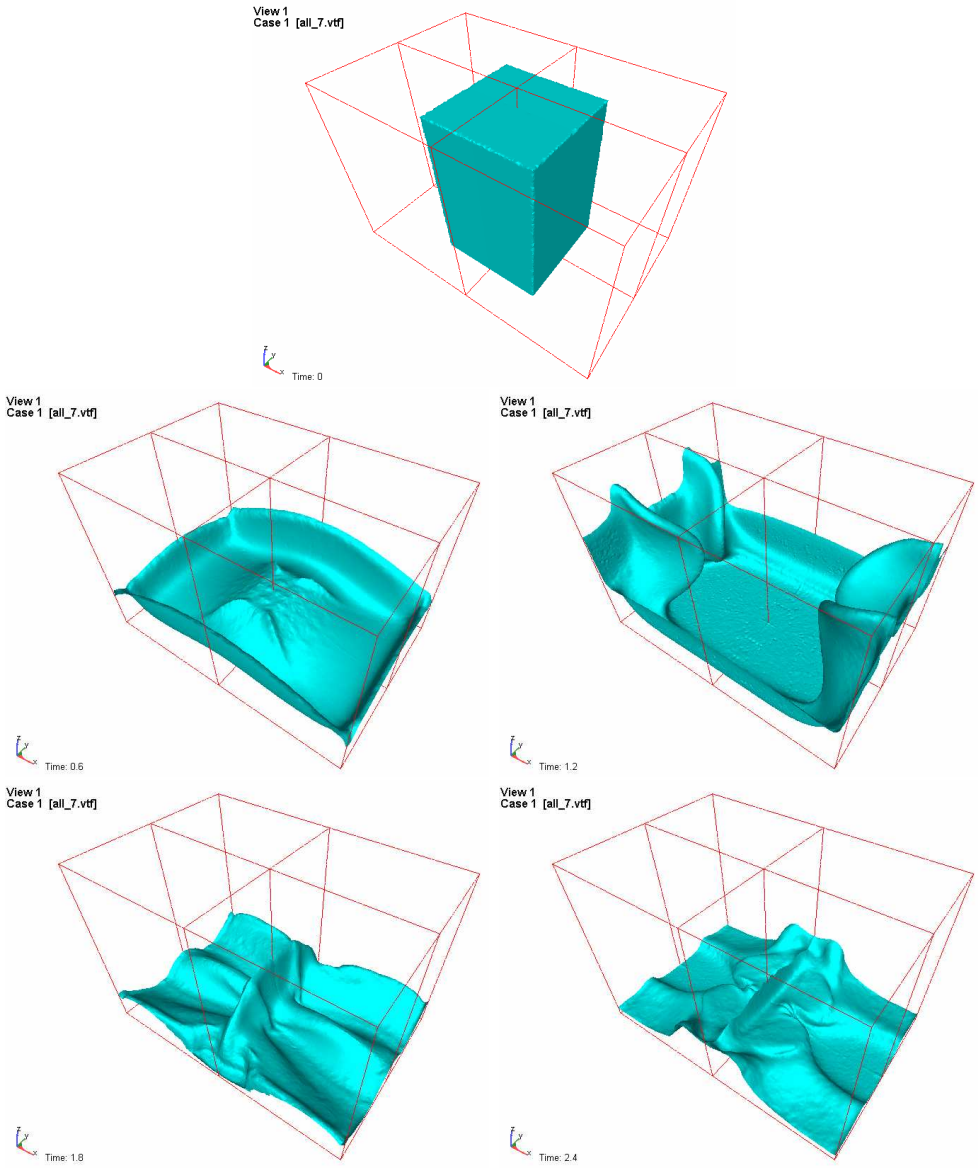


FIGURE 4.5 – Ecroulement de Barrage 3D par simulation numérique directe [1]

pas permis de réaliser la simulation avec le pas de temps fixe de 0.001 s, nous avons néanmoins utilisé le pas de temps adaptatif défini dans le chapitre précédent, permettant de simuler les 2 s en quelques 4 520 pas de temps contre 2 000 pour le pas de temps fixe précité. Les résultats, présentés sur les figures 4.8 et 4.7, sont assez proches des résultats de Cruchaga et al., c'est à dire un peu plus diffusifs que les résultats obtenus par VMS direct. Cependant, la nécessité d'un pas de temps adaptatif étant relativement contraignante, nous avons décidé de tester l'effet du modèle LES sur le solveur VMS.

Pour ce nouveau calcul, nous reprenons les mêmes conditions de simulation, soit une maillage fixe homogène et isotrope de 9 000 éléments et un pas de temps de .001 s.

Les figures 4.9 et 4.10 nous montrent la comparaison entre les résultats expérimentaux

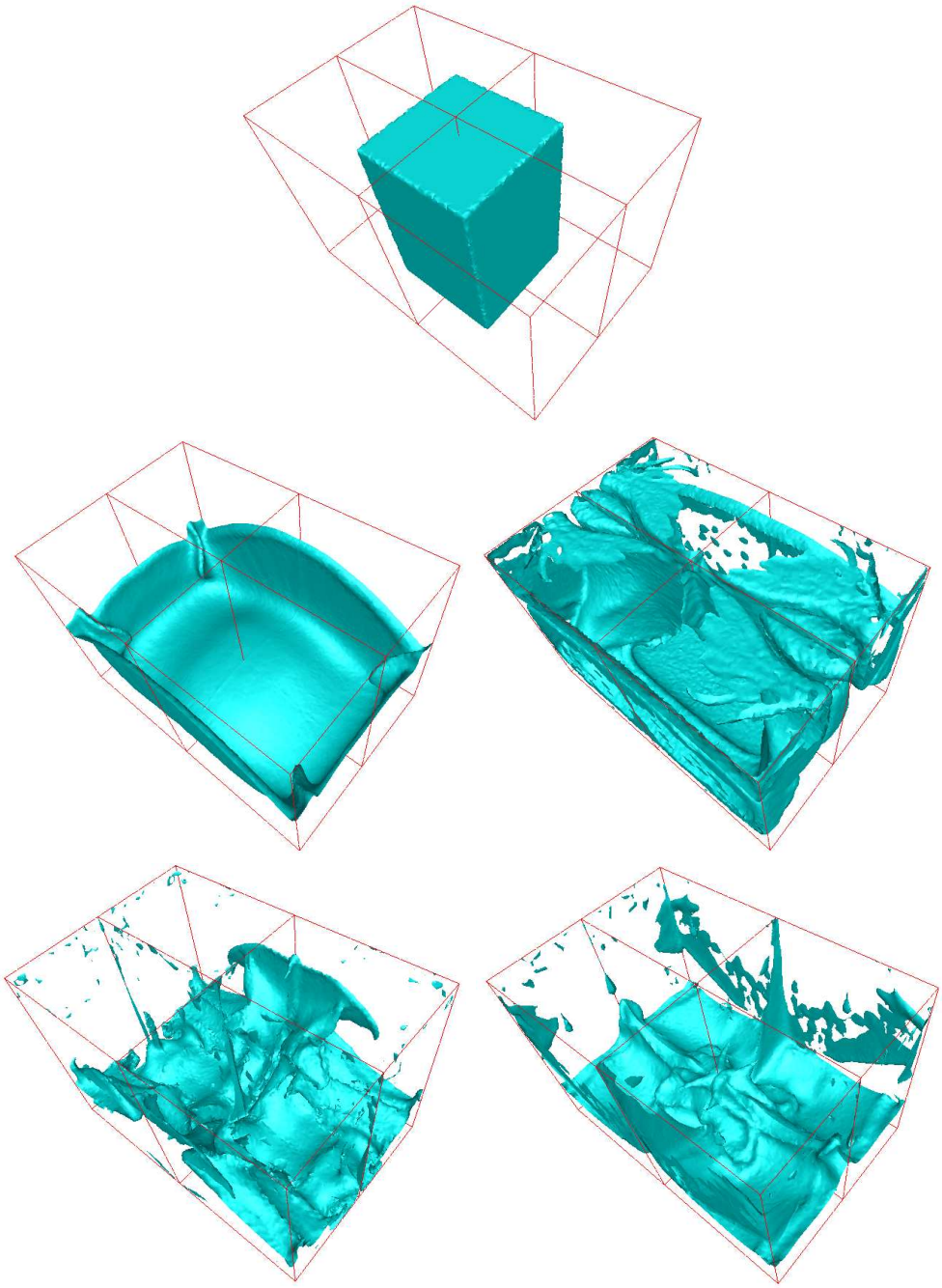


FIGURE 4.6 – Ecroulement de Barrage 3D avec simulation grandes échelles

obtenus par Cruchaga et al [4] et nos résultats numériques obtenus directement avec le solveur Navier-Stokes VMS ainsi que nos résultats obtenus avec le modèle de turbulence dynamique ajouté au solveur Navier Stokes VMS. Deux remarques principales peuvent être faites :

- Les deux séries de résultats numériques sont très proches, l'introduction de la turbulence dans le solveur n'introduit pas d'erreur supplémentaire sur les résultats finaux.

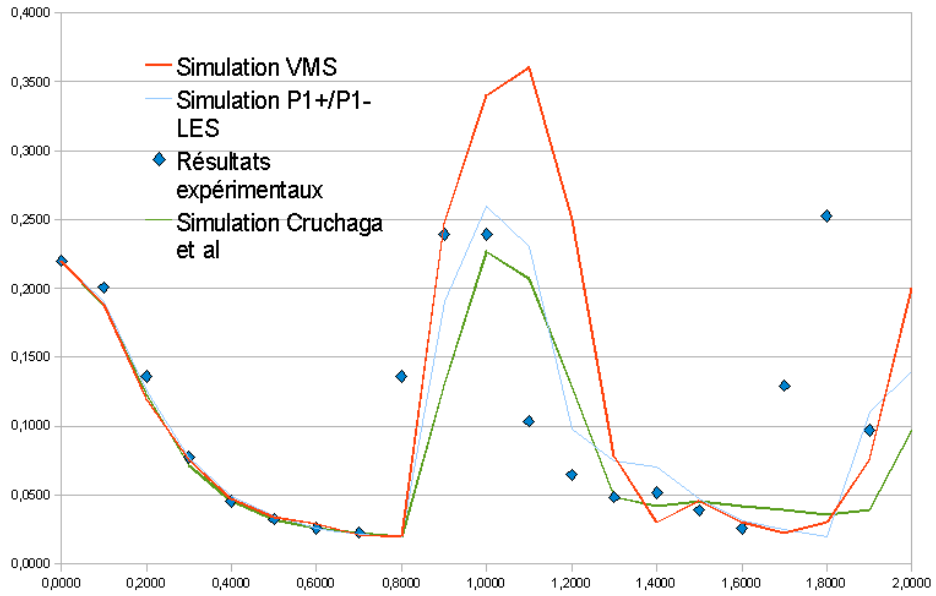


FIGURE 4.7 – Comparaison des résultats - Hauteur de front sur le plan gauche

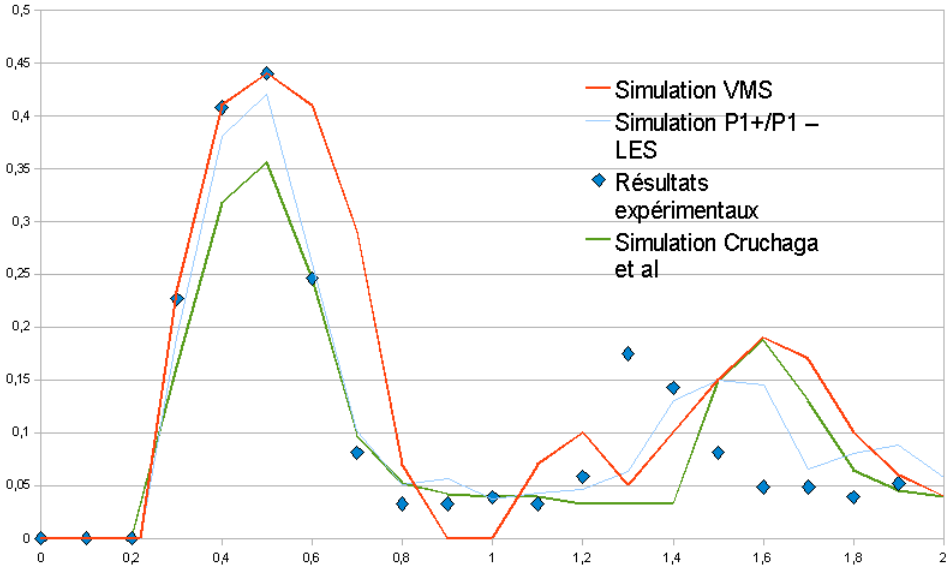


FIGURE 4.8 – Comparaison des résultats - Hauteur de front sur le plan droit

– Le solveur VMS permet d'outrepasser le caractère explicite de la turbulence, la condition CFL présentée en 3.3.3 ne doit pas être nécessairement vérifiée, ce qui nous permet d'utiliser moins d'incréments de calcul, et par conséquent diminuer grandement le temps de calcul.

La figure 4.11 représente le champ de viscosité augmentée (viscosité turbulente ajoutée à la viscosité moléculaire) pour différents instants. On observe que celle ci atteint une valeur maximale de 9 $Pa.s$ dans l'eau, soit 9 000 fois supérieure à la viscosité moléculaire, et qu'elle apparaît particulièrement dans les zones à forte perturbation.

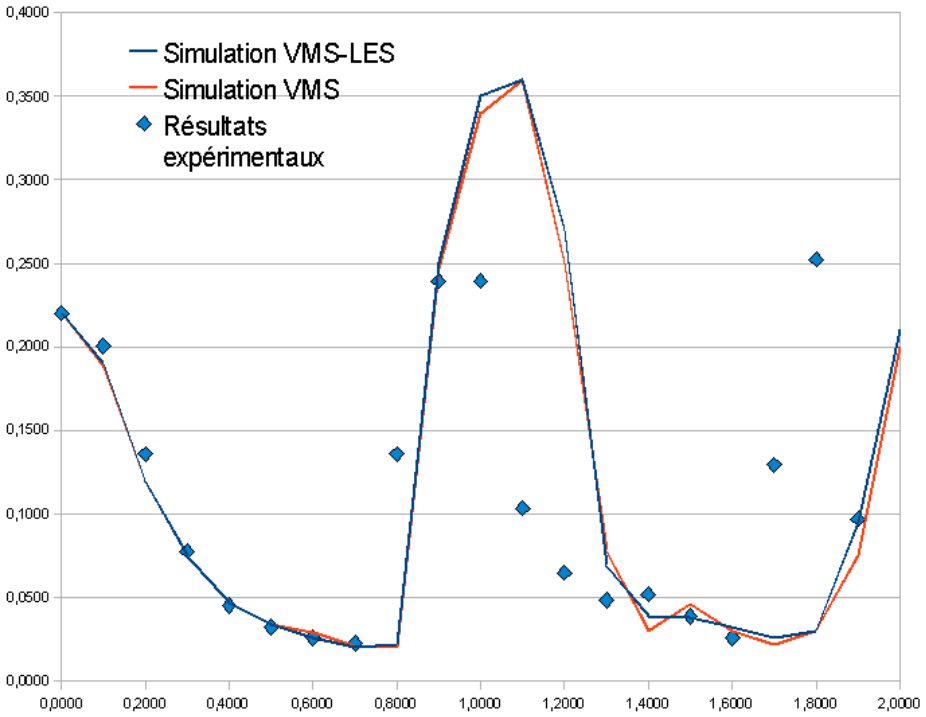


FIGURE 4.9 – Comparaison des résultats - Hauteur de front sur le plan gauche

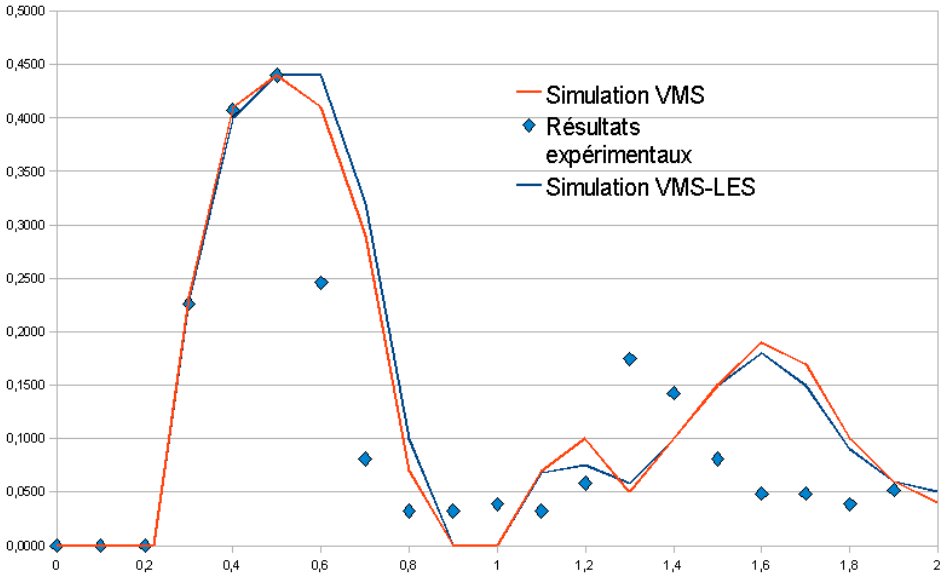


FIGURE 4.10 – Comparaison des résultats - Hauteur de front sur le plan droit

4.4.3 Remplissage 3D

4.4.3.1 Introduction

Les différents cas tests étudiés jusqu'à présent ne nous présentent pas de réelles données expérimentales exploitables et contrôlables pour pouvoir comparer à nos résultats

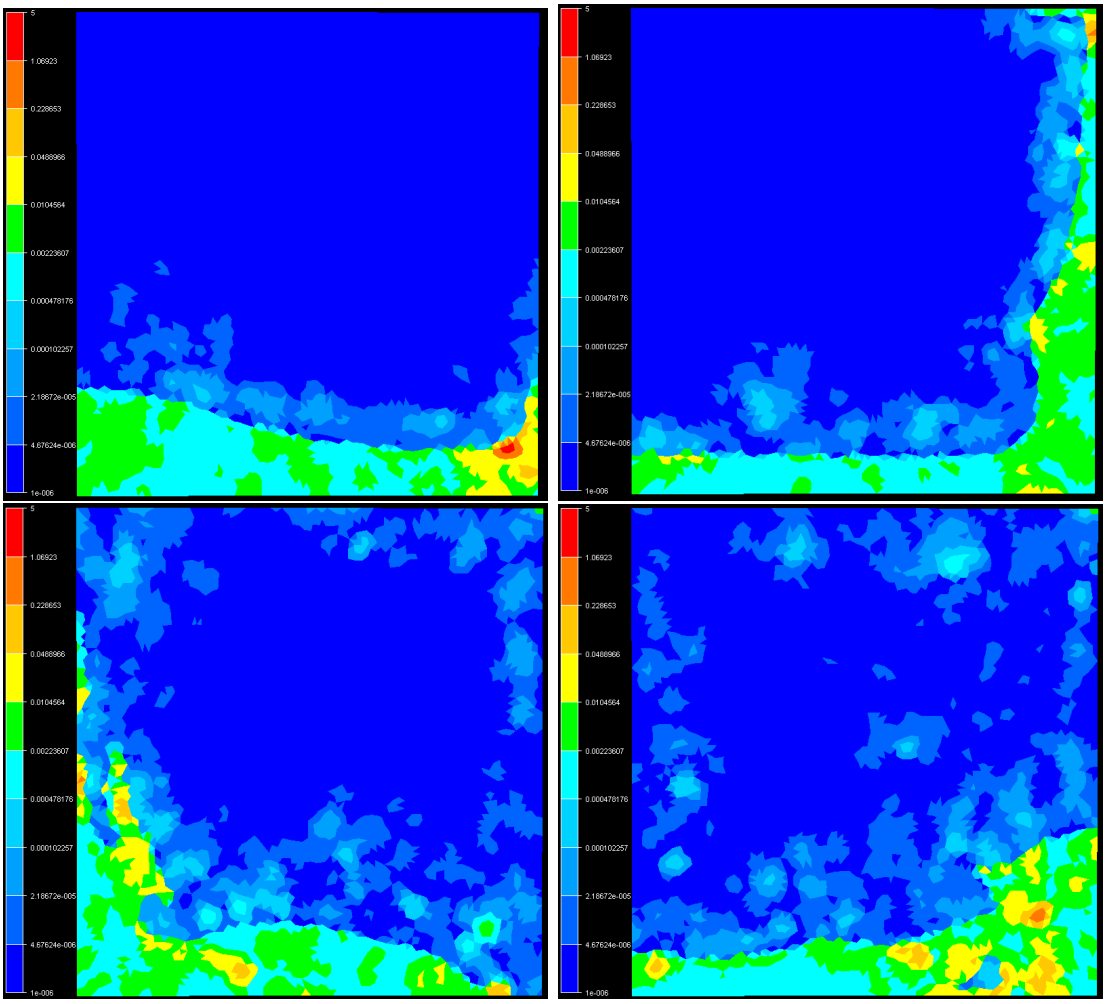


FIGURE 4.11 – Champ de viscosité augmentée pour $t = 0.25\ s$, $t = 0.5\ s$, $t = 1\ s$, $t = 1.5\ s$ (échelle logarithmique)

numériques. De plus, la plupart des cas de la littérature sont bidimensionnels simples et ne semblent pas particulièrement sensibles au modèle de turbulence utilisé. Nous avons pour cela décidé de construire notre propre maquette afin d'observer un écoulement entièrement tridimensionnel s'approchant d'un cas de remplissage.

Nous avons également décidé que l'écoulement ne soit entraîné que par la gravité, ce qui permet de s'affranchir de conditions aux limites en débit qui sont source d'incertitude et d'instabilités non contrôlées dans le cas expérimental.

4.4.3.2 Dispositif expérimental

Dans ce paragraphe, nous présentons la maquette qui a été conçue et réalisée au Cemef dans le cadre de cette thèse. La partie expérimentale et l'acquisition ont également été menées au Cemef.

La maquette présentée dans ce paragraphe (figure 4.12) est composée de deux bacs (A) et (B). Le premier bac est légèrement surélevé par rapport au second et un canal de communication cylindrique relie les deux. Les dimensions sont détaillées en figure 4.13. Au temps $t = 0\ s$, le bac (A) est rempli d'eau tandis que le bac (B) est vide, on ouvre alors la vanne de séparation entre les deux bacs. Le but de cette expérience est de caractériser qualitativement et quantitativement l'écoulement dans le bac (B), notamment l'allure du jet d'eau et des remontées sur les plans de gauche et de droite. Nous disposons pour cela de deux appareils d'acquisition permettant des images à déclenchement synchronisé et à une fréquence de 20 images par seconde. Le premier est placé face au bac et permet d'obtenir une visualisation globale de l'écoulement, mais également de mesurer la hauteur du front d'eau sur l'axe médian du plan de gauche avec une incertitude estimée à 5 mm. Le second appareil est situé à la droite du bac (B) et permet de mesurer la hauteur du front d'eau sur l'axe médian au plan droit du bac.

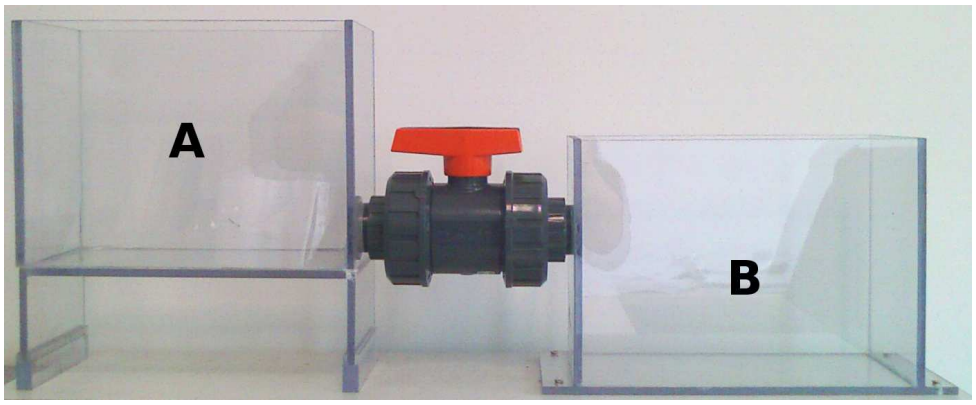


FIGURE 4.12 – Dispositif expérimental

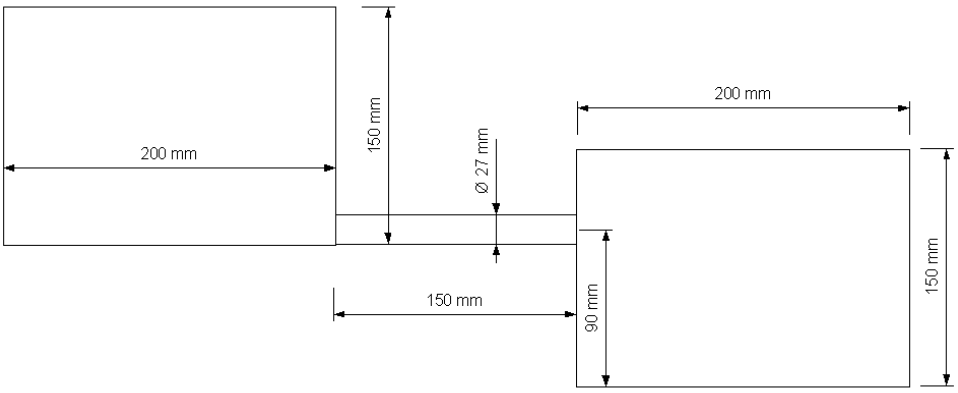


FIGURE 4.13 – Dimensions de la maquette

4.4.3.3 Modèle numérique

Pour simuler l'écoulement, nous avons utilisé un maillage fixe isotrope hétérogène à 4 000 000 d'éléments, représentant les deux bacs et le canal de communication. Le bac (A) est maillé avec une taille de maille de 6 mm, le bac (B) ainsi que le canal sont maillés avec une taille de maille de 3.5 mm.

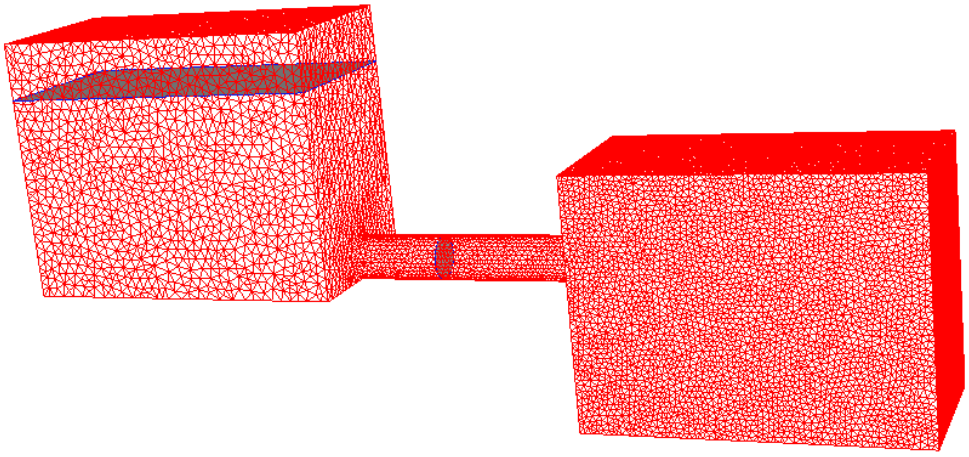


FIGURE 4.14 – Domaine de simulation - 1 000 000 d'elements tétrahédriques

Le pas de temps a été fixé à 10^{-3} s. Les conditions aux limites sont les suivantes :
- vitesse libérée et pression nulle sur les plans supérieurs ;
- contact glissant/collant sur toutes les autres parois.

Nous avons lancé plusieurs simulations afin de comparer les modèles de Smagorinsky statique, dynamique sans facteur d'échelle et dynamique avec facteur d'échelle, ainsi que les conditions aux limites de type collant ou glissant. La simulation des 3 premières secondes a nécessité 4 jours de calcul sur 32 processeurs.

4.4.3.4 Etude des différents paramètres de la turbulence

Dans ce paragraphe, nous allons voir l'influence des différents paramètres de la turbulence tels que le facteur d'échelle ξ défini dans (4.62) ainsi que les conditions aux limites sur la simulation et les résultats engendrés.

Modèle statique de Smagorinsky

La figure 4.15 compare les résultats obtenus avec un modèle de Smagorinsky statique, avec contact glissant, aux résultats expérimentaux. Nous avons utilisé pour cette simulation, la valeur du coefficient de Smagorinsky C_S optimale retenue dans [4], soit $C_S = 3.57$.

Le modèle statique de Smagorinsky permet de simuler l'écoulement tridimensionnel avec notre solveur Navier-Stokes VMS. Cependant, des conditions aux limites de type classique, soit avec des bords parfaitement glissants ou parfaitement collants, ne semblent

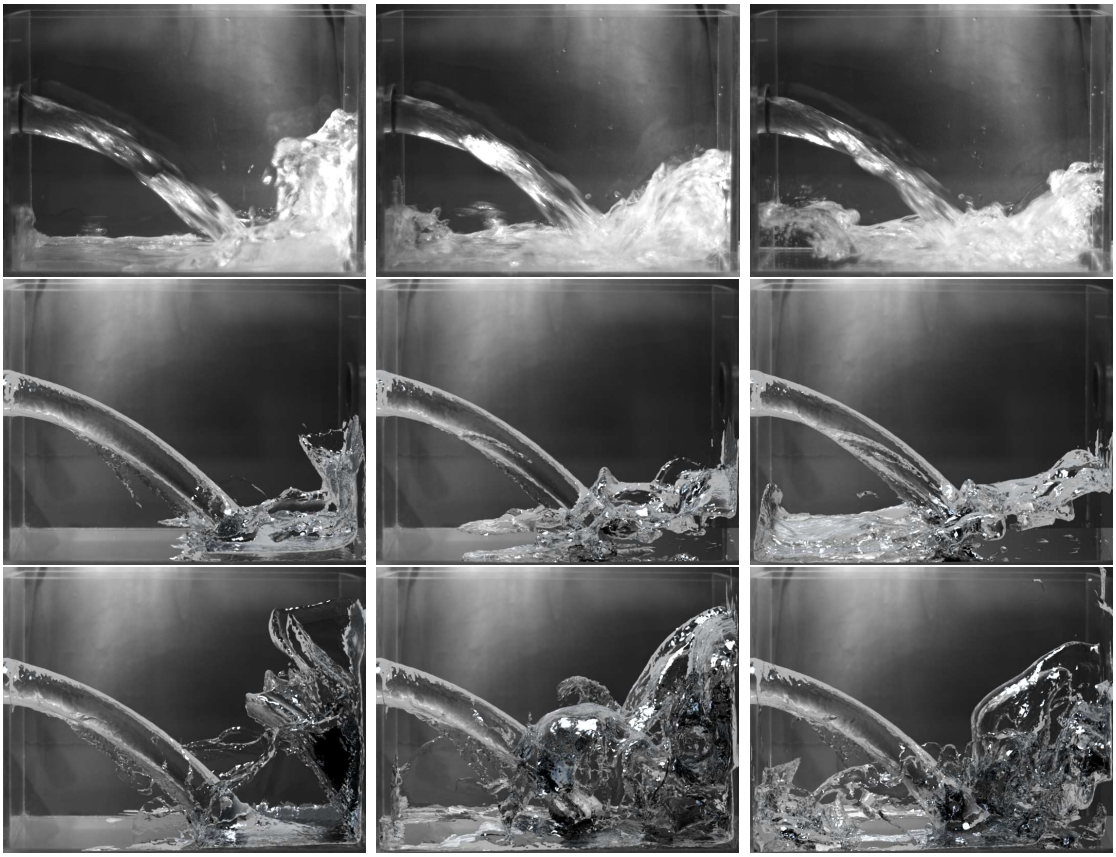


FIGURE 4.15 – Évolution en temps de l'interface air-eau : résultats expérimentaux (haut), numériques avec modèle statique de Smagorinsky et bords collants (milieu), numériques avec modèle de Smagorinsky statique et bords glissants (bas)

pas suffisantes pour décrire de manière réaliste l'écoulement. Afin d'optimiser ce modèle, une loi de paroi ou encore un maillage de couche limite près des plans de conditions aux limites est nécessaire.

Modèle dynamique sans facteur d'échelle

La figure 4.16 présente les résultats numériques obtenus avec le modèle de Smagorinsky dynamique classique, c'est à dire avec l'hypothèse que le facteur d'échelle ξ introduit en 4.62 reste unitaire. La première ligne représente les résultats expérimentaux, la deuxième ligne présente les résultats numériques avec contact glissant, la troisième ligne présente les résultats numériques avec contact collant. Pour ce modèle, on constate également que

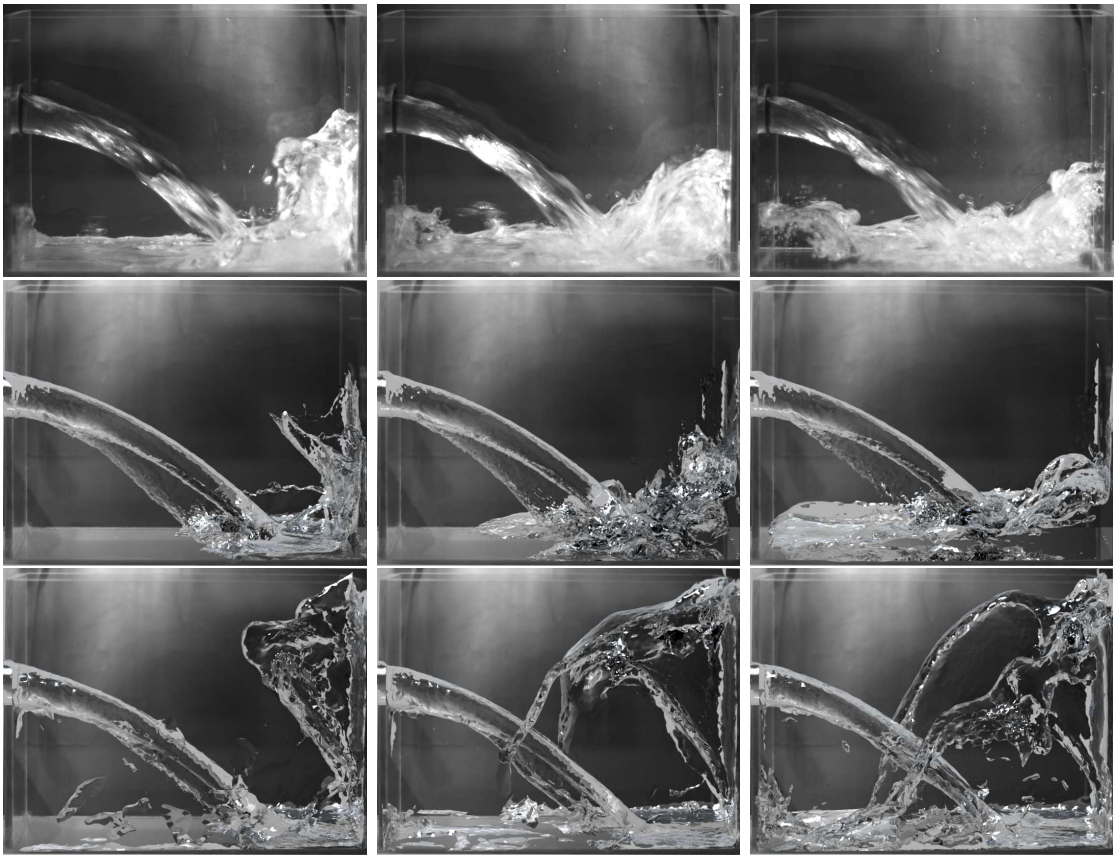


FIGURE 4.16 – Évolution en temps de l'interface air-eau : résultats expérimentaux (haut), numériques avec modèle de Smagorinsky dynamique sans facteur d'échelle et bords collants (milieu), numériques avec modèle de Smagorinsky dynamique sans facteur d'échelle et bords glissants (bas)

l'hypothèse de contact glissant n'est pas du tout adaptée étant donnée que l'eau impactant la paroi de droite monte beaucoup trop haut, voire jusqu'à sortir de la cavité, ce qui est très loin de la réalité.

L'hypothèse de contact collant paraît bien plus réaliste, cependant il ne permet pas de représenter de manière correcte les fines couches d'eau qui peuvent apparaître sur la gauche du jet au début du remplissage. Afin d'utiliser au mieux ce modèle, on peut utiliser soit

un modèle de loi de paroi, soit un maillage de couche limite sur les plans de conditions aux limites.

Modèle dynamique avec facteur d'échelle
La figure 4.17 représente les résultats obtenus avec le modèle de Smagorinsky dynamique avec prise en compte du facteur d'échelle ξ [2]. Sur cette figure, on se rend compte que la

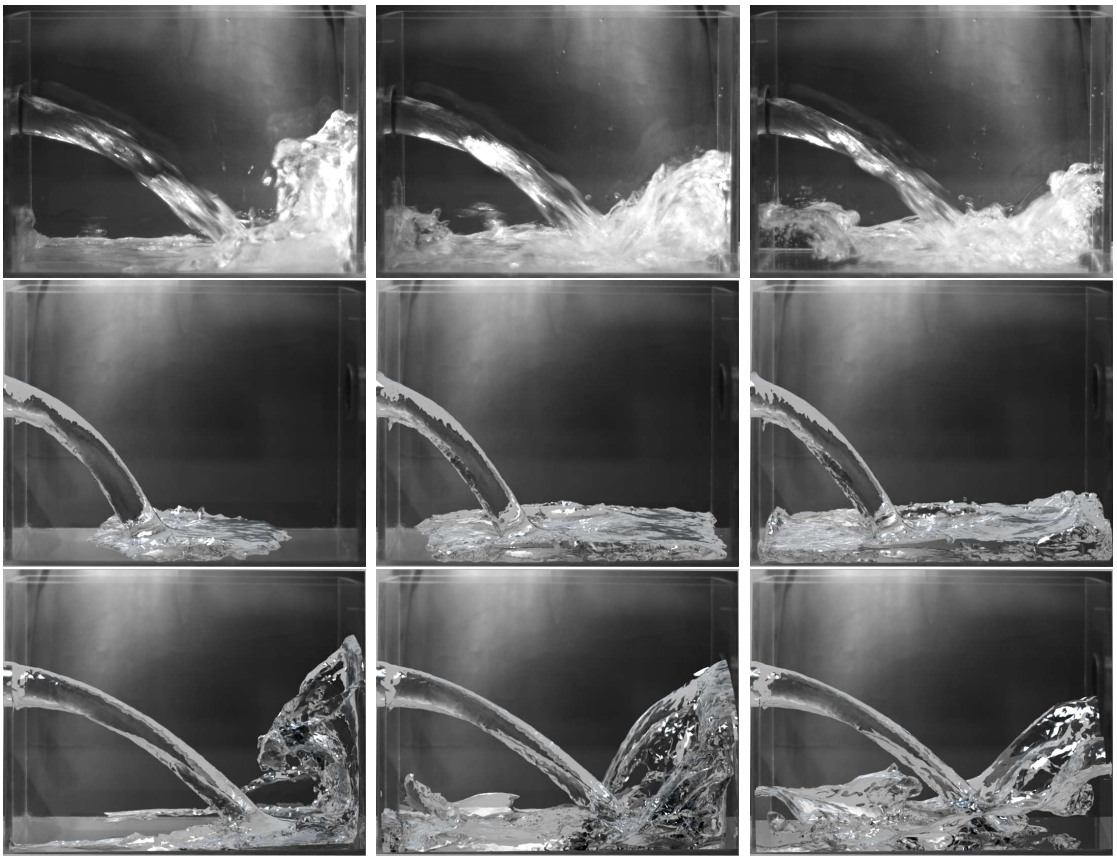
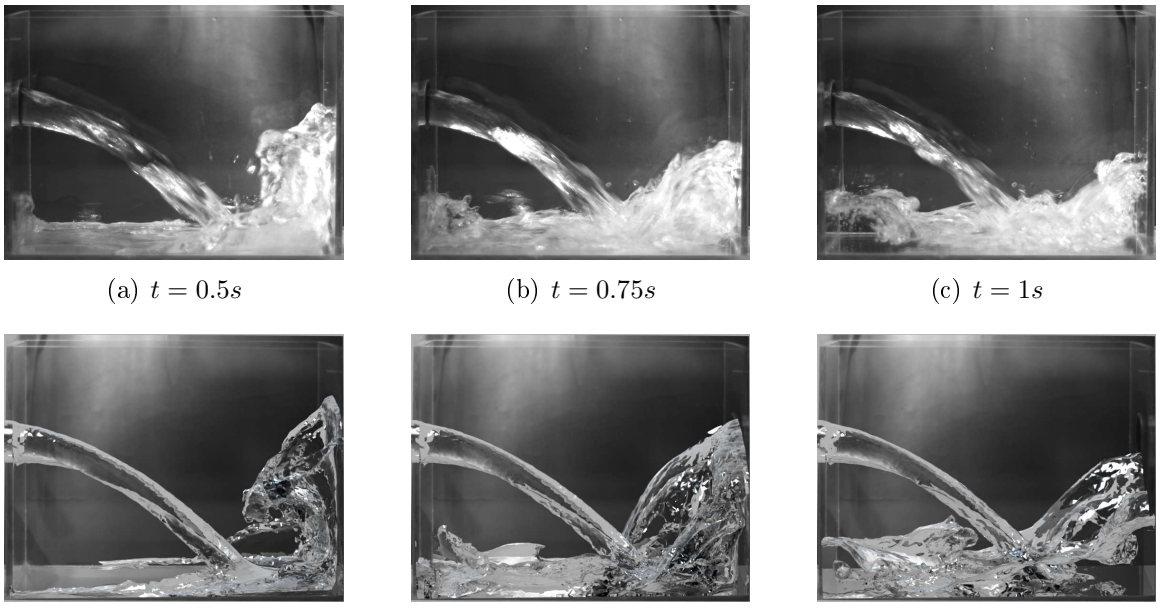


FIGURE 4.17 – Évolution en temps de l'interface air-eau : résultats expérimentaux (haut), numériques avec modèle de Smagorinsky dynamique avec facteur d'échelle et bords collants (milieu), numériques avec modèle de Smagorinsky dynamique avec facteur d'échelle et bords glissants (bas)

prise en compte du facteur d'échelle avec un contact glissant est le modèle qui représente au mieux les remontées d'eau sur les parois ainsi que les "vagues retour" vers le plans de gauche. L'allure du jet d'eau semble également plus réaliste. Nous retiendrons par la suite ce modèle, étant donné qu'il présente l'avantage de ne pas nécessiter d'intégration de loi de paroi ou de raffinement de maillage près des frontières.

4.4.3.5 confrontation des résultats

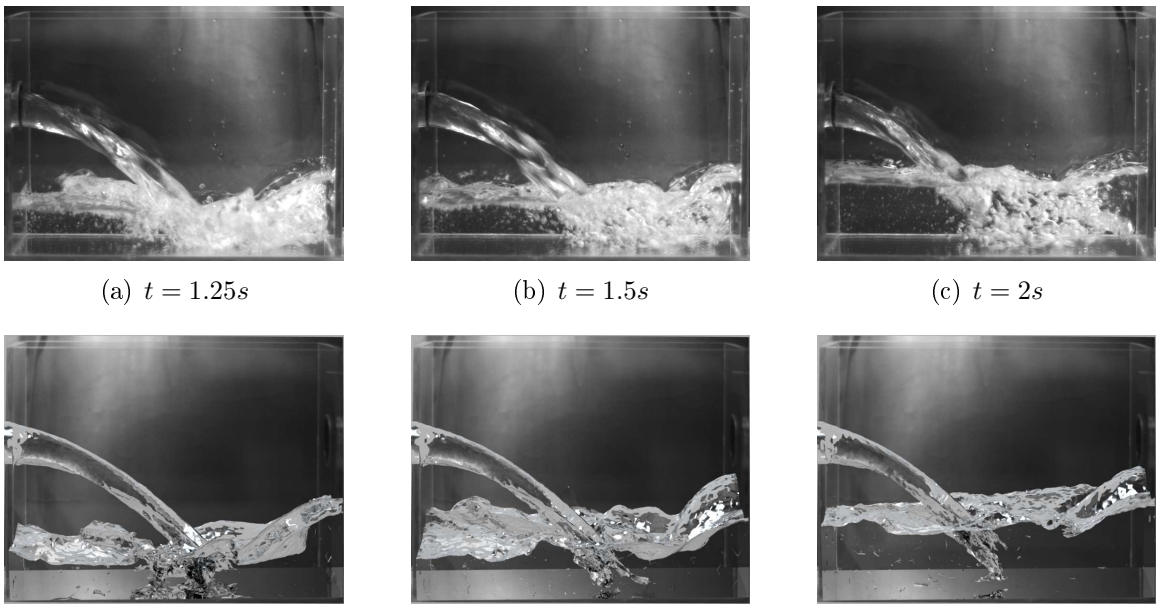
Les figures 4.18 et 4.19 présentent l'allure des résultats expérimentaux ainsi que des résultats numériques obtenus avec le modèle Smagorinsky dynamique.



(a) $t = 0.5s$ (b) $t = 0.75s$ (c) $t = 1s$

(d) $t = 0.5s$ (e) $t = 0.75s$ (f) $t = 1s$

FIGURE 4.18 – Évolution en temps de l'interface air-eau : résultats expérimentaux (haut), et numériques obtenus avec le modèle dynamique et prise en compte du facteur d'échelle (bas)



(a) $t = 1.25s$ (b) $t = 1.5s$ (c) $t = 2s$

(d) $t = 1.25s$ (e) $t = 1.5s$ (f) $t = 2s$

FIGURE 4.19 – Évolution en temps de l'interface air-eau : résultats expérimentaux (haut), et numériques obtenus avec le modèle dynamique et prise en compte du facteur d'échelle (bas)

Le modèle dynamique avec prise en compte du facteur d'échelle permet de stabiliser l'écoulement avec des paramètres physiques réels. La représentation de l'interface est quant à elle très réaliste. On peut remarquer deux principales divergences :

- la hauteur de remontée du front d'eau sur le plan droit est légèrement supérieure dans le cas numérique ; ceci peut être expliqué par l'absence de loi de paroi ou encore par le temps d'ouverture de la vanne non nul ;
- Le maillage ne permet pas de décrire les nombreuses bulles d'air emprisonnées dans l'écoulement comme nous le montrent les résultats expérimentaux. Il faudrait pour cela utiliser un maillage beaucoup plus fin, ce qui augmenterait considérablement le temps de calcul. De plus, la non considération de celles-ci ne semble pas affecter la bonne description de l'écoulement.

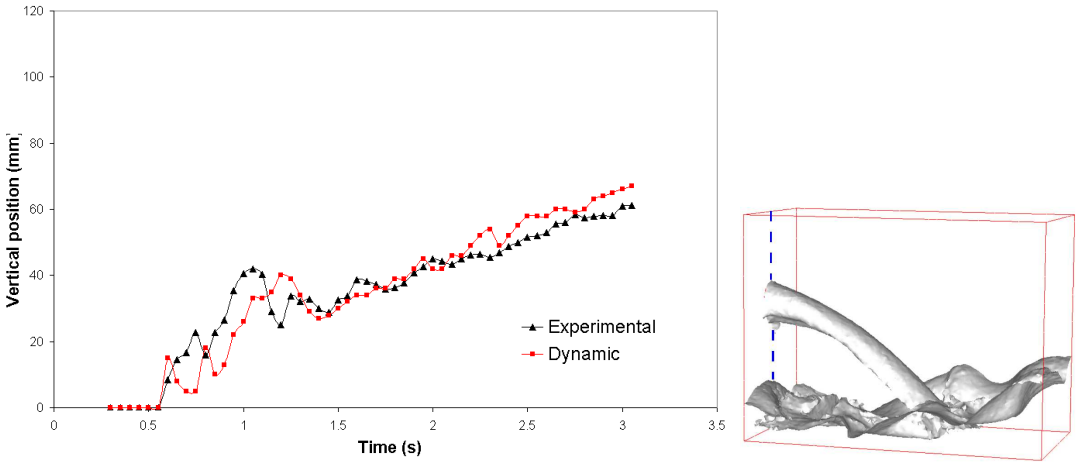


FIGURE 4.20 – Évolution en temps de l'interface au milieu du plan gauche

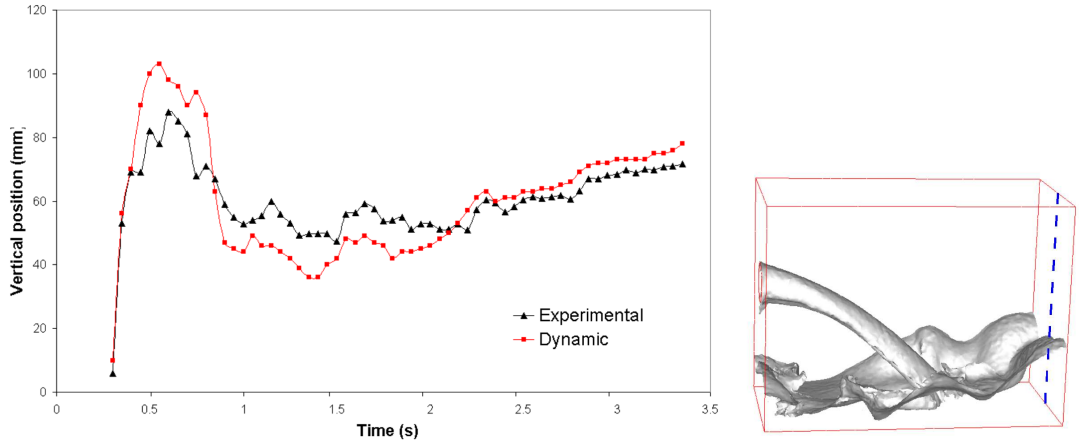


FIGURE 4.21 – Évolution en temps de l'interface au milieu du plan droit

Les figures 4.20 et 4.21 représentent l'évolution des fronts d'eau sur les axes des médians de la paroi de gauche et de la paroi de droite. Ces derniers permettent de confirmer que la remontée d'eau du calcul à l'aide du modèle dynamique de Smagorinsky est légèrement

plus haute que pour le cas expérimental, cependant l'écoulement est correctement décrit pour le reste du calcul. On observe les mêmes tendances pour les deux courbes ; bien que les amplitudes ne soient pas exactement les mêmes.

4.5 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre les différentes modélisations possibles permettant de représenter la turbulence au sein d'un écoulement à haut Reynolds. Nous avons retenu une approche de type "Large Eddy Simulation", permettant une simulation avec peu d'ajout de temps de calcul ainsi que peu ou pas de paramètres à fixer de manière empirique.

Après avoir présenté les différentes approches statique et dynamique de Smagorinsky, nous avons testé le comportement de la méthode dynamique retenue avec un solveur de Navier Stokes stabilisé uniquement par la méthode P1+/P1, puis avec notre solveur VMS présenté dans le chapitre 2. La combinaison du calcul LES avec ce dernier s'est révélé beaucoup plus robuste qu'avec le modèle P1+/P1. Le solveur VMS permet en effet d'utiliser un pas de temps supérieur à la contrainte CFL, et le modèle LES n'introduit pas d'erreur dans les résultats malgré une viscosité turbulente ajoutée très importante.

Enfin, nous avons pu tester différents types de modèle LES sur une application tridimensionnelle et les confronter à nos propres résultats expérimentaux de remplissage d'eau. Nous avons retenu le modèle dynamique de Smagorinsky avec calcul du facteur d'échelle et conditions aux limites glissantes, qui s'est révélé être le pus réaliste et ne nécessitant aucune loi de paroi ou de raffinement du maillage sur les couches limites.

Cependant, l'utilisation d'un maillage fixe demande un nombre d'éléments très élevé pour décrire les détails de l'interface, y compris dans les zones d'intérêt moindre comme l'air. L'adaptation de maillage semble être une bonne solution afin de localiser le raffinement et de réduire grandement le temps de calcul.

Bibliographie

[1] O. Basset. *Simulation Numérique D'écoulements Multi-Fluides Sur Grille De Calcul*. PhD thesis, École Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 2006.

[2] S. Bhushan. A proposed modification to the dynamic approach. *International Journal For Numerical Methods In Fluids*, 54(9) :1075–1095, Jul 30 2007.

[3] Hamn-Ching Chen and Kai Yu. Cfd simulations of wave-current-body interactions including greenwater and wet deck slamming. *Computers & Fluids*, 38(5) :970–980, May 2009. 9th International Symposium On Fluid Control, Measurement And Visualization, Tallahassee, Fl, Sep 17-19, 2007.

[4] M.A. Cruchaga, D. J. Celentano, and T.E. Tezduyar. Collapse of a liquid coumn : Numerical simulation and experimental validation. *Comput. Mech.*, 39 :453–476, 2007.

[5] A. Favre, L.S.G Kovasznay, R. Dumas, J. Gaviglio, and M. Coantic. *La Turbulence En Mécanique Des Fluides*. 1976.

[6] L. Gaston. *Simulation Numérique Par Éléments Finis Bidimensionnels Du Remplissage De Moules De Fonderie Et Étude Expérimentale Sur Maquette Hydraulique*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 1997.

[7] M Germano, U Piomelli, P Moin, and Wh Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics Of Fluids A-Fluid Dynamics*, 3(7) :1760–1765, Jul 1991.

[8] S Ghosal, Ts Lund, P Moin, and K Akselvoll. A dynamic localization model for large-eddy simulation of turbulent flows. *Journal Of Fluid Mechanics*, 286 :229–255, Mar 10 1995.

[9] Elie Hachem. *Stabilized Finite Element Method For Heat Transfer And Turbulent Flows Inside Industrial Furnaces*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 2009.

[10] Y Kaneda and Dc Leslie. Tests of subgrid models in the near-wall region using represented velocity-fields. *Journal Of Fluid Mechanics*, 132(Jul) :349–373, 1983.

[11] E. Labourasse, D. Lacanette, A. Toutant, P. Lubin, S. Vincent, O. Lebaigue, J. p. Caltagirone, and P. Sagaut. Towards large eddy simulation of isothermal two-phase flows : Governing equations and a priori tests. *International Journal Of Multiphase Flow*, 33(1) :1–39, Jan 2007.

[12] B.E. Launder, W.C. Reynolds, W. Rodi, J. Mathieu, and D. Jeandel. *Turbulence Models And Their Applications, Volume 1-2 Of Collection De La Direction Des Études Et Recherches D'electricité De France*. 1984.

[13] B.E. Launder and D.B. Spalding. Lectures in mathematical models of turbulence. *Academic Press Inc. (london) Ltd*, 1972.

[14] Dk Lilly. A proposed modification of the germano-subgrid-scale closure method. *Physics Of Fluids A-Fluid Dynamics*, 4(3) :633–635, Mar 1992.

[15] C Meneveau and Ts Lund. The dynamic smagorinsky model and scale-dependent coefficients in the viscous range of turbulence. *Physics Of Fluids*, 9(12) :3932–3934, Dec 1997.

[16] P. Sagaut. *Large Eddy Simulation For Incompressible Flows.* 1998.

[17] P Sagaut and M Germano. On the filtering paradigm for les of flows with discontinuities. *Journal Of Turbulence*, 6(23), 2005.

[18] R. Schiestel. *Modélisation Et Simulation Des Écoulements Turbulents. Traité Des Nouvelles Technologies.* 1993.

[19] J. Smagorinsky. General circulation experiments with primitive equations. *Mon. Weather Rev.*, 91 :99–164, 1963.

Deuxième partie

Étude de la thermique

Chapitre 5

Résolution de la thermique turbulente

Contents

5.1 Introduction 112
5.2 Résolution des équations de la thermique 112
5.2.1 Convection/diffusion instationnaire 112
5.2.2 Conditions initiales et conditions aux limites spatio-temporelles 113
5.2.3 Résolution classique du problème thermique : la méthode de Galerkin standard 115
5.2.4 Méthodes de stabilisation 120
5.3 Intégration de la turbulence dans l'équation de la thermique 124
5.4 Applications numériques 126
5.4.1 Convection turbulente naturelle et forcée 126
5.4.2 Remplissage d'une cavité 128
5.5 Conclusions 132

5.1 Introduction

Une des caractéristiques des procédés de fonderie est l'importance des échanges thermiques. Ce sont ces derniers qui déterminent d'une part l'évolution des fronts de solidification, mais ils introduisent également des phénomènes de convection naturelle ayant une grande influence sur l'écoulement. Ainsi, une bonne modélisation des transferts thermiques est indispensable pour déterminer les caractéristiques finales d'une pièce fondue, que ce soit en fin de remplissage comme en fin de refroidissement.

Cependant, l'application de l'équation de la chaleur à un écoulement turbulent n'est pas immédiate. Il faut prendre en compte d'une part le fort caractère convectif, d'autre part la présence de forts gradients de température, cela grâce à des méthodes de stabilisations adaptées. Il faut également prendre en compte le modèle de turbulence utilisé pour les équations de Navier-Stokes en introduisant un terme de couplage dépendant de la turbulence locale.

Nous introduirons dans ce paragraphe les équations du système, puis nous développerons les différentes méthodes de résolution appliquées. Enfin, nous verrons le comportement de notre méthode dans différents types d'applications numériques, jusqu'au remplissage multiphasique turbulent.

5.2 Résolution des équations de la thermique

5.2.1 Convection/diffusion instationnaire

La détermination précise des champs de température dans une enceinte ou dans une pièce nécessite de résoudre des équations d'advection ou encore de convection diffusion.

L'équation de conservation de l'énergie met en relation l'énergie interne spécifique et la puissance dissipée par les efforts intérieurs (déformations) plus un rapport de chaleur :

$$\rho \frac{de}{dt} = -\nabla \cdot \boldsymbol{q} + \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} + r \tag{5.1}$$

avec e l'énergie interne spécifique, ρ la masse volumique, $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur des contraintes de Cauchy, $\boldsymbol{\varepsilon}$ le tenseur taux de déformation, r le terme volumique de la création de chaleur et $\boldsymbol{q}$ le vecteur flux de chaleur. Cette équation découle directement du premier principe de la thermodynamique [2] et c'est son écriture à l'aide de la température T qui nous donnera l'équation de la chaleur recherchée.

On suppose que le matériau est à liaisons parfaites et on néglige toute transformation chimique ou physique de la matière : l'énergie interne est alors supposée dépendre de la

température absolue T par la relation suivante :

$$\frac{de}{dt} = c\frac{dT}{dt} \tag{5.2}$$

En négligeant la création de chaleur par dissipation visqueuse, l'expression de la chaleur s'exprime :

$$\rho c\frac{\partial T}{\partial t} + \rho c\boldsymbol{u}\cdot\nabla T = -\nabla\cdot\boldsymbol{q} + r \tag{5.3}$$

La loi de Fourier isotrope traduit la proportionnalité du flux de chaleur au gradient de température et s'écrit :

$$\boldsymbol{q} = -\lambda\nabla T \tag{5.4}$$

ou λ est la conductivité thermique du fluide.

Au final, on obtient :

$$\underbrace{\rho c\frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{variation temporelle}} + \underbrace{\rho c\boldsymbol{u}\cdot\nabla T}_{\text{advection}} - \underbrace{\nabla\cdot(\lambda T)}_{\text{diffusion}} = \underbrace{f}_{\text{terme source}} \tag{5.5}$$

où et f est le terme source. On peut aussi définir $k = \dfrac{\lambda}{\rho c}$ comme le coefficient de diffusion (ou diffusivité thermique).

Pour fermer le problème, il nous reste à exprimer les conditions aux limites et les conditions initiales associées.

5.2.2 Conditions initiales et conditions aux limites spatio-temporelles

L'équation de la chaleur (5.5) est une équation aux dérivées partielles du second ordre en espace et du premier ordre en temps. La résolution de cette équation permet de connaître à chaque instant la température $T(\boldsymbol{x}, t)$ en tout point du matériau. Elle suppose toutefois que la répartition initiale de température ainsi que les conditions aux limites (lois de variation de la température ou de ses dérivées) sur les frontières du domaine étudié soient définies afin que le problème thermique soit correctement posé (et admette une solution unique).

5.2.2.1 Condition initiale

Cette condition suppose qu'à l'instant $t = 0$, le champ de température est connu dans le domaine :

$$T(\boldsymbol{x}, t = 0) = T_0(\boldsymbol{x}) \tag{5.6}$$

5.2.2.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites géométriques résultent des différents phénomènes physiques de transfert de chaleur. S'appliquant sur toute ou une partie de la surface extérieure $\partial\Omega$ du domaine étudié Ω (figure 5.1), ces conditions aux limites sont de plusieurs types [1]. Nous nous contentons ici de présenter les plus fréquentes, traduisant le lien entre le milieu étudié (le matériau) et le milieu extérieur.

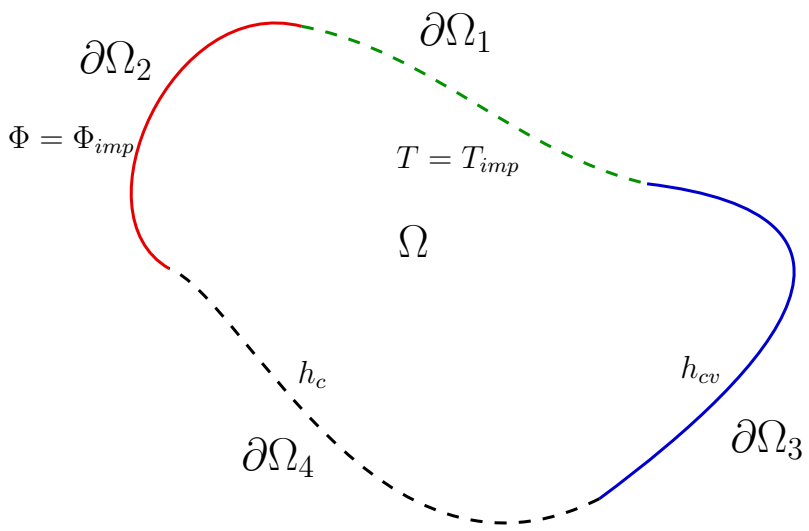


FIGURE 5.1 – Conditions aux limites

1. a) Une condition de Dirichlet de type température imposée, issue du contact avec un corps parfaitement contrôlé thermiquement :

$$T(\boldsymbol{x}, t) = T_{imp} \qquad \text{sur } \partial\Omega_1 \tag{5.7}$$

2. Une condition de Neumann de type flux imposée, provenant d'une source de chaleur extérieure s'il est positif, ou extrait de source de chaleur s'il est négatif :

$$-\lambda \nabla T.\boldsymbol{n} = \Phi_{imp} \qquad \text{sur } \partial\Omega_2 \tag{5.8}$$

3. Une condition de type convection et/ou rayonnement avec l'extérieur :

$$-\lambda \nabla T.\boldsymbol{n} = h(T - T_{ext}) \qquad \text{sur } \partial\Omega_3 \tag{5.9}$$

$$h = h_{cv} + \varepsilon_r \sigma_r (T + T_{ext})(T^2 + T_{ext}^2) \tag{5.10}$$

où h est le coefficient d'échange thermique, h_{cv} est le coefficient de transfert par convection, ε_r est l'émissivité du corps comprise entre 0 et 1, σ est la constante de Stefan.

4. Une condition de type échange thermique entre corps en contact :

$$-\lambda \nabla T.\boldsymbol{n} \;=\; h_c(T - T_{ext}) \qquad \text{sur } \partial\Omega_4 \tag{5.11}$$

où h_c est le coefficient de transfert thermique entre les matériaux. A noter que cette condition peut être définie mathématiquement comme un cas particulier de la condition précédente ($h = h_c$), nous la considèrerons comme tel par la suite.

5.2.3 Résolution classique du problème thermique : la méthode de Galerkin standard

5.2.3.1 Formulation forte du problème

On considère un domaine Ω entouré par sa frontière $\partial\Omega$. Calculons le champ température $T(\boldsymbol{x}, t)$ dans le domaine. Ce champ de température est régi par l'équation de la chaleur :

$$\left\{\begin{array}{lll} \rho c\dfrac{\partial T}{\partial t} + \rho c\boldsymbol{u}\cdot\nabla T - \nabla\cdot(\lambda\nabla T) \;=\; f & \text{dans } \Omega \\ T(\boldsymbol{x},t) \;=\; T_{imp} & \text{sur } \partial\Omega_1 \\ -\lambda\nabla T.\boldsymbol{n} \;=\; \Phi_{imp} & \text{sur } \partial\Omega_2 \\ -\lambda\nabla T.\boldsymbol{n} \;=\; h(T - T_{ext}) & \text{sur } \partial\Omega_3 \\ T(\boldsymbol{x}, t=0) = T_0(\boldsymbol{x}) & \end{array}\right. \tag{5.12}$$

5.2.3.2 Formulation faible

on introduit les espaces fonctionnels suivants :

$$\mathcal{L}^2(\Omega) \;=\; \left\{w, \int_\Omega q^2 dV < \infty\right\} \tag{5.13}$$

$$\mathcal{H}^1(\Omega) = \mathcal{V} \;=\; \left\{w \in \mathcal{L}^2(\Omega), \nabla w \in (\mathcal{L}^2(\Omega))^d\right\} \tag{5.14}$$

$$\mathcal{H}^1_0(\Omega) = \mathcal{V}_0 \;=\; \left\{w \in \mathcal{H}^1(\Omega), w = 0 \text{ sur } \partial\Omega_1\right\} \tag{5.15}$$

On rappelle le produit scalaire associé à l'espace $\mathcal{L}^2(\Omega)$:

$$(f_1, f_2) = \int_\Omega f_1 f_2 dV \qquad \forall f_1, f_2 \in \mathcal{L}^2(\Omega) \tag{5.16}$$

On peut maintenant définir les fonctions $a(T, w)$ et $l(w)$ telles que :

$$\left\{\begin{array}{rcl} a(T,w) & = & \displaystyle\int_\Omega \rho c\boldsymbol{u}\cdot\nabla T w dV + \int_\Omega \lambda\nabla T\cdot\nabla w dV + \int_{\partial\Omega_3} hTw dS \\ l(w) & = & \displaystyle\int_\Omega fw dV - \int_{\partial\Omega_2}\Phi_{imp} w dS + \int_{\partial\Omega_3} hT_{ext} w dS \end{array}\right. \tag{5.17}$$

Le problème se ramène à :

$$\begin{gathered}\text{trouver } T \text{ tel que } (T - T_{imp}) \in \mathcal{H}^1(0,\tau;\mathcal{V}_0) \text{ et :} \\ \left(\frac{\partial T}{\partial t}\ ,\ w\right) + a(T,w) - l(w) \ = \ 0 \ \ \forall w \in \mathcal{L}^2(0,\tau;\mathcal{V}_0)\end{gathered} \tag{5.18}$$

5.2.3.3 Formulation discrète

La méthode des éléments finis consiste à approcher l'espace $\mathcal{V}$ par l'espace de dimension finie $\mathcal{V}_h$, espace des fonctions d'interpolation qui sont des polynômes de degrés n par élément, n étant l'ordre d'interpolation choisi. Dans ces conditions, la formule faible discrète du problème devient :

$$\begin{gathered}\text{trouver } T_h \text{ tel que } (T_h - T_{imp}) \in \mathcal{H}^1_h(0,\tau;\mathcal{V}_{h0}) \text{ et :} \\ \left(\frac{\partial T_h}{\partial t}\ ,\ w_h\right) + a(T_h,w_h) - l(w_h) \ = \ 0 \ \ \forall w_h \in \mathcal{L}^2(0,\tau;\mathcal{V}_{h0})\end{gathered} \tag{5.19}$$

Discrétisation temporelle
Généralement, on associe à la discrétisation spatiale de l'équation (5.19) un schéma de discrétisation temporelle de type différences finies. Le schéma le plus utilisé est le schéma à deux pas de temps, encore appelé θ-schémas où $\theta \in [0,1]$:

$$\left(\frac{T_h^{n+1} - T_h^n}{\Delta t}\ ,\ w_h\right) \ = \ l(w_h) - \theta a(T_h^{n+1},w_h) - (1-\theta)a(T_h^n,w_h) \ \forall w_h \in \mathcal{L}^2(0,\tau;\mathcal{V}_{h0}) \tag{5.20}$$

Cette équation permet de calculer T_{n+1} au temps t_{n+1} à partir de T_n au temps t_n :

Schéma d'Euler explicite ($\theta = 0$)
C'est une résolution immédiate qui calcule T_{n+1} en fonction de T_n :

$$\left(\frac{T_h^{n+1} - T_h^n}{\Delta t}\ ,\ w_h\right) \ = \ l(w_h) - a(T_h^{n+1},w_h) \ \forall w_h \in \mathcal{L}^2(0,\tau;\mathcal{V}_{h0}) \tag{5.21}$$

Cette résolution d'ordre 1 doit cependant respecter la contrainte de stabilité de Courant Friedrich lewy [5], ce qui limite en partie son utilisation.

Schéma d'Euler implicite ($\theta = 1$)

$$\left(\frac{T_h^{n+1} - T_h^n}{\Delta t}\ ,\ w_h\right) \ = \ l(w_h) - a(T_h^n,w_h) \ \forall w_h \in \mathcal{L}^2(0,\tau;\mathcal{V}_{h0}) \tag{5.22}$$

Cette résolution, également d'ordre 1, utilise la valeur actuelle, donc inconnue, de T_h dans la fonction $a(T_h^{n+1},w_h)$. Ce schéma est plus compliqué à mettre en œuvre que le précédent mais il présente l'avantage d'être inconditionnellement stable.

Schéma de Crank-Nicholson ($\theta = 0.5$)
Ce type de schéma est la combinaison du schéma explicite d'Euler et du schéma implicite d'Euler.

$$\left(\frac{T_h^{n+1} - T_h^n}{\Delta t}\ ,\ w_h\right) \ = \ l(w_h) - 0.5a(T_h^{n+1}, w_h) - 0.5a(T_h^n, w_h)\ \forall w_h \in \mathcal{L}^2(0,\tau;\mathcal{V}_{h0}) \quad (5.23)$$

Il a l'avantage d'avoir une convergence d'ordre 2, mais il est moins stable que le schéma précédent.

Discrétisation spatiale
On remplace le domaine Ω par un ensemble de N_{el} éléments simplexes Ω_e, soit des triangles dans le cas 2D ou des tétraèdres dans le cas tridimensionnel [9].

Soit $T_h(\boldsymbol{x}, t) = \sum_i N_i(\boldsymbol{x}) T_i(t)$ la solution du problème éléments finis, et $\boldsymbol{T}$ le vecteur associé aux valeurs de la température T_i en chaque nœud.
$N_i(\boldsymbol{x})$ est la fonction d'interpolation associée au nœud i, continue et linéaire par élément, telle que $N_i(\boldsymbol{x}_j) = \delta_{ij}$.

Le problème discrétisé se met sous la forme matricielle suivante :

$$M\frac{\partial \boldsymbol{T}}{\partial t} + C\boldsymbol{T} - D\boldsymbol{T} + \Phi\boldsymbol{T} - S = 0 \quad (5.24)$$

avec :

$$M_{ij} = \sum_{i,j} \int_{\Omega_e} N_i N_j dV \quad (5.25)$$

$$C_{ij} = \sum_{i,j} \int_{\Omega_e} \boldsymbol{u} \cdot \nabla N_i N_j dV \quad (5.26)$$

$$D_{ij} = \sum_{i,j} \int_{\Omega_e} k \nabla N_i \nabla N_j dV \quad (5.27)$$

$$\Phi_{ij} = \sum_{i,j} \int_{\partial\Omega_{2e}} h N_i N_j dS \quad (5.28)$$

$$S_i = \sum_i \left(\int_{\partial\Omega_{3e}} h N_i T_{ext} dS + \int_{\Omega_e} f N_i dV + \int_{\partial\Omega_{2e}} \Phi_{imp} N_i T_{ext} dS \right) \quad (5.29)$$

$$(5.30)$$

La relation (5.24) représente la forme algébrique de la forme discrétisée de l'équation de la chaleur. Du point de vue physique, chaque terme ci dessus peut être interprété comme suit :

– M désigne la matrice de masse ou de capacité, elle est symétrique ;

- C la matrice de convection, matrice non symétrique ;
- D la matrice de diffusion, matrice symétrique
- Φ la matrice des flux et des énergies/chaleur à travers la frontière $\partial\Omega_2$ du domaine ;
- S la matrice colonne des sources généralisées englobant à la fois les sources internes de chaleur f et les conditions aux limites de température imposée.

Il est intéressant de remarquer que le terme de convection peut lui aussi être décomposé en deux contributions à l'aide du théorème de Green. Lorsque la masse volumique du fluide est constante, en vertu du principe de la conservation de la masse, le terme de convection s'exprime aussi comme suit [2] :

$$\int_{\Omega_e} \boldsymbol{u} \cdot \nabla T_h N_i dV = -\int_{\Omega_e} T_h \boldsymbol{u} \cdot \nabla N_i dV + \int_{\partial\Omega_e} T_h N_i \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} dS \quad (5.31)$$

$$= \frac{1}{2}\int_{\Omega_e} \boldsymbol{u} \cdot (N_i \nabla T_h - T_h \nabla N_i) dV + \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega_e} T_h N_i \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} dS \quad (5.32)$$

Cette variante du terme de convection est intéressante car elle conduit à une matrice de convection antisymétrique, propriété dont la conséquence garantit la conservation globale de l'énergie du système dans le domaine et aide à ne pas diminuer plus la qualité de la solution numérique.

5.2.3.4 Limitation de la méthode Galerkin standard

Les méthodes de Galerkin standard rencontrent en général deux types de difficultés, selon le régime du problème à traiter : convection dominante ou diffusion pure.

Convection dominante

Lorsque l'on tient compte de la présence d'un écoulement du milieu, le champ température, en formulation matricielle, est régi par l'équation (5.24). L'influence du transport par l'écoulement est représentée par la matrice de convection non symétrique C. Nous avons mis en évidence que ce terme ne doit pas en principe dégrader l'énergie totale du système, mais ne fait que la redistribuer dans l'espace, c'est donc bien un transport.

[3] montrent que la présence de ce terme non symétrique donne lieu à des oscillations numériques et à des solutions peu précises dès que le nombre de Péclet est élevé :

$$Pe = \frac{h\,|\boldsymbol{u}|}{K} \quad (5.33)$$

Le nombre de Péclet est le rapport entre les termes de convection et les termes de diffusion. En différences finies, la solution à ces instabilités est bien connue sous le nom de décentrage.

Cette opération de décentrage consiste à estimer le terme $\boldsymbol{u} \cdot \nabla T$ en privilégiant l'information en provenance de l'amont par rapport à celle venant de l'aval permettant ainsi

le non raffinement du maillage trop coûteux. Plusieurs schémas éléments finis [3] reproduisent cet effet de décentrage par des techniques variées dont la plus connue consiste à rajouter un terme de diffusion artificielle aux équations fortement convectives.

On peut également déterminer la part de convection naturelle, liée à la dilatation thermique des fluides et à la gravité, en définissant le nombre de Rayleigh Ra :

$$Ra = \frac{g\beta}{\nu K}\Delta T.L^3 \tag{5.34}$$

où β est le coefficient de dilatation thermique tel que $\rho = \rho_0(1+\beta)$, ν est la viscosité cinématique, L est la grandeur caractéristique du problème et ΔT est l'écart de température caractéristique.
Ce nombre adimensionnel représente également l'importance du couplage entre les équations de la thermique et les équations de Navier-Stokes ; en effet, si $Ra > 1$, il faudra faire intervenir la variation de masse volumique de chaque fluide dans l'équation du moment de Navier-Stokes.

Diffusion pure et choc thermique
Les méthodes de Galerkin standard peuvent également rencontrer des difficultés pour le traitement des problèmes de diffusion pure, en particulier, lorsqu'on doit traiter des chocs thermiques importants.
Une condition de stabilité importante à respecter concerne notamment le pas de temps :

$$\Delta t > \frac{h^2}{2K} \tag{5.35}$$

où h est la taille de maille et K la diffusivité thermique du matériau.

Méthodes de résolution

- L'adaptation du pas de temps et de la taille de maille dans la direction du gradient est une des méthodes pour résoudre ce problème de choc thermique mais elle présente deux inconvénients :
  - lorsqu'on agit sur la taille de maille (raffinement conséquent du maillage), il y a un risque important d'engendrer des nombres de noeuds et d'éléments trop importants ;
  - en revanche, lorsqu'on agit sur le pas de temps, on peut être confronté à des conflits voire des contradictions entre les pas de temps mécanique et thermique ainsi sur la précision des calculs.
- La thermique asynchrone consiste à désynchroniser les pas de temps mécanique et thermique. [10, 12].
- La méthode de condensation de la matrice capacité. Cette technique, utilisée par [13] pour la simulation du refroidissement en fonderie est peu coûteuse en nombre de noeuds et d'éléments. Néanmoins, elle reste limitée par le fait que la solution

condensée n'est pas toujours précise. Lorsqu'on est en présence d'un couplage thermomécanique important, les répercussions d'une résolution thermique peu précise sur le calcul mécanique peuvent être très néfastes au bon déroulement de la simulation.
Une solution intermédiaire a toutefois été proposée par [4] qui introduisent une nouvelle matrice capacité, combinaison linéaire de la matrice initiale et de la matrice condensée.

– Enfin, la technique de Taylor Galerkin explicite utilisée par [1] permet également de résoudre le problème du choc thermique.

5.2.4 Méthodes de stabilisation

5.2.4.1 La méthode SUPG

La méthode de stabilisation utilisée pour résoudre l'équation de la thermique avec convection dominante est la méthode Streamline Upwind Petrov-Galerkin (SUPG) développée dans le chapitre 3, paragraphe 3.2.5.2.0.

5.2.4.2 SCPG

Dans ce paragraphe, nous présentons la technique de stabilisation des équations de la thermique proposée par [6, 8], connue sous le nom "Shock-Capturing". La méthode de Galerkin standard présente de nombreuses instabilités au voisinage des discontinuités, ce à cause de son terme hyperbolique dominant.

L'idée de la méthode SCPG est d'améliorer la stabilité de la méthode SUPG en complétant son effet sur les forts gradients de température.
On introduit pour celà un nouveau champ :

$$\boldsymbol{v}_{//} = \begin{cases} \dfrac{R_e(T_h)}{\nabla T_h \cdot \nabla T_h} \nabla T & \text{si } \nabla T_h \neq 0 \\ 0 & \text{si } \nabla T_h = 0 \end{cases} \tag{5.36}$$

où R_e représente le résidu de l'équation de la thermique (5.5). La valeur du champ T_h dans cette équation est considérée comme connue, c'est la valeur du champ à l'incrément précédent.

L'équation de la thermique est modifiée de la manière suivante :

trouver $t \in \mathcal{T}$ tel que :

$$a(T_h, \boldsymbol{w}_h) + SUPG + \sum_K \tau_2 \int_K \left(\frac{\partial T_h}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla T_h - \nabla \cdot (k \nabla T_h) - f \right) (\boldsymbol{v}_{//} \cdot \nabla \boldsymbol{w}_h) = l(\boldsymbol{w}_h) \tag{5.37}$$

où τ_2 est un paramètre de stabilisation liée à la méthode SUPG.

Cette méthode ajoute une correction dans le sens de l'écoulement, dans le but de stabiliser les forts gradients.
Enfin, afin de minimiser la diffusion liée au cumul des deux méthodes de stabilisation, on définit le paramètre τ_2 de la manière suivante :

$$\begin{cases} \tau_2 = 0 & \text{si } v_{//} >= v \\ \tau_2 = \tau_K \left(\dfrac{v}{v_{//} - 1} \right) & \text{si } v_{//} < v \end{cases} \tag{5.38}$$

5.2.4.3 Application et résultats numériques

Pour des problèmes de convection/diffusion à convection dominante, ces méthodes présentent des bonnes propriétés de stabilité dans plusieurs cas. Dans cette partie on donne un exemple numérique et on compare par détails ces méthodes :

Considérons le problème suivant de convection-diffusion à convection dominante :

- $\boldsymbol{u} = 1m.s^{-1}$: vitesse de convection (Stokes) ;
- $k = 10^{-6}\ m^2.s^{-1}$: diffusivité ;
- $f = 0$: terme source ;
- $T_g = 200^{\circ}C$: température gauche ;
- $T_d = 50^{\circ}C$: température droite.

Pour cette application, le nombre de Péclet, défini dans (5.33) vaut $Pe = 5.10^5$, on peut considérer que l'importance de la convection est caractéristique d'un écoulement turbulent, tel que l'on peut trouver en fonderie.

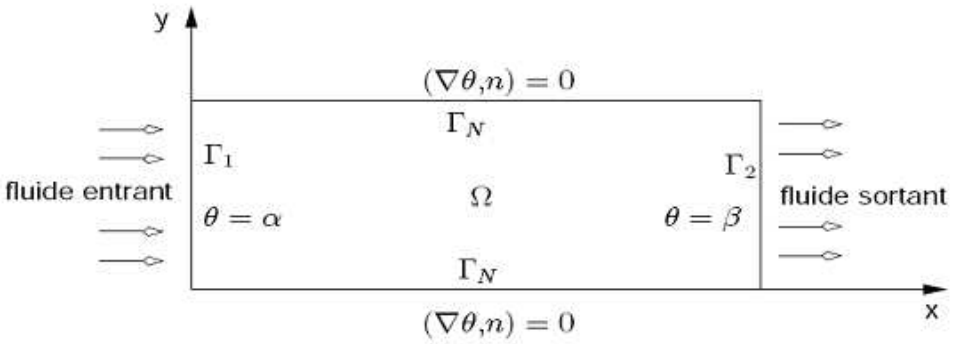


FIGURE 5.2 – Description du problème de convection dominante

Les figure 5.3 et 5.4 nous montrent comment la méthode Shock Capturing Petrov/Galerkin (SCPG) permet de limiter les oscillations numériques.

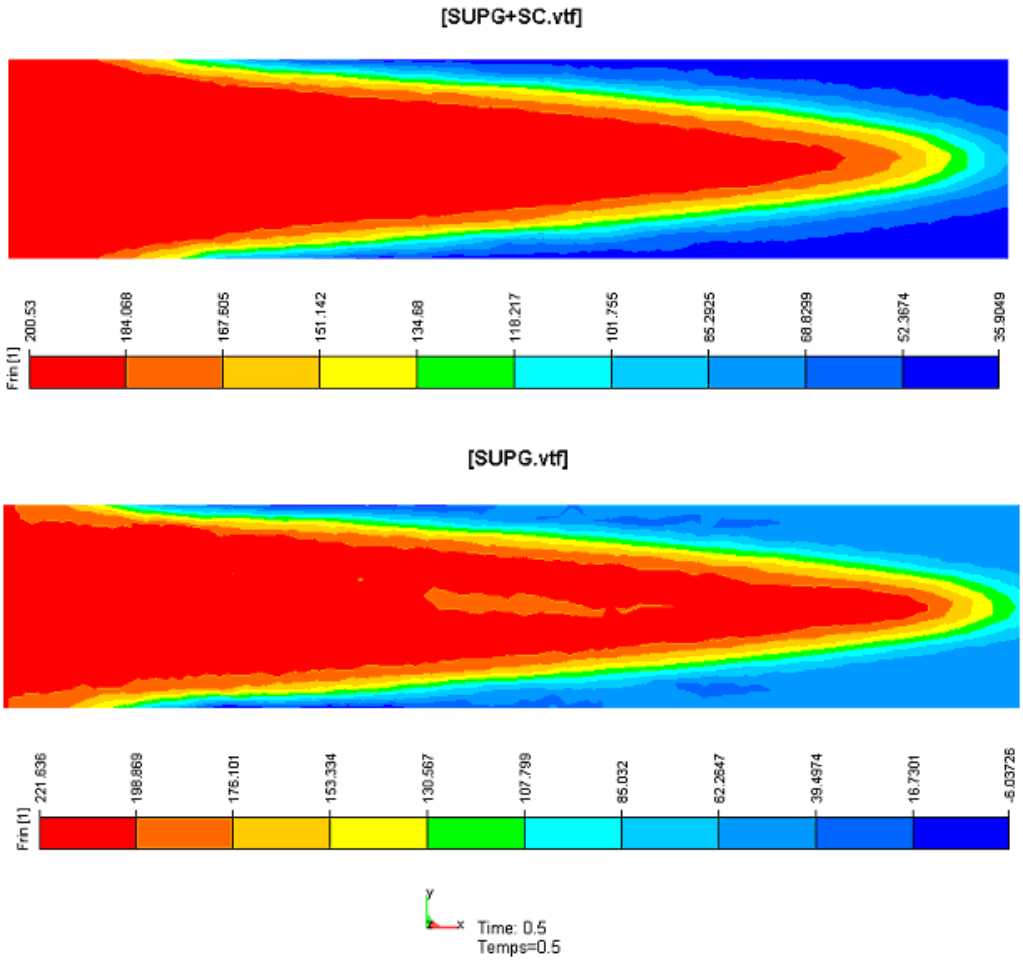


FIGURE 5.3 – Mise en évidence à un instant donné des oscillations du schéma SUPG et comparaison avec un schéma SUPG+SC plus stable

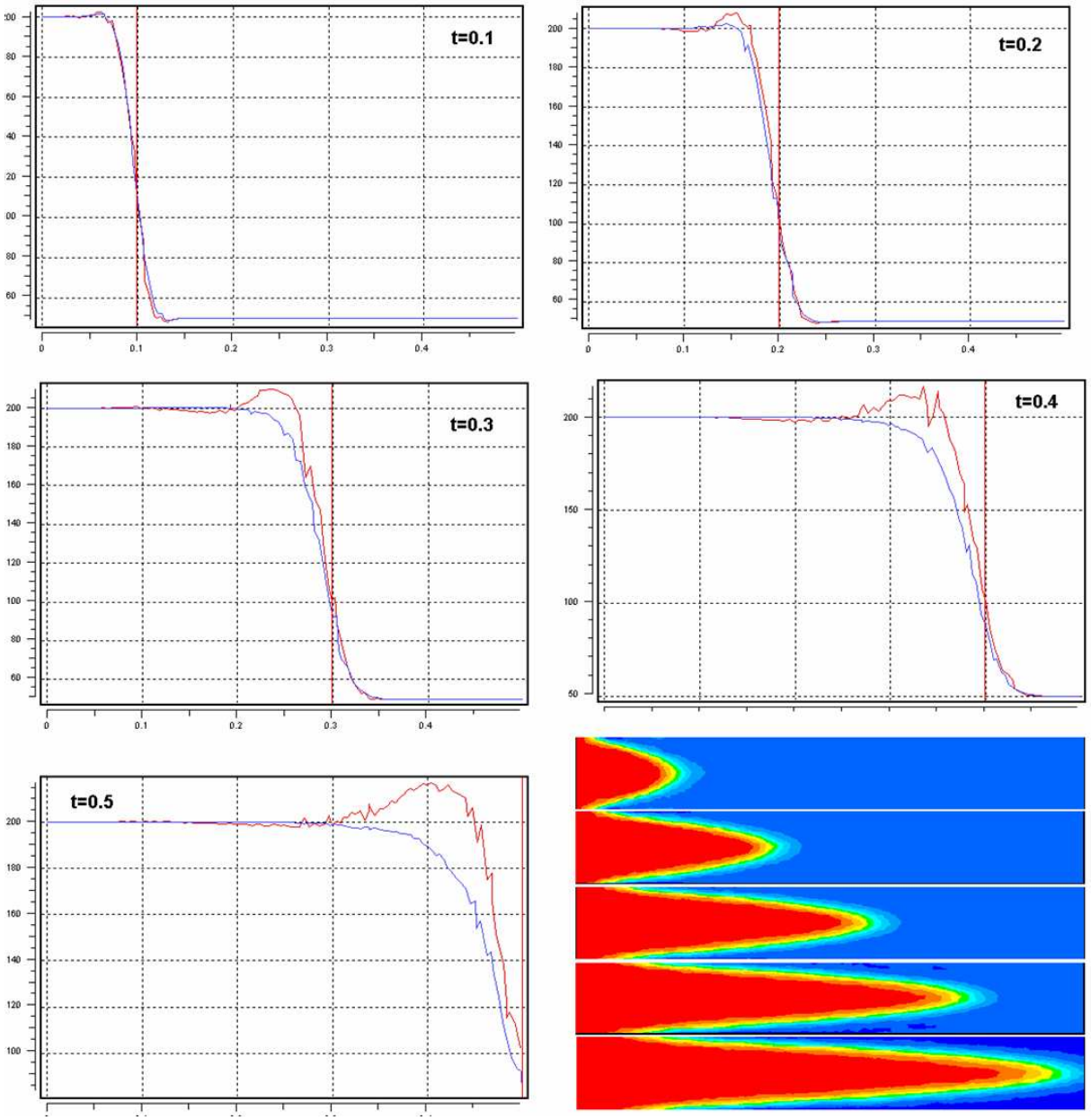


FIGURE 5.4 – Mise en évidence à un instant donné des oscillations du schéma SUPG (rouge) et comparaison avec un schéma SUPG+SC (bleu) plus stable

5.3 Intégration de la turbulence dans l'équation de la thermique

Nous avons vu dans le chapitre 4 que la résolution des équations du mouvement de fluides à haut nombre de Reynolds requiert l'utilisation d'un modèle de turbulence. L'introduction d'un tel modèle ajoute un nouveau terme dans les équations de Navier-Stokes et la vitesse résolue ne correspond plus simplement à la discrétisation de la vitesse réelle mais à une vitesse moyennée. La vitesse de convection introduite dans l'équation de la thermique n'est donc pas la vitesse réelle et il faut également pouvoir modéliser les échanges thermiques ayant lieu aux échelles non résolues afin de décrire le système de la manière la plus réaliste qui soit.

On rappelle le principe général des méthodes de turbulence : chaque champ Φ du système est décomposé en une partie filtrée $\bar{\Phi}$ et une partie variable Φ' :

$$\Phi \;=\; \bar{\Phi} + \Phi' \tag{5.39}$$

Pour une méthode L.E.S., on utilise un filtrage spatial, le terme Φ' est donc le terme des petites échelles, ou terme de sous maille. Dans les méthodes R.A.N.S., on utilise un filtrage temporel, Φ' est la partie fluctuante.

De la même manière que pour la vitesse, on souhaite obtenir la partie filtrée $\bar{T}$ du champ de température en ne résolvant pas la partie des petites échelles.

Ainsi, on peut réécrire l'équation de la thermique (5.12) en fonction des champs filtrés et des champs variables [11] :

$$\rho c_p \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \bar{\boldsymbol{u}} \cdot \nabla \bar{T} \right) + \nabla(\rho c_p \overline{\boldsymbol{u}' T'}) \;=\; \nabla \cdot (\lambda \nabla \bar{T}) \tag{5.40}$$

où $\bar{\boldsymbol{u}}$ est la vitesse filtrée obtenue en résolvant les équations de Navier-Stokes filtrées avec modèle de turbulence :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{u}} = 0 \\ \bar{\rho} \dfrac{\partial \bar{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{\boldsymbol{u}} \otimes \bar{\boldsymbol{u}}) + \nabla \cdot (-2(\bar{\mu} + \mu_t)\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + p^* \mathbb{1}) - \bar{\rho} \boldsymbol{g} - \bar{\sigma} \bar{\kappa} \bar{\boldsymbol{n}}_{\boldsymbol{\Gamma}} \delta = 0 \end{cases} \tag{5.41}$$

μ_t est la viscosité turbulente introduite par le modèle de turbulence utilisé.

L'équation (5.40) fait apparaître un nouveau terme dépendant des vitesses de sous maille et température de sous maille. Ce flux turbulent de chaleur de sous maille représente la chaleur transportée par les échelles non représentées, ayant un effet direct sur les champs

résolus. On peut ainsi réécrire l'équation de la thermique filtrée :

$$\rho c_p \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \bar{\boldsymbol{u}} \cdot \nabla \bar{T} \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla \bar{T} - \boldsymbol{q}_t) \tag{5.42}$$

$$\boldsymbol{q}_t = \rho c_p \overline{\boldsymbol{u}' T'} \tag{5.43}$$

Ce terme étant défini à partir de champs non résolus, il convient de le modéliser avec une méthode apropriée. De manière analogue à la modélisation de la turbulence dans l'équation de Navier-Stokes, le flux de chaleur thermique peut être modélisé par un terme de diffusion [11] :

$$\boldsymbol{q}_t = \lambda_t \nabla \bar{T} = \rho c_p K_t \nabla \bar{T} \tag{5.44}$$

oùλ_t et K_t sont respectivement la conductivité thermique turbulente et la diffusivité thermique turbulente.

Afin de fermer le système, on utilise l'analogie de Reynolds selon laquelle le rapport entre le flux d'énergie mécanique turbulente et le flux thermique turbulent doit être constant et proche de 1. En d'autres termes, on a la relation suivante entre la viscosité cinématique turbulente $\nu_t = \dfrac{\mu_t}{\rho}$ et la diffusivité thermique turbulente K_t :

$$Pr_t = \frac{\nu_t}{K_t} = cte = 0.9 \tag{5.45}$$

où Pr_t est le nombre de Prandtl turbulent dont la valeur est la même pour tous les fluides.

L'introduction de ce terme turbulent dans l'équation de la chaleur permet donc de modéliser les échanges thermiques entre les petites échelles, non représentées, mais il permet également de stabiliser la résolution de l'équation de convection-diffusion en ajoutant un terme elliptique de diffusion. Ceci a pour double effet de réduire à la fois les oscillations numériques et le temps de calcul.

5.4 Applications numériques

5.4.1 Convection turbulente naturelle et forcée

Dans ce paragraphe, nous allons étudier le cas de convection turbulente naturelle et forcée présenté dans [7] et [14]. Le domaine, présenté figure 5.5, est une cavité tridimensionnelle de dimensions $1.04 \times 0.3 \times 1.04\ m^3$ remplie d'air, on introduit de l'air à une vitesse de $0.57\ m.s^{-1}$ à travers une ouverture de $1.8\ cm$ en haut de la paroi de gauche. La sortie se fait par le bas de la paroi de droite, à travers une ouverture de $2.4\ cm$. La paroi inférieure est maintenue à une température chaude $T_h = 35^{\circ}C$, tandis que les parois gauche, supérieure et droite sont maintenues à une température froide $T_c = 15^{\circ}C$. Cette différence de température crée un mouvement de convection naturelle ajouté à la convection forcée. Le nombre de Rayleigh vaut $Ra_H = 2.4\ 10^9$, le nombre de Reynolds vaut $Re_h = 684$.

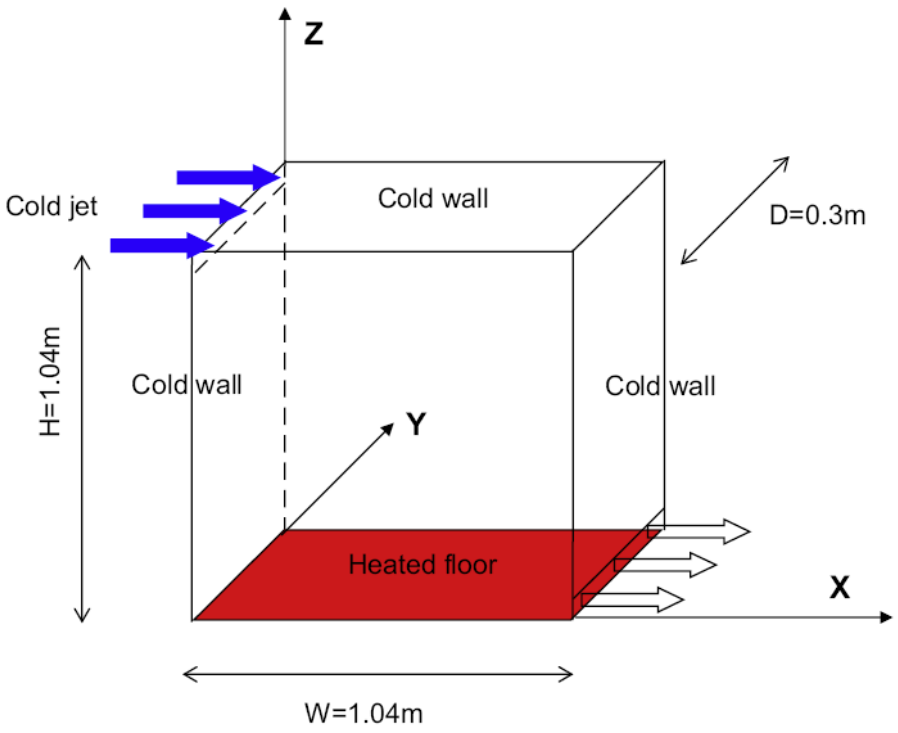


FIGURE 5.5 – Convection turbulente naturelle et forcée [7]

Pour cette application, nous utilisons un maillage fixe isotrope de 328 239 éléments (figure 5.6), le pas de temps est fixé $0.003\ s$.

La figure 5.7 montre les lignes de courant dans la cavité. Les courbes de vitesse et température sont présentées figure 5.8. Ces courbes représentent la moyenne temporelle sur une période de 200 incréments [7]. On remarque une bonne corrélation des résultats avec les autres méthodes numériques. Comme prévu, au centre de la cavité, on retrouve

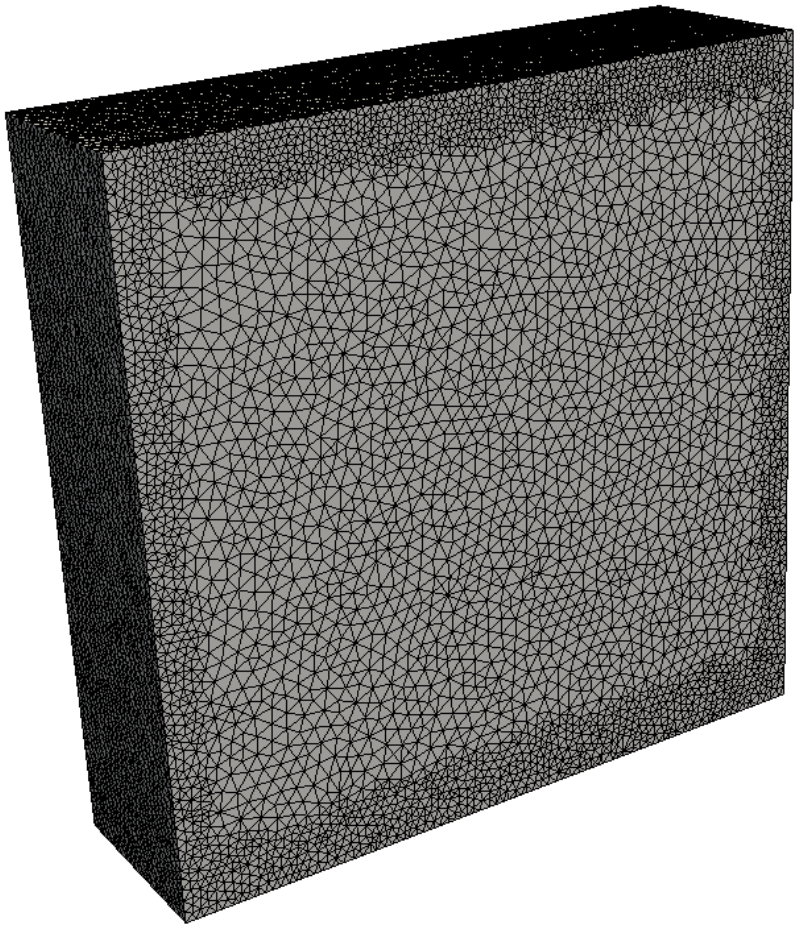


FIGURE 5.6 – Maillage utilisé pour la convection turbulente naturelle et forcée

une température moyenne de $21^{\circ}C$. Le couplage du solveur thermique stabilisé, du solveur Navier Stokes VMS et du modèle dynamique de Smagorinsky s'avère robuste sur ce genre d'écoulement typique d'un remplissage de métal en fusion.

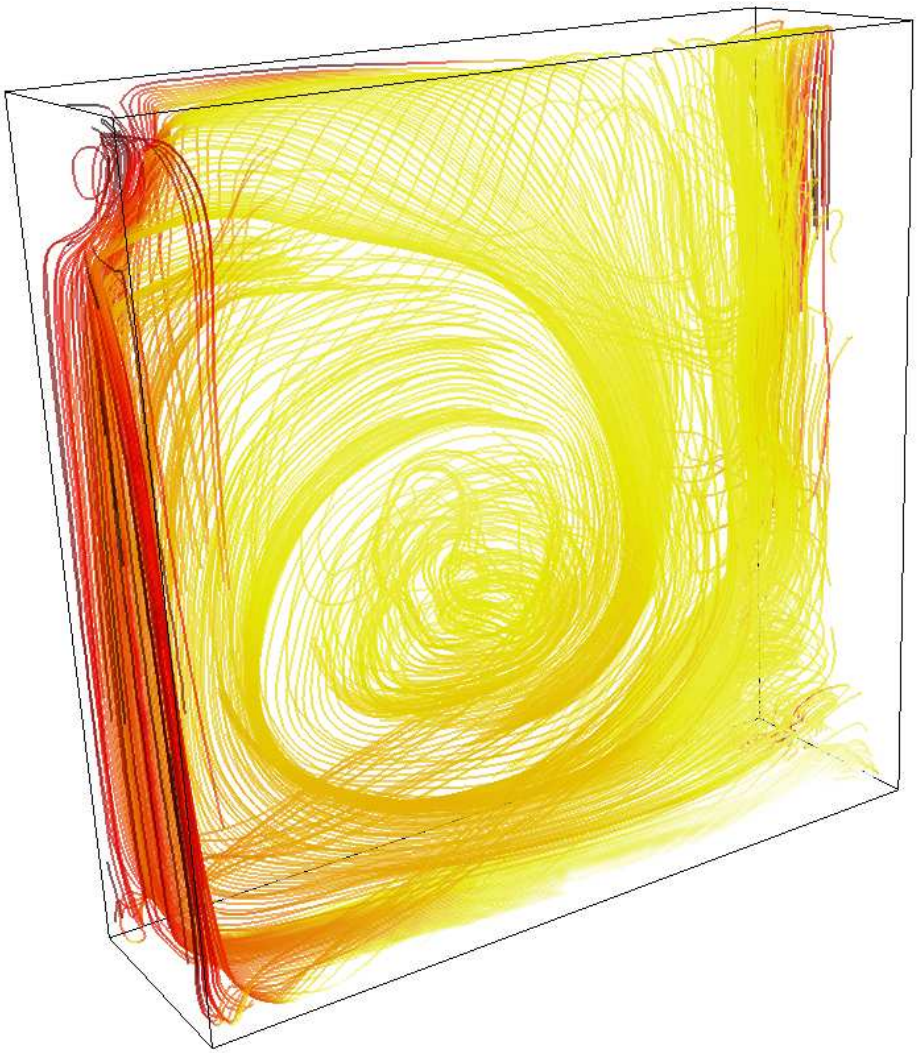


FIGURE 5.7 – Lignes de courant et température dans la cavité

5.4.2 Remplissage d'une cavité

Dans ce paragraphe, nous nous intéressons à l'application numérique au remplissage d'une cavité avec transferts thermiques. Le domaine est une cavité de $0.1 \times 0.2\ cm^2$ initialement remplie au quart d'eau. On utilise un maillage fixe isotrope et homogène de 6 500 nœuds et un pas de temps adaptatif. A l'instant initial, la cavité a une température de $30^{\circ}C$ on injecte de l'eau à $10^{\circ}C$ à une vitesse de 0.3 $m.s^{-1}$, l'introduction d'eau dans la cavité aura pour effet de générer un mouvement de convection forcée turbulente auquel on ajoute un effet de convection naturelle en chauffant le fond de la cavité à la température

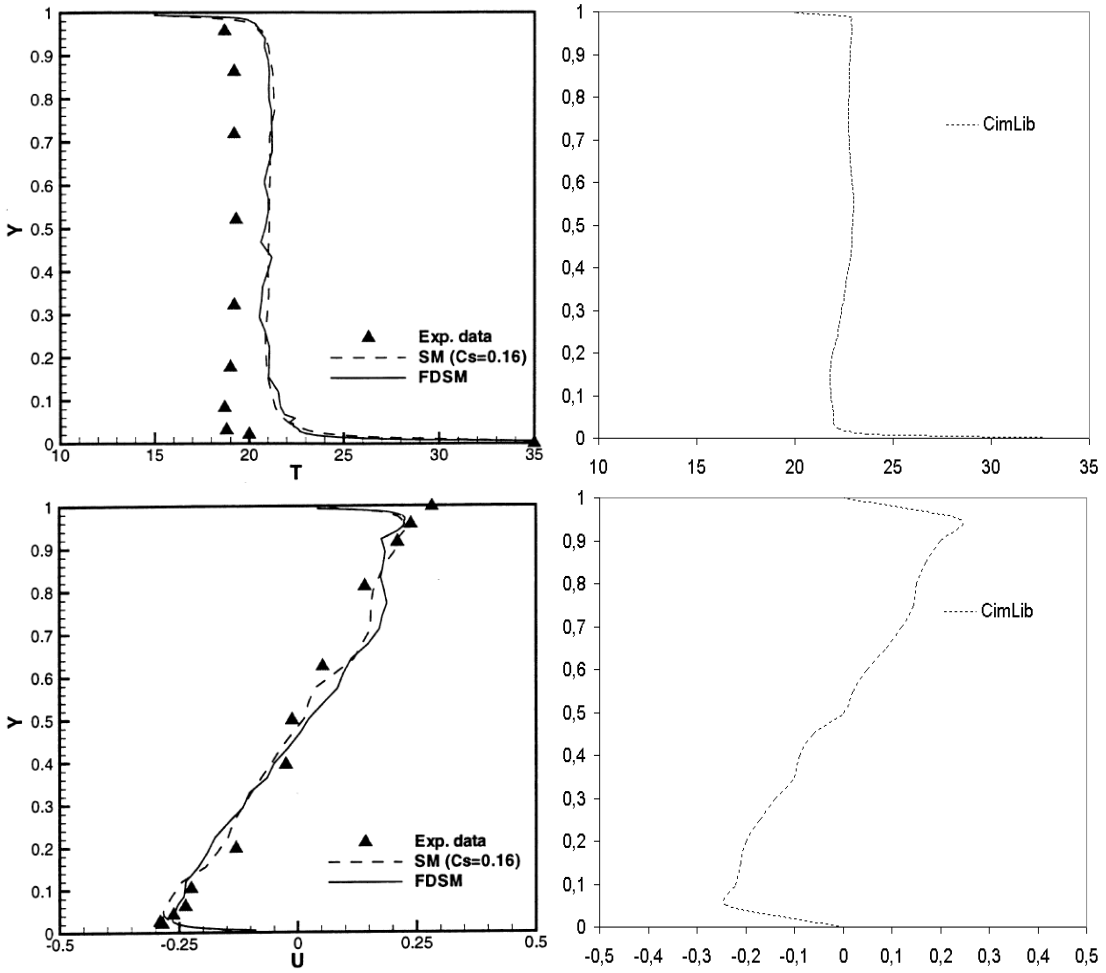


FIGURE 5.8 – Comparaison entre les résultats expérimentaux, numériques et notre méthode. en haut : vitesse moyenne à $x = 0.502m$; en bas : température moyenne à $x = 0.502m$

de $50^{\circ}C$. L'objectif de cette application est d'étudier le comportement de notre méthode de résolution lorsque tous les solveurs sont couplés.

La figure 5.9 nous montre l'évolution de la surface libre et de la température à différents instants. On aperçoit alors que le champ de température reste stable malgré les tourbillons engendrés par le remplissage. L'introduction du modèle de turbulence dans l'équation de la thermique permet de limiter les instabilités numériques. Un tel calcul diverge immédiatement lorsque l'on essaie de le résoudre par simulation numérique directe.

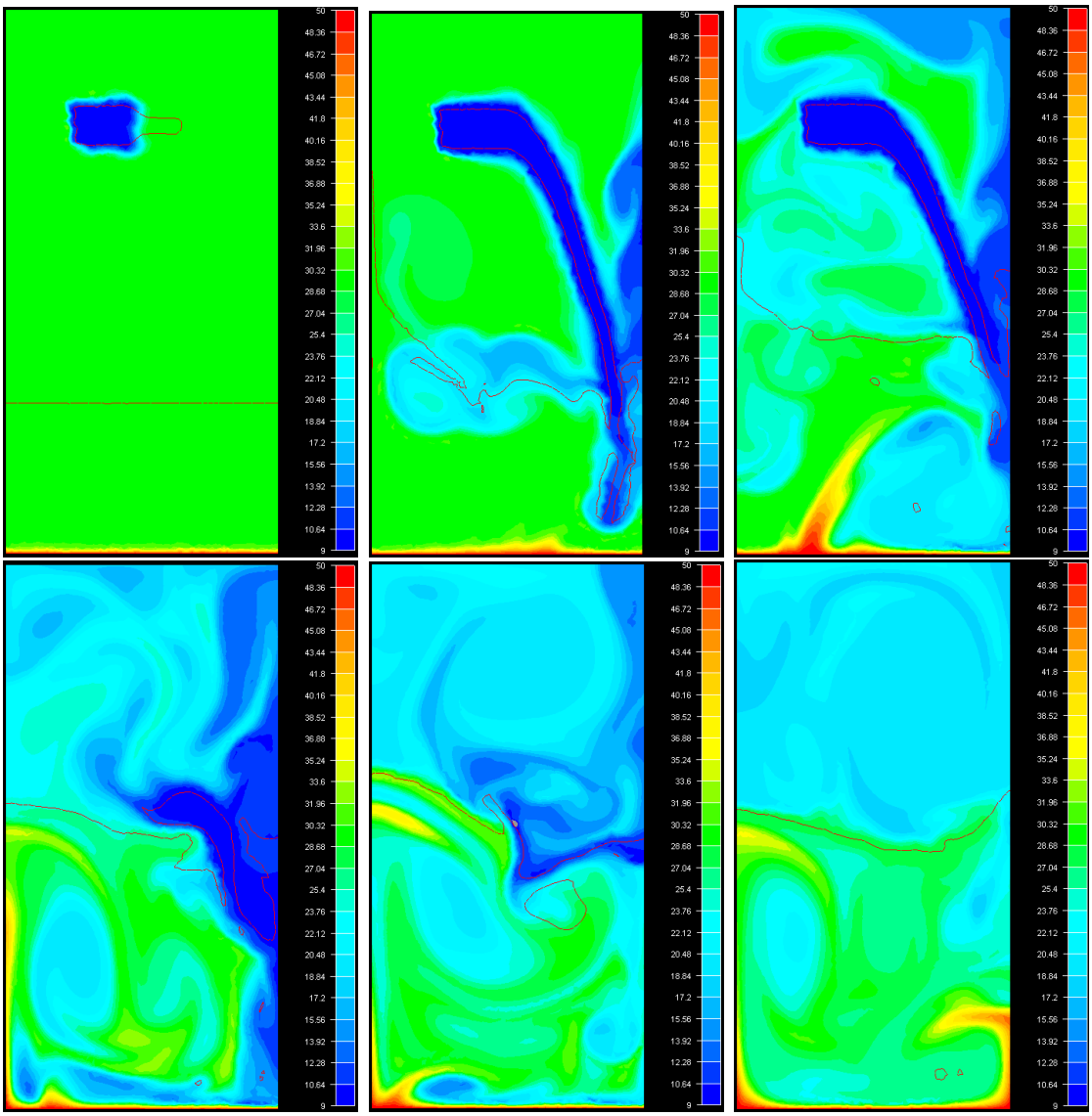


FIGURE 5.9 – Remplissage et chauffage d'une cavité

Cette nouvelle application permet également de présenter une façon originale d'introduire les conditions aux limites :

– La cavité est entièrement fermée ($\boldsymbol{u}.\boldsymbol{n} = 0$ sur $\partial\Omega$) ;

- Dans la zone d'injection initiale, on impose $\alpha > \alpha_0$ pendant tout le temps du remplissage ;
- Dans la zone d'injection initiale, on impose $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_{imp}$ pendant tout le temps du remplissage ;

La figure 5.10 montre comment l'écoulement se comporte dans ces conditions

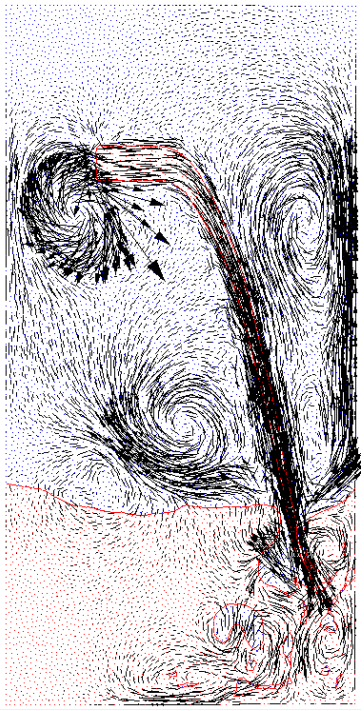


FIGURE 5.10 – Champ de vitesse et interface dans la cavité

5.5 Conclusions

Nous avons montré dans ce chapitre comment écrire et discrétiser les équations de la thermique pour une résolution par éléments finis. Nous avons ensuite montré comment la méthode de stabilisation Streamline Upwind Petrov Galerkin permet de stabiliser la résolution de la thermique à convection dominante. Nous avons également présenté une méthode permettant de prendre en compte les chocs thermiques grâce à l'introduction d'un nouveau terme de stabilisation.

L'utilisation d'une vitesse résultant d'un modèle de turbulence pour convecter la thermique implique également une modélisation supplémentaire. Celle-ci est faite par l'ajout d'une conductivité turbulente, directement calculée en fonction de la viscosité turbulente présentée dans le chapitre précédent.

Les différentes appllications numériques ont attesté la stabilité du solveur thermique pour de simples cas de diffusion et de convection. L'application à la convection turbulente naturelle et forcée a également permis de valider le bon comportement du couplage thermique/turbulence. Enfin, le cas du remplissage a élargi au cas d'un écoulement multi fluide turbulent, plus représentatif du procédé de fonderie.

Bibliographie

[1] S. Batkam. *Thermique Multidomaine En Simulation Numérique Du Remplissage 3d.* PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 2002.

[2] A. Bianchi, Y. Fautrelle, and J. Etay. *Transferts Thermiques.* 2004.

[3] A. Brooks and T. Hughes. Streamline upwind /petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navier-stokes equations. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 32 :199–259, 1982.

[4] J. L. Chenot, Y. Tronel, and N. Soyris. Finite element calculation of thermo-coupled large deformation in hot forging. In , *International Conference On Heat Transfer*, 1992.

[5] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy. Uber die partiellen diefferenzengleichungen der mathematischen physik. *Mathematische Annalen*, 100(1) :32–74, 1928.

[6] EGD do Carmo and GB Alvarez. A new stabilized finite element formulation for scalar convection-diffusion problems : the streamline and approximate upwind petrov-galerkin method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(31-32) :3379–3396, 2003.

[7] Ridouane Ezzouhri, Patrice Joubert, Francois Penot, and Sophie Mergui. Large eddy simulation of turbulent mixed convection in a 3d ventilated cavity : Comparison with existing data. *International Journal Of Thermal Sciences*, 48(11) :2017–2024, Nov 2009.

[8] AC Galeao, RC Almeida, SMC Malta, and AE Loula. Finite element analysis of convection dominated reaction-diffusion problems. *Applied Numerical Mathermatics*, 48(2) :205–222, FEB 2004.

[9] C. Gruau. *Génération De Métriques Pour Adaptation Anisotrope De Maillages, Applications à La Mise En Forme Des Matériaux.* Thèse de doctorat, Ecole Nationale Sup ÉRieure Des Mines De Paris, 2004.

[10] O. Jaouen. *Modélisation Tridimensionnelle Par Éléments Finis Pour L'analyse Thermomécanique Du Refroidissement Des PiÈces Coulées.* PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 1998.

[11] D. Lacanette. *Simulation Numérique De L'essorage Et Du Refroidissement D'un Film Liquide En Mouvement Par Un Jet Plan Turbulent.* PhD thesis, Université Bordeaux I, 2004.

[12] B. Magnin. *Modélisation Du Remplissage Des Moules D'injection Pour Les Polymères Thermoplastiques Par Une Méthode Eulérienne-Legrangienne Arbitraire*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 1994.

[13] Y. Tronel. *Contribution À La Modélisation Thermomécanique Et Physique Du Forgeage À Chaud*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 1993.

[14] W Zhang and QY Chen. Large eddy simulation of indoor airflow with a filtered dynamic subgrid scale model. *INTERNATIONAL JOURNAL OF HEAT AND MASS TRANSFER*, 43(17) :3219–3231, SEP 2000.

Chapitre 6

Résolution du changement de phase

Contents

6.1 Introduction 136
6.1.1 Méthodes à grille mobile 136
6.1.2 Méthodes à grille fixe 136
6.2 Traitement de l'interface solide/liquide 139
6.2.1 Introduction 139
6.2.2 Equation de Gibbs-Thomson 139
6.2.3 Applications numériques 141
6.2.4 Calcul dynamique du coefficient cinétique 143
6.3 Thermique et changement de phase 145
6.3.1 Équations 146
6.3.2 application numérique 147
6.4 Applications numériques 150
6.4.1 Solidification dans un coin 150
6.4.2 Solidification de l'étain 151
6.4.3 Calcul triphasique avec solide mobile 152
6.5 Conclusion 161

6.1 Introduction

Les premières publications sur le chagnement de phase remontent à Stefan (1891). C'est pourquoi la dénomination "Problème de Sefan" pour un problème de changement de phase est toujours utilisée même pour des formulations plus complètes et complexes que le problème initial. Dans le problème de Stefan, le changement de phase est considéré comme une transformation isotherme instantanée. Depuis une vingtaine d'années, de multiples méthodes numériques ont été proposées dans la littérature pour résoudre le problème de Stefan [1, 3]. En général, ces méthodes cherchent à approcher la position du front de solidification/fusion au cours du temps, et se divisent alors en deux catégories principales :

- les méthodes à grille mobile ou déformable ;
- les méthodes à grille fixe qui regroupent par exemple la méthode de la chaleur spécifique équivalente, la méthode enthalpique et la méthode de la source de chaleur fictive.

6.1.1 Méthodes à grille mobile

Les méthodes à maillage déformable se fondent sur la formulation classique de Stefan définie de la manière suivante :

- dans le domaine occupé par la phase liquide l :

$$\rho_l c_{pl} \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_l \nabla T) \;=\; 0 \tag{6.1}$$

- dans le domaine occupé par la phase solide s :

$$\rho_s c_{ps} \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda_s \nabla T) \;=\; 0 \tag{6.2}$$

- à l'interface solide/liquide Γ :

$$\rho L_f \boldsymbol{u}_n \;=\; \lambda_s \frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{n}} - \lambda_l \frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{n}} \tag{6.3}$$

  où $\boldsymbol{n}$ représente la normale à l'interface Γ et $\boldsymbol{u}_n$ la composante normale de la vitesse de déplacement de l'interface.

La formulation par éléments finis d'un tel problème fait alors appel à des techniques de maillage adaptatif [6] afin de faire coïncider l'interface avec le maillage du système.

6.1.2 Méthodes à grille fixe

Les méthodes à maillage fixe sont fondées sur une formulation enthalpique de l'équation de conservation de l'énergie, et utilisent une fonction locale pour suivre le déplacement du front de solidification à travers le maillage statique.

La méthode enthalpique est décrite en détails par Voller et al. [16] sous ses différentes formes. Voller a en outre écrit cette méthode dans sa forme la plus utilisée aujourd'hui [15].

6.1.2.1 Méthode de la chaleur spécifique équivalente

La formulation en capacité calorifique équivalente consiste à prendre en compte la chaleur latente directement dans la capacité calorifique c_p. Ainsi, si le chemin de solidification n'est fonction que de la température, on peut formellement définir une chaleur spécifique équivalente :

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} = \frac{\partial \rho c T}{\partial t} + \rho L \frac{\partial f_l}{\partial t} \tag{6.4}$$

$$= \rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho L \frac{\partial f_l}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial t} \tag{6.5}$$

Ici, la fonction différentielle $\frac{\partial f_l}{\partial T}$ ne dépend que du matériau considéré et est une variable connue du problème. C'est une fonction $\delta(T)$ de la température. On peut alors réécrire le problème de la manière suivante :

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} = \rho(c + c^{eq})\frac{\partial T}{\partial t} \tag{6.6}$$

$$c^{eq} = L\frac{\partial f_l(T)}{\partial T} \tag{6.7}$$

Le changement de phase est alors traité comme une non linéarité des propriétés physiques. Cependant, les variations brutales de chaleur spécifique peuvent causer des difficultés numériques dans la résolution de l'équation de la chaleur.
L'autre inconvénient de cette méthode est qu'elle est basée uniquement sur la température et ne permet donc pas de résoudre un changement de phase isotherme sans introduire une plage de température dans laquelle se fera la transformation. L'introduction d'une telle plage implique une adaptation de maillage lorsque le gradient de température est trop élevé pour assurer la conservation de l'énergie, et un domaine spatial trop étendu lorsque le gradient de température est trop faible. De plus, la dépendance en température ne permet pas de prendre en compte le cas de la surfusion.

6.1.2.2 Résolution en enthalpie

Une méthode plus stable pour prendre en compte le changement de phase dans l'équation de la thermique est de la résoudre en enthalpie :

$$\begin{cases} \rho\dfrac{\partial h}{\partial t} + \rho \boldsymbol{u}\cdot\nabla h - \nabla\cdot(\lambda\nabla T) = 0 \\ T = f(h) \end{cases} \tag{6.8}$$

Une méthode de Newton Raphson est alors utilisée pour faire converger le système [4].

L'avantage de cette méthode est qu'elle est beaucoup plus précise que la dernière, notamment au niveau de la conservation de l'énergie. Cependant, elle requiert plusieurs itérations de Newton Raphson non linéaires. Le fait de conserver une dépendance des propriétés physiques uniquement en fonction de la température ne permet pas de se défaire des autres inconvénients de la précédente méthode.

6.1.2.3 Méthode de germination-croissance

La méthode de germination-croissance est basée sur une approche Level-Set. L'interface liquide/solide est représentée par une fonction distance. De la même manière que dans la réalité, la solidification/fonte ne peut se faire qu'à l'interface. Il est donc également nécessaire d'introduire un modèle de germination.
Cette méthode requiert de pouvoir décrire correctement l'interface ainsi que son évolution, il faut donc introduire une méthode de capture d'interface en plus de résoudre les équations de la thermique. Pour de grands nombres de Stefan, l'évolution de la Level-Set de phase et de la thermique sont fortement liées. Néanmoins, l'avantage de cette méthode est qu'elle permet de déterminer avec précision la position de l'interface. On peut ensuite, de la même manière que dans le chapitre 3, définir une épaisseur d'interface de manière géométrique. Cette méthode permet de simuler tout type de changement de phase, y compris isotherme, tout en conservant des tailles de grilles adaptées.

C'est cette méthode que nous allons développer dans la suite de ce chapitre.

6.2 Traitement de l'interface solide/liquide

6.2.1 Introduction

Le traitement du changement de phase avec une fonction Level-Set combinée à une loi de germination croissance est très largement utilisé dans la littérature pour simuler la cristallisation des métaux [18] et la croissance de grains [12, 14], mais elle peut également être élargie à l'échelle macroscopique [8].

Dans le modèle de germination croissance, on considère que le changement de phase est toujours réalisé au niveau d'une surface déjà existante. L'une ou l'autre des deux phases vient alors à croître, ce qui peut être modélisé comme un déplacement de l'interface liquide/solide. Il est alors naturel de considérer une méthode de capture d'interface afin de décrire la transformation. Comme toute fonction Level-Set, elle est transportée par l'équation de convection sur l'interface :

$$\left(\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \boldsymbol{u}_n \cdot \nabla \alpha\right)\Big|_\Gamma = 0 \tag{6.9}$$

Une fois la fonction Level-Set de phase α calculée, on peut utiliser une loi de mélange telle que décrite dans le chapitre 3.5 afin de définir les propriétés physiques de chaque phase.

La seconde étape est de définir la vitesse de convection de l'interface solide/liquide. Celle-ci peut être déterminée par la thermique ainsi que d'autres paramètres tels que la géométrie de l'interface, la présence et la concentration en solutés pour les matériaux non purs, etc.. Nous étudierons dans ce chapitre les différentes lois définies dans la littérature et nous verrons laquelle est la plus adaptée à notre problème. Nous ne traiterons cependant pas du problème de germination, qui est plus relatif au problème de croissance de grains ; en effet dans notre cas la germination sera donnée par la frontière des domaines considérés.

6.2.2 Equation de Gibbs-Thomson

La forme la plus utilisée pour le calcul de la vitesse de croissance est la relation de Gibbs-Thomson [2]. Cette relation, particulièrement étudiée pour la croissance dendritique [13], exprime la vitesse de croissance en fonction de la température, mais aussi du rayon de courbure de l'interface :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \boldsymbol{u}_n . \nabla \alpha = 0 \tag{6.10}$$

avec :

$$\boldsymbol{u}_n|_\Gamma = \mu_k (T_f - T_I - \Gamma \kappa) \nabla \alpha \tag{6.11}$$

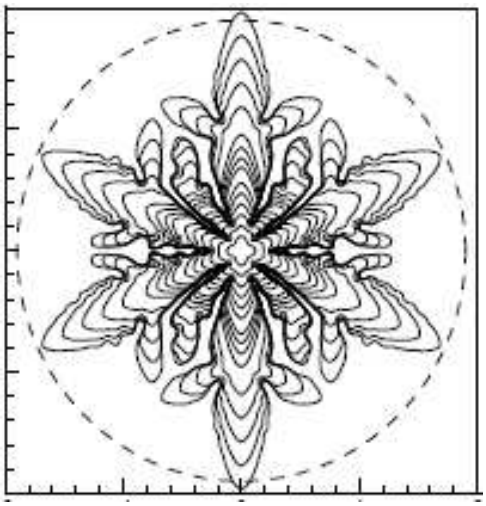


FIGURE 6.1 – Exemple d'application du modèle germination/croisssance pour la croissance dendritique de grains [13]

où T_f est la température de fusion, T_I est le champ de température à l'interface, κ la courbure d'interface, $\mu_k \simeq 2.10^{-5} m/sK$ est le coefficient cinétique de croissance, $\Gamma \simeq 2.10^{-7} mK$ est le coefficient de Gibbs-Thomson. α est considéré comme une fonction distance proche de l'interface, soit $|\nabla\alpha| = 1$

Pour l'ensemble de nos calculs, la taille de maille est de l'ordre du millimètre, nous ne pouvons donc pas capter de rayon de courbure inférieur au millimètre, soit $\kappa < 10^3 m^{-1}$, et $\Gamma\kappa < 10^{-2} K$, ce qui est négligeable face aux variations de température observées ; ce terme est donc négligé par la suite. La vitesse de croissance est donc réduite à la forme suivante :

$$\boldsymbol{u}_n|_\Gamma \;=\; \mu_k(T_f - T_I)\nabla\alpha \tag{6.12}$$

La vitesse de croissance est ainsi calculée en tout point de l'interface. On peut extrapoler cette relation en tout point du domaine Ω :

$$\boldsymbol{u}_n|_\Gamma \;=\; \mu_k(T_f - T)\nabla\alpha \tag{6.13}$$

Cependant, pour plus de précision, nous décidons d'utiliser une interpolation de la température à l'interface [13] :

$$T_I = T - (\nabla\alpha \cdot \nabla T)\alpha \tag{6.14}$$

Cette formulation permet d'obtenir une vitesse de croissance plus régulière près de l'interface, ce qui améliore la stabilité du transport par Level-Set, en particulier lorsque la distance entre l'interface liquide/solide et l'isosurface T_f du champ de température est inférieure à la taille de maille.

6.2.3 Applications numériques

6.2.3.1 Croissance d'une boule

Nous nous intéressons maintenant à la croissance d'une boule liquide dans un environnement solide (figure 6.2).

- dimension de la cavité : $l = 0.1m$
- rayon de la partie liquide initiale : $R = 0.05m$
- température de fusion : $T_f = 0^{\circ}C$
- température imposée : $T_I = 10^{\circ}C$
- maillage isotrope homogène à 4 000 éléments
- coefficient cinétique $\mu_k = 2.10^{-5} m/sK$
- pas de temps $\Delta t = 1s$

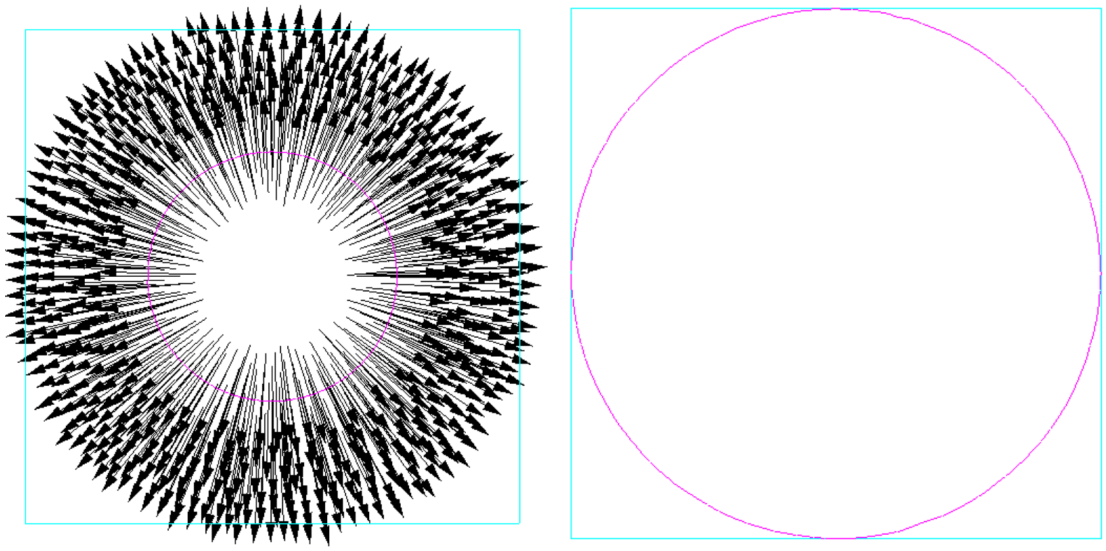


FIGURE 6.2 – Croissance d'une boule

Dans cet exemple, la température est imposée fixe dans tout le domaine. La vitesse de croissance est donc constante égale à $v_m = 5.10^4$. Il faut théoriquement $250s$ pour que la frontière liquide atteigne un rayon de $0.1m$.
Lors de la simulation, l'isosurface $\alpha = 0$ touche le bord de la cavité au 250^{eme} incrément, ce qui correspond à la théorie. L'interface reste bien circulaire.

6.2.3.2 Interpolation au niveau macroscopique

La formulation de Gibbs-Thomson étant correcte à l'échelle dendritique, il devient impossible de l'utiliser à l'échelle macroscopique, notamment compte tenu du terme relié

à la courbure. Certains auteurs se sont donc intéressés à généraliser cette formulation au niveau macroscopique [8, 10, 11], On peut alors retenir la forme générale :

$$v_n = A(T_f - T)^b \tag{6.15}$$

où A et b sont deux constantes à déterminer en fonction du matériau.

Ce type de modèle est notamment très utilisé pour déterminer l'évolution et la forme des grains lors de la solidification des métaux. Nous nous intéresserons cependant uniquement à ce que l'interface liquide-solide suive de manière très proche l'isosurface de la température de fusion, sans aucune considération de croissance de grain. Ainsi, afin de ramener l'échelle d'évolution du changement de phase à l'ordre de l'évolution mécanique et de la thermique, nous allons définir notre propre loi selon la formule suivante :

$$v_n = v_n^{max} tanh\left(\frac{T_f - T}{\Delta T}\right) \tag{6.16}$$

où v_n^{max} est la vitesse de troncature, de l'ordre de la vitesse caractéristique du système, ΔT est un intervalle nominal de température dépendant du problème considéré, idéalement légèrement inférieur à l'écart de température caractéristique du système.

Cette forme de loi d'évolution permet d'être appliquée à tout type de système, quel que soit son échelle. Pour des températures proches du point de fusion, on retrouve la forme définie par l'équation (6.15) ; lorsque les températures s'éloignent trop du point de fusion, on tronque la vitesse de croissance à la valeur v_n^{max} afin de limiter les divergences possibles.

6.2.3.3 Application numérique avec convection naturelle

Nous allons maintenant intégrer la croissance de phase aux équations de la thermique et de la mécanique.
On s'intéresse à une cavité bidimensionnelle de 20 cm de côté ayant pour centre l'origine du repère, remplie d'eau et à une température initiale $T_0 = 20^\circ C$. On initialise le domaine solide pour $y > 7.5cm$, puis on applique une température $T_f = -50^\circ C$ sur la partie supérieure de la cavité. Les données du problème sont les suivantes :

- température de fusion : $0^\circ C$
- chaleur latente de fusion : 0 $J.m^{-3}$
- capacité calorifique du liquide : 2.10^6 $J.m^{-3}.K^{-1}$
- capacité calorifique du solide : 2.10^6 $J.m^{-3}.K^{-1}$
- conductivité thermique du liquide : 2 $W.m^{-1}.K^{-1}$
- conductivité thermique du solide : 2 $W.m^{-1}.K^{-1}$
- masse volumique du liquide : 1 000 $kg.m^{-3}$
- masse volumique du solide : 1 000 $kg.m^{-3}$
- viscosité dynamique du liquide : 10^{-3} $Pa.s$

- viscosité dynamique du solide : $10^6\ Pa.s$
- pas de temps : $min\left(5\ s, \frac{max(v_n)}{2h}\right)$
- vitesse de croissance maximale : $v_n^{max} = 5.10^{-4} m/s$
- $\Delta T = 10^{\circ} C$
- $\rho = \rho_0(1 - \chi T)\,;\ \chi = 2,6.10^{-4}$

La simulation est lancée sur un maillage isotrope homogène à 500 éléments, pour une taille de maille $h = 0.015m$.

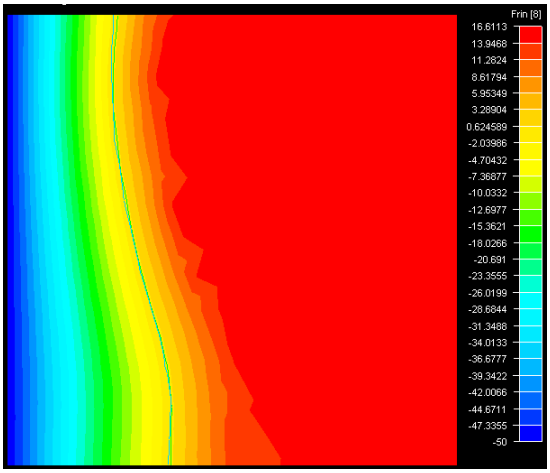


FIGURE 6.3 – Évolution du champ de température dans la cavité et interface liquide-solide pour $t = 1\,000\ s$

La figure 6.3 représente l'évolution du champ de température dans le volume de la cavité, ainsi que l'isovaleur 0 du champ de température et l'interface liquide-solide. On remarque que les deux isosurfaces sont quasiment confondues.

6.2.4 Calcul dynamique du coefficient cinétique

Dans ce paragraphe, nous présentons une méthode de calcul locale et dynamique du coefficient cinétique de changement de phase. Cette méthode permet d'optimiser le temps de calcul en diminuant les vitesses de croissance données par l'équation (6.16). En effet, pour des changements de phase relativement lents, on peut avoir des vitesses de croissance locales bien supérieures à l'évolution réelle de l'interface ainsi que par rapport aux vitesses en présence dans l'écoulement.

6.2.4.1 Calcul de la vitesse d'avancée du front de température

On pose $\Gamma_0(t) = \{\boldsymbol{x} \in \Omega; T(\boldsymbol{x}, t) = 0\}$ l'isosurface de température nulle, on va établir à quelle vitesse Γ_0 se déplace :

Au temps $t + \Delta t$, on cherche $\Delta \boldsymbol{x}$ tel que :

$$T(\boldsymbol{x} + \Delta \boldsymbol{x}, t + \Delta t) = T(\boldsymbol{x}, t) \quad = \quad 0 \tag{6.17}$$

On peut réaliser un développement limité :

$$\nabla T \Delta x + \dot{T} \Delta t = 0 \tag{6.18}$$

On recherche maintenant le déplacement Δl qu'à effectué l'isosurface le long de sa normale $\Delta \boldsymbol{x} = \Delta l \frac{\nabla T}{|\nabla T|}$:

$$\Delta l \, |\nabla T| + \dot{T} \Delta t = 0 \tag{6.19}$$

La vitesse d'évolution peut donc être approchée :

$$\frac{\Delta l}{\Delta t} = -\frac{\dot{T}}{|\nabla T|} \tag{6.20}$$

$$\boldsymbol{v} = -\dot{T} \frac{\nabla T}{|\nabla T|^2} \tag{6.21}$$

6.2.4.2 Calcul de l'avancée du front de solidification

On pose $\Gamma_1(t) = \{\boldsymbol{x} \in \Omega; \alpha(\boldsymbol{x}, t) = 0\}$ l'isosurface de Level-Set nulle. On définit également $T_1(\boldsymbol{x})$ comme la température du point $\boldsymbol{y}$ le plus proche de $\boldsymbol{x}$ sur $\Gamma_1(t)$, cette température peut être approchée par l'équation (6.14). :

$$T_1(\boldsymbol{x}) = T(\boldsymbol{y}) = T(\boldsymbol{x}) + \nabla T(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}) \tag{6.22}$$

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x} - \alpha \nabla \alpha + O(\alpha^2) \tag{6.23}$$

$$T_1(\boldsymbol{x}) = T(\boldsymbol{x}) - \alpha \nabla T \nabla \alpha \tag{6.24}$$

la vitesse de croissance est la suivante :

$$\boldsymbol{v} = c(T_1 - T_f) \tag{6.25}$$

soit :

$$\boldsymbol{v} = cT_1 \tag{6.26}$$

Si les deux fronts sont assez proches, on peut supposer que ceux-ci avancent de manière parallèle, c'est-à-dire :

$$\frac{\nabla T}{|\nabla T|} = \nabla \alpha \tag{6.27}$$

Pour que les deux fronts avancent à la même vitesse, on reprend les équations (6.21) et (6.26) :

$$c = -\frac{1}{|\nabla T|} \frac{\dot{T}}{T_1} \tag{6.28}$$

On peut alors redéfinir la vitesse de croissance de manière dynamique en définissant un écart T_1^0 toléré entre la température d'interface et la température de fusion :

$$v_n = c(T_1^0)\Delta T tanh\left(\frac{T_f - T}{\Delta T}\right) \tag{6.29}$$

$$c = -\frac{1}{|\nabla T|}\frac{\left|\dot{T}\right|}{T_1^0} \tag{6.30}$$

6.2.4.3 Application numérique

Nous allons maintenant appliquer notre méthode dynamique au cas présenté dans le paragraphe 6.2.3.3. La figure 6.4 nous montre l'évolution du champ de température et de

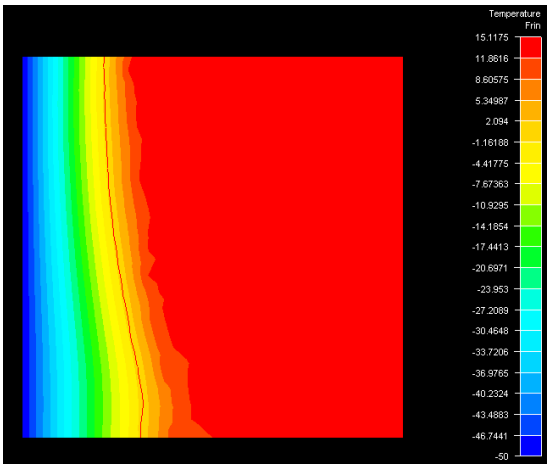


FIGURE 6.4 – Évolution du champ de température et interface liquide-solide pour $t = 1\,000\ s$ avec calcul dynamique du coefficient dynamique

l'interface liquide-solide. On a choisi dans ce cas $\Delta T = 5^{\circ}C$ et $T_1^0 = 0.2^{\circ}C$

6.3 Thermique et changement de phase

On rappelle que l'équation de la thermique s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{dh}{dt} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \tag{6.31}$$

où h est l'enthalpie, définie de la manière suivante :

$$h \quad = h_0 + \rho c_p (T - T_f) + \rho L_f f^l \tag{6.32}$$

où L_f est la chaleur latente de fusion et f^l est la fraction liquide. Dans le cadre d'une approche level-set, cette dernière est définie comme la fonction de heavyside régularisée $H(\alpha)$ associée à la fonction level-set α.

On peut définir le nombre adimensionnel de Stefan Ste qui caractérise l'importance de la chaleur latente dans le problème :

$$Ste = \frac{c_p(T - T_f)}{L_f} \tag{6.33}$$

- Si $Ste >> 1$, la chaleur latente est négligeable face aux autre échanges d'énergie du système, il n'est pas nécessaire de l'introduire dans le calcul.
- Si $Ste << 1$, la chaleur latente est très importante, mais on ne peut pas négliger les autres phénomènes tels que la convection et la diffusion.

6.3.1 Équations

L'équation de la thermique peut être réécrite de la manière suivante :

$$\rho c_p \frac{dT}{dt} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - L_f \frac{dH(\alpha)}{dt} \tag{6.34}$$

De la même manière que (3.41) On peut définir la fraction liquide à partir de la fonction α et d'une épaisseur de changement de phase E, constante ou dépendant de la taille de maille, à la manière de (3.44) :

$$H(\alpha) = \begin{cases} 0 & \text{si } \alpha < -E \\ \frac{1}{2}\left(1 + sin\left(\frac{\pi\alpha}{2E}\right)\right) & \text{si } -E < \alpha < E \\ 1 & \text{si } \alpha > E \end{cases} \tag{6.35}$$

La variation de H étant grande d'un élément à un autre, on décide de calculer $\frac{dH}{dt}$ en fonction de α :

$$\frac{dH}{dt} = \frac{dH}{d\alpha}\frac{d\alpha}{dt} \tag{6.36}$$

$$\frac{dH}{dt} = \delta(\alpha)\frac{d\alpha}{dt} \tag{6.37}$$

avec :

$$\delta(\alpha) = \begin{cases} 0 & \text{si } \alpha < -E \\ \frac{\pi}{2E} cos\left(\frac{\pi\alpha}{2E}\right) & \text{si } -E < \alpha < E \\ 0 & \text{si } \alpha > E \end{cases} \tag{6.38}$$

d'où la nouvelle équation de la thermique :

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla T \right) - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = L_f \delta(\alpha) \frac{d\alpha}{dt} \tag{6.39}$$

On remarque dans cette nouvelle forme de l'équation de la thermique que l'épaisseur de changement de phase E a une grande importance. La première contrainte évidente est que celle-ci doit être plus grande qu'une taille de maille afin de ne pas introduire trop d'erreur de discrétisation. Si sa valeur est trop grande, on diffuse le transfert de chaleur entre les deux phases sur une zone très large, ce qui n'est pas du tout représentatif de la transformation. Cependant, une épaisseur très fine augmente localement le terme source introduit, ce qui peut dans certains cas introduire une divergence des calculs. Pour la suite de nos calculs, nous retiendrons la valeur $E = 2h$.

6.3.2 application numérique

On reprend la géométrie du cas développé précédemment dans le paragraphe 6.2.3.1 en modifiant les paramètres suivants :

- température initiale : $T_0 = 10^{\circ}C$
- chaleur latente de fusion : $L_f = 2.10^7 J.m^{-3}$
- capacité calorifique : $4.10^6 J.m^{-3}.K^{-1}$
- conductivité thermique : $\lambda = 2W.m^{-1}.K^{-1}$
- pas de temps $\Delta t = 5s$

L'équation de la thermique est cette fois résolue. on introduit le terme $L_f \frac{df^l}{dt}$ comme terme source, les frontières du domaine sont adiabatiques.

La figure 6.5 représente l'évolution de la température à différents instants. Le système se stabilise à $T_\infty = 6.01^{\circ}C$.
À $t = 0s$, on peut calculer l'énergie thermique $\mathcal{E}(t = 0)$ contenue dans le système :

$$\mathcal{E}(t = 0) = \int_\Omega h(t = 0s) dV = \rho c_p T_0 l^2 + \pi R^2 L_f \tag{6.40}$$

À $t \to \infty$, on a :

$$\mathcal{E}(t \to \infty) = \int_\Omega h(t \to \infty) dV = \rho c_p T_\infty l^2 + l^2 L_f \tag{6.41}$$

L'enceinte étant adiabatique, on peut écrire la conservation de l'énergie :

$$\mathcal{E}(t = 0) = \mathcal{E}(t \to \infty) \tag{6.42}$$

$$\int_\Omega h(t \to \infty) dV = \int_\Omega h(t = 0s) dV \tag{6.43}$$

$$\rho c_p T_0 l^2 + \pi R^2 L_f = \rho c_p T_\infty l^2 + l^2 L_f \tag{6.44}$$

$$T_\infty = T_0 + (\pi \frac{R^2}{l^2} - 1) \frac{L_f}{\rho c_p} \tag{6.45}$$

$$T_\infty = 5.98^{\circ}C \tag{6.46}$$

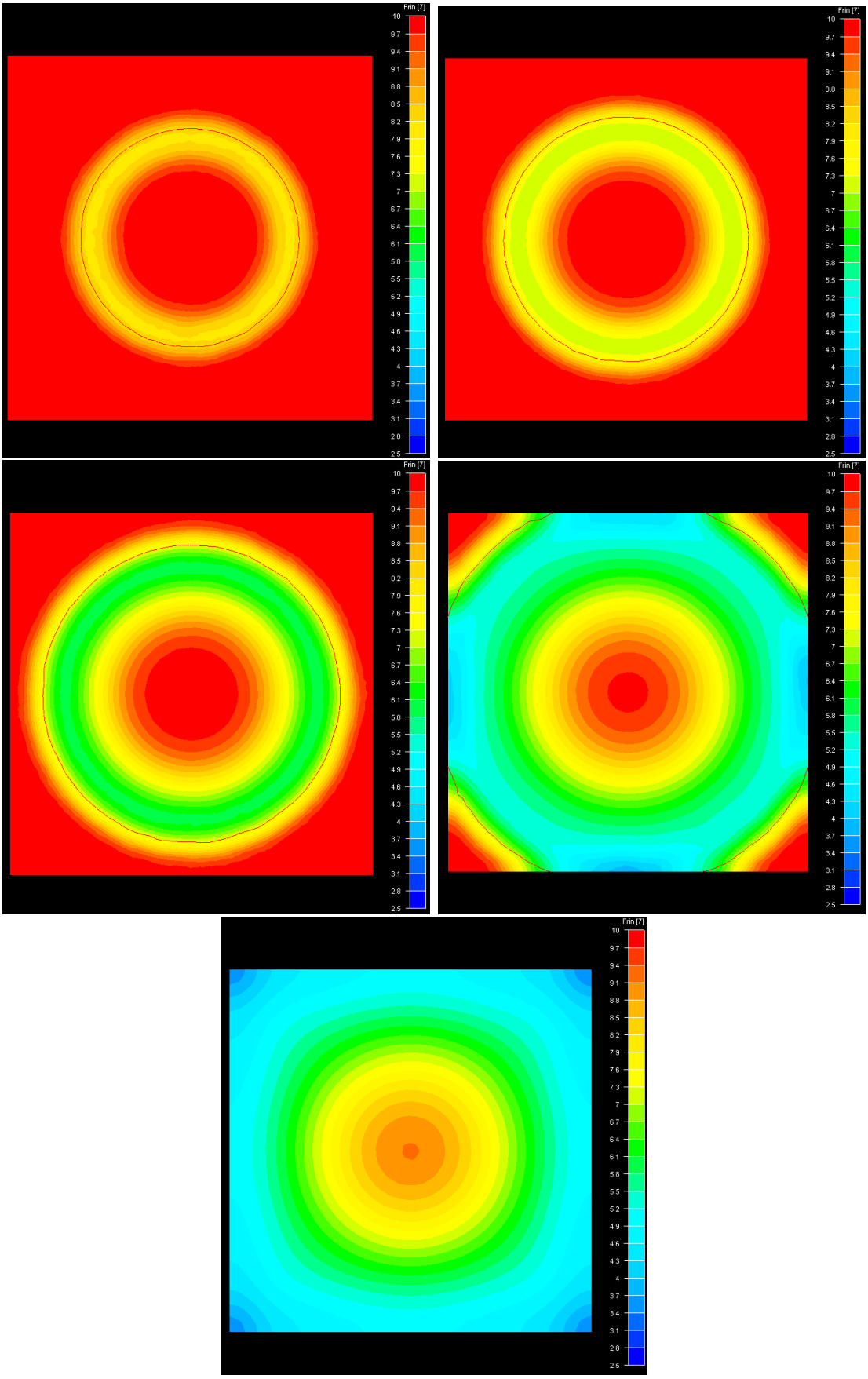


FIGURE 6.5 – Champ de température à $t = 50s, 100s, 200s, 400s, 800s$

On obtient donc une erreur inférieure à 1% sur la différence de température prédite $T_0 - T_\infty$.

6.4 Applications numériques

6.4.1 Solidification dans un coin

Dans ce paragraphe, nous allons nous intéresser au cas de solidification dans un coin, dont les résultats analytiques sont disponibles dans [7]. Ce cas ne fait intervenir que les équations de la thermique et du changement de phase.
Le domaine est une cavité carrée 1 m de côté, initialement à une température de $0.3^{\circ}C$. A l'instant initial, on impose une température de $-1^{\circ}C$ sur la partie inférieure ainsi que sur la partie gauche. Les données du matériau sont les suivantes :

- $\rho c = 1\ J.K^{-1}.m^{-3}$;
- $\lambda = 1\ W.m^{-1}.K^{-1}$;
- $L_f = 0.25\ J.m^{-3}$

Le nombre de Stefan de la transformation vaut donc $Ste = 4$, ce qui représente une importance modérée de la chaleur latente. Pour ce calcul, nous utilisons la définition dynamique du coefficient cinétique. Le maillage utilisé est fixe isotrope homogène, et est constitué de 5 000 nœuds.

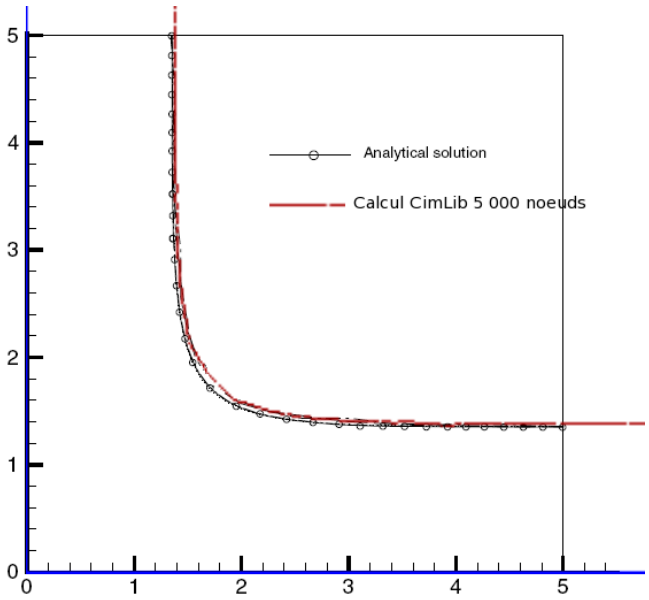


FIGURE 6.6 – Isosurface pour $t = 0.01\ s$

La figure 6.6 compare notre résultat aux résultats analytiques. On remarque la bonne corrélation entre nos résultats et la théorie, à l'erreur d'interpolation près.
Cette simulation permet également de valider le calcul dynamique du coefficient cinétique pour un calcul simple avec prise en compte de la chaleur latente, ceci permet en effet d'optimiser localement paramètres d'évolution afin de limiter le coût de calcul.

6.4.2 Solidification de l'étain

On s'intéresse dans ce paragraphe à un cas de solidification classique de la littérature [17]. De l'étain liquide est placé dans une cavité $8.89 \times 6.66 \times 12.6\ cm$; compte tenu de la symétrie du problème, on se ramène à une cavité bidimensionnelle de $8.89\ cm$ de large sur $6.66\ cm$ de haut. La paroi de droite est maintenue à une température inférieure à la température de fusion tandis que la paroi de gauche est maintenue à une température au dessus de la température de fusion, comme le présente la figure 6.7. Le mouvement de convection naturelle est entretenu par le maintien de la paroi de gauche à une température constante, au dessus de la température de fusion.

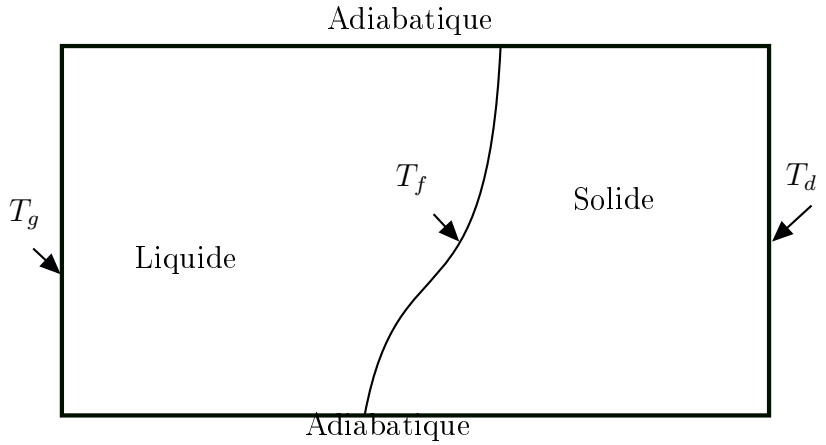


FIGURE 6.7 – Conditions aux limites du problème

A l'instant initial, l'étain est à la même température que la paroi de gauche, on a donc :

- $T_g = 233^{\circ}C$;
- $T_f = 231.9^{\circ}C$;
- $T_d = 229^{\circ}C$;
- $T(t=0) = T_g = 233^{\circ}C$.

Les données physiques sont présentées table 6.1 [9] :

Symbole	ρ	k	c_p	μ	T_f	β	L_f
Unité	kg/m^3	W/mK	J/kgK	$Pa.s$	$^{\circ}C$	$1/K$	J/kg
Solide	7 300	56.5	255.0		231.9	$1.06\ 10^{-4}$	$5.9\ 10^{4}$
Liquide	7 300	32.6	255.0	$3.77\ 10^{-3}$			

TABLE 6.1 – Données physiques de l'étain [9]

Le nombre de Stefan de la transformation vaut $Ste = 1.32\ 10^{-2}$, ce qui correspond à une très grande importance de la chaleur latente. Nous avons lancé la simulation sur

un maillage fixe isotrope homogène de 3 400 nœuds, avec un coefficient cinétique de 5.10^{-4}.

La figure 6.8 présente le champ de température ainsi que la position de l'interface liquide/solide pour différents instants donnés. On remarque que la convection naturelle fait que l'interface n'avance pas de manière homogène.

Dans la figure 6.9, on compare nos résultats aux résultats expérimentaux de [17] et à différents résultats numériques de la littérature [5]. Nos résultats sont en bonne adéquation avec les résultats expérimentaux ainsi que les autres résultats numériques. Ce résultat pour un nombre de Stefan très faible permet d'abord de valider le modèle de croissance, et il permet aussi de valider la bonne conservation de l'énergie. Il convient maintenant de valider le comportement de notre modèle de croissance au sein d'un écoulement multiphasique turbulent.

6.4.3 Calcul triphasique avec solide mobile

Dans ce paragraphe, nous allons intégrer le changement de phase dans un calcul triphasique gaz/liquide/solide turbulent.

6.4.3.1 Calcul 2D

Le domaine de calcul est une cavité de $0.1 \times 0.2\ m^2$, initialement remplie d'une petite quantité d'eau avec la présence d'un glaçon.
Initialement, la température de l'eau est de $20^{\circ}C$, la température du glaçon est de $-50^{\circ}C$, jusque $t\ = 1\ s$, on injecte de l'eau à une température de $50^{\circ}C$ et à une vitesse de $0.3\ m.s^{-1}$, la température de la paroi inférieure est imposée à $50^{\circ}C$ durant tout le calcul.

Calcul sans chaleur latente
On se propose dans un premier temps de résoudre le calcul en ne prenant pas en compte la chaleur latente. La figure 6.10 représente le champ de température ainsi que les interfaces eau liquide/glace et eau/air pour différents instants donnés.

On retrouve les tourbillons dus à la turbulence déjà présents dans le calcul du chapitre précédent (5).on remarque également que l'intégration du changement de phase se fait sans soucis dans le calcul turbulent. Le glaçon est totalement fondu au bout de 6 s.

L'utilisation d'une fonction Level-Set de phase permet de définir les différents domaines et lois de mélange grâce aux fonctions Heavyside présentées dans le chapitre 3.5, au paragraphe 3.3.1.1.

L'intégration de la vitesse de croissance dans l'équation de transport de la level-set de phase permet de résoudre simultanément et de manière efficace le transport et le

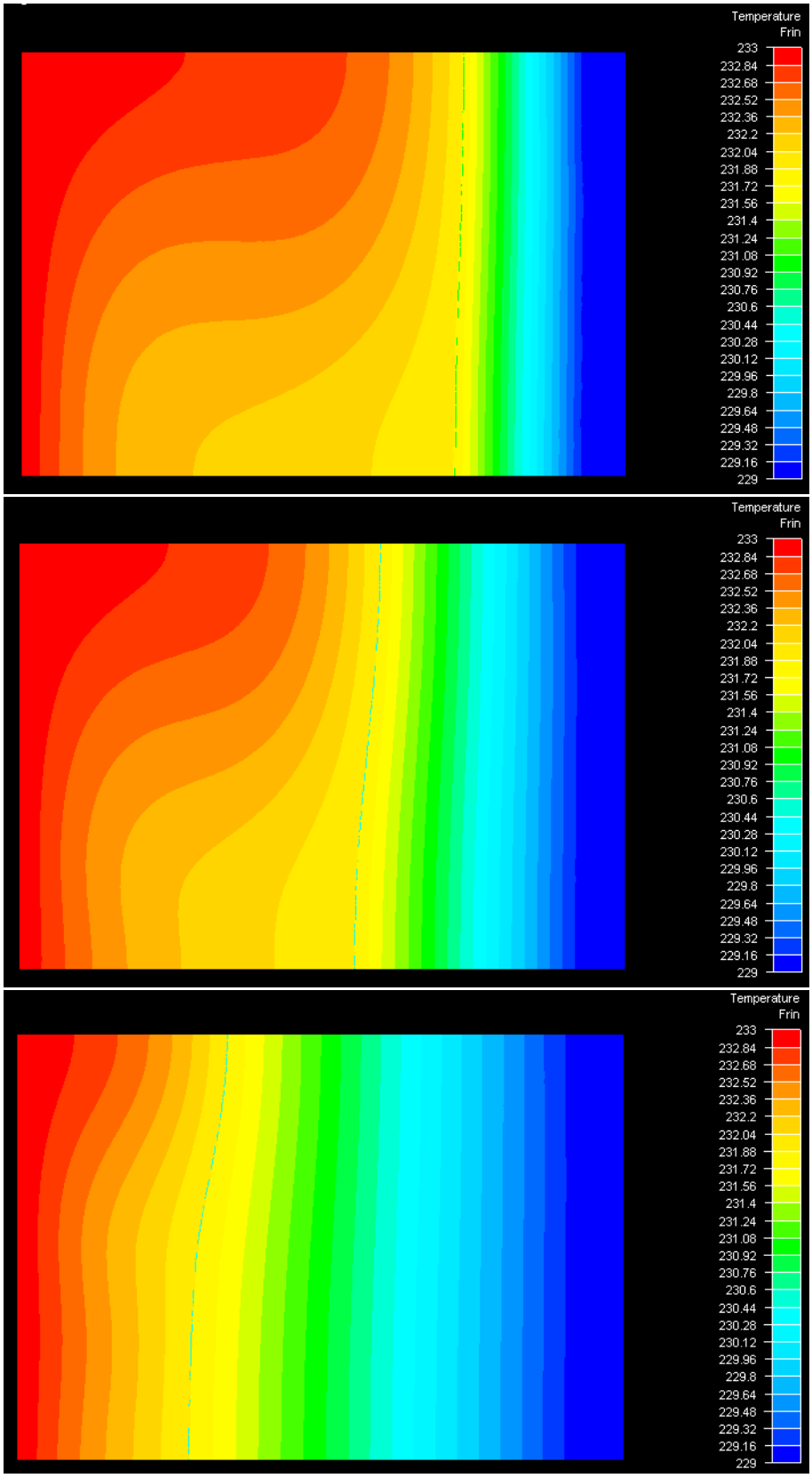


FIGURE 6.8 – Champ de température pour $t = 594\ s,\ 1\,904\ s,\ 6\,825\ s$

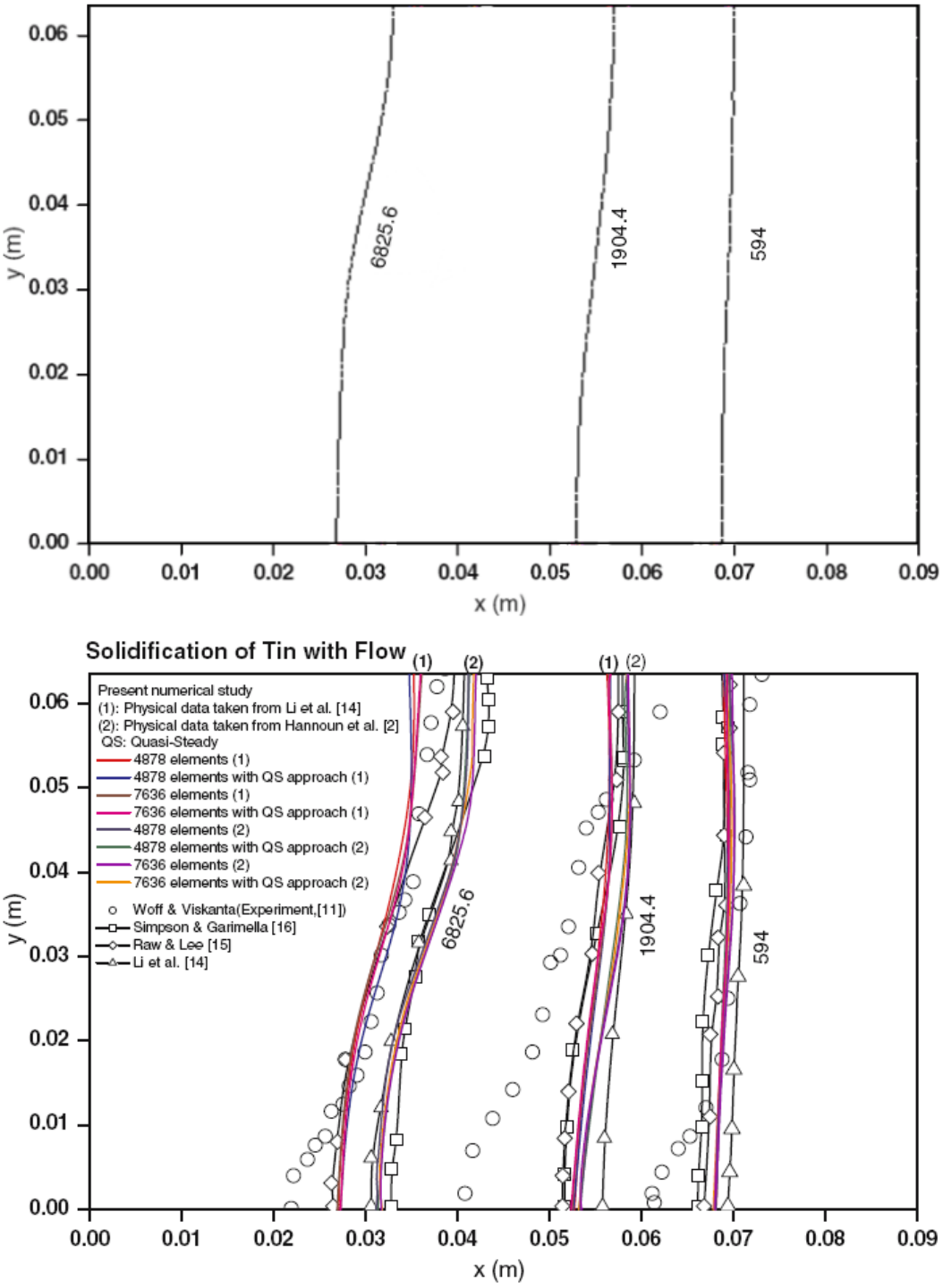


FIGURE 6.9 – Position de l'interface à différents instants, comparaison avec [5] (les références sont telles que présentées dans l'article)

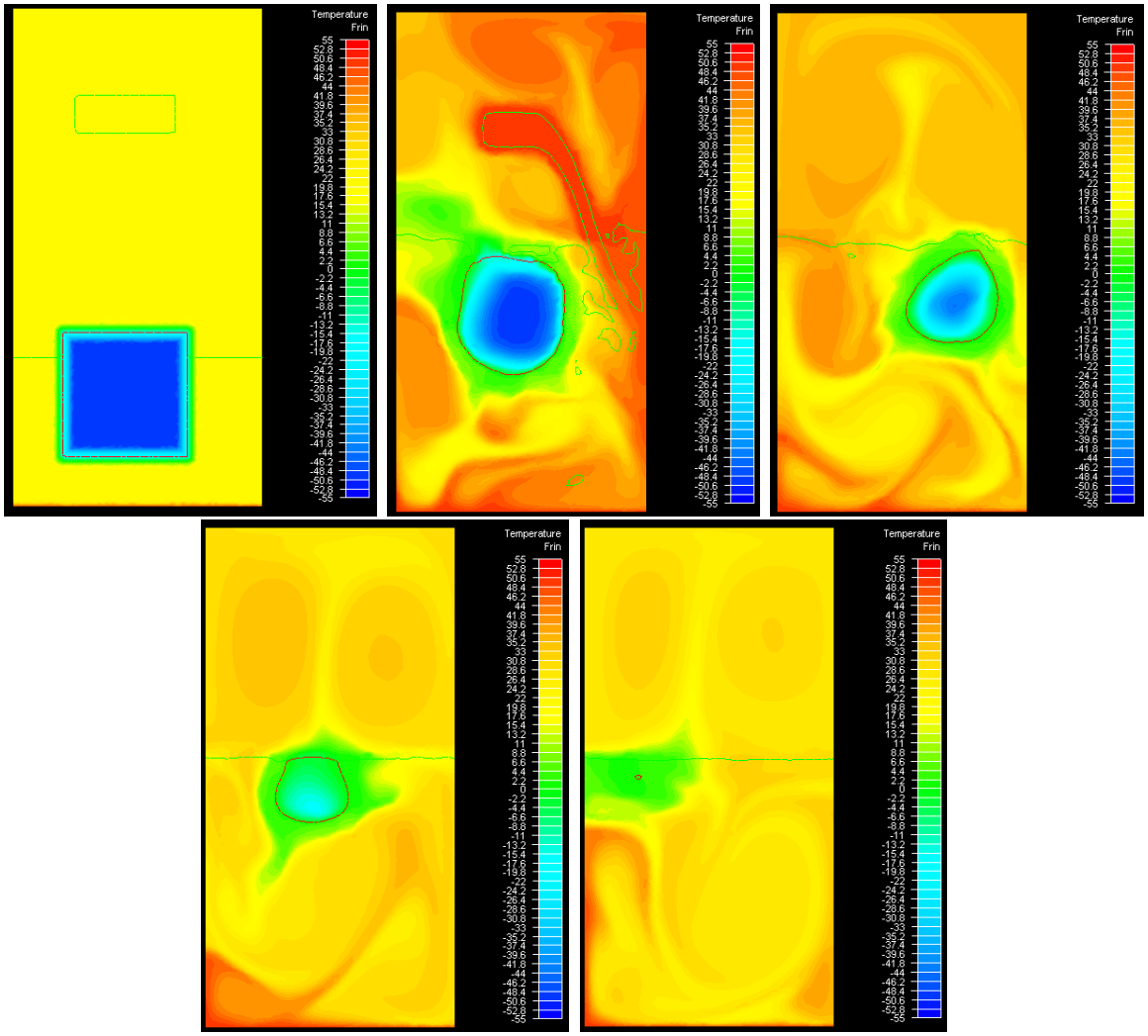


FIGURE 6.10 – Évolution des interfaces et du champ de température pour $t = 0\ s$, $t = 1\ s$, $t = 2\ s$, $t = 4\ s$, $t = 6\ s$,

changement de phase. La vitesse de convection finale $\boldsymbol{V}_{l-s}$ devient la suivante :

$$\boldsymbol{V}_{l-s} = \boldsymbol{v} + \boldsymbol{v}_n \tag{6.47}$$

où $\boldsymbol{v}$ est le champ de vitesse obtenu par les équations de Navier-Stokes et $\boldsymbol{v}_n$ est la vitesse de croissance obtenu par l'équation 6.16.

Cette application permet également de se rendre compte de la capacité de l'approche monolithique développée dans le chapitre 3.5 à représenter différentes phases solide-liquide-gazeuse de manière naturelle grâce à l'utilisation de plusieurs Level-Sets sur un maillage fixe. Le solide est immergé dans le solveur fluide en lui fixant une viscosité très élevée ($10^3 Pa.s$), afin d'assurer une déformation minimale, il peut ainsi se mouvoir librement dans tout le domaine. L'intégration du solide dans le solveur thermique se fait également de la même manière que pour les fluides.

Calcul avec chaleur latente
On reprend le calcul précédent en intégrant le calcul de la chaleur latente, le nombre de Stefan est de l'ordre de 1 dans notre cas.

La partie délicate du calcul réside dans le fait de calculer le terme advectif $\boldsymbol{v} \cdot \nabla\alpha$ de la dérivée $\frac{d\alpha}{dt}$ dans l'équation (6.39). En effet, le gradient $\nabla\alpha$ de la fonction level-set linéaire par élément devient constant par élément, soit d'un ordre différent de la vitesse $\boldsymbol{v}$. La première solution, la plus précise, consiste à projeter cette dernière dans l'espace des fonctions continues par élément ; cette solution nécessite cependant de projeter également le terme $\delta(\alpha)$, perdant ainsi beaucoup de précision sur ce terme très abrupte, et ne bénéficie pas de la stabilisation du terme source optimale de notre solveur thermique. Nous avons donc décidé de projeter le terme ∇T dans l'espace des fonctions continues linéaires par élément, puis de l'assembler avec les autres termes $\delta(\alpha)$ et $\boldsymbol{v}$ linéaires.

Les figures 6.11 et 6.12 comparent les résultats obtenus avec ceux du paragraphe précédent. On remarque que le terme source introduit dans l'équation de la chaleur latente ralentit considérablement la fonte du glaçon, en effet dans ce dernier calcul, le glaçon met 35 s à fondre complètement. Ce retard est l'effet attendu par l'intégration de la chaleur latente.

6.4.3.2 Calcul 3D

On s'intéresse dans ce cas à une cavité tridimensionnelle de dimensions $0.1 \times 0.1 \times 0.2\ m^3$, initialement remplie d'une petite quantité d'eau avec la présence d'un glaçon. La température initiale du système est de $20^\circ C$, on injecte pendant 3 s de l'eau à $20^\circ C$ pour une vitesse de $0.3 m.s^{-1}$. Le glaçon a une température initiale de $-50^\circ C$.

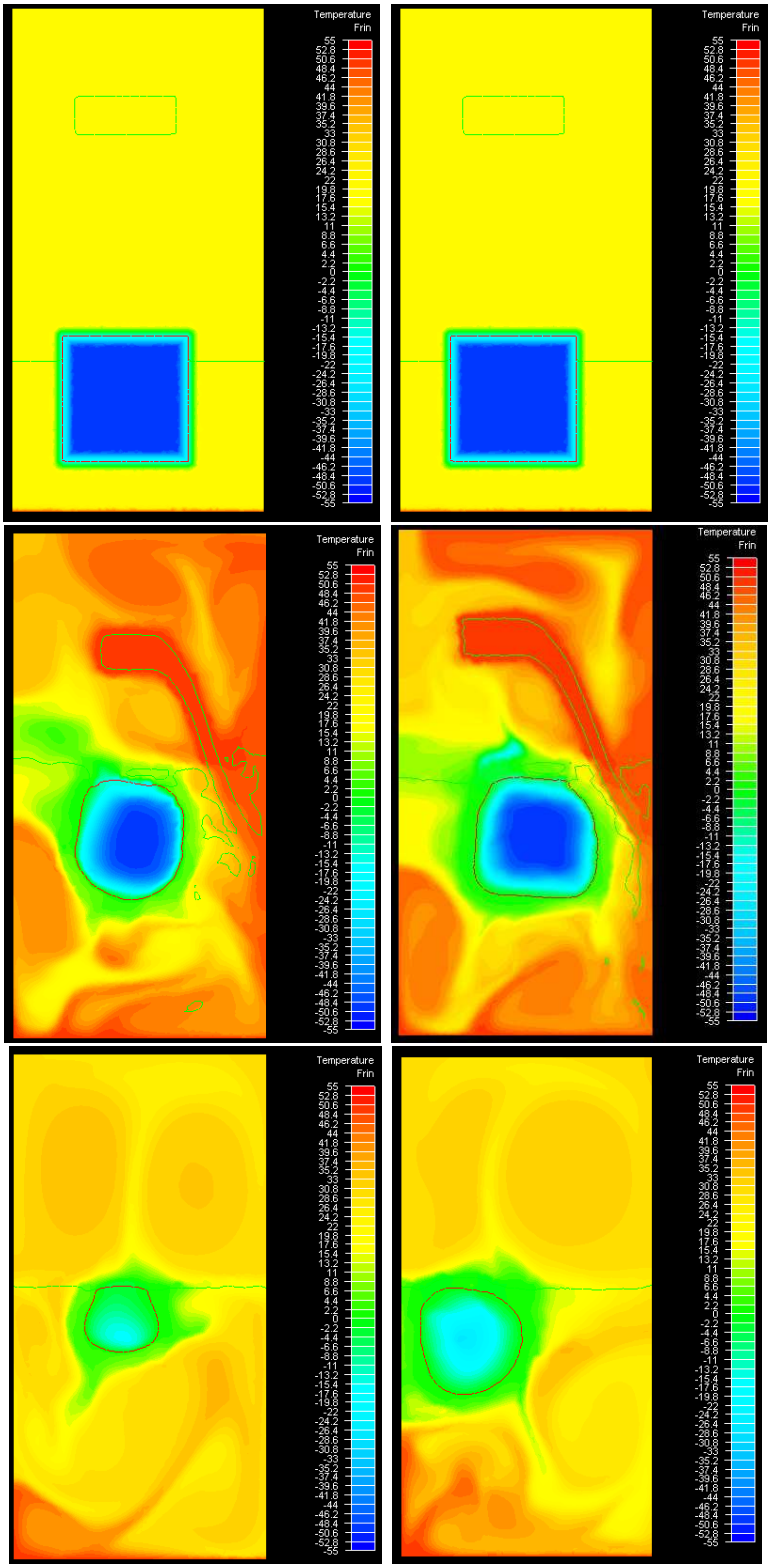


FIGURE 6.11 – Comparaison de l'évolution des interfaces et du champ de température pour $t = 0\ s$, $t = 1\ s$, $t = 4\ s$ pour le calcul sans chaleur latente (gauche) est avec chaleur latente (droite)

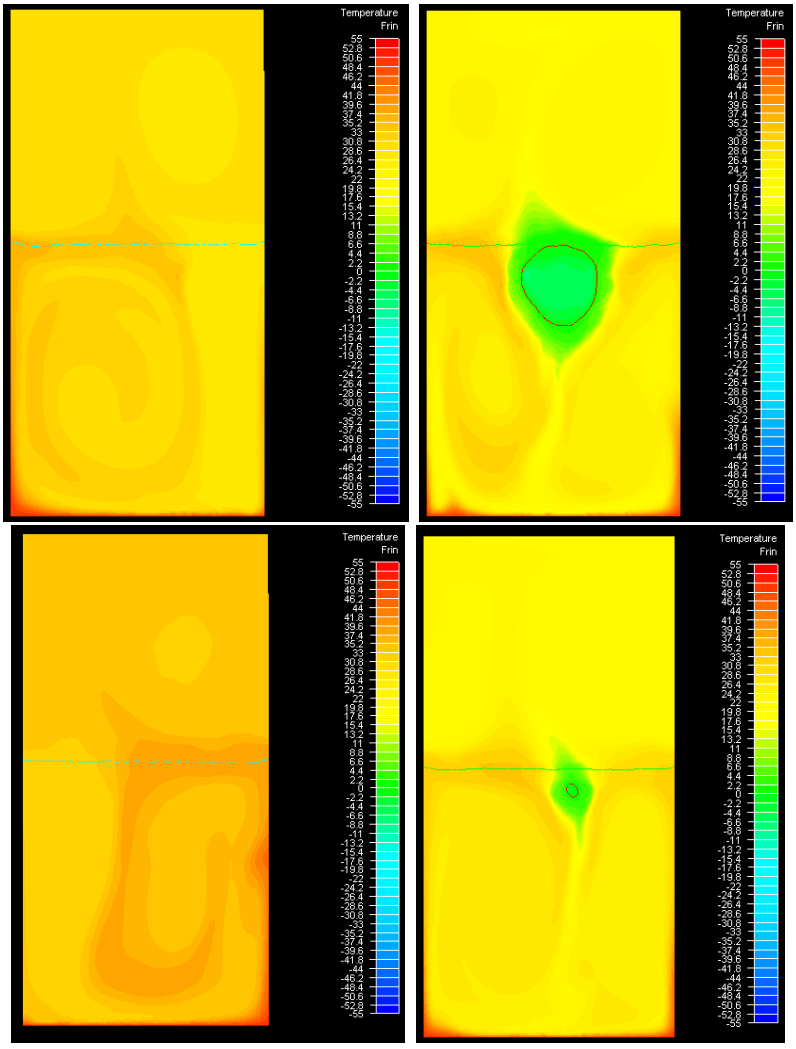


FIGURE 6.12 – Comparaison de l'évolution des interfaces et du champ de température pour $t = 15\ s$, $t = 35\ s$ pour le calcul sans chaleur latente (gauche) est avec chaleur latente (droite)

Calcul sans chaleur latente

On se propose dans un premier temps de résoudre le système sans prendre en compte la chaleur latente.

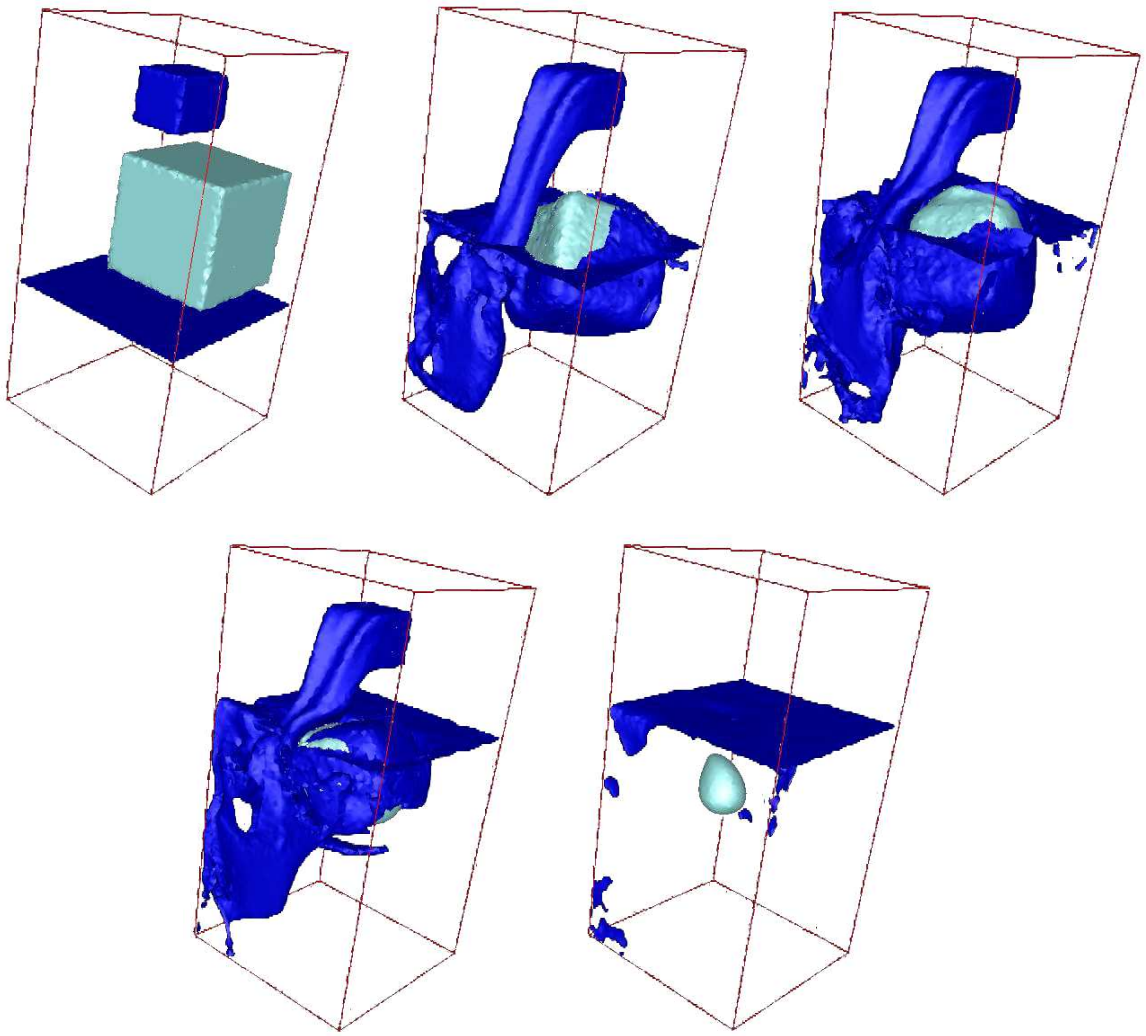


FIGURE 6.13 – Évolution des interfaces pour $t = 0\ s$, $t = 1\ s$, $t = 2\ s$, $t = 3\ s$, $t = 4\ s$ - Calcul sans chaleur latente

La figure 6.13 montre l'évolution de l'interface eau/glace et de l'interface eau/air. De même que pour le calcul précédent, l'intégration du changement de phase dans un calcul turbulent tridimensionnel se fait de manière naturelle. Le glaçon peut se mouvoir librement dans la cavité, entraîné par le jet d'eau, puis fond progressivement. On note cependant que du à l'absence de chaleur latente, le changement de phase se fait d'une manière très rapide par rapport à la réalité : le glaçon gagne légèrement en volume, ce qui montre la réversibilité de notre méthode, puis disparaît quasiment totalement au bout d'à peine 4 s.

Calcul avec chaleur latente

On réalise le même calcul en introduisant la chaleur latente. La figure 6.14 présente les résultats pour les mêmes instants que le calcul précédent. On remarque que, bien qu'on n'aperçoive pas de grands changements pour la phase de remplissage, le glaçon a à peine diminué pour $t = 4\ s$ alors qu'il est quasiment disparu pour la simulation différente.

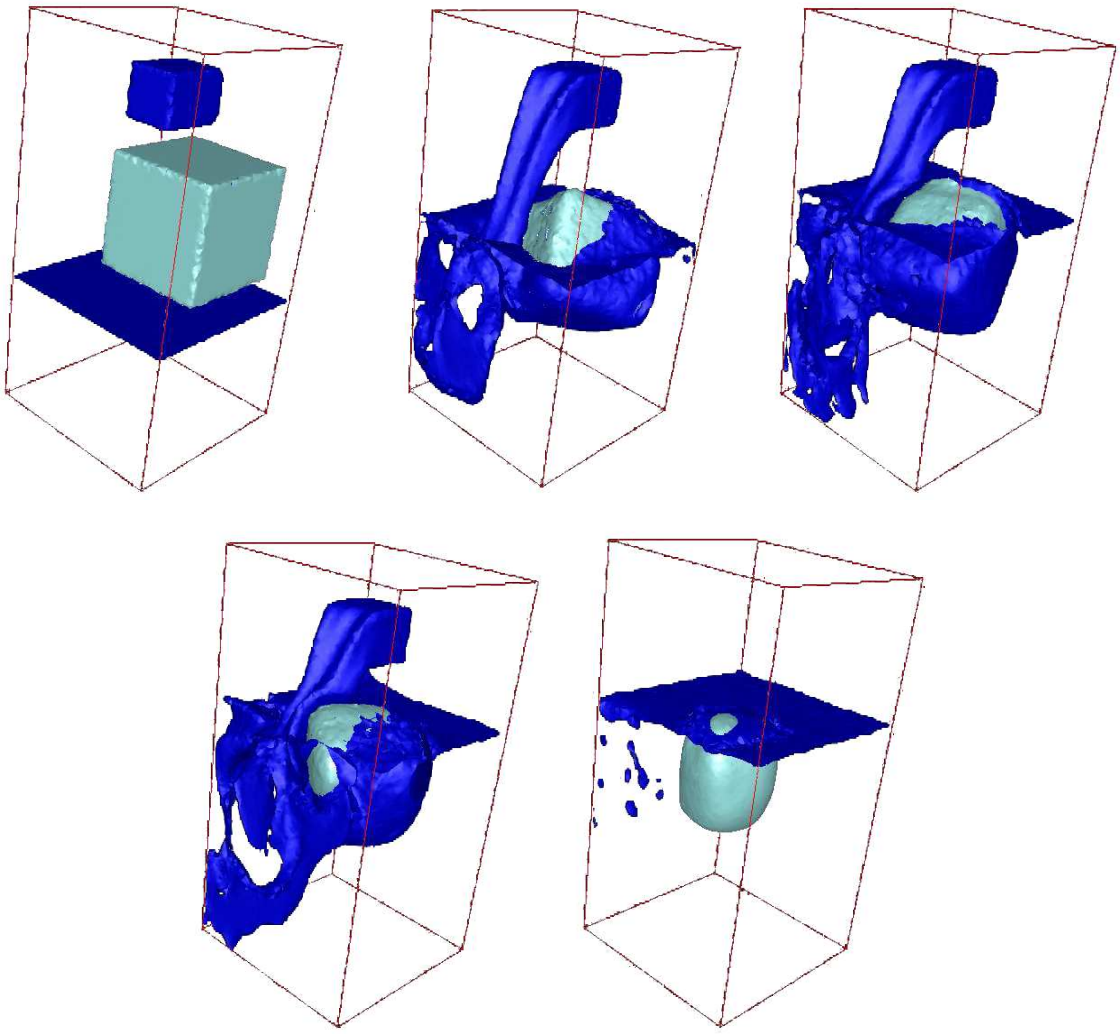


FIGURE 6.14 – Évolution des interfaces pour $t = 0\ s$, $t = 1\ s$, $t = 2\ s$, $t = 3\ s$, $t = 4\ s$ - Calcul avec chaleur latente

Cette dernière application permet de valider le couplage entre tous les solveurs de ce manuscrit et montre qu'il est possible et efficace de combiner :

- solveur Navier-Stokes avec approche Variational Multi Scales ;
- approche monolithique avec immersion de domaines gaz/liquide/solide ;
- méthode level-set pour le transport de l'interface entre deux fluides ;
- modèle de turbulence Large Eddy Simulation de type Smagorinsky dynamique ;
- solveur de convection diffusion thermique stabilisé ;

- couplage turbulence - thermique ;
- modèle de croissance avec fonction level-set pour le changement de phase ;
- introduction de la chaleur latente en tant que terme source dans l'équation de la thermique.

L'ensemble de ces solveurs constitue la base solide d'une simulation de remplissage turbulent avec changement de phase.

6.5 Conclusion

Nous avons développé dans ce chapitre une méthode novatrice permettant de représenter l'évolution de la solidification/fusion d'un matériau grâce à une approche level-set. Cette méthode est basée sur un modèle de germination-croissance porté à l'échelle macroscopique, dont les paramètres de croissance sont calculés en fonction des grandeurs physiques du système (températures et vitesses). Ceci a pour avantage d'optimiser la description de la transformation en restant dans des échelles de vitesse et de température raisonnables.

L'intégration du saut d'énergie lié à la chaleur latente se fait grâce à l'ajout d'un terme source dans l'équation de la thermique. Ce terme source est calculé uniquement avec la variation de la fonction level-set de phase, ce qui le rend plus conservatif que s'il était calculé à partir de la variation d'une fonction heavyside régularisée, moins régulière.

Les différentes applications numériques ont pu valider la bonne conservation de notre méthode, et attester le couplage avec les équations du mouvement et de la thermique développées dans les chapitres précédents.
Nous avons également pu tester l'intégration d'un solide mobile avec changement de phase dans l'approche monolithique avec turbulence. Cette dernière application nous a permis de valider la robustesse du couplage de toutes les équations pour un cas bidimensionnel ainsi qu'un cas tridimensionnel.

Bibliographie

[1] V. Alexiades and A.D. Solomon. *Mathematical Modeling Of Melting And Freezing Processes*. Taylor Francis, 1993.

[2] C. Beckermann, H.J. Diepers, I. Steinbach, A. Karma, and X. Tong. Modeling melt convection in phase-field simulations of solidification. *Journal Of Computational Physics*, 154 :468–496, 1999.

[3] J. Crank. *Free And Moving Boundary Problems*. Clarendon Press, 1984.

[4] M. Hamide. *Modélisation Numérique Du Soudage À L'arc Des Aciers*. PhD thesis, École Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 2008.

[5] Yih-Jena Jan. A cell-by-cell thermally driven mushy cell tracking algorithm for phase-change problems - part ii : Phase-change with natural convection. *Computational Mechanics*, 40(2) :217–231, Jul 2007.

[6] S. Jana, S. Ray, and F. Durst. A numerical method to compute solidification and melting processes. *Applied Mathematical Modelling*, 31(1) :93–119, Jan 2007.

[7] L.M. Jiji, K.A. Rathjen, and T. Drzewiecki. Two-dimensional solidification in a corner. *Int. J. Heat Mass Transfer.*, 13 :215–218, 1969.

[8] A.R. Karev, M. Farzaneh, and E.P. Lozowski. Character and stability of a wind-driven supercooled water film on an icing surface - i. laminar heat transfer. *International Journal Of Thermal Sciences*, 42 :481–498, 2003.

[9] Cy Li, Sv Garimella, and Je Simpson. Fixed-grid front-tracking algorithm for solidification problems, part ii : Directional solidification with melt convection. *Numerical Heat Transfer Part B-Fundamentals*, 43(2) :143–166, Feb 2003.

[10] S. Mcfadden and D.J. Browne. A front-tracking model to predict solidification macrostructures and columnar to equiaxed transitions in alloy castings. *Applied Mathematical Modelling*, 33 :1397–1416, 2009.

[11] M. Rebow and D.J. Browne. On the dendritic tip stability parameter for aluminium alloy solidification. *Scripta Materialia*, 56 :481–484, 2007.

[12] Dipayan Sanyal, P. Ramachandrarao, and O. P. Gupta. A fast strategy for simulation of phase change phenomena at multiple length scales. *Computational Materials Science*, 37(1-2) :166–177, Aug 2006. 14th International Workshop On Computational Mechanics Of Materials, Goa, India, Sep 23-25, 2004.

[13] Lijian Tan and Nicholas Zabaras. A level set simulation of dendritic solidification with combined features of front-tracking and fixed-domain methods. *Journal Of Computational Physics*, 211(1) :36–63, 2006.

[14] Lijian Tan and Nicholas Zabaras. A level set simulation of dendritic solidification of multi-component alloys. *Journal Of Computational Physics*, 221(1) :9–40, Jan 20 2007.

[15] Vr Voller. Fast implicit finite-difference method for the analysis of phase-change problems. *Numerical Heat Transfer Part B-Fundamentals*, 17(2) :155–169, 1990.

[16] Vr Voller, Cr Swaminathan, and Bg Thomas. Fixed grid techniques for phase-change problems - a review. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, 30(4) :875–898, Sep 1990. 6th Conf On Numerical Methods In Thermal Problems, Swansea, Wales, Jul, 1987.

[17] F Wolff and R Viskanta. Solidification of a pure metal at a vertical wall in the presence of liquid superheat. *International Journal Of Heat And Mass Transfer*, 31(8) :1735–1744, Aug 1988.

[18] Y Yang and Hs Udaykumar. Sharp interface cartesian grid method iii : Solidification of pure materials and binary solutions. *Journal Of Computational Physics*, 210(1) :55–74, Nov 20 2005.

Chapitre 7

Conclusion et Perspectives

Contents

7.1 Conclusions 166
7.2 Perspectives 167

7.1 Conclusions

Nous avons développé tout au long de ce manuscrit une méthode eulérienne complète permettant de simuler par éléments finis le remplissage turbulent d'une cavité par un fluide newtonien à changement de phase. La construction de cette méthode a nécessité le développement et la validation de nombreux outils numériques dont le détail des étapes suit.

Dans un premier temps, nous avons montré comment développer la base de toute simulation d'écoulement de fluides, c'est à dire le solveur des équations de Navier Stokes. Après avoir explicité la formulation variationnelle ainsi que la discrétisation numérique du problème, nous avons présenté une première approche permettant de stabiliser le caractère hyperbolique de l'équation. Cette formulation P1+/P1, qui vérifie la condition de stabilité de Brezzi-Bbuška, ne permet de représenter que des nombres de Reynolds modérés. Nous avons alors choisi d'introduire une résolution avec une approche de type Variational-Multi-Scale, présentant l'avantage de modéliser plus finement les écoulements modérément perturbés.
L'application numérique présentée permet de montrer la robustesse de la méthode VMS qui permet de représenter une large gamme de nombres de Reynolds. Celle-ci commence à présenter des écarts pour un nombre de Reynolds $Re = 12\,000$, limite au delà de laquelle il est judicieurx d'utiliser un modèle de turbulence.

La prise en compte des différents domaines en présence (solides, liquides ou gazeux) se fait grâce à une approche monolithique. Cette approche, couplée à une méthode level-set, permet d'utiliser une unique fois par incrément les solveurs de l'écoulement (Navier-Stokes et thermique). La résolution se fait par immersion de domaines sur un seul maillage. Cette méthode a pour avantage de s'affranchir des étapes de remaillage des domaines ou de prise en compte des contacts et des recouvrements, relativement complexes à mettre en œuvre et coûteuses en temps de calcul.
Notre méthode de capture d'interface est quant à elle basée sur une approche level-set. La fonction distance associée permet de définir de manière simple et régulière les différentes transitions et lois de surface entre les différentes phases. Son caractère local permet de réduire le temps de calcul et d'optimiser les conditions aux limites, tandis que la combinaison de l'équation de transport avec l'équation de réinitialisation permet de conserver la forme caractéristique de la fonction sans équation supplémentaire.
Les différentes applications numériques ont pu valider le comportement de notre méthode, le cas de l'écroulement de barrage a également pu montrer la capacité du solveur Navier-Stokes à représenter des écoulement relativement perturbés.

Nous avons également fait le tour des méthodes de modélisation de la turbulence, nous avons opté pour une méthode de type Large Eddy Simulations, plus pratique et moins dissipative que les méthodes de type Reynolds Average Navier Stokes. Le modèle dynamique de Smagorinsky utilisé permet de décrire de manière optimale les caractéristiques de la

turbulence sans paramètre supplémentaire nécessaire. Le cas test de l'écroulement de barrage a pu montrer que le modèle de turbulence, associé au solveur de Navier-Stokes VMS, n'introduit pas d'erreur supplémentaire malgré la viscosité élevée ajoutée. La conception d'une maquette à eau a permis de créer un cas de référence d'écoulement tridimensionnel turbulent. La comparaison aux résultats expérimentaux a également validé le bon choix du modèle de turbulence et les conditions aux limites à utiliser.

Une autre étape importante est la résolution des équations de la thermique. La modélisation d'un écoulement à convection dominante nécessite une stabilisation de type SUPG, que nous avons également enrichi d'une prise en compte des chocs thermiques. Cette méthode s'est révélée assez robuste pour simuler des écoulements relativement perturbés. De la même manière que pour les équations de l'écoulement, l'approche monolithique permet d'immerger différents domaines (gazeux/liquides/solides) sur un seul maillage et ne résout qu'une seule fois l'équation de la thermique par pas de temps. L'utilisation d'une vitesse obtenue par un modèle de turbulence en tant que vitesse de convection nécessite l'introduction d'un nouveau terme de diffusion dans l'équation de la thermique, directement proportionnel à la viscosité turbulente introduite précédemment. Le solveur ainsi obtenu a permis de faire une première simulation concluante de remplissage turbulent avec prise en compte des équations de la thermique.

Enfin, nous avons introduit une méthode novatrice de prise en compte de la solidification. Cette méthode, basée sur un modèle de germination croissance, décrit chaque phase en présence par une fonction level-set associée à un champ de vitesse de croissance. Les paramètres d'évolution de chaque phase sont calculés en fonction des grandeurs caractéristiques de l'écoulement, ce qui permet de se placer dans une même échelle de temps. L'utilisation d'une fonction level-set a pour avantage d'introduire naturellement le changement de phase dans le modèle monolithique, elle permet également de définir une épaisseur de changement de phase sur laquelle est répartie la chaleur latente de transformation. Les différentes applications numériques ont validé chaque étape de l'intégration du changement de phase. Nous avons enfin montré par la dernière simulation que la combinaison de toutes les méthodes étudiées au cours de ce document permettait d'obtenir un code de simulation robuste et complet.

7.2 Perspectives

Nous avons étudié dans ce manuscrit une méthode robuste et efficace permettant de simuler des écoulements à haut nombre de Reynolds avec changement de phase. Cependant, la turbulence nécessite une description très fine des interfaces fluides et la description du changement de phase nécessite la même description pour les interfaces associées. L'utilisation de maillages fixes requiert par conséquent un nombre d'éléments très élevé (de l'ordre de plusieurs millions), ce qui donne au final des temps de calcul conséquents. Le

remplissage en fonderie de pièces de plusieurs dizaines de tonnes pouvant durer quelques dizaines de minutes, le nombre d'incréments nécessaires pour la simulation est d'autant plus grand, d'où la nécessité de limiter au maximum les degrés de liberté.
Les technologies d'adaptation de maillage à l'aide d'estimateurs d'erreur sont une solution intéressante pour localiser le raffinement là où il est le plus nécessaire. L'introduction de notre modèle de turbulence dans le code de simulation Rem3D, utilisant l'adaptation de maillage anisotrope développé dans les thèses de Gruau [2] et Zerguine [3] et un pas de temps adaptatif optimisé pour le transport de la level-set a ainsi permis de réaliser la simulation présentée figure 7.1. Nous avons pour cela repris la simulation du chapitre 4 appliquée aux paramètres physiques de l'acier en fusion ($\rho = 8\,000 kg/m^3$, $\eta = 10^{-3} Pa.s$). Le temps de calcul correspondant a été de $15h$ sur 6 processeurs pour $6s$ de simulation.

Nous nous sommes également intéressés à un cas de validation industriel, plus représentatif de la réalité. La figure 7.2 présente ainsi les résultats de simulation de remplissage isotherme en source d'un lingot d'acier de 60 tonnes. Les paramètres physiques sont les mêmes que pour le cas précédent. On peut également avoir un aperçu du maillage adapté à l'instant $t = 60s$ sur la figure 7.3

Nous avons également montré qu'il était possible de simuler une ou plusieurs phases solides grâce à notre approche monolithique. Cependant, bien que cette intégration se fasse de la même manière que pour les phases fluides dans le solveur thermique, nous l'avons introduite dans le solveur Navier Stokes en fixant une viscosité très élevée. Cette viscosité ne pouvant pas être trop élevée pour des raisons de conditionnement de matrice, elle se révèle inexacte pour simuler des solides indéformables ou non visqueux.
Il existe pour cela des techniques dites d'"interaction fluide-structure" [1] permettant de simuler les différents types de phase au sein d'un même solveur, en respectant l'approche monolithique.

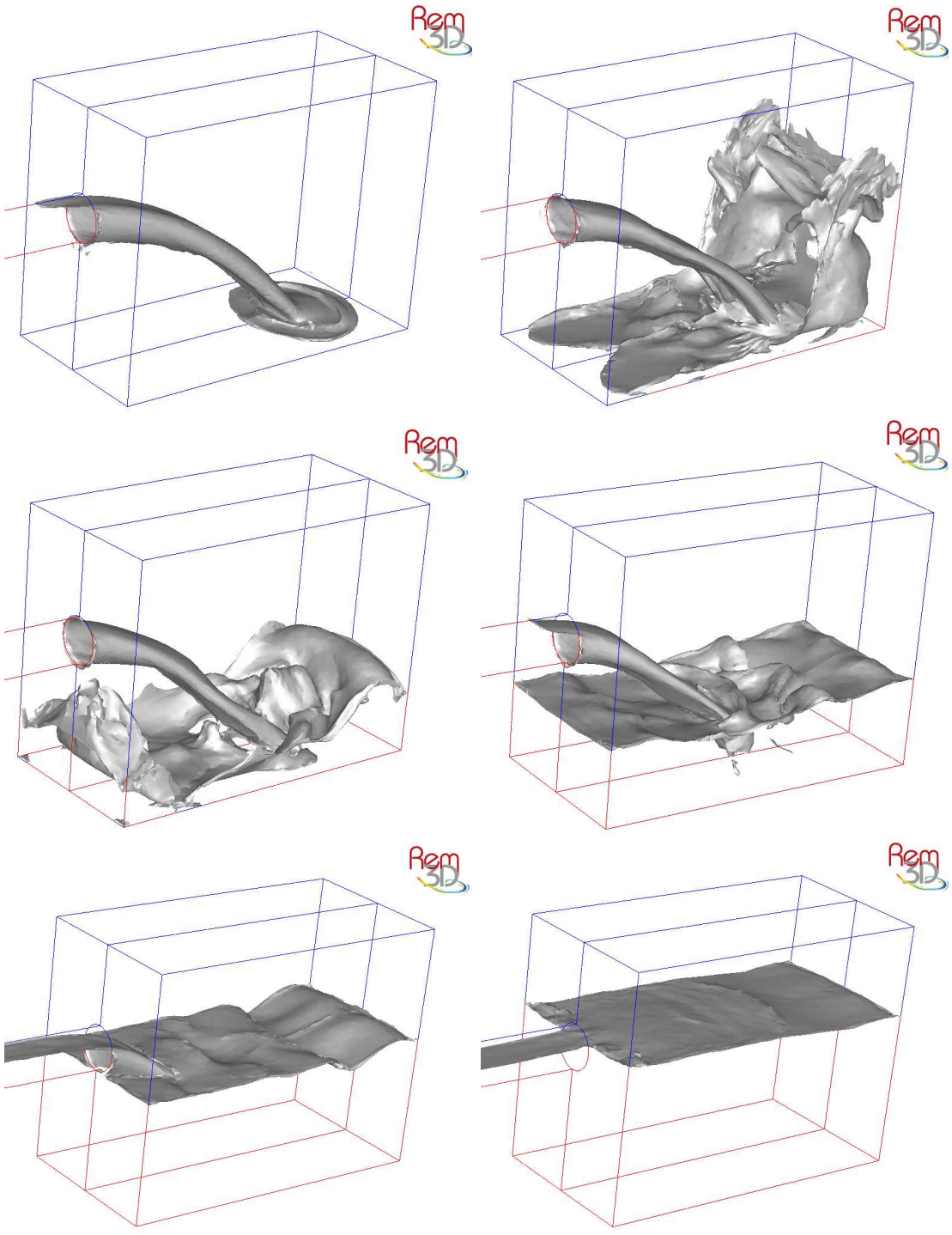


FIGURE 7.1 – Remplissage turbulent avec adaptation de maillage ($t = 0.3s - 0.65s - 1s - 2s - 4s - 6s$)

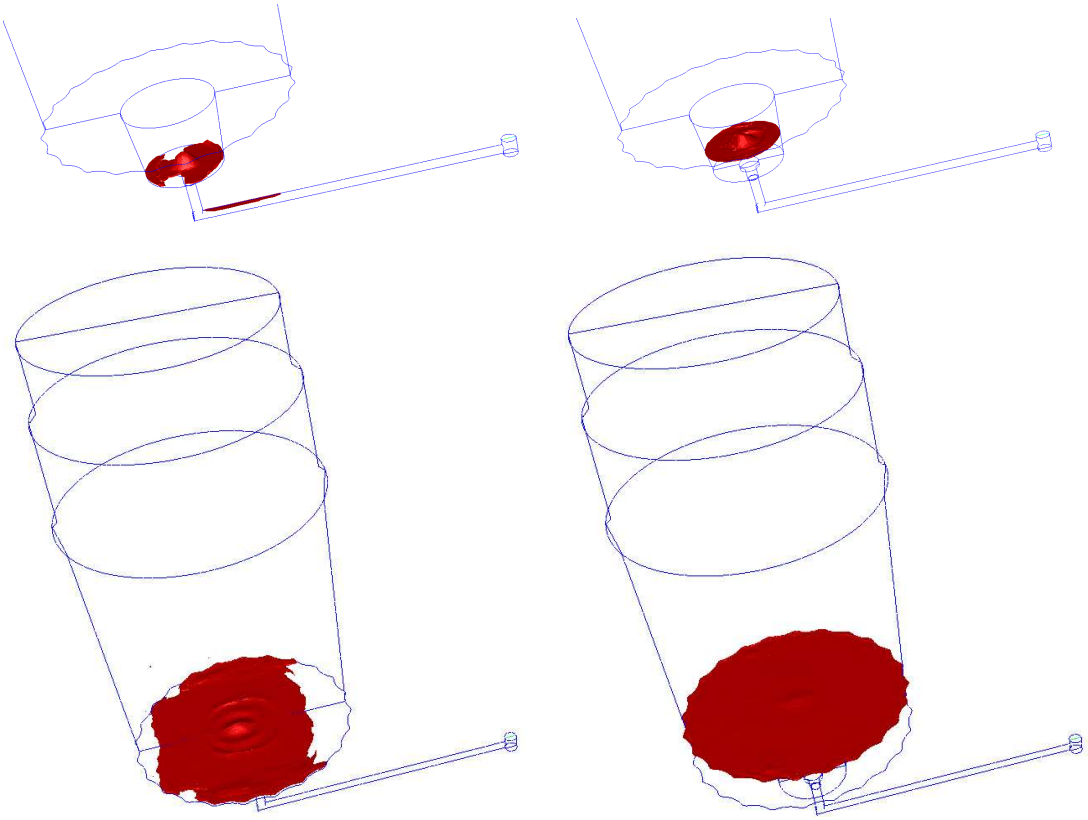


FIGURE 7.2 – Remplissage d'un lingot de 60 tonnes avec adaptation de maillage $t = 3.5s - 14.5s - 42s - 200s$

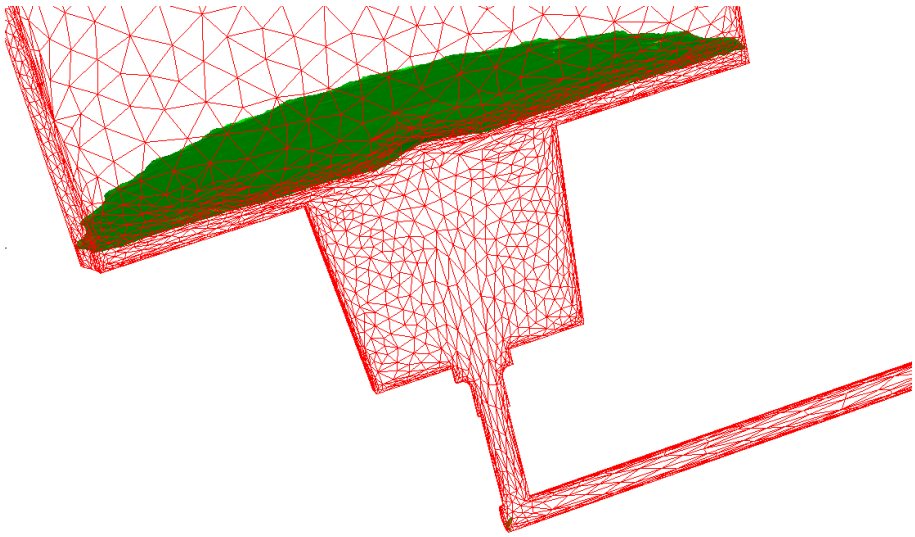


FIGURE 7.3 – Maillage du lingot pour $t = 60s$

Bibliographie

[1] S. Feghali, E. Hachem, and T. Coupez. Monolithic stabilized finite element method for rigid body motions in the incompressible navier-stokes flow. *Journal of Computational Mechanics*, 2010.

[2] C. Gruau. *Génération de Métriques Pour Adaptation Anisotrope de Maillages, Applications à la Mise en Forme des Matériaux.* Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 2004.

[3] W. Zerguine. *Simulation Numérique du Procédé d'Injection Assistée Eau.* Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure Des Mines De Paris, 2010.

Éléments Finis Stabilisés Pour le Remplissage en Fonderie à Haut Reynolds

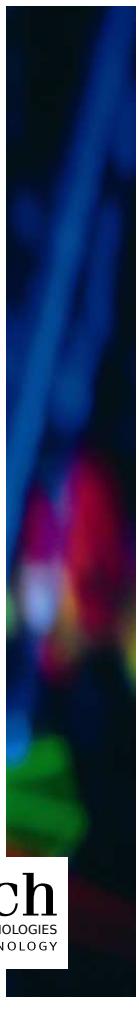
Résumé : L'objectif de cette thèse est de développer un code de simulation complet pour le remplissage en fonderie de pièces de grandes dimensions (jusqu'à plusieurs mètres). Ce type de procédé fait entrer en jeu de nombreux phénomènes physiques couplés, nécessitant des méthodes numériques adaptées. La faible viscosité du métal liquide (de l'ordre de $10^{-6}\ m^2/s$) requiert l'emploi d'un modèle de turbulence basé sur un solveur Navier Stokes stabilisé et une méthode de suivi/capture d'interface. Nous avons pour cela choisi un approche stabilisée de type Variational Multi Scales (VMS), qui s'est révélée efficace pour simuler des nombres de Reynolds modérés, alliée à une méthode level-set permettant de déterminer de manière précise et à tout moment la position de l'interface liquide/air. La turbulence est quant à elle prise en compte grâce à un modèle dynamique de type Large Eddy Simulations (L.E.S.), ne faisant pas apparaître de paramètre empirique. Chacune de ces méthodes numériques a été confrontée à des résultats expérimentaux, numériques ou analytiques. Nous avons également conçu notre propre maquette expérimentale de remplissage d'eau, afin de valider le couplage des solveurs pour un cas représentatif. Une autre caractéristique de ces procédés à durée relativement longue (jusqu'à plusieurs dizaines de minutes) est l'importance des transferts thermiques, pouvant mener à la solidification du métal en cours de remplissage. Il convient donc de développer une méthode de résolution stabilisée de la thermique avec convection dominante. Cette méthode doit prendre en compte les variables turbulentes introduites précédemment. Enfin, nous proposons une méthode innovante pour simuler le changement de phase, basée sur une approche germination/croissance avec fonction level-set. L'application de toutes ces méthodes au cas du remplissage avec glaçon mobile a enfin permis de valider la robustesse numérique de notre code et le bon couplage de ses différentes entités.

Mots clés : Navier Stokes, Méthode Éléments Finis Stabilisés, Level-Set, Large Eddy Simulations, Changement de Phase

Stabilised Finite Elements For High Reynolds Metal Casting

Abstract: The main objective of this thesis is to develop a complete simulation code for large pieces (up to several meters) metal casting. This kind of processes reveals several coupled physical phenomena and needs adapted numerical methods. Molten metal has usually a low viscosity (around 10-6 m2/s) hence in order to simulate the filling process the use of a turbulence model is required. At the same time, the liquid/air interface must be tracked along with the numerical simulation. In the first part of this work, a stabilized finite element method base on the Variational MultiScale approach (VMS) required for computing the incompressible flows is proposed and analyzed. The latter approach has proved to be efficient in simulating moderate Reynolds numbers, and combined with a convected level-set method, it showed an ability to determine accurately and at any moment the position of the liquid / air interface. Turbulence is taken into account by developing a dynamic Large Eddy Simulation (L.E.S.) model with no empirical data. For validation, each of these methods has been compared to experimental, numerical or analytical results. We also designed our own water flow experimental setting in order to validate our solvers coupling for a representative case. Another feature of these processes having a relatively long duration (over several ten minutes) is the influence of conjugate heat transfers. This can play a major role on the solidification of the metal that is being filled. It is then convenient to develop a stabilized finite element method for convection dominated heat transfer. This method should take into account previously introduced turbulent variables. Finally, we propose an innovative method to simulate the phase change based on a germination/growth approach, with a level-set function. The appliance of all these methods to the moving ice filling case allows the validation of the computational robustness of our code and the well-coupling of its various entities.

Keywords: Navier Stokes, Stabilised Finite Element Method, Level-Set, Large Eddy Simulation, Phase Change



MINES ParisTech

ParisTech
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
PARIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY