

Titre: Développement d'un algorithme numérique monolithique de pseudo-concentration avec une méthode d'éléments finis adaptative pour les écoulements diphasiques en 2D
Title:

Auteur: Stéphane Sved Teja
Author:

Date: 2022

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Sved Teja, S. (2022). Développement d'un algorithme numérique monolithique de pseudo-concentration avec une méthode d'éléments finis adaptative pour les écoulements diphasiques en 2D [Master's thesis, Polytechnique Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/10509/>
Citation:

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/10509/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Stéphane Étienne, André Garon, & Cédric Béguin
Advisors:

Programme: Génie mécanique
Program:

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

**Développement d'un algorithme numérique monolithique de
pseudo-concentration avec une méthode d'éléments finis adaptative pour les
écoulements diphasiques en 2D**

STEFANE SVED TEJA

Département de génie mécanique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
Génie mécanique

Août 2022

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

**Développement d'un algorithme numérique monolithique de
pseudo-concentration avec une méthode d'éléments finis adaptative pour les
écoulements diphasiques en 2D**

présenté par **Stefane SVED TEJA**

en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

Jérôme VÉTEL, président

Stéphane ÉTIENNE, membre et directeur de recherche

Cédric BÉGUIN, membre et codirecteur de recherche

André GARON, membre et codirecteur de recherche

Bruno BLAIS, membre

DÉDICACE

*À mes parents, Pierre et Teresa,
pour leur soutien indéfectible dans mon parcours. . .*

REMERCIEMENTS

Tout d'abord, je tiens à remercier mon directeur de recherche Stéphane Étienne pour sa confiance lors du développement de ce projet ainsi que pour son appui tout au long de ma maîtrise. Son soutien m'a permis de mener à bien ce travail. Je lui offre aussi un remerciement particulier de m'avoir introduit au monde de la recherche.

Je remercie également mon co-directeur Cédric Béguin pour sa collaboration qui a été un pilier pour ce projet. Ses suggestions et son expertise ont, sans aucun doute, permis l'implémentation avec succès du modèle présenté.

À tous les membres de la Chaire de recherche General Electric, je les remercie d'avoir formé une équipe passionnée par les mêmes ambitions qui m'aura gardé motivé tout au long de ma maîtrise.

RÉSUMÉ

Ce mémoire présente le développement et l'implémentation d'une méthode numérique de capture d'interface pour la résolution des écoulements diphasiques. Il inclut une brève vérification du modèle ainsi qu'une étude de cas de référence afin de tester les capacités du modèle.

L'objectif principal pour cet algorithme numérique est de simuler le fractionnement et la coalescence des phases à l'aide d'une modélisation simple afin de capturer les phénomènes physiques présents dans les écoulements à phases séparées.

L'algorithme se base sur la résolution d'une équation de transport associé à un champ marqueur couplé aux équations de Navier-Stokes résolues selon une description eulérienne à l'aide de la méthode des éléments finis. L'assemblage et la résolution du système d'équations se font selon une approche monolithique permettant une meilleure résolution pour ce type de problèmes caractérisés par de grands ratios de propriétés physiques entre les phases.

La méthode développée est dotée d'un module d'adaptation de maillage qui lui permet d'augmenter l'efficacité du calcul. Elle est mise à l'épreuve à l'aide de cas tests de difficulté croissante tels que l'instabilité de Rayleigh-Taylor et l'évolution d'une vague déferlante qui impact une paroi. On verra que certains développements sont encore nécessaires, mais les résultats présentés témoignent du potentiel et de la capacité de cette méthode à reproduire des phénomènes réels et font de ce modèle un excellent candidat pour la simulation d'écoulements diphasiques.

ABSTRACT

This work presents the development and implementation of a numerical interface capture method for solving two-phase flows. It includes a brief verification of the model as well as a benchmark case study to test the capabilities of the model.

The main objective for this numerical algorithm is to simulate phase splitting and coalescence using simple modeling to capture the physical phenomena present in phase-separated flows.

The algorithm is based on the solution of a transport equation associated with a marker field coupled to the Navier-Stokes equations solved according to an Eulerian description using the finite element method. The assembly and the resolution of the system of equations are done using a monolithic approach allowing a better resolution for this type of problems characterized by large ratios of physical properties between phases.

The developed method is equipped with a mesh adaptation module which allows it to increase the efficiency of the computation. It is tested with benchmark test cases of increasing difficulty such as the Rayleigh-Taylor instability and the evolution of a breaking wave impacting a wall.

It will be seen that some developments are still necessary, but the results presented show the potential and the capacity of this method to reproduce real phenomena and make this model an excellent candidate for the simulation of two-phase flows.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	vi
TABLE DES MATIÈRES	vii
LISTE DES TABLEAUX	x
LISTE DES FIGURES	xi
NOMENCLATURE ET ABRÉVIATIONS	xiv
LISTE DES ANNEXES	xvi
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Contexte Industriel	3
1.2 État des lieux	5
1.3 Objectifs de recherche et développements	6
1.4 Plan du mémoire	7
CHAPITRE 2 ÉTAT DE L'ART	8
2.1 Modèles et algorithmes numériques en écoulements diphasiques	8
2.2 Modèles numériques "one-fluid"	10
2.2.1 Méthodes à suivi d'interface (Interface-Tracking Techniques)	11
2.2.2 Méthodes à capture d'interface (Interface-Capturing Techniques)	12
2.3 Méthode de Pseudo-Concentration (Introduction)	16
2.3.1 Avancements et état des lieux	16
2.4 Méthode Level-Set Conservative	17
CHAPITRE 3 DÉVELOPPEMENT ET IMPLÉMENTATION DE L'ALGORITHME NUMÉRIQUE DE PSEUDO-CONCENTRATION EN ÉLÉMENTS FINIS	18
3.1 Modélisation et développement des équations théoriques	18

3.1.1	Équations de Navier-Stokes	18
3.2	Modèles mathématiques et méthodes numériques	20
3.2.1	Méthode des éléments finis en mécanique des fluides	20
3.3	Assemblage et résolution du système matriciel (méthode de Newton)	24
3.3.1	Résolution du système d'équations non linéaires	25
3.4	Développement d'un algorithme pour la méthode de Pseudo-Concentration 2D en éléments finis	26
3.4.1	Présentation de la méthode de Pseudo-Concentration (PCM)	26
3.4.2	Modèle mathématique de l'écoulement	27
3.4.3	Stabilisation par accroissement de régularité (assouplissement de front)	30
3.4.4	Stabilisation par transformation	32
3.4.5	Stabilisation numérique	35
3.5	Développement pour les écoulements compressibles	37
3.6	Adaptation de la discrétisation spatiale	40
3.6.1	Estimateur d'erreur et normes	41
3.6.2	Stratégie de raffinement	43
3.7	Intégration temporelle et méthodes adaptatives en temps	46
CHAPITRE 4 VÉRIFICATION ET RÉSULTATS		
	DU MODÈLE NUMÉRIQUE	48
4.1	Vérification d'un modèle numérique	48
4.2	Piston monophasique à vitesse constante	50
4.2.1	Présentation du cas	50
4.2.2	Présentation des résultats	51
4.3	Ballotement de grande amplitude	54
4.3.1	Présentation du cas	54
4.3.2	Analyse des résultats	55
4.4	Instabilité de Rayleigh-Taylor	58
4.4.1	Présentation du cas	59
4.4.2	Analyse des résultats numériques	59
4.5	Large Gas Pocket	67
4.5.1	Présentation du cas	67
4.5.2	Analyse des résultats	71
CHAPITRE 5 CONCLUSION		
5.1	Synthèse des travaux	81
5.2	Limitations de la solution proposée	82

5.3 Améliorations futures et travaux recommandées	82
RÉFÉRENCES	85
ANNEXES	90

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1	Définition des normes d'erreur pour l'adaptation de maillage dans l'algorithme <code>adapt</code> intégré dans <code>CADYF</code> [1]	43
Tableau 3.2	Normes d'adaptation de maillage pour le cas Rayleigh-Taylor	44
Tableau 4.1	Propriétés physiques des fluides et conditions limites pour la simulation de vérification - Cas du piston fictif monophasique	51
Tableau 4.2	Description, propriétés physiques et conditions limites du ballotement	54
Tableau 4.3	Propriétés physiques et conditions limites pour la simulation de Rayleigh-Taylor	59
Tableau 4.4	Propriétés physiques des fluides et conditions limites pour le cas LGP	68

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Différents modes d'écoulement diphasique (Inspiré de [2])	2
Figure 1.2	Banc d'essai - Laboratoire Expérimental Grande Hauteur	3
Figure 1.3	Montage d'un profil aérant au LEGH	4
Figure 1.4	Intéraction entre les modules du code source	5
Figure 2.1	Classification des méthodes numériques pour les écoulements diphasiques (Tiré de <i>Mirjalili et al.</i> [3])	9
Figure 2.2	Méthode de suivi d'interface	11
Figure 2.3	Illustration de trois méthodes d'interface, (a) Suivi d'interface, (b) VOF, (c) Level Set (Tiré de Luo et al. [4])	14
Figure 2.4	Représentation schématique de la méthode VOF (tiré de <i>Fortin</i> , 2019 [5])	15
Figure 3.1	Schéma d'un domaine de calcul pour une résolution numérique	19
Figure 3.2	Discrétisation spatiale du domaine Ω	21
Figure 3.3	Élément de référence P2-P1	22
Figure 3.4	Élément de référence P2-P1	24
Figure 3.5	Schéma d'un domaine de calcul pour un résolution numérique	26
Figure 3.6	Schéma de la modélisation	28
Figure 3.7	Champ scalaire abrupt	28
Figure 3.8	Illustration d'une variable A qui présente une discontinuité sur l'interface. (Tiré de <i>K. Luo et al.</i> , [4])	30
Figure 3.9	Champ scalaire $\varphi(\mathbf{x}, t)$ assoupli	31
Figure 3.10	Projection des fronts $\varphi(\mathbf{x}, t)$ sur le plan $[x, \varphi]$ pour le cas piston	32
Figure 3.11	Schéma d'un domaine de calcul pour une résolution numérique	33
Figure 3.12	Adaptation de maillage (e_p, e_u, e_φ) - Rayleigh-Taylor (t=0.6s)	45
Figure 3.13	Adaptation de maillage (e_p, e_u, e_φ) - Rayleigh-Taylor (t=0.7s) Interface montrée en rouge	45
Figure 3.14	Instantanés temporels rétrospectifs utilisés par BDF-p (Tirée de Hay et al. [6])	46
Figure 4.1	Processus de vérification d'un modèle numérique (Tiré de AIAA G-077-1998) [7]	49
Figure 4.2	Piston fictif monophasique à l'état initial (t=0)	50
Figure 4.3	Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation du piston fictif	52

Figure 4.4	Variation du champ de vitesse dans l'ensemble du domaine de calcul en fonction du temps pour le piston fictif (Cas de vérification)	53
Figure 4.5	Ballotement de grande amplitude	54
Figure 4.6	Évolution de l'interface sur la paroi droite en fonction du temps	55
Figure 4.7	Résultats de l'évolution de l'interface sur la paroi droite en fonction du temps obtenus par <i>Dettmer et Peric</i> (2006) [8]	55
Figure 4.8	Interface et champ de vitesse à différents temps du sloshing (Méthode de Pseudo-Concentration) avec T étant la période	56
Figure 4.9	Résultats de l'évolution de l'interface sur la paroi droite en fonction du temps obtenus par la méthode de suivi (CADYF)	57
Figure 4.10	Éruption du volcan Sarychev (NASA - https://svs.gsfc.nasa.gov/1144)	58
Figure 4.11	Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation Rayleigh-Taylor	60
Figure 4.12	Superposition des interfaces entre les méthodes de pseudo-concentration et suivi d'interface - Simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor sans tension de surface	61
Figure 4.13	Comparaison de l'interface à $t = 0.9s$ pour différentes méthodes numériques	62
Figure 4.14	Interface et métriques pour RT ($t=0.7s$)	63
Figure 4.15	Amplitude du pic en fonction du temps	63
Figure 4.16	Comparaison des métriques B_h et S_h entre les modèles de suivi et pseudo-concentration en fonction du temps	64
Figure 4.17	Comparaison de l'évolution de B_h en fonction de S_h entre le modèle de suivi et le modèle de pseudo-concentration	65
Figure 4.18	Interface de l'instabilité de Rayleigh-Taylor à différents instants après rupture des brins	66
Figure 4.19	Crête avant impact lors du sloshing de l'eau	67
Figure 4.20	État initial de la simulation (LGP)	69
Figure 4.21	Déferlement anticipé dû aux instabilités accrues ($t = 0.17s$)	70
Figure 4.22	Évolution du cas Large Gaz Pocket dans le temps (Viscosités $\times 50$)	71
Figure 4.23	Comportement de l'adaptation de maillage dans le temps	72
Figure 4.24	Maillage généré par le module d'adaptation de maillage pour la vague impactante lors du dernier pas de temps réussi ($t = 0.334s$) - interface en rouge	73
Figure 4.25	Lèvre de la vague à des instants consécutifs avant impact	74
Figure 4.26	Contours de vitesse de la vague impactante avant son impact	75

Figure 4.27	Moyenne glissante de l'évolution du pas de temps h en fonction du temps	75
Figure 4.28	Dernier pas de temps simulé par Pseudo-Concentration - LGP (avant impact) (Viscosités x 10)	76
Figure 4.29	Adaptation de maillage (e_p, e_u, e_φ) - LGP (avant impact)	77
Figure 4.30	Interface et contours de vitesse de la vague - LGP (avant impact) . .	78
Figure 4.31	Vorticité au niveau de la crête de la vague - LGP (dernier pas de temps)	79
Figure 4.32	Comparaison entre le modèle de suivi d'interface en rouge ($t = 0.328s$) et bleu ($t = 0.331s$) et le modèle de pseudo-concentration développé dans ce travail en noir ($t = 0.334s$)	80
Figure A.1	Champ scalaire $\varphi(\mathbf{x}, t)$ pour le cas LGP à $t=0.131$ s	90
Figure A.2	Champ scalaire $\phi((\mathbf{x}, t) = \mathcal{F}(\varphi(\mathbf{x}, t))$ pour le cas LGP à $t=0.131$ s . .	90

NOMENCLATURE ET ABRÉVIATIONS

Abréviations

2D	2 Dimensions
3D	3 Dimensions
BDF	Backward Differentiation Formula
CADYF	Computer Aided DYnamics of Fluids
DNS	Direct Numerical Simulation
ALE	Arbitrary Lagrangian Eulerian
CFD	Computational Fluid Dynamics
EDP	Équation aux Dérivées partielles
SUPG	Streamline Upwind Petrov Galerkin
VOF	Volume Of Fluids
MAC	Marker And Cell
FTM	Front Tracking Method
IRT	Instabilité de Rayleigh-Taylor
GNL	Gaz Naturel Liquefié
LGP	Large Gaz Pocket

Nomenclature

g	Constante gravitationnelle
$\hat{\mathbf{n}}$	Vecteur normale unitaire
p	Pression
t	Temps
\mathbf{u}	Vecteur de vitesse $[u,v]$
\mathbf{x}	Coordonnées cartésiennes $[x,y]$
Γ	Frontière(s) au domaine
ϕ_p	Fonction test de pression
ϕ_u	Fonction test de vitesse
μ	Viscosité dynamique
μ_1	Viscosité dynamique du fluide 1
μ_2	Viscosité dynamique du fluide 2
μ_A	Viscosité dynamique du fluide A
μ_B	Viscosité dynamique du fluide B

ρ	Masse volumique
ρ_1	Masse volumique du fluide 1
ρ_2	Masse volumique du fluide 2
ρ_A	Masse volumique du fluide A
ρ_B	Masse volumique du fluide B
$\boldsymbol{\sigma}$	Tenseur des contraintes
Ω	Domaine du problème

LISTE DES ANNEXES

Annexe A	COMPARAISON DU CHAMP MARQUEUR SCALAIRE AVEC ET SANS AFFÛTAGE	90
----------	--	----

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Le sujet des écoulements polyphasiques couvre un vaste domaine ; une multitude de contextes technologiques différents, un large spectre d'échelles différentes, un large éventail de disciplines d'ingénierie et une multitude d'approches analytiques différentes.

Les écoulements diphasiques sont définis comme l'interaction simultanée de deux phases distinctes où chacune de ces phases représente une masse ou un volume de matière avec des interfaces communes. Ce type d'écoulement peut se produire dans un système à un ou plusieurs composants. Il existe plusieurs combinaisons de phases possibles et elles comprennent : (1) solide-liquide, où les particules solides sont principalement dispersées dans le liquide, (2) solide-gaz, où les particules solides sont transportées par un courant de gaz, (3) liquide-vapeur (gaz), où la fraction volumique d'une phase par rapport à l'autre donne lieu à différents régimes d'écoulement, (4) deux liquides non miscibles et (5) une combinaison des cas mentionnés précédemment [9].

Il s'agit d'une famille d'écoulements que l'on retrouve dans plusieurs phénomènes naturels et industriels et leur étude est particulièrement importante dans les industries et les applications liées à l'énergie. Qu'il s'agisse du flux sanguin humain ou bien des réacteurs nucléaires, cette branche de la mécanique des fluides a été le sujet principal de plusieurs études scientifiques pendant plusieurs générations. Néanmoins, malgré les efforts menés jusqu'à présent, les connaissances dans ce domaine sont encore restreintes étant donné la difficulté du domaine et la nécessité d'une infrastructure complexe pour son étude. La chaire de recherche en écoulements diphasiques dirigée par le Professeur Stéphane Etienne dans laquelle ce projet a été hébergé, étudie de façon approfondie les écoulements diphasiques afin d'atteindre une meilleure connaissance dans ce domaine et ainsi contribuer à la communauté scientifique à l'aide de développements numériques et de données expérimentales.

Le manque d'information et de données expérimentales forme le moteur qui incite les scientifiques au développement de modèles numériques efficaces, mais souvent très coûteux en puissance de calcul afin d'obtenir des méthodes précises et consistantes pour la prédiction de ce type d'écoulements.

Dans un contexte historique, cette branche de la mécanique des fluides a connu un grand essor dans les dernières décennies grâce aux avancements et aux développements technologiques en informatique qui ont permis un accroissement significatif de la puissance de calcul. La loi de *Moore* stipule que le nombre de transistors dans les microprocesseurs double tous les deux

ans. Ceci a un effet direct sur la puissance et la rapidité des ordinateurs. En d'autres mots, les machines de calculs sont devenues de plus en plus petites, de moins en moins coûteuses tout en devenant de plus en plus rapides et puissantes. Cette augmentation de puissance de calcul a donné beaucoup d'importance au calcul scientifique, non seulement en mécanique des fluides, mais pour les sciences computationnelles en général. Cet envol technologique a permis le développement et l'implémentation de plusieurs types et approches numériques pour la modélisation précise des écoulements diphasiques et monophasiques lesquels nous étudierons dans le présent travail.

La physique et la modélisation numérique des écoulements polyphasiques est plus complexes que pour les écoulements monophasiques. Cette complexité découle principalement des différentes interactions physiques et chimiques qui existent entre les fluides et l'interface qui les sépare ainsi que les changements topologiques présents dans ce type d'écoulements.

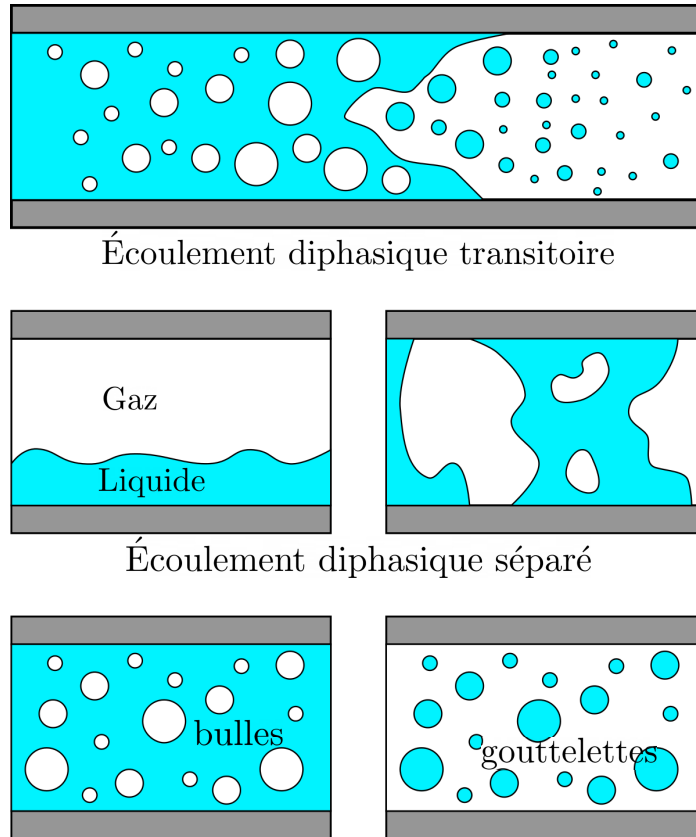


FIGURE 1.1 Différents modes d'écoulement diphasique (Inspiré de [2])

La Figure 1.1 montre les modes principaux d'écoulements polyphasiques. Selon le mode

d'écoulement, il existe différents modèles numériques pour la modélisation de certains phénomènes propres à chaque mode d'écoulement. Rien que les différents modes d'écoulements témoignent déjà de la complexité accrue de ce type d'écoulement lorsque comparé aux écoulements monophasiques.

1.1 Contexte Industriel

Ce projet a été mené dans un contexte industriel qui vise à améliorer l'efficacité des turbines hydro-électriques tout en oxygénant l'eau en aval des barrages. Même en étant souvent considérés parmi les sources d'énergie renouvelables les plus avantageuses, les barrages hydro-électriques représentent l'une des plus grandes interventions humaines dans le cycle hydrologique et leur impact environnemental n'est pas négligeable. Parmi les facteurs qui affectent le plus le cycle hydrologique se trouve l'appauvrissement en oxygène dissous en aval de la turbine hydraulique.

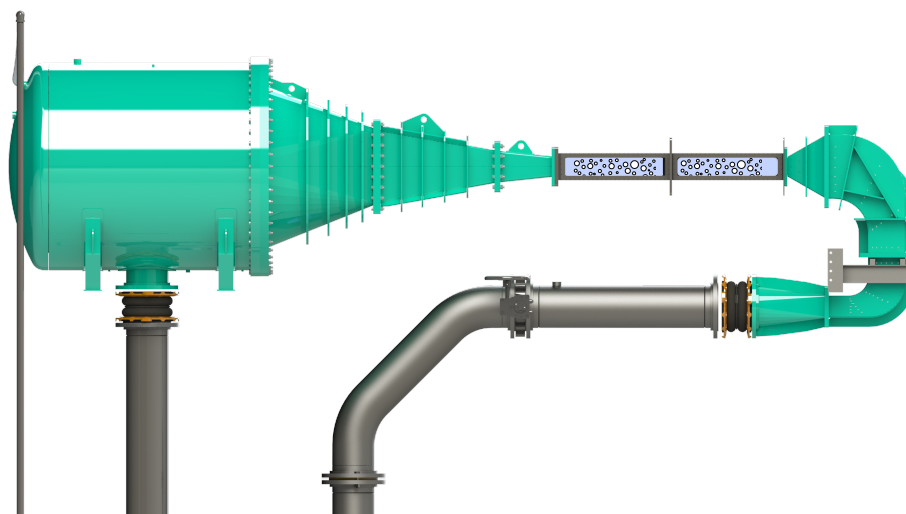


FIGURE 1.2 Banc d'essai - Laboratoire Expérimental Grande Hauteur

À cet effet, l'admission d'air dans les zones de basse pression d'une turbine est une méthode optimale pour venir combler ce problème. Cependant, les connaissances pour mener à bien une technologie capable d'aérer de manière efficace les turbines hydrauliques sont minces. Dans le cadre de la chaire de recherche industrielle en écoulements diphasiques en collaboration avec General Electric et Polytechnique Montréal, l'une des recherches principales porte sur l'étude de la performance d'injection d'air dans l'eau turbinée ainsi que la modélisation numérique d'écoulements diphasiques dispersés. Les corrélations tirées de l'environnement

de calcul développé sont cruciales pour la validation de routines dans l'outil de simulation numérique utilisé par le partenaire industriel.

L'obtention de données expérimentales se fait dans un banc d'essai conçu en conséquence et capable de reproduire les conditions retrouvées au cœur des turbines. La Figure 1.2 montre le banc en question qui constitue le Laboratoire Expérimental Grande Hauteur (LEGH).

Pour atteindre des conditions encore plus proches et pouvoir mieux étudier l'injection d'air et l'interaction entre les aubes et le processus d'injection, le montage montré à la Figure 1.3 a été mis en place dans le laboratoire. Ce montage est muni d'un profil hydrodynamique aérant qui injecte l'air dans l'écoulement d'eau dans lequel il est submergé.

L'objectif du banc d'essai est l'obtention de résultats expérimentaux pour la validation de la modélisation numérique établie par l'équipe de développement numérique. À cet effet, les corrélations tirées des résultats expérimentaux serviront à améliorer les modèles développés.

Malgré l'importance des écoulements diphasiques dans le domaine industriel et scientifique, la recherche dédiée à cette branche de la mécanique des fluides reste marginale encore de nos jours. L'augmentation dans la puissance de calcul grâce à l'évolution technologique permet d'approfondir les connaissances dans ce domaine. Les résultats qui en découlent seront donc cruciaux pour la diminution de l'empreinte sur l'environnement issue de l'énergie hydroélectrique, qui représente l'une des plus grandes contributions économiques dans le secteur des ressources naturelles.

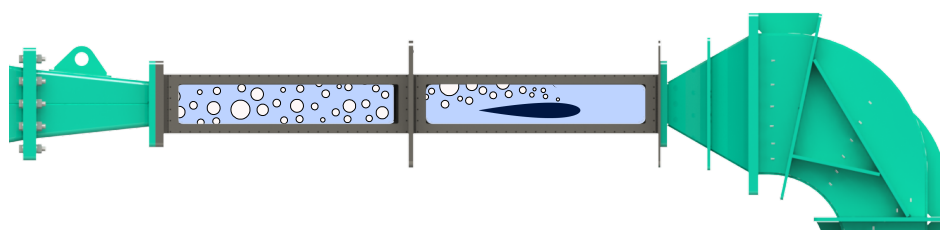


FIGURE 1.3 Montage d'un profil aérant au LEGH

Le modèle développé dans ce travail de maîtrise ne sera pas utilisé directement avec les données expérimentales tirées du laboratoire. Bien qu'il s'agisse de l'objectif ultime, ce modèle reste encore à une étape préliminaire par le fait que le modèle de pseudo-concentration se limite aux écoulements 2D dans ces travaux. Néanmoins, quelques comparaisons bien précises pourront être réalisées. Les travaux futurs qui seront réalisés pour continuer le développement amorcé par ce projet de recherche feront en sorte de pouvoir se comparer directement aux données expérimentales, notamment avec un modèle de pseudo-concentration en 3D.

1.2 État des lieux

Dans le cadre des travaux présentés dans ce mémoire, on s'intéresse exclusivement à la simulation numérique d'écoulements diphasiques bidimensionnels. Ces simulations sont réalisées avec un code source de calcul de haute fidélité dédié à la mécanique des fluides numérique développé par les intégrants de l'équipe de développement numérique de Polytechnique Montréal. Les développements réalisés dans ce logiciel de calcul se font lors de projets de recherche indépendants. Ce sont ces développements qui nourrissent les capacités de ce code en lui apportant de nouvelles fonctionnalités numériques.

Cet ensemble logiciel est constitué de trois programmes de base :

- amiral** : logiciel permettant la mise en place du calcul. Il est responsable de la génération du maillage et du transfert de la solution d'un maillage à un autre maillage raffiné et adapté
- cadyf** : solveur monolithique en éléments finis
- adapt** : programme en charge de réaliser l'adaptation de maillage par estimation et réduction de l'erreur spatiale (algorithme d'adaptation de maillage)

Le schéma suivant montre de manière graphique l'interaction entre chacun des modules afin de mieux comprendre les échanges d'information sous forme de boucle d'asservissement.

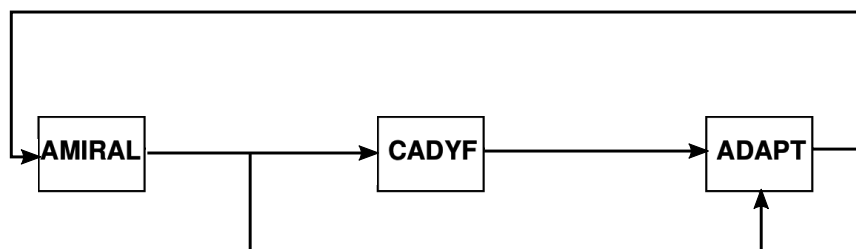


FIGURE 1.4 Interaction entre les modules du code source

C'est donc en ajoutant les développements propres à notre projet de recherche dans les différents programmes que nous intégrerons l'algorithme numérique de pseudo-concentration dans le code source pour la résolution d'écoulements diphasiques en pseudo-concentration. Nous interviendrons notamment dans **amiral** pour l'ajout de variable qui intervient dans l'équation de transport. Dans **cadyf** nous implémenterons l'équation de transport et le couplage avec les équations de Navier-Stokes et finalement, l'intervention sur **adapt** sera pour le développement de l'adaptation spatiale par rapport à la variable inscrite sur **amiral**.

1.3 Objectifs de recherche et développements

L'objectif principal du projet est de développer et d'intégrer un nouvel algorithme de pseudo-concentration monolithique en éléments finis, adaptatif en espace (adaptation de maillage) et en temps pour la résolution d'écoulement diphasiques instationnaires en 2D.

Cet objectif découle du besoin de simuler les détachements et la coalescence des phases tout en limitant la quantité de ressources de calcul mises en œuvre ainsi que la nécessité d'avoir un champ scalaire qui permet de quantifier la fraction volumique dans l'entièreté du domaine de calcul.

Les objectifs concrets de recherche sont donc les suivants :

- ❶ Développer et implémenter le couplage de l'équation de transport pour la méthode de pseudo-concentration avec un algorithme de Navier-Stokes monolithique déjà existant.
- ❷ Intégrer le calcul de l'erreur ainsi que la méthode adaptative en espace par rapport à la nouvelle variable du modèle créée pour le couplage.
- ❸ Ajouter la formulation pour les fluides compressibles pour le modèle de pseudo-concentration
- ❹ Valider la performance et le bon fonctionnement du développement à l'aide de cas académiques de référence
- ❺ Faire une analyse des résultats obtenus avec le nouveau modèle numérique

La difficulté du développement réside principalement sur l'ajout de la nouvelle variable, le couplage entre Navier-Stokes et l'équation de transport ainsi que l'intégration du calcul de l'erreur pour adapter le maillage en fonction de cette dernière.

Une fois ces tâches accomplies, nous effectuerons une analyse de vérification (point 4) comme pour tout développement en science computationnelle, ceci, ayant comme but de tester l'implémentation mathématique du modèle développé dans ce travail. Par la suite, l'analyse de résultats test tel que mentionné par le point 5 se fait afin de pouvoir se comparer à d'autres méthodes numériques déjà existantes dans le solveur mais aussi en se comparant aux résultats d'autres solveurs numériques.

1.4 Plan du mémoire

Ce mémoire de maîtrise n'est pas une référence pour les concepts mathématiques ou les méthodes numériques associées aux écoulements diphasiques. L'objectif principal de ce document est de présenter, sans être rudimentaire, les travaux qui ont été effectués dans le cadre de ce projet de recherche en développement numérique. Par ailleurs, il expose de manière concise les procédures qui ont été implémentées afin de réussir cet exploit. Pour les lecteurs avides des concepts mathématiques présentés, nous les invitons à consulter les références offertes tout au long de ce document afin d'avoir tous les outils nécessaires à un apprentissage approfondi sur chacun des sujets traités.

En premier lieu, nous présentons les différents modèles numériques existants pour la modélisation d'écoulements diphasiques et qui sont d'intérêt pour le développement du modèle traité dans ce travail sous forme d'une revue de littérature. Nous exposons aussi leurs avantages et désavantages et l'ensemble constitue le chapitre 2.

Le chapitre 3, quant à lui, explique en premier lieu les concepts mathématiques nécessaires au bon fonctionnement de la modélisation. Il passe en revue les équations qui gouvernent la mécanique des fluides, la méthode des éléments finis et la procédure utilisée par la résolution des systèmes d'équations non linéaire. Par la suite, nous exposons le développement qui a été fait afin de réussir l'implémentation du modèle numérique de pseudo-concentration dans le code source Cadyf et nous montrons en détail les différentes astuces et équations nécessaires au développement. Ce chapitre traite aussi les modules d'adaptation afin d'optimiser la résolution numérique des écoulements diphasiques tels que l'adaptation en temps et en espace du solveur.

Afin d'apprécier le fonctionnement du modèle et ses capacités, nous réalisons une série d'analyses de cas de références dans le chapitre 4 où nous comparons les résultats obtenus avec d'autres méthodes qui ont été discutées dans la revue de littérature du chapitre 2. Nous effectuons aussi une analyse de validation nécessaire pour tout développement numérique afin de s'assurer de la bonne implémentation du modèle voulu.

Finalement, nous présentons le résumé des travaux menés au cours de ces travaux de maîtrise et nous proposons des améliorations futures pour les travaux qui suivront celui-ci. D'autre part, nous exposons les limitations rencontrées au cours des simulations lancées afin de garder un registre des complications qui ont aidé à forger le modèle tel qu'il est présenté dans ce document.

CHAPITRE 2 ÉTAT DE L'ART

Ce chapitre a pour but d'exposer les connaissances scientifiques nécessaires et déjà existantes pour le développement et la modélisation d'algorithmes numériques en écoulements diphasiques. Le monde de la dynamique des fluides computationnelle ou Computational Fluid Dynamics (CFD) en anglais et le monde du calcul numérique en général a connu une forte démocratisation dans les deux dernières décennies. Ceci a permis un raffinement et un perfectionnement des modèles pionniers ainsi qu'un développement extensif de nouveaux modèles spécialisés selon le type de calcul numérique envisagé. En effet, le progrès de la puissance de calcul fait des simulations un outil fort intéressant du point de vu financier et parfois même indispensable dans la plupart des secteurs de l'industrie et plus particulièrement dans les domaines traitants de la science appliquée.

En premier lieu, on présentera de façon brève les différentes méthodes de résolutions pour des écoulements diphasiques. Par la suite, nous verrons de façon plus approfondie les méthodes à modélisation d'interface qui porte un intérêt particulier pour le développement qui a été effectué et mis dans ce mémoire de maîtrise.

2.1 Modèles et algorithmes numériques en écoulements diphasiques

Tout comme en physique, le monde du calcul numérique peut être divisé en deux mondes. Le monde *Eulérien* et le monde *Lagrangien*. La principale différence entre ces deux descriptions numériques réside sur le référentiel du fluide par rapport au maillage. La description *Eulerienne* se base sur une résolution des équations sur un maillage fixe en temps et en espace. En contraste, dans la description *Lagrangienne* la résolution numérique se réalise sur un maillage mobile. Le déplacement du maillage dans la description Lagrangienne varie avec le fluide selon la déformation induite par les forces subies par ce dernier. Le maillage subit un changement topologique associé au fluide et se déplace en temps et en espace avec le fluide assigné. Il existe aussi une description qui combine ces deux formulations. Cette description hybride appelée Arbitrary Lagrangian Eulerian (ALE) est une combinaison optimale entre la formulation Eulérienne et Lagrangienne. L'ensemble de ces descriptions utilisent une résolution directe ou Direct Numerical Simulation (DNS) qui consiste à résoudre les équations de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie jusqu'aux plus petites échelles et sans l'intermédiaire de modèles de turbulence. Ce type de résolution s'avère être l'une des plus précises pour les écoulements diphasiques.

Les modèles numériques que nous présenterons font partie des méthodes de la formulation eulérienne. Ces modèles portent un intérêt particulier dans ce travail étant donné que l'algorithme développé dans ce projet en fait partie. L'un des avantages de cette description est le fait que la discrétisation du domaine de calcul ne varie pas en fonction de la topologie du matériau (masse, fluide) ce qui rend cette catégorie d'algorithmes de simulation d'excellents candidats pour des calculs numériques en mécanique des fluides et davantage lorsqu'une grande déformation du fluide est envisagée (Hirt & Nichols, 1981) [10]. Dans ce travail, nous ferons abstraction des modèles numériques appartenant aux descriptions Lagrangiennes et *ALE* et nous nous concentrerons sur les formulations Eulériennes.

Nous pouvons regrouper quatre grandes classes de modélisation dans la littérature et dans le domaine de la CFD (Computational Fluid Dynamics). Chacune de ces classes est dotée de différents types d'approches de modélisation, nous présenterons brièvement des approches existantes, mais avec un intérêt particulier sur les approches à capture d'interface (***Interface-Capturing***). La Figure 2.1 montre de façon schématique l'arborescence selon le type de modèles numériques et permet de visualiser le classement des approches numériques les plus connues. Pour ce projet de recherche, nous identifions les modèles d'intérêt par les formes ovales.

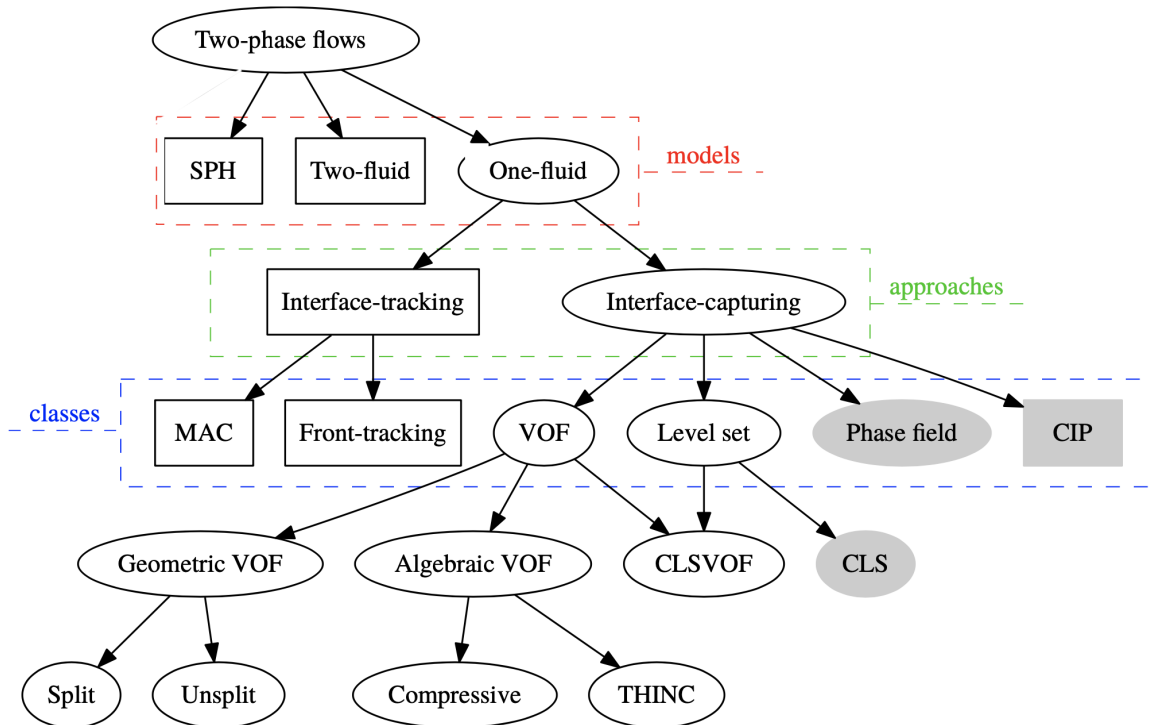


FIGURE 2.1 Classification des méthodes numériques pour les écoulements diphasiques (Tiré de *Mirjalili et al.* [3])

2.2 Modèles numériques "one-fluid"

La catégorie de modèles "one-fluid" ou "uni-fluide" est une technique de modélisation utilisée pour les simulations diphasiques ou multiphasiques. Cette terminologie se justifie par le fait que les différentes phases (ou fluides) présentes dans la simulation sont traitées comme un ensemble unique. On peut visualiser ceci comme un mélange homogène des fluides présents dans le domaine de calcul. Avec cette approche, les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sont résolues pour la totalité du champ d'écoulement. Ces mêmes équations permettent un changement arbitraire dans les propriétés des fluides en incluant l'écoulement avec interfaces où la masse volumique ρ et la viscosité μ varient de manière discontinue Prosperetti & Tryggvason [11].

Lorsqu'on s'intéresse à la simulation diphasique en résolvant un seul système d'équations pour la totalité du champ d'écoulement, il est nécessaire de prendre en compte les différences dans les propriétés entre les différents fluides. L'identification des différents fluides se fait donc par le moyen d'une fonction échelon (Heaviside) $H(x, y)$ en lui associant la valeur 1 à un fluide en particulier et 0 ailleurs. Il devient impératif de connaître la position de l'interface entre ces différents fluides et son déplacement en fonction du temps induit par l'écoulement lui-même et gouverné par les équations classiques de la mécanique des fluides.

Ceci peut être fait au moyen de l'utilisation d'une *fonction marqueur* (f). Cette fonction correspond à la fonction de Heaviside introduite plus haut, mais elle se différencie par le fait que f est dotée avec une transition plus souple dans l'implémentation numérique du modèle, ce qui rend l'algorithme d'autant plus stable numériquement (chose qui a été faite dans le modèle développé dans ce travail). L'évolution de cette fonction f , qui pilote le comportement de l'écoulement diphasique et de l'interface immergée dans les fluides, est gouvernée par l'advection de la fonction marqueur par le fluide selon l'équation :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f = 0 \quad (2.1)$$

Dans la littérature, il existe deux grandes classes pour la modélisation de type "one-fluid" : les techniques dites à suivi d'interface (***Interface-Tracking***) et les techniques à capture d'interface (***Interface-Capturing***). Dans cette section, nous présenterons ces deux grandes catégories qui font partie intégrante des connaissances scientifiques essentielles au développement du modèle numérique fait dans ce projet de maîtrise.

2.2.1 Méthodes à suivi d'interface (Interface-Tracking Techniques)

Front-Tracking

Comme son nom le suggère, la méthode Front Tracking (FT) Unverdi and Tryggvason (1992) [12] est une technique de dynamique des fluides numérique en écoulements multiphasiques dans laquelle l'emplacement d'une interface fluide-fluide est proprement suivi par l'advection de points marqueurs d'interface. Ce suivi se fait à l'aide de noeuds de contrôle sous une description Lagrangienne comme le montre la Fig.2.2 Roghair (2016) [13].

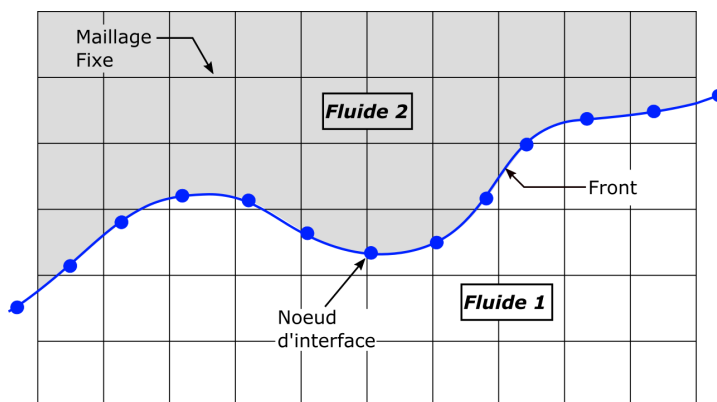


FIGURE 2.2 Méthode de suivi d'interface

Avec cette technique, les forces interfaciales sont calculées directement aux nœuds de l'interface et sont transférées dans les équations de Navier-Stokes sous forme de terme source. L'interface permet aussi de délimiter les propriétés des fluides. Contrairement aux méthodes à capture d'interface, les propriétés ne sont pas advectées avec l'interface, il est donc nécessaire d'en faire la mise à jour à chaque pas de temps.

◆ Avantages

Cette méthode est extrêmement précise dans le suivi de l'interface vu que tous les efforts computationnels sont mis sur son repérage. Ainsi, la position de l'interface à l'aide de cette méthode ALE est extrêmement fidèle comparée aux méthodes d'interface capturing.

◆ Limitations

L'une des contraintes les plus importantes pour cette méthode numérique est le fait qu'elle ne permet pas la rupture et/ou la coalescence entre les phases dû à la nature du modèle numérique qui s'appuie sur la présence d'une interface entre les deux phases en tout temps. Un algorithme de construction d'interface serait donc nécessaire pour simuler une cassure ou coalescence de phases.

Marker and Cell (MAC)

La méthode MAC (Marker And Cell) aussi connue comme "Volume Tracking", est une méthode relativement ancienne. Elle s'est démarquée par les travaux de Harlow et Welch en 1965 [14] au fameux laboratoire de Los Alamos et elle inspirera le développement de la méthode VOF. Cette méthode s'appuie sur un maillage fixe eulérien dans lequel baignent des particules virtuelles de masse nulle. Ces particules portant le nom de "Marqueurs" sont déplacées par le champ de vitesse de la solution. La distribution de ces marqueurs dans le maillage permet de marquer la présence ou non du fluide. L'identification de l'interface se fait par l'interpolation entre les particules intérieures et extérieures du volume étudié

Elle ne doit pas être confondue avec la méthode Lagrangienne pure, étant donné que seuls les marqueurs se voient déplacés afin de suivre et reconstruire l'interface. Ainsi, la représentation de l'interface n'est pas stockée dans les calculs et chaque marqueur se doit d'être d'être advecté individuellement et ce à chaque pas de temps.

La méthode MAC est encore utilisée de nos jours grâce à ses performances intéressantes et uniques. À cet effet, une revue de la méthode avec les dernières avancées scientifiques a été effectuée par McKee et al. (2007) [15].

2.2.2 Méthodes à capture d'interface (Interface-Capturing Techniques)

Level-Set

La méthode *Level-Set* proposée par Osher and Sethian (1987) [16] est une méthode non conservative qui permet de représenter l'interface entre les fluides comme une courbe de niveau d'une fonction à dimension élevée. L'interface, Γ , immergée entre les fluides, est identifiée comme l'ensemble de niveaux zéro (isoligne) du champ auxiliaire $\phi(x, t)$ qui est défini comme la fonction signée de la distance à Γ tel que :

$$\left| \phi(\mathbf{x}, t) \right| = \left| \mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma \right| = d \quad (2.2)$$

Typiquement, on initialise cette fonction comme étant la distance signée d'un point \mathbf{x} par rapport à l'interface. Cette fonction distance représente la plus petite distance entre le point où elle est analysée et l'interface et permet d'identifier les différents fluides (ou phases) de la façon suivante :

$$\phi(x, t) = \begin{cases} -d, & \text{Phase 1 || Fluide 1} \\ 0, & \text{Interface} \\ d, & \text{Phase 2 || Fluide 2} \end{cases} \quad (2.3)$$

La méthode Level-Set est puissante et efficace pour la capture d'interfaces puisqu'elle permet de suivre des changements topologiques complexes tels que la rupture, la formation de creux ou l'inverse de ces deux phénomènes.

Le déplacement de l'interface évolue de la même façon que pour la méthode VOF selon l'équation de transport :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (2.4)$$

Avec la différence que l'on déplace l'interface seulement dans la direction normale. L'interface représente une discontinuité des propriétés physiques des fluides, ce qui peut susciter des problèmes de diffusion (élargissement de l'interface) ainsi que la présence d'oscillations numériques. Pour minimiser ces problèmes, la méthode Level Set utilise une fonction Heaviside $H(\phi)$ lissée qui permet de définir la position de l'interface, Γ , de façon explicite. Cette fonction $H(\phi)$ agit comme fonction marqueur tel que :

$$\begin{cases} H(\phi) = 0, & \text{si } \phi < -\delta_\Gamma \\ H(\phi) = 1, & \text{si } \phi > \delta_\Gamma \\ H(\phi) = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\delta_\Gamma} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\delta_\Gamma}\right) \right], & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.5)$$

où δ_Γ représente l'épaisseur virtuelle de l'interface.

Les propriétés physiques telles que la masse volumique ou la viscosité sont calculées à l'aide de cette fonction marqueur de la façon suivante :

Masse Volumique :

$$\rho = \left(1 - H(\phi)\right)\rho_1 + H(\phi)\rho_2 \quad (2.6)$$

Viscosité

$$\mu = \left(1 - H(\phi)\right)\mu_1 + H(\phi)\mu_2 \quad (2.7)$$

où ρ_1, ρ_2 et μ_1, μ_2 , représentent la masse volumique et viscosité des fluide 1 et fluide 2 respec-

tivement. L'équation (2.6) peut être appliquée de manière analogue à toute autre propriété intrinsèque des fluides.

La puissance de cette méthode réside dans sa capacité à résoudre avec une haute fidélité la collision et/ou le déferlement ainsi que leurs coalescences. Le lecteur intéressé est référé aux travaux de Luo et al. [4].

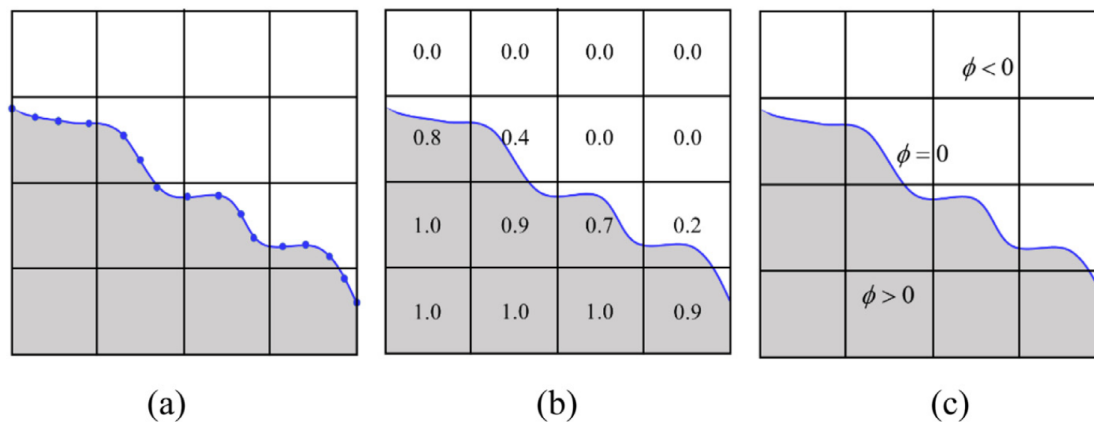


FIGURE 2.3 Illustration de trois méthodes d'interface, (a) Suivi d'interface, (b) VOF, (c) Level Set (Tiré de Luo et al. [4])

◆ Avantages

Cette technique est capable de traiter des angles aigus et les pics dans la solution de propagation de l'interface, ainsi que les changements topologiques complexes et les effets tridimensionnels. En utilisant des techniques adaptatives, le travail de calcul est le même que celui des autres méthodes, avec les avantages d'une précision accrue et d'une modélisation robuste.

◆ Limitations

Méthode non conservatrice. L'évolution de l'interface dépend non seulement de la propagation du champ de vitesse, mais aussi de la fonction de distance. La fonction distance se doit d'être recalculée à chaque pas de temps afin de garder la fonction distance signée.

Volume of Fluids - VOF

La méthode VOF, inspirée sur la méthode MAC décrite plus haut, a débuté avec les travaux de Noh and Woodward (1976) [17] en proposant la modèle SLIC. Une amélioration proposée par Hirt and Nichols (1981) [10] a rendu le modèle très populaire. Cette méthode est devenue si populaire que la NASA à elle aussi développé une série de codes VOF, il s'agit plus précisément des travaux de Torrey et al. [18] à Los Alamos.

Cette méthode de volumes finis se base sur l'utilisation d'une fonction continue décrivant la fraction volumique C d'une phase dans chacune des cellules du domaine de calcul. Ce modèle appartenant à la famille de modélisation "one-fluid" repose sur l'advection de l'interface par le champ d'écoulement. Cette advection se fait à l'aide de la relation suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = 0 \quad (2.8)$$

Les différentes phases sont représentées par un seul fluide et la différenciation de chacune de ces phases se fait par l'association des propriétés à chacun des fluides en fonction de C :

Masse Volumique :

$$\rho = \rho_1 C + \rho_2 (1 - C) \quad (2.9)$$

Viscosité

$$\mu = [\rho_1 \mu_1 C + \rho_2 \mu_2 (1 - C)] / \rho \quad (2.10)$$

Un des défis avec cette technique réside sur la reconstruction de l'interface et sur le schéma utilisé pour l'équation d'advection (2.8) afin de limiter la dispersion numérique, tâche qui s'avère complexe, et ce davantage pour les simulations en 3D. Néanmoins, VOF reste un des modèles les plus utilisés parmi les approches à capture d'interface et d'excellents résultats ont été obtenus avec ce modèle. Présentement, la plupart des logiciels commerciaux incluent l'option de simulation de surface libre ou d'écoulements diphasiques à l'aide de VOF.

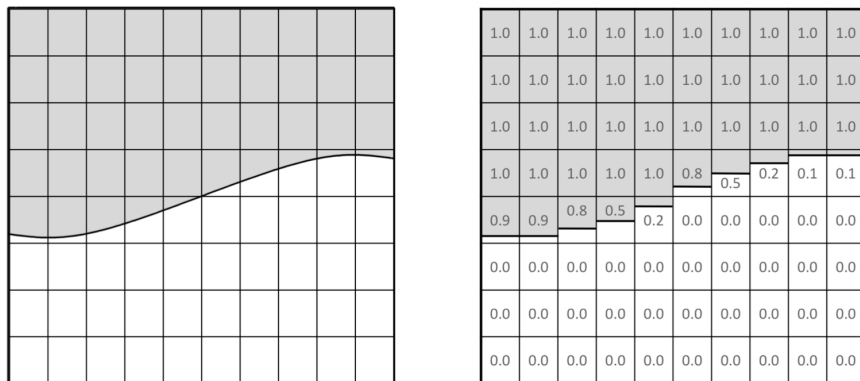


FIGURE 2.4 Représentation schématique de la méthode VOF (tiré de Fortin, 2019 [5])

◆ **Avantages**

La méthode VOF est une méthode simple et puissante. Elle permet de simuler des cas très complexes et ne nécessite pas une puissance de calcul excessive comme il serait le cas pour d'autres méthodes. Elle permet la coalescence et détachement de l'interface.

◆ **Limitations**

Un algorithme de reconstruction d'interface est nécessaire afin d'avoir l'interface de manière lisse et continue. La position de l'interface est entièrement dépendante de l'algorithme de reconstruction.

2.3 Méthode de Pseudo-Concentration (Introduction)

Inspirée des méthodes VOF, la technique de pseudo-concentration échange les fractions de volumes contre une variable générique qui représente chaque fluide. Une équation de transport est résolue pour suivre l'interface et elle fait ainsi partie de la famille d'approches *Interface-capturing*. Elle est notamment très utilisée dans la modélisation de surfaces libres et surtout lors de simulations de procédés de remplissage des moules en polymère.

Nous limitons la présentation de cette méthode étant donné qu'une section entière lui est dédiée dans les chapitres suivants où nous expliquerons en détail cette méthode.

◆ **Avantages**

Technique très versatile qui permet de localiser l'interface dans l'évolution d'une simulation numérique dans des géométries complexes. Capable de modéliser le détachement et la coalescence des phases.

◆ **Limitations**

Présence d'instabilités proche de l'interface due à une discontinuité qui découle directement de la modélisation mathématique.

2.3.1 Avancements et état des lieux

Malgré une recherche ardue d'articles scientifiques, cette méthode est rarement appliquée à la mécanique des fluides traitant les écoulements diphasiques. La grande majorité de références littéraires trouvées traitent l'évolution du remplissage de moules en polymères c'est à dire où la viscosité est extrêmement élevée. C'est notamment pour cette raison que ce développement est avant-gardiste et pertinent pour la communauté scientifique.

Il est toutefois important de mentionner au lecteur qu'il existe une affinité entre le modèle de pseudo-concentration réalisé dans le présent travail et la méthode de Level-Set Conservative présentée Kronbichler et al. [19].

Cette variante de la méthode Level Set a pour objectif de trouver une fonction alternative d'ensemble de niveaux, ainsi qu'un schéma d'advection convenable, résultant en la conservation de la zone délimitée par l'interface. Un exposé plus détaillé est donné dans la section suivante.

2.4 Méthode Level-Set Conservative

Cette méthode conservative se différencie de la méthode Level Set standard par l'effort supplémentaire qui est apporté pour trouver une méthode d'advection du champ de niveaux $\phi(\mathbf{x}, t)$ construit à l'aide de la fonction de distance, qui soit conservative et où le profil de ϕ à l'interface reste inchangé.

Les travaux d'Olsson et al. [20] mettent en place une méthode Level Set modifiée avec une conservation intégrée. La fonction de distance $\phi(\mathbf{x}, t)$ devient une fonction caractéristique régularisée avec une procédure de réinitialisation formulée sous la forme d'une loi de conservation afin de préserver le profil lisse de la fonction caractéristique.

Cette loi de conservation se base sur les méthodes dites TVD (Total Variation Diminishing) qui approchent les lois de conservation sans introduire d'oscillations près des discontinuités.

De plus, afin d'éviter les discontinuités à l'interface, Olsson et al. [20] introduisent une faible viscosité virtuelle, l'équation de transport devient donc somme suit :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \epsilon \Delta \phi \quad (2.11)$$

L'avantage principal de cette méthode découle du fait que la conservation de la masse est nettement améliorée par rapport à la méthode Level Set standard.

Tel qu'il sera présenté plus bas dans le prochain chapitre, cette variante de la méthode Level Set contient plusieurs astuces qui ont aussi été implémentées dans le modèle présenté dans ce travail.

Nous référons tout lecteur ayant un intérêt particulier pour la méthode Level Set Conservative aux travaux effectués par Olsson et al. [20], Kronbichler et al. [19] ainsi que le travail effectué par Zahedi et al. [21] où les deux méthodes Level Set (Standard et Conservative) sont utilisées pour l'étude de courants parasites dans les simulations par éléments finis à l'aide des équations incompressibles de Navier-Stokes pour la résolution d'écoulements diphasiques.

CHAPITRE 3 DÉVELOPPEMENT ET IMPLÉMENTATION DE L'ALGORITHME NUMÉRIQUE DE PSEUDO-CONCENTRATION EN ÉLÉMENTS FINIS

Ce chapitre présente la formulation des équations permettant de résoudre un écoulement en sciences computationnelles, qu'il s'agisse d'un écoulement monophasique ou multiphasique. On commence par passer en revue les équations aux dérivées partielles qui régissent les problèmes de la mécanique des fluides. Par la suite, on abordera les méthodes numériques qui sont utilisées pour résoudre ces équations aux dérivées partielles. Pour finir, on accorde une attention particulière au développement de l'algorithme numérique de pseudo-concentration et son implémentation dans le code CADYF.

3.1 Modélisation et développement des équations théoriques

Les lois physiques fondamentales qui gouvernent le mouvement et le transfert de masse en mécanique des fluides sont les lois de Newton, la conservation de la masse ainsi que la première loi de la thermodynamique. L'application mathématique de ces concepts se traduit par les équations de Navier-Stokes, l'équation de la continuité et l'équation de l'énergie. Plus bas nous présentons de manière plus concrète ces équations qui sont le pilier de la CFD.

3.1.1 Équations de Navier-Stokes

Les équations décrivant l'écoulement d'un fluide newtonien incompressible en mécanique des fluides sont les équations de continuité et de Navier-Stokes qui s'écrivent mathématiquement de la manière suivante :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.1)$$

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}}_1 = \underbrace{-\nabla p}_2 + \underbrace{\nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)]}_3 + \underbrace{\rho \mathbf{f}}_4 \quad (3.2)$$

L'équation (3.1) peut se résumer comme étant la conservation de la masse pour un fluide incompressible. Pour ce qui est des équations de Navier-Stokes (3.2), elles gouvernent le mouvement des fluides et peuvent être vues comme l'application de la deuxième loi de Newton pour les déplacements des fluides dans tout écoulement visqueux.

Les différents termes correspondent aux forces d'inerties (1), forces de pression (2), forces visqueuses (3) et les forces externes appliquées sur le fluide (4).

Il paraît important de rappeler que des solutions analytiques aux équations de Navier-Stokes n'ont été obtenues que sous certaines conditions bien précises. Usuellement, il est nécessaire de résoudre ces équations numériquement ou bien à l'aide de méthodes approximatives où certains termes sont omis ou modifiés.

Pour alléger l'équation (3.2), on utilise le tenseur de contraintes σ défini tel que :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mu(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T) \quad (3.3)$$

L'équation (3.2) devient :

$$\rho\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \rho\mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho\mathbf{f} \quad (3.4)$$

La résolution numérique des équations de Navier-Stokes se fait sur un domaine de calcul Ω . Ce domaine est délimité par des frontières Γ telles que le montre la figure 3.1. L'imposition de conditions limites sur ces frontières doit être faite soigneusement afin de bien résoudre le problème souhaité.

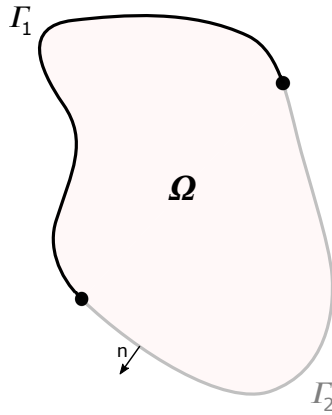


FIGURE 3.1 Schéma d'un domaine de calcul pour une résolution numérique

Conditions de Dirichlet :

$$\text{On impose : } \mathbf{u} = u_{Dirichlet} \quad \text{sur } \Gamma_D \quad (3.5)$$

Conditions de Neumann :

$$\frac{\partial u}{\partial \hat{\mathbf{n}}} = \mathbf{G} \quad \text{sur } \Gamma_N \quad (3.6)$$

Lors de l'imposition des conditions limites, il devient impératif de s'assurer que l'ensemble des conditions limites respectent la condition suivante :

$$\begin{cases} \Gamma_D \cup \Gamma_N = \Gamma \\ \Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset \end{cases} \quad (3.7)$$

3.2 Modèles mathématiques et méthodes numériques

Cette section expose de manière non exhaustive les principes qui sont au cœur de la résolution numérique par la méthode des éléments finis. Elle représente la base mathématique utilisée au cours de ces travaux. L'optique n'est pas celle d'instruire sur le vaste et complexe domaine des éléments finis, mais plutôt d'en faire un rappel et une brève introduction. On réfère tout lecteur intéressé par cette analyse aux livres de Zienkiewicz *et al.* [22] et T. J. Chung [23].

3.2.1 Méthode des éléments finis en mécanique des fluides

La description des lois physiques pour des problèmes spatio-temporels se traduit généralement de façon mathématique par des équations aux dérivées partielles (EDP). La plupart du temps, dues aux contraintes géométriques ou bien par la nature même du problème que l'on veut résoudre, ces équations ne peuvent être résolues analytiquement. Tel est le cas pour les équations de Navier-Stokes que nous avons présentées plus haut. Il faut donc faire recours à l'approximation de ces équations à l'aide de discrétisations. Ces discrétisations permettent d'approximer les EDP par des modèles numériques résolus à l'aide de méthodes numériques. En d'autres mots, la solution aux équations du modèle numérique est une approximation de la solution réelle des équations aux dérivées partielles (EDP). Ainsi, la méthode des éléments finis est l'une des méthodes permettant le calcul approximatif et qui se base sur deux principes élémentaires :

1. Discrétisation spatiale du domaine de calcul

La discrétisation du domaine de calcul permet de subdiviser le domaine Ω en une quantité finie de sous-domaines appelés éléments. L'approximation d'une fonction continue sur l'ensemble Ω sur chacun des éléments se fait à l'aide de fonctions polynomiales définies localement sur chacun de ces éléments afin de trouver la solution discrète associée au sous-domaine et non pas sur l'ensemble continu Figure (3.2).

2. Formulation variationnelle de l'EDP

La formulation variationnelle ou la forme faible du problème se base sur l'idée de trouver une solution qui vérifie l'EDP, non pas à chaque point, mais plutôt en sommant et pondérant les contributions de chaque sous-domaine (en moyennant) via l'intégrale.

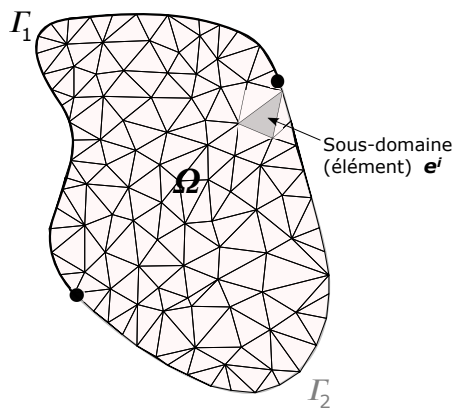


FIGURE 3.2 Discrétisation spatiale du domaine Ω

Approximation par éléments finis

L'idée réside sur l'obtention d'une solution approximative à une équation différentielle sujette aux conditions limites sur Γ de la forme :

$$-A\mathbf{u} - \mathbf{f} = 0 \quad \text{sur } \Omega \quad (3.8)$$

En introduisant une série de fonctions de base, l'approximation du champ continu \mathbf{u} peut s'écrire comme suit :

$$u_h = \sum u_i \Phi_i \quad (3.9)$$

où les u_i sont des constantes nodales (ou degrés de liberté) et Φ_i sont des fonctions linéairement indépendantes choisies de sorte que toutes les conditions limites soient vérifiées. L'équation (3.9) étant une approximation, elle fait en sorte que la substitution de (3.9) dans (3.8) ne satisfera pas exactement l'équation différentielle à résoudre. Ainsi, nous devons soulever la présence d'un résidu \mathcal{R} qui représente l'erreur associée à cette approximation.

Nous pouvons récrire cette approximation du champ \mathbf{u} après discrétisation du domaine afin de le définir sur chacun des éléments de discrétisation. Les fonctions Φ_i se construisent à partir des fonctions de forme N_j^e sur chacun des éléments.

On peut donc écrire l'approximation de la fonction \mathbf{u} sur un éléments e_i de Ω comme :

$$u(\mathbf{x}) \approx u_h(\mathbf{x}) = \sum_j^{n_u} N_j^e(\mathbf{x}) u_i^e \quad (3.10)$$

où N^e représente les fonctions d'interpolation liées au degré de liberté u_i prescrites en termes de variables indépendantes et n_u le nombre nodal disponible pour chaque degré de liberté sur un élément e^i . C'est en combinant cette approximation de u_i et en discrétisant la formulation variationnelle que nous obtiendrons le système d'équations par éléments finis à $N \times n_u$ inconnues que nous pourrons, par la suite, écrire sous la forme d'un système linéaire $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$.

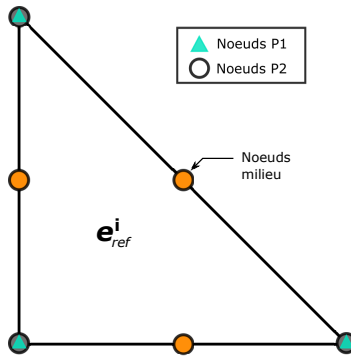


FIGURE 3.3 Élément de référence P2-P1

Une étape cruciale en éléments finis, est le choix des fonctions d'interpolation et leur ordre d'approximation. Dans le cadre général et pour la méthode utilisée dans ces travaux, les fonctions d'interpolation sont des polynômes de différents degrés. Ainsi, en utilisant une expansion polynomiale, la variation linéaire d'un degré de liberté (variable indépendante) dans un élément peut être exprimée par les données fournies aux noeuds sommet (en vert). Cependant, pour des variations quadratiques, il faut ajouter des noeuds milieu (en orange) comme le montre la Figure (3.3) pour un total de 6 noeuds par élément. Le nombre de noeuds utilisé pour une variable correspond ainsi au n_u que l'on trouve dans l'équation (3.10).

C'est à ces 6 noeuds que l'on évalue les vitesses U et V pour avoir une approximation polynomiale quadratique (P2) du champ de vitesse. La pression quand à elle ne sera évaluée qu'en premier ordre (P1) ce qui se traduit par l'utilisation des 3 noeuds sommet. Il devient important de préciser à ce moment que la variable de pseudo-concentration (ψ) sera elle aussi évaluée avec des fonctions d'interpolation quadratiques. Nous reviendrons sur ceci dans la prochaine section où l'on expose l'implémentation du modèle numérique qui est le moteur du présent mémoire. Pour un élément donné tel que celui de la Figure 3.3, si on s'intéresse aux variables U , V , ψ et P , on a un total de $3 \cdot 6 + 3 = 21$ inconnues.

Formulation faible et méthode de Galerkin

Les équations aux dérivées partielles telles que l'équation (3.4) représentent la formulation forte du problème que l'on cherche à résoudre dans un domaine bidimensionnel Ω , borné par des frontières Γ (Figure 3.1). Dans de nombreux cas, les phénomènes naturels qu'une EDP (formulation forte) entend modéliser sont mieux décrits sous forme discontinue et peuvent également contenir des termes sources sans valeur ponctuelle bien définie.

Dans ces situations, une formulation faible du problème s'avère être un meilleur modèle physique. En abaissant les critères de continuité pour la solution, la formulation faible est une forme plus apte pour la discrétisation et la résolution numérique par la méthode des éléments finis.

La méthodologie pour passer vers une formulation faible associée à un problème fort est la suivante :

- Pondérer le problème fort par un fonction test arbitraire
- Intégrer le tout sur le domaine de calcul Ω
- Faire appel au théorème de la divergence
- Appliquer les conditions aux bords

En faisant appel au théorème de la divergence et en intégrant par parties, les termes de bord, représentant les conditions limites, sont alors mis en évidence. L'idée de la formulation faible est donc de trouver une solution qui vérifie l'EDP, non pas à chaque point, mais plutôt "en moyenne" via l'intégrale sur Ω .

Si l'on applique la méthode décrite pour l'obtention de la formulation faible aux équations (3.1) et (3.4) avec ϕ_u et ϕ_p étant les fonctions test de la vitesse et de la pression respectivement, nous obtenons le problème faible suivant :

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \cdot \phi_p \, d\Omega = 0 \quad (3.11)$$

$$\int_{\Omega} \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \phi_u \, d\Omega + \int_{\Omega} \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) \cdot \phi_u \, d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \phi_u \, d\Omega = \int_{\Gamma} \left(\mu \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \hat{\mathbf{n}}} - p \hat{\mathbf{n}} \right) \cdot \phi_u \, d\Gamma \quad (3.12)$$

C'est sous cette formulation variationnelle que l'on vient substituer le champ continu de la variable indépendante par son approximation discrète exprimée sous la forme de l'équation (3.10). Il suffira maintenant d'appliquer la méthode de Galerkin pour être en mesure d'écrire le système matriciel par éléments finis pour ainsi résoudre le problème à l'aide des méthodes numériques comme celle de Newton-Raphson.

La méthode de Galerkin est une projection orthogonale des résidus \mathcal{R} vers une série de fonctions linéairement indépendantes. C'est en choisissant les fonctions tests identiques aux fonctions d'interpolation de l'élément (e^i) que nous adoptons la méthode de Galerkin pour les éléments finis.

Il est opportun de signaler que la discrétisation spatiale du domaine de calcul ressemble au schéma illustré par la Figure 3.2. Cette discrétisation se base sur la triangulation de Delaunay tel qu'aucun des sommets des triangles n'est à l'intérieur du cercle circonscrit d'un autre triangle quelconque. Ceci se traduit par des éléments de taille et forme très différentes. La construction des fonctions d'interpolation sur chacun des éléments du maillage, se fait sur un élément de référence e_{ref}^i (Fig. 3.3). Les calculs entre l'élément de référence vers un élément du domaine de calcul se ramènent à l'aide d'une transformation spatiale entre les coordonnées physiques $\mathbf{x} = [x, y]$ et les coordonnées de référence $\mathbf{r} = [r, s]$ [24].

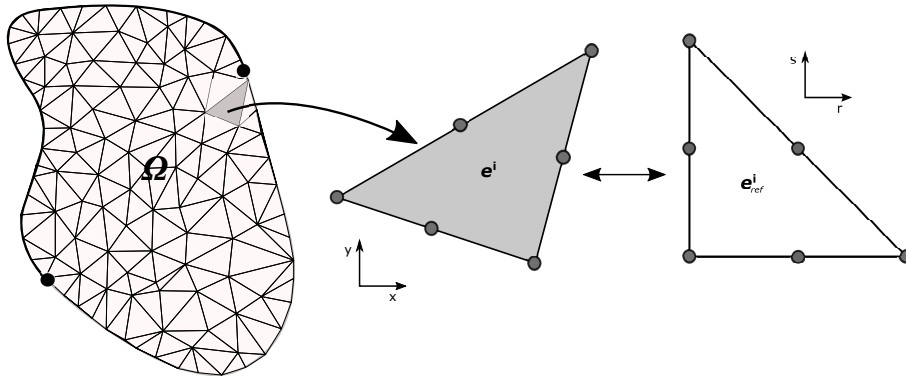


FIGURE 3.4 Élément de référence P2-P1

3.3 Assemblage et résolution du système matriciel (méthode de Newton)

Le solveur numérique `cadyf` est implémenté selon une formulation monolithique entièrement couplée sous forme d'un système d'équations linéarisées et sa résolution se fait à l'aide de la méthode itérative de Newton-Raphson. L'ensemble de ces équations forment le système matriciel de la forme $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ qui correspond à l'assemblage des systèmes d'équations relatifs à chaque élément.

Le calcul du système matriciel utilise la méthode du Jacobien numérique et la matrice jacobienne élémentaire, quant à elle, est construite à partir d'une perturbation du résidu élémentaire et à l'aide de la méthode des différences finies. Cette méthode permet la résolution de l'ensemble des équations couplées simultanément et fait de `cadyf` un solveur monolithique performant.

3.3.1 Résolution du système d'équations non linéaires

La méthode de Newton-Raphson est une des méthodes les plus populaires et la plus importante pour résoudre des équations ou des systèmes d'équations non linéaires. Cette méthode permet d'approximer les racines d'une fonction f par itération de la formule suivante :

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (3.13)$$

Mis simplement, $-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} = \delta_x$, devient la « correction » qui doit être ajoutée à l'estimation initiale afin de converger vers la racine de f . Cette itération se poursuit jusqu'à atteindre un seuil d'arrêt satisfaisant selon le contexte du problème.

Ce même principe est donc appliqué aux systèmes d'équations où x_n n'est plus un scalaire, mais un vecteur de la forme $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_k]^T$, l'estimation de la racine x_n de f devient le vecteur résidu \mathcal{R}_n contenant les résidus pour chaque inconnue de l'élément et où la dérivée $f'(x)$ devient la matrice Jacobienne de sorte que $\mathbf{J}_{\mathcal{R}_n} = \nabla \mathbf{F}$.

Afin d'assurer que le problème sous sa forme faible soit vérifié pour chaque élément, il suffit d'évaluer les résidus pour chaque inconnue de l'élément. Soit $\delta \mathbf{x}_n$ le vecteur perturbation de la solution, alors la méthode appliquée aux systèmes d'équations non linéaires, tel que pour cadyf se présente comme suit :

$$\begin{cases} \text{On résout :} & \mathbf{J}_{\mathcal{R}_n} \delta \mathbf{x}_n = -\mathcal{R}_n \\ \text{On pose :} & \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \delta \mathbf{x}_n \end{cases} \quad (3.14)$$

La méthode de Newton-Raphson est intéressante puisqu'en théorie, elle converge asymptotiquement de façon quadratique vers la solution. Cependant, cet ordre de convergence dépend d'une estimation initiale \mathbf{x}_0 qui soit suffisamment proche de la solution exacte \mathbf{x}^* et du fait que la matrice Jacobienne $\mathbf{J}_{\mathcal{R}_n}$ est inversible et calculée de manière exacte pour chaque itération.

Dans notre implémentation, on utilise la méthode de la matrice Jacobienne numérique, qui revient à poser, pour une itération n donnée :

$$\mathbf{J}_{\mathcal{R}_n}(ij) = \frac{\mathcal{R}_{ni}(\mathbf{x}_n + \delta x_{nj} \mathbf{e}_j) - \mathcal{R}_{ni}(\mathbf{x}_n)}{\delta x_{nj}} \quad (3.15)$$

avec δx_{nj} une perturbation de la composante j du vecteur de la solution courante et \mathcal{R}_i la composante i du vecteur résidu \mathcal{R}_n à l'itération courante [24].

3.4 Développement d'un algorithme pour la méthode de Pseudo-Concentration 2D en éléments finis

Cette section est dédiée à l'exposition et la description de la méthode développée dans ce travail. Nous exposons le développement fait au cours de ce travail afin d'obtenir un nouveau modèle numérique de pseudo-concentration par la méthode des éléments finis.

Tel qu'il a été mentionné dans l'introduction, nous travaillons sur un code source nommé CADYF, qui est un solveur monolithique en éléments finis développé en Fortran. Il résout ainsi toutes les variables indépendantes impliquées dans la simulation simultanément et sur le même système matriciel qui a déjà été présenté.

Fortran est un langage de programmation qui est particulièrement adapté au calcul numérique et au calcul scientifique. Il est populaire pour le calcul à haute performance et il est utilisé pour les programmes qui évaluent et classent les superordinateurs les plus rapides au monde. De plus, il bénéficie de plusieurs décénies dans des domaines de forte intensité de calcul, d'où son utilisation.

3.4.1 Présentation de la méthode de Pseudo-Concentration (PCM)

Avant de présenter le développement entamé, nous présentons ici l'idée de base derrière cet algorithme formant la méthode de pseudo-concentration (PCM). L'idée réside sur l'utilisation des concentrations pour suivre le mouvement d'une interface entre deux fluides non miscibles. Les concentrations sont supposées n'être transportées que par convection et servent de marqueurs de phase [25].

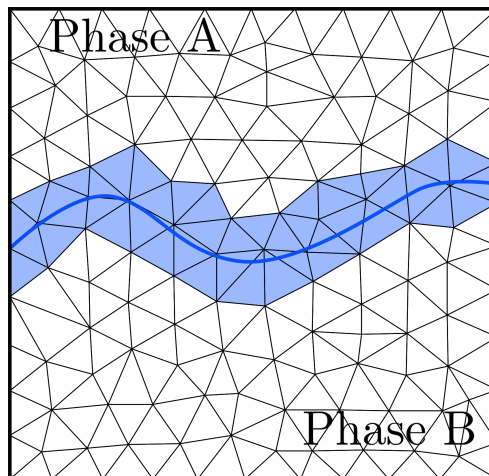


FIGURE 3.5 Schéma d'un domaine de calcul pour une résolution numérique

Cette méthode se base sur un principe simple et peut-être résumée comme suit :

1. Construction de la fonction de Pseudo-Concentration

La méthode de pseudo-concentration est une méthode purement Eulérienne, elle se base sur le principe *interface capturing* que nous avons décrit de manière explicite dans le Chapitre 2. Cette méthode identifie l'interface à l'aide de marqueurs. Ces marqueurs se traduisent numériquement par un champ scalaire qui attribue une valeur spécifique à chaque point de l'espace afin de bien identifier chacun des fluides.

Cette fonction se traduit par la génération d'un champ scalaire qui doit être construit et initialisé afin de bien générer le problème à résoudre

2. Assemblage matriciel

Une fois l'implémentation du champ scalaire du marqueur établie, nous devons associer ce marqueur aux noeuds des éléments afin de pouvoir construire le système matriciel en éléments finis. Ainsi, un ajout vectoriel dans la matrice de résolution doit être mis en place et doit contenir les couplages nécessaires afin de respecter les corrélations entre le champ scalaire et les variables indépendantes qui sont aussi résolues de manière simultanée dans ce même système.

3. Couplage et résolution de l'équation de transport

Pour mettre le modèle de PCM en place, il est nécessaire que le couplage entre le champ de vitesse et la variation dans le temps soit bien établi numériquement. Cette corrélation se fait à l'aide des résidus dans le système matriciel pour résoudre l'équation de transport qui décrit l'interface dans le modèle.

3.4.2 Modèle mathématique de l'écoulement

Comme il a été décrit plus haut, le mouvement de substances fluides visqueuses est gouverné par les équations de Navier-Stokes. Ces équations ont été présentées précédemment par l'équation (3.4) décrite dans un référentiel Eulérien.

La méthode de pseudo-concentration (PCM) qui a été développée lors de ces travaux est une méthode pour les écoulements diphasiques à interface mobile en utilisant l'approche eulérienne et l'idée de capture d'interface. La fonction de pseudo-concentration $\varphi(\mathbf{x}, t)$ est un champ scalaire qui sert de marqueur en identifiant chacune des phases auxquelles on assigne une isoligne qui identifie l'interface entre les fluides A et B avec des masses volumiques ρ_A et ρ_B et des viscosités μ_A et μ_B .

Dans ce contexte, la masse volumique et la viscosité sont définies respectivement en tant que :

$$\rho = \varphi\rho_A + (1 - \varphi)\rho_B \quad (3.16)$$

$$\mu = \varphi\mu_A + (1 - \varphi)\mu_B \quad (3.17)$$

tel que $\varphi = 1$ pour le fluide A et $\varphi = 0$ pour le fluide B.

Avant d'aller plus loin et afin de mieux illustrer le champ scalaire et son rôle dans cette méthode numérique, prenons l'exemple d'un piston et analysons le champ scalaire qui lui serait associé lors de sa modélisation.

Considérons une colonne divisée en trois parties contenant deux fluides gazeux séparés par une couche liquide avec leurs interfaces respectives entre chacun de ces fluides. Pour faire simple, nous considérons qu'un seul type de gaz pour la partie supérieure et inférieure et de l'eau pour la couche du milieu qui les sépare en agissant en tant que piston comme présenté sur la Figure 3.6

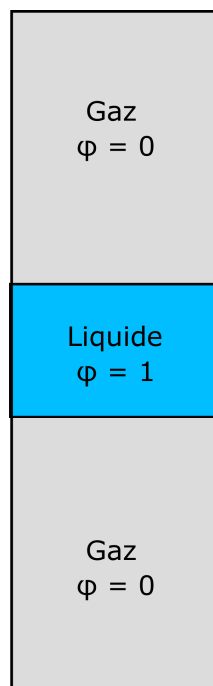


FIGURE 3.6 Schéma de la modélisation

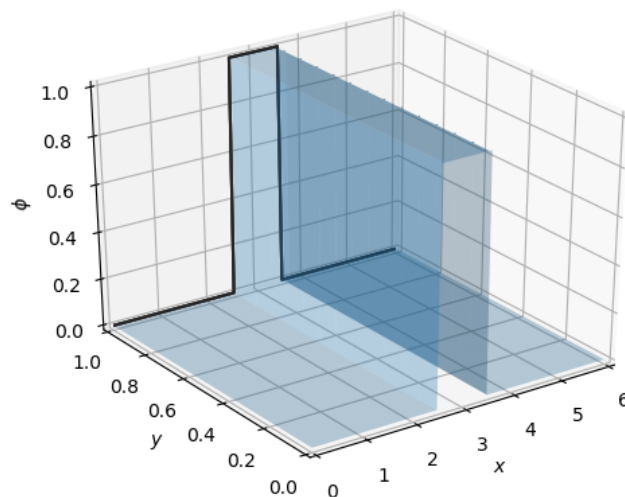


FIGURE 3.7 Champ scalaire abrupt

La Figure 3.7 correspond à la représentation graphique du champ scalaire qui traduit l'exemple

du piston décrit plus haut. Ce champ scalaire représente la fonction de pseudo-concentration utilisée dans ce modèle et qui devra être modifiée à chaque pas de temps afin de connaître l'évolution spatio-temporelle des fluides et leurs interfaces. Le champ $\varphi(\vec{\mathbf{x}}, t)$ est donc entièrement indépendant du reste des variables, pourtant son évolution est cruciale à la modélisation d'un écoulement diphasique.

Un autre aspect important présenté dans la Figure 3.7 est le front abrupt que représente le passage d'un fluide à un autre. Ce front du champ scalaire représente l'interface entre les fluides dans la simulation. Nous analyserons l'importance et l'impact de ce changement drastique plus loin dans la section.

L'évolution de l'interface est régie par une équation de transport qui se réduit à advecter le champ scalaire $\varphi(\vec{\mathbf{x}}, t)$ en fonction du temps. Nous pouvons résumer l'advection comme le transport d'une quantité (scalaire ou vectorielle) par le mouvement du milieu environnant.

L'équation d'advection est une EDP qui régit le mouvement d'un champ scalaire en temps et en espace lorsque ce dernier est advecté par un champ vectoriel de vitesse. Cette équation découle de la loi de la conservation du champ scalaire advecté et du théorème de Gauss. C'est sur ce principe que le modèle de PCM se base.

En advectant le champ marqueur $\varphi(\mathbf{x}, t)$ à chaque pas de temps avec la dynamique du fluide dans le domaine de calcul, notre modèle connaît la nouvelle position de l'interface entre les fluides ainsi que la position des fluides eux-mêmes et leurs propriétés physiques.

Soumis à un champ de vitesse $\mathbf{u} = (u, v)$ l'équation de transport à résoudre pour $\varphi(\vec{\mathbf{x}}, t)$ est l'EDP homogène suivante :

$$\frac{\partial \varphi(\vec{\mathbf{x}}, t)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi(\vec{\mathbf{x}}, t) = 0 \quad (3.18)$$

Il est bien connu que les EDP à advection dominante comme l'équation (3.21) présentent de sérieuses difficultés numériques dues aux fronts abrupts mobiles présents dans les solutions des EDP de transport ou bien aux discontinuités de choc dans les solutions associées aux EDP d'advection pure comme le montre la Figure 3.8.

D'autres difficultés supplémentaires incluent les couplages forts (un concept important dans les problèmes multiphysiques instationnaires), les non-linéarités des systèmes d'EDP dominés par l'advection, l'effet des singularités aux sources et aux puits ponctuels, ainsi que la diffusion-dispersion anisotrope sous forme tensorielle.

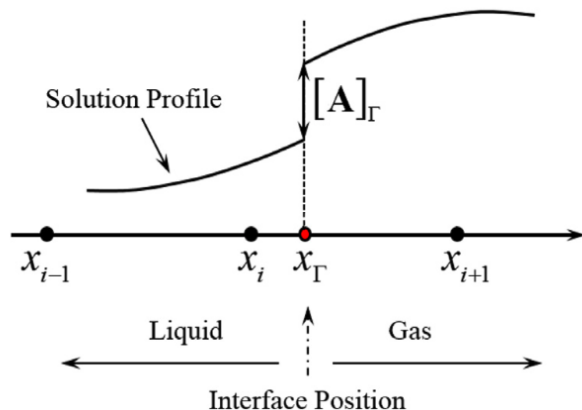


FIGURE 3.8 Illustration d'une variable A qui présente une discontinuité sur l'interface. (Tiré de *K. Luo et al.*, [4])

Ces instabilités numériques issues directement du champ scalaire $\varphi(\vec{x}, t)$ doivent être prises en compte dans le modèle et dans la mesure du possible être éliminées ou du moins minimisées. Dans les prochaines parties, on présente les approches qui ont été élaborées et mises en place dans cet algorithme numérique afin de pallier et minimiser ces instabilités numériques.

3.4.3 Stabilisation par accroissement de régularité (assouplissement de front)

Bien qu'il existe plusieurs solutions en analyse numérique pour compenser les difficultés qu'éprouve un modèle lors de l'advection d'un front abrupt, le lissage du front reste une solution simple et efficace lorsque ceci est envisageable. Les solutions numériques sont performantes, mais elles sont exhaustives et sont utilisées si aucune alternative ne peut être mise en place afin d'assouplir le front en question.

Heureusement, l'assouplissement du front est une option qui peut être adoptée. Il est évident qu'en adoptant cette approche, nous introduisons des approximations supplémentaires au modèle qui se traduisent généralement par une perte de la précision. À cet effet, d'autres techniques devront être intégrées dans notre modèle afin de compenser les erreurs introduites par l'assouplissement du front du champ marqueur $\varphi(\vec{x}, t)$. Nous expliquerons ces techniques en détail dans les sections suivantes.

Un des critères les plus importants que doit remplir la fonction de pseudo-concentration est son rôle de marqueur pour l'identification entre les fluides. Cette dissociation implique l'identification de l'interface, qui est pilotée par le choix d'une isoligne à laquelle on lui associe la position de l'interface. C'est donc en choisissant une isoligne appropriée que nous pouvons nous permettre l'assouplissement du front entre les phases.

Si l'on revient à l'exemple du piston introduit plus haut, en appliquant ce concept de lissage de front, la transition entre les valeurs de $\varphi = 0$ vers $\varphi = 1$ se fait de façon plus continue et moins abrupte comme le montre la Figure 3.9 ce qui diminue les instabilités pour l'advection du champ.

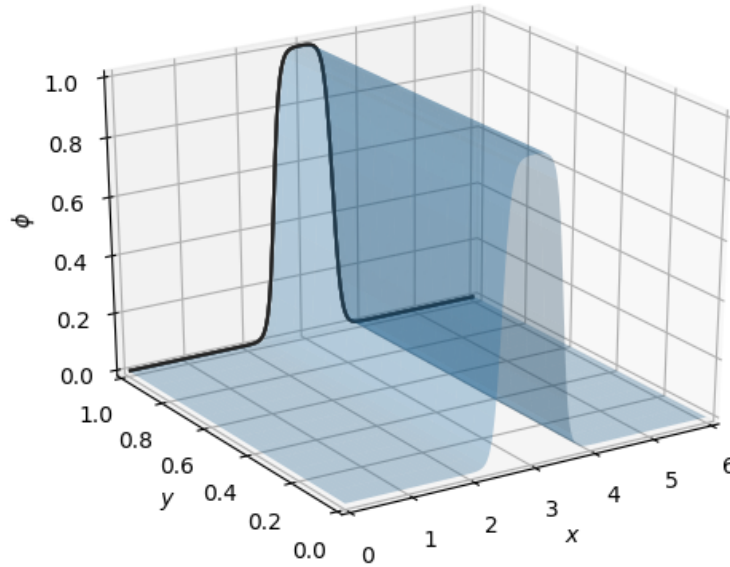


FIGURE 3.9 Champ scalaire $\varphi(\mathbf{x}, t)$ assoupli

L'assouplissement du front se fait tout simplement par le moyen d'une fonction quelconque qui permet une transition continue entre les différentes phases présentes dans notre problème. À titre d'exemple, nous pouvons songer à la fonction $\sin(cx)$ où c est un coefficient contrôlant la pente de transition et ainsi l'assouplissement voulu. Plusieurs fonctions peuvent être utiles pour l'assouplissement, par simplicité nous choisissons la fonction sin dans nos travaux sachant que cette dernière peut être modifiée selon la nature du cas étudié. On définit le champ $\varphi(\vec{\mathbf{x}}, t)$ tel que :

$$\varphi(\vec{\mathbf{x}}, t) = \begin{cases} 1, & \text{Phase 1 || Fluide 1} \\ \sin(cx), & \text{Interface} \\ 0, & \text{Phase 2 || Fluide 2} \end{cases} \quad (3.19)$$

Bien que cette technique aide à la résolution numérique de l'équation (3.21), elle introduit quelques problèmes dans le modèle tel que l'élargissement de l'épaisseur virtuelle de l'interface δ comme le montre la Figure 3.10. Sur cette figure, il est aussi possible d'apprécier l'effet de l'assouplissement, le front assoupli élimine la discontinuité qui nuit à l'algorithme numérique pour son advection.

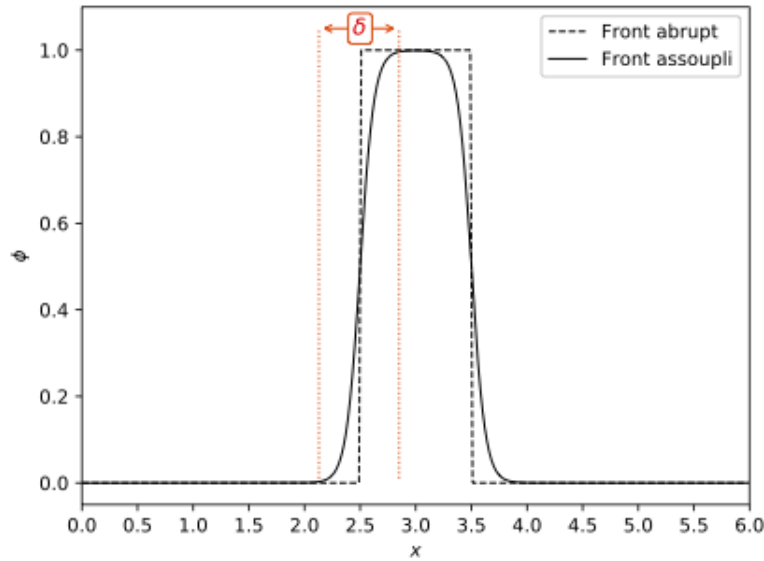


FIGURE 3.10 Projection des fronts $\varphi(\mathbf{x}, t)$ sur le plan $[x, \varphi]$ pour le cas piston

L'élargissement de l'interface sur δ implique une diffusion de cette dernière imposée dès le début de la modélisation ce qui entraîne des désavantages dans le modèle PCM.

Les techniques exposées dans les prochaines sections expliquent quelques astuces qui nous permettent de contrer ce désavantage tout en améliorant le modèle numérique.

3.4.4 Stabilisation par transformation

Pour atténuer les instabilités comme la diffusion et la dispersion numérique dans la résolution de l'équation de transport de notre modèle PCM, nous utilisons une fonction de transformation $\varphi \mapsto F(\varphi)$. Cette transformation permet un redressement de la variable advectée et agit en tant que filtre stabilisateur.

L'idée consiste à reconstruire le champ scalaire $\varphi(\mathbf{x}, t)$ à chaque pas de temps et de l'utiliser pour le calcul des propriétés physiques décrites par les équations (3.16) et (3.17) afin d'éliminer les oscillations qui se présentent naturellement lorsqu'on résout numériquement l'équation d'advection (3.21) de plus, la diffusion numérique qui en découle sera filtrée et par conséquent atténuée.

Comme mentionné dans le chapitre 2, le choix de la fonction de pseudo-concentration est l'un des défis les plus critiques dans le développement d'une méthode PCM. Après tout, c'est cette fonction qui pilote l'écoulement diphasique et qui lui donne un sens physique. Pour que

cette fonction soit appropriée, elle doit vérifier trois critères :

- Conservative
- Sans oscillations parasites
- Épaisseur d'interface δ constante

L'utilisation de la tangente hyperbolique permet de répondre aux critères mentionnés plus haut tout en gardant les propriétés nécessaires de la fonction marqueur pour notre modèle. Ainsi, le champ scalaire utilisé pour le calcul des variables physiques calculé à chaque pas de temps devient :

$$\mathcal{F}(\varphi(\vec{x}, t)) = \psi(\vec{x}, t) = \frac{\tanh \left[\lambda \cdot \varphi(\vec{x}, t) \right] + 1}{2} \quad (3.20)$$

L'un des aspects les plus intéressants pour nous lors de l'implémentation de cette astuce est le fait que la nouvelle fonction $F(\varphi(\vec{x}, t))$ borne la variable ψ à être comprise entre 0 et 1. Nous pouvons l'apprécier graphiquement dans la Figure 3.11. Ceci est d'une importance cruciale pour notre modèle étant donné que nous nous basons sur l'approche de fraction volumique. Par conséquent, pour n'importe quelle valeur de φ dans \mathbb{R} nous avons $\psi(\vec{x}, t) \in [0, 1]$.

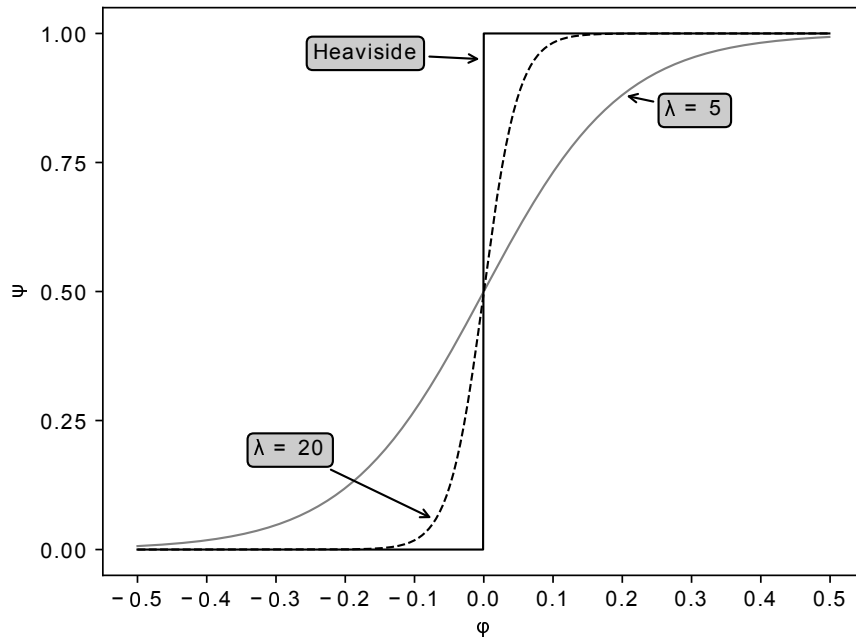


FIGURE 3.11 Schéma d'un domaine de calcul pour une résolution numérique

Cette reformulation permet de construire la corrélation entre la fonction d'ensemble de niveaux et la fonction tangente hyperbolique. Plutôt que de définir l'interface par l'isosurface

$\varphi = 0$, elle est maintenant définie par l'emplacement de l'isosurface $\psi = 0.5$. Un autre avantage est le fait de pouvoir contrôler la pente à la position de l'interface à l'aide de la constante λ comme le montre la Figure 3.11.

En implémentant cette astuce, on corrige tout surpassement de la variable φ qui pourrait parvenir d'une instabilité numérique et assure une stabilité globale du champ scalaire sur tout le domaine de calcul. De plus, elle donne un contrôle sur l'épaisseur de l'interface, chose qui devient avantageuse surtout après avoir utilisé la technique de l'assouplissement du front que l'on a expliquée plus haut.

Finalement, en employant la dérivation en chaîne et par le fait même que l'équation (3.21) est une EDP hyperbolique homogène, il est donc facile de démontrer mathématiquement que l'advection du champ $\varphi(\mathbf{x}, t)$ est équivalente à l'advection du champ $F(\varphi(\mathbf{x}, t))$ ce qui réduit drastiquement les modifications au développement préalablement fait pour le champ $\varphi(\mathbf{x}, t)$.

Nous pouvons ainsi écrire la relation suivante, en se rappelant que nous utilisons l'advection sur le champ scalaire $\varphi(\vec{\mathbf{x}}, t)$ dans le code source :

$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \equiv \quad \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (3.21)$$

L'utilisation de cette fonction de transformation ne nécessite pas de développement majeur autre que le calcul du champ $\psi(\mathbf{x}, t)$ à chaque pas de temps. Cependant, les avantages surpassent le développement nécessaire et c'est sur cette technique que repose l'ensemble du modèle construit dans ce travail.

Dans cette dernière section, nous exposons une dernière technique de stabilisation numérique qui fait partie intégrante du modèle et du code de calcul `cadyf` en assurant le bon fonctionnement du calcul numérique en éléments finis.

3.4.5 Stabilisation numérique

Les écoulements de convection sont particulièrement difficiles à résoudre avec les techniques de Galerkin standards. L'équation de transport pour le champ φ est, quant à elle, une équation d'advection pure et elle est sujette aux mêmes difficultés à moins d'utiliser des mailles d'une extrême finesse.

Malgré ses avantages innés, la méthode de pseudo-concentration admet une légère perte de masse sur l'ensemble du domaine qui est non physique et liée directement à la modélisation numérique. Tout d'abord, la discrétisation de l'équation peut conduire à une dissipation numérique importante qui se manifeste généralement par une perte de masse dans les zones de forte courbure ou d'autres régions sous-résolues.

La présence de ratios élevés de masse volumique (ou viscosité) entre les fluides d'une simulation est une source prédominante d'oscillations numériques à l'interface [16]. À cet effet, une étude exhaustive a été menée par Wang et al., 2019 [26] sur l'effet de grands ratios de densité et/ou viscosité dans des écoulements diphasique à haut Reynolds simulés à l'aide de méthodes de champs de phase, très similaires au modèle développé dans ce travail.

Pour atténuer ces instabilités, nous proposons l'utilisation d'une stabilisation par le calcul moyen du champ scalaire φ . Ceci afin de lisser les propriétés physiques sur les éléments afin d'atténuer le changement abrupt de ces propriétés lors d'un changement de phase sur un seul élément. Ainsi, les travaux de A. Kačeniauskas [27] sur la simulation en pseudo-concentration proposent l'implémentation du calcul moyen du champ φ de l'équation (3.16) en considérant la masse volumique comme constante sur une aire élémentaire (A_e) de sorte que :

$$\varphi_{stable}(\mathbf{x}, t) = \frac{\sum_{i=1}^n G_i \varphi_i}{A_e} \quad (3.22)$$

où n est le nombre de point de Gauss, G_i les coefficients de Gauss, et φ_i les valeurs de φ au points de Gauss de l'élément.

Nous reviendrons sur cet aspect lors de l'analyse des résultats réalisée au chapitre 4, plus précisément lors de simulations d'une vague déferlante où ces instabilités deviennent évidentes.

Dans notre modèle, le problème a été résolu en calculant soigneusement les valeurs de la masse volumique dans une zone d'éléments finis. La masse volumique est considérée comme constante dans l'élément et les valeurs dans la formule ont été moyennés.

Équation de Cahn-Hilliard et couplage Cahn-Hilliard Navier-Stokes

L'équation de Cahn-Hilliard développée par Cahn et Hilliard en 1958 [28], est une équation mathématique qui décrit le processus de séparation de phases, par lequel les deux composants d'un fluide se séparent spontanément et forment des domaines purs de chaque composant.

En posant c comme étant la concentration du fluide, et avec $c = \pm 1$ indiquant chacun des domaines, alors l'équation s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D\nabla^2(c^3 - c - \gamma\nabla^2c) = 0 \quad (3.23)$$

où D est le coefficient de diffusion et le terme $(c^3 - c - \gamma\nabla^2c)$ est connu sous le nom de potentiel chimique qui est directement lié à la physique de séparation de phases.

Cette équation trouve diverses applications dans plusieurs domaines tels que dans les fluides et les phases de matériaux (écoulements de fluides interfaciaux, science des polymères). De plus, la solution de l'équation (3.23) pour un mélange binaire coïncide avec la résolution du « *Problème de Stefan* ».

Finalement, l'un des intérêts d'actualité parmi les chercheurs, est le couplage de l'équation de séparation de phase de Cahn-Hilliard avec les équations de Navier-Stokes aussi connu sous le nom du système Cahn-Hilliard Navier-Stokes (CHNS) pour la résolution d'écoulements polyphasiques ou à surfaces libres. Les travaux de Kühn et al. sont un exemple concret des bénéfices du système CHNS et tout lecteur intéressé est référé à leurs travaux sur la simulation d'écoulements diphasiques maritimes [29].

Le cadre Cahn-Hilliard est souvent utilisé pour décrire les processus de séparation de phases le long d'interfaces diffuses, cependant la région de transition de phase se situe généralement en dessous de la résolution du maillage. Par conséquent, ces conditions ressemblent de près à celles trouvées à la limite de l'interface entre les phases d'où l'intérêt du couplage CHNS.

C'est pour cette même raison que cette équation est importante dans le développement de notre modèle. Bien que le temps alloué au développement du modèle présenté dans ce travail n'a pas permis d'exploiter les avantages de cette équation, il est important de mentionner qu'il s'agit d'une voie intéressante pour les travaux futurs de ce modèle de pseudo-concentration d'éléments finis.

L'un des avantages attendus lors de son implémentation est celui de stabiliser la diffusion de l'interface qui est présentement très sensible au maillage autour de l'interface entre les différentes phases qui se traduit par un changement abrupt du champ scalaire $\varphi(\vec{x}, t)$.

3.5 Développement pour les écoulements compressibles

De façon générale, les écoulements diphasiques sont des écoulements compressibles. Ce type d'écoulement diffère des écoulements incompressibles que nous avons traités jusqu'à présent par l'addition des variations thermodynamiques issues des transferts énergétiques à l'intérieur des écoulements. En général, ces changements ont une influence importante sur la masse volumique du fluide.

Dans ce travail, nous traitons la compressibilité selon le modèle des gaz parfaits et les équations de continuité, Navier-Stokes et l'ajout de l'équation d'énergie deviennent comme suit :

$$-\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \mathbf{u} \cdot \left[\frac{\partial \rho}{\partial p} \nabla p + \frac{\partial \rho}{\partial T} \nabla T \right] \quad (3.24)$$

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - \frac{2}{3} \mu \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u} \right] + \mathbf{f} \quad (3.25)$$

$$\rho c_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \mathbf{u} \cdot \nabla p + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \tau + q_s \quad (3.26)$$

avec \mathbf{f} la force de flottabilité sous la forme de Boussinesq.

L'équation (3.24) représente l'équation d'état qui est nécessaire pour faire la liaison thermodynamique qui existe entre la masse volumique, la pression et la température. Le symbole τ représente la dissipation visqueuse :

$$\tau = \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) : \nabla \mathbf{u} \quad (3.27)$$

Le dernier terme de droite de l'équation (3.26), q_s , correspond aux sources de chaleur présentes (ou pas) lors de l'implémentation du problème à résoudre. Il est important de signaler que la dissipation visqueuse τ n'est pas encore implémentée dans la version courante de **CADYF** [30].

Dans le présent travail, nous considérons l'équation d'état pour un gaz parfait, où R est la constante thermodynamique du gaz selon :

$$\rho = \frac{p}{RT} \quad (3.28)$$

En introduisant les variables thermodynamiques de compressibilité isotherme α et le coefficient d'expansion volumique β telles que :

$$\alpha = \frac{1}{\rho} \left. \frac{\partial \rho}{\partial p} \right|_T \quad (3.29)$$

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_p \quad (3.30)$$

les variables p et T peuvent être décrites selon deux composantes. Soit un état de référence noté p_{ref} et T_{ref} pour la pression et la température respectivement suivi d'un terme variable qui correspond aux variables de calcul lors de la simulation notées p^* et T^* de sorte que :

$$p = p_{ref} + p^* \quad (3.31)$$

$$T = T_{ref} + T^* \quad (3.32)$$

La décomposition des variables p et T peut s'étendre donc aux variables thermodynamiques α et β pour avoir les variables thermodynamiques à l'état de référence α_{ref} et β_{ref} qui découlent directement de p_{ref} et T_{ref} :

$$\alpha_{ref} = \frac{1}{p_{ref}} \quad (3.33)$$

$$\beta_{ref} = \frac{1}{T_{ref}} \quad (3.34)$$

Finalement, les coefficients de compressibilité et de dilatation volumique peuvent être exprimés en fonction des variables de calcul et de l'état thermodynamique de référence de la façon suivante :

$$\alpha = \frac{\alpha_{ref}}{\alpha_{ref}p^* + 1} \quad (3.35)$$

$$\beta = \frac{\beta_{ref}}{\beta_{ref}T^* + 1} \quad (3.36)$$

Après ces manipulations, le système d'équations décrit par les équations (3.24 - 3.26) pour les écoulements compressibles pour un gaz parfait s'écrit de la façon suivante :

$$-\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\alpha_{ref}}{\alpha_{ref}p^* + 1} \mathbf{u} \cdot \nabla p^* - \frac{\beta_{ref}}{\beta_{ref}T^* + 1} \mathbf{u} \cdot \nabla T^* \quad (3.37)$$

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p^* + \nabla \cdot \left[\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - \frac{2}{3} \mu \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u} \right] + \mathbf{f} \quad (3.38)$$

$$\rho c_p \mathbf{u} \cdot \nabla T^* = \mathbf{u} \cdot \nabla p^* + \nabla \cdot (\lambda \nabla T^*) + \tau + q_s \quad (3.39)$$

avec :

$$\rho = \rho_{ref} \frac{(\alpha_{ref}p^* + 1)}{(\beta_{ref}T^* + 1)} \quad (3.40)$$

L'implémentation dans notre modèle de pseudo-concentration nous oblige à définir les variables thermodynamiques α et β en fonction du champ scalaire φ et d'un état de référence pour chacune des phases présentes dans le problème d'écoulement compressible que l'on souhaite résoudre à l'aide du modèle de pseudo-concentration. Ainsi, nous devons rajouter le système d'équations suivant pour l'intégration de la compressibilité dans notre modèle.

En faisant référence à la fonction de transformation $\mathcal{F}(\varphi(\vec{\mathbf{x}}, t))$ de l'équation (3.20) nous avons le système additionnel suivant :

$$\alpha \equiv \alpha_{PS} = \mathcal{F}(\varphi(\vec{\mathbf{x}}, t))\alpha_1 + (1 - \mathcal{F}(\varphi(\vec{\mathbf{x}}, t)))\alpha_2 \quad (3.41)$$

$$\beta \equiv \beta_{PS} = \mathcal{F}(\varphi(\vec{\mathbf{x}}, t))\beta_1 + (1 - \mathcal{F}(\varphi(\vec{\mathbf{x}}, t)))\beta_2 \quad (3.42)$$

$$\rho_{1C} = \rho_1 \frac{\alpha_{PS} p^* + 1}{\beta_{PS} T^* + 1} \quad (3.43)$$

$$\rho_{2C} = \rho_2 \frac{\alpha_{PS} p^* + 1}{\beta_{PS} T^* + 1} \quad (3.44)$$

$$\rho = \rho_{2C} + \mathcal{F}(\varphi(\mathbf{x}, t))(\rho_{1C} - \rho_{2C}) \quad (3.45)$$

Bien que l'implémentation pour les écoulements compressibles avec la méthode de pseudo-concentration ait été implémentée dans le présent travail, pour des questions de temps, nous nous sommes limités à son implémentation sur le code source. À cet effet, aucune vérification ou analyse de résultats exhaustive a été réalisée.

Afin d'utiliser la fonctionnalité compressible de ce modèle dans des travaux futurs, une analyse et vérification de résultats en compressible devra être entamée afin de s'assurer que l'implémentation dans le code soit correcte et corrigée si jugé nécessaire.

3.6 Adaptation de la discrétisation spatiale

Toute simulation numérique par éléments finis est amorcée par la discrétisation spatiale du domaine de calcul. Cette discrétisation a un impact direct sur la modélisation, la résolution et par conséquent le résultat qui en découle. L'importance de cette étape va sans dire pour tout calcul computationnel et son exécution devrait être faite minutieusement afin d'aider le solveur numérique à atteindre le même résultat avec un effort de calcul moindre. Bien qu'un maillage quelconque puisse théoriquement suffire, l'utilisation d'une discrétisation raffinée et en harmonie avec le problème que l'on veut résoudre est généralement nécessaire dans certains cas et peut aider à (1) atteindre une meilleure précision dans le résultat numérique, (2) diminuer le temps de calcul en optimisant le nombre d'éléments et (3) atténuer les instabilités numériques. Malgré son importance, la discrétisation du domaine est souvent laissée libre à l'utilisateur et se base intégralement sur son expertise et sa compréhension ou selon des prédictions *a priori* du problème à résoudre. Cette harmonie entre la discrétisation spatiale et le problème numérique à résoudre se manifeste de deux façons. Notamment, il est désiré d'avoir un raffinement ou grande densité d'éléments dans les régions qui présentent de grandes altérations tandis qu'il devient avantageux de réduire cette densité dans les régions plus "monotones" afin de réduire considérablement le coût de calcul.

L'estimation d'erreur entre les solutions obtenues en éléments finis et l'analyse adaptative qui en découle, où la discrétisation spatiale est successivement raffinée pour atteindre des seuils de précision prédéterminés, sont essentiels à l'utilisation optimale des codes d'éléments finis que ce soit pour l'analyse pratique, l'ingénierie ou la recherche. Munir un code d'éléments finis d'un tel algorithme automatisé d'adaptation de maillage en fonction de l'écoulement et de façon dynamique s'adaptant aux régions nécessitant une résolution plus détaillée lui donnerait un avantage supérieur. Ceci est l'une des particularités du code source `cadyf` et l'une des raisons pour lesquelles ce solveur se trouve à la fine pointe du développement numérique avancé. Même à ce jour, presque aucun code commercial disponible n'inclut un module de prévision/estimation d'erreur ou d'adaptativité.

Cette section présente brièvement les concepts de base avec lesquels ce module a été développé et présentera les ajouts faits afin d'avoir une adaptation de maillage en fonction du nouveau degré de liberté qui a été développé dans ces travaux et qui est nécessaire pour une adaptation de maillage dans le modèle PCM implémenté. Le processus adaptatif est basé sur un estimateur de la norme de l'erreur sur l'ensemble du domaine Ω inspiré du travail fait par Zienkiewicz et Zhu. L'objectif étant de présenter la méthode, nous nous abstenons des détails et invitons tout lecteur intéressé à s'adresser aux travaux de Zienkiewicz et Zhu [31] pour la méthode et Vautrin [1] et Muller [24] pour son implémentation dans le code source.

3.6.1 Estimateur d'erreur et normes

Avant même de commencer cette section, il est important de signaler que l'estimation de l'erreur suggérée par Zienkiewicz et Zhu, bien qu'elle soit suffisamment précise, d'autant plus pour notre application n'est pas la méthode la plus sophistiquée qui existe dans la littérature, notamment lorsqu'on s'intéresse à des problèmes de faible régularité. Cependant, son évaluation est si simple qu'elle peut facilement être intégrée dans des codes d'éléments finis déjà existants sans exiger de développements supplémentaires exhaustifs [32].

Estimateur d'erreur

La solution trouvée de façon approximative au moyen d'une simulation numérique Λ_h diffère de la solution exacte Λ par l'erreur e_Λ commise lors du calcul numérique de façon que :

$$e_\Lambda = \Lambda - \Lambda_h \quad (3.46)$$

où Λ représente une quantité quelconque issue de la simulation (champs de vitesse, pression, la température ou même le champ scalaire du marqueur PCM)

En faisant référence à ce qui a été discuté au tout début du présent chapitre, il existe certains cas pour lesquels la solution exacte u ne peut pas être tirée analytiquement ou bien n'est tout simplement pas connue. Il est donc nécessaire d'utiliser une estimation de u qui soit plus précise que u_h afin de pouvoir estimer l'erreur.

Comme stipulé par l'équation (3.47), nous désignons les fonctions de base utilisées pour approximer les degrés de liberté par M en supposant qu'elles ont été obtenues à partir de fonctions de forme élémentaires de degré polynomial $p = 2$. Ainsi, la méthode de projection pour l'estimation de l'erreur propose de désigner des fonctions de base M_i sur lesquelles la projection sera effectuée. Ces fonctions forment une base polynomiale construite à partir de fonctions de forme élémentaires de degré polynomial $q \geq p$. Pour ces travaux, le degré q a été fixé à $q = 3$ [1]. Le calcul de u^* correspondant à une solution globalement plus précise et continue selon la méthode de Zienkiewicz et Zhu se base sur une projection caractérisée par :

$$\Lambda^* = \sum_{i=1}^m M_i \Lambda_i \quad (3.47)$$

où les coefficients sont obtenus en imposant :

$$\int_{\Omega} (\Lambda^* - \Lambda_h)^T M_i \, d\epsilon_i = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (3.48)$$

Cette méthode aussi connue sous le nom de reconstruction des gradients consiste à créer une reconstruction de Λ_h en se basant sur l'ensemble des éléments voisins au sommet considéré.

C'est donc à l'aide de cette méthode que le calcul de Λ^* permet l'estimation de la valeur de l'erreur de la façon suivante :

$$e \approx e_h = (\Lambda^* - \Lambda_h) \quad (3.49)$$

Normes

Une mesure directe pour l'erreur est la norme L_2 qui peut être associée à n'importe quelle quantité calculée par simulation. Ainsi, nous avons la norme L_2 de l'erreur qui est calculée de la façon suivante pour une quantité scalaire ou vectorielle respectivement :

$$\|e_h\|_{\Omega} = \left(\int_{\Omega} (\Lambda^* - \Lambda_h)^2 d\Omega \right)^{1/2} \quad (3.50)$$

$$\|e_h\|_{\Omega} = \left(\int_{\Omega} (\Lambda^* - \Lambda_h) \cdot (\Lambda^* - \Lambda_h) d\Omega \right)^{1/2} \quad (3.51)$$

Ces normes sont définies pour l'ensemble du domaine Ω , et peuvent être calculées en utilisant les principes des éléments finis et plusieurs méthodes basiques de l'analyse numérique. L'une d'entre elles, est celle qui a été implémentée sur le code source est par quadrature de Gauss-Legendre. Il est à noter que le carré de ces normes peuvent être aussi déterminés localement en sommant la contribution de chacun des éléments e_i de sorte que :

$$\|e_h\|^2 = \sum_{i=1}^m \|e_h\|_i^2 \quad (3.52)$$

où i représente la contribution d'un élément et m le nombre d'éléments formant la discrétisation spatiale du domaine de calcul.

Cette valeur absolue de l'erreur n'a aucune signification physique intéressante, néanmoins si on s'intéresse à l'erreur relative en pourcentage, ce ratio η devient le critère seuil pour l'algorithme d'adaptativité.

$$\eta = \frac{\|e_h\|}{\|\Lambda\|} \quad (3.53)$$

Le tableau suivant (Tableau 3.1) présente les différentes normes pour le calcul de l'erreur ainsi que leurs définition et formulation mathématique.

TABLEAU 3.1 Définition des normes d'erreur pour l'adaptation de maillage dans l'algorithme `adapt` intégré dans CADYF [1]

Norme d'erreur	Définition
$\ e_P\ _\Omega$ "Norme L^2 pression"	Champs de pression $\Lambda = p$
$\ e_P\ _{H^1, \Omega}$ "Norme H^1 pression"	Champs de pression demie norme H1 $\Lambda = \nabla p$
$\ e_T\ _\Omega$ "Norme thermique"	Flux de chaleur $\Lambda = \nabla T$
$\ e_u\ _\Omega$ "Norme énergie"	Tenseur des contraintes visqueuses $\bar{\Lambda} = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{u})\bar{I}$
$\ e_\varphi\ _\Omega$ "Norme L^2 PSI"	Champs scalaire (Marqueur) $\Lambda = \varphi$

3.6.2 Stratégie de raffinement

La stratégie de raffinement va bien évidemment dépendre de la précision que l'on veut atteindre. Une option est celle de spécifier un pourcentage seuil $\bar{\eta}$ de l'erreur L^2 discutée précédemment. Ainsi, le critère après le calcul global doit vérifier la condition :

$$\eta \leq \bar{\eta} \quad (3.54)$$

En admettant que l'erreur soit distribuée de manière égale sur l'ensemble du domaine de calcul, il revient de même d'imposer la condition (3.57) à chacun des m éléments du maillage, ceci se traduit mathématiquement par l'inéquation suivante :

$$\|e\|_i \leq \bar{\eta} \left[\frac{(\|\Lambda\|_\Gamma^2 + \|e\|_\Omega^2)}{m} \right]^{1/2} \equiv e_{\Gamma_i} \quad (3.55)$$

Étant donné que l'erreur est effectivement calculée pour chaque élément du maillage, il est facile de vérifier où l'adaptation de maillage doit être exécutée. En effet, le ratio

$$\zeta_i = \frac{\|e\|_i}{e_{\Gamma_i}} \quad (3.56)$$

permet de trouver les éléments pour lesquels un raffinement est nécessaire pour que la condition (3.57) soit justifiée. Pour une taille d'élément courante égale à h_i , présentant un ratio $\zeta > 1$ aura une nouvelle taille raffinée de

$$h'_i = \frac{h_i}{\zeta_i^{1/p}} \quad \forall \zeta_i > 1 \quad (3.57)$$

L'analyse effectuée par Zienkiewicz et Zhu suggère que le degré p soit le même que le degré polynomiale utilisé dans les fonctions tests présentées dans l'équation (3.52).

Jusqu'à présent, nous avons présenté l'adaptation de maillage en formules et avec une optique mathématique. Il est important, néanmoins, de présenter au lecteur le résultat appliqué de cette technique pour saisir l'importance et son fonctionnement dans un code d'éléments finis une fois utilisé dans un cas réel de simulation. Dans la prochaine section, nous présenterons l'adaptation de maillage qui a été réussie pour un cas qui porte une importance particulière dans ce travail.

Il est important de garder en tête qu'il s'agit simplement d'une démonstration graphique de la puissance de ce module et que nous ne rentrerons pas dans la description ni dans les détails de cette simulation à ce stade puisqu'une section entière lui est dédiée dans le chapitre 4 de validation et vérification.

Le tableau suivant résume les normes qui ont été utilisées pour l'adaptation de maillage du cas présenté dans les Figures 3.12 et 3.13

TABLEAU 3.2 Normes d'adaptation de maillage pour le cas Rayleigh-Taylor

Norme d'erreur utilisé	Définition	Facteur de réduction
$\ e_P\ _{H^1, \Omega}$ "Norme L^2 pression"	Norme Pression H^1 $\Lambda = \nabla p$	0.6
$\ e_u\ _{\Omega}$ "Norme L^2 pression"	Norme énergie $\Lambda = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{u})\bar{\mathbf{I}}$	0.6
$\ e_\varphi\ _{\Omega}$ "Norme L^2 pression"	Norme Psi $\Lambda = \varphi$	0.6

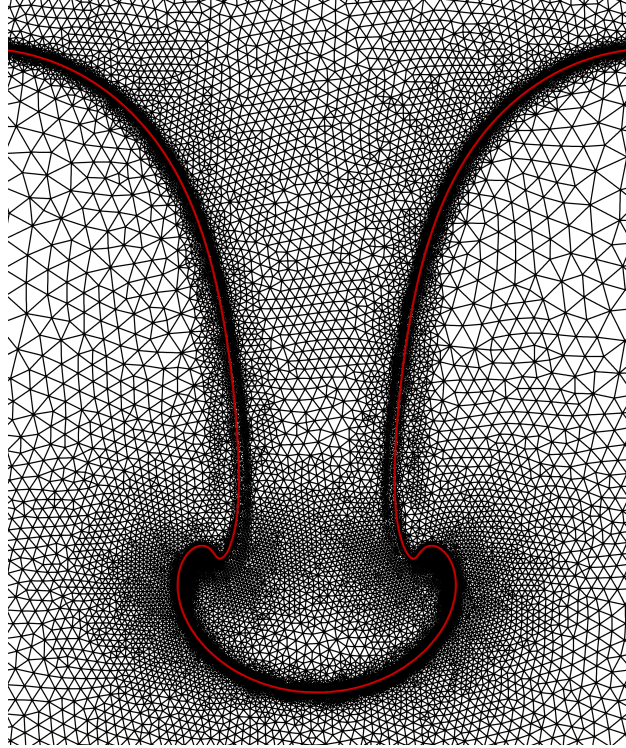


FIGURE 3.12 Adaptation de maillage (e_p, e_u, e_φ) - Rayleigh-Taylor (t=0.6s)

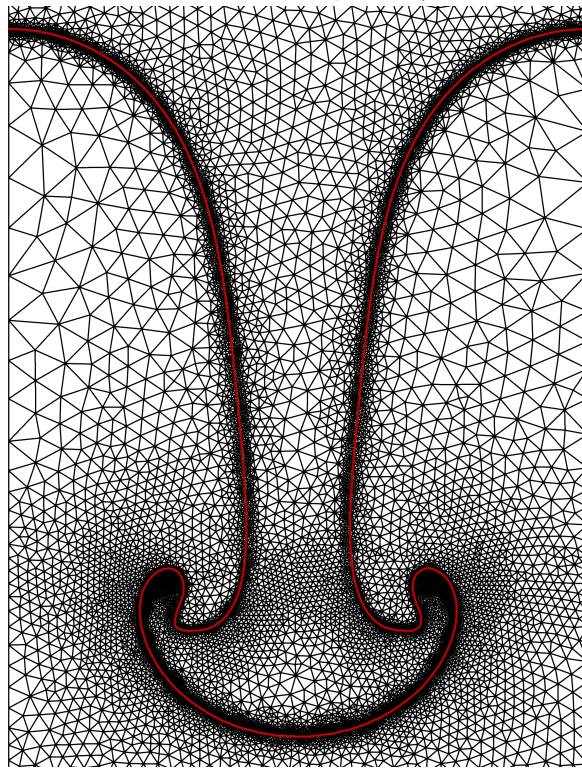


FIGURE 3.13 Adaptation de maillage (e_p, e_u, e_φ) - Rayleigh-Taylor (t=0.7s) Interface montrée en rouge

3.7 Intégration temporelle et méthodes adaptatives en temps

Cette section présente une brève introduction aux méthodes BDF ainsi que sur l'adaptation hp qui est implémentée dans le solveur `cadyf` et utilisée par la méthode de pseudo-concentration. Tout lecteur intéressé est référé aux travaux de Hay et al. (2015) [6] où le développement de la méthode est expliqué en détail. Nous référons aussi aux travaux de Muller [24] qui a étendu les fonctionnalités du module d'adaptation du pas de temps.

L'intégrateur temporel dont `cadyf` est muni pour obtenir une intégration temporelle efficace des équations incompressibles de Navier-Stokes, est basé sur la méthode BDF (Backward Differentiation Formula). Cette méthode appartient à une famille de méthodes implicites pour l'intégration numérique d'équations différentielles ordinaires. Ce sont des méthodes linéaires dites « multi-pas » (ou multiétapes) qui, pour une fonction et un temps donné, approchent la dérivée de cette fonction en utilisant des informations provenant de points temporels déjà calculés, augmentant ainsi la précision de l'approximation. La Figure 3.14 explique schématiquement ceci. De plus, ces schémas numériques, implicites en temps, ont l'avantage de ne pas être contraints à la condition de Courant-Friedrich-Lewy (CFL).

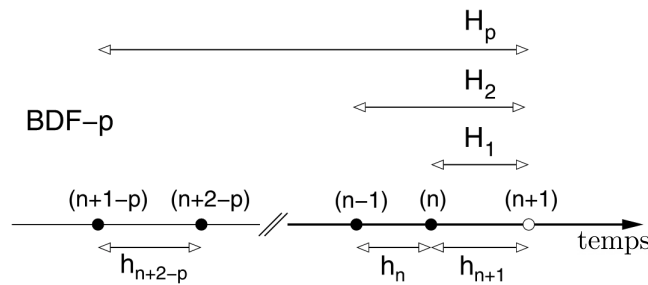


FIGURE 3.14 Instants temporels rétrospectifs utilisés par BDF-p (Tirée de Hay et al. [6])

L'algorithme d'adaptation utilise une combinaison de sélections de pas (h-adaptivity) et d'ordre (p-adaptivity) pour contrôler respectivement la précision de la solution et l'efficacité de calcul du processus d'intégration temporelle. Ceci, afin d'assurer la stabilité de la méthode numérique tout en contrôlant l'erreur de la discrétisation temporelle. L'implémentation utilise des intégrateurs d'ordre p allant de 1 à 5 ainsi qu'un mécanisme de rejet de pas de temps.

L'intégration temporelle par les méthodes BDF est basée sur la différenciation numérique pour résoudre un problème aux valeurs initiales :

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases} \quad (3.58)$$

afin de trouver une approximation de la dérivée à l'instant t_{n+1} de sorte que l'équation (3.58) devient :

$$y'(t_{n+1}) = f(t_{n+1}, y(t_{n+1})) \quad (3.59)$$

L'approximation de la dérivée $y'(t_{n+1})$ se fait à l'aide des polynômes d'intégration de Newton q d'ordre p qui interpolent y_j au temps t_j où $j = n + 1, \dots, n + 1 - p$. Ces polynômes sont définis tels que :

$$q(t) = \sum_{j=0}^p \left[\prod_{i=0}^{j-1} (t - t_{n+1-i}) \right] \delta^j y \quad (3.60)$$

où $\delta^j y$ est la différence divisée de $j^{\text{ème}}$ ordre de y définie comme :

$$\begin{cases} \delta^j y = \delta^j [y_{n+1}, \dots, y_{n+1-j}] = \frac{\delta^{j-1}[y_{n+1}, \dots, y_{n+2-j}] - \delta^{j-1}[y_n, \dots, y_{n+1-j}]}{t_{n+1} - t_{n+1-j}} \\ \delta^0 y = \delta^0 [y_{n+1}] = y_{n+1} \end{cases} \quad (3.61)$$

C'est en différenciant l'équation (3.60) par rapport au temps à $t = t_{n+1}$ et en écrivant le résultat comme une combinaison linéaire de la solution y_j , qu'on obtient [6] :

$$q'(t_{n+1}) = \sum_{j=1}^p \left[\prod_{i=1}^{j-1} (t_{n+1} - t_{n+1-i}) \right] \delta^j y = \sum_{i=0}^p \alpha_i y_{n+1-i} = f(y_{n+1}, t_{n+1}) \rightarrow y'(t_{n+1}) \quad (3.62)$$

où les coefficients α_i sont les coefficients de la combinaison linéaire obtenue à partir des différences divisées de y et dépendent de l'ordre p et le pas de temps h d'où le nom « adaptation hp » [6]. C'est donc ainsi que le solveur CADYF réalise une adaptation hp en adaptant le pas de temps et l'ordre en fonction de l'erreur estimée (Hay et al.).

CHAPITRE 4 VÉRIFICATION ET RÉSULTATS DU MODÈLE NUMÉRIQUE

L'une des parties les plus intéressantes et sans doute la plus importante lors du développement d'un modèle numérique en sciences computationnelles est celle du lancement de simulations et l'analyse des résultats qui en découlent. C'est en réalisant des simulations que l'on exploite le code développé et que l'on teste l'ensemble du modèle implémenté. Les résultats des simulations représentent un résumé visuel et compréhensible des concepts abstraits implémentés et orchestrés sous forme de lignes de code qui forment le modèle numérique en question. Ils sont le but ultime de tout modèle numérique puisque c'est l'outil qui permet la mise en place d'études de cas. D'autant plus, l'analyse des résultats est l'un des seuls moyens de comparer, vérifier et valider un modèle numérique. C'est parmi ces raisons et bien d'autres dont on discutera plus bas, qu'un chapitre complet est souvent dédié aux présentations des résultats dans tout travail de développement numérique en science computationnelle.

Ce chapitre a pour objectif de présenter le résultat de l'implémentation du modèle dans le code source `CADYF` à l'aide de plusieurs études de cas qui ont été jugés aptes pour tester le modèle sur différents aspects et qui permettront de mettre en évidence la robustesse du modèle implémenté dans le temps alloué pour le développement de ces travaux. Avant la présentation des résultats et les analyses respectives, nous entamons une étude de cas particulière dédiée à la vérification du modèle. Par la suite, nous mettons le modèle à l'épreuve en réalisant des simulations selon un niveau de complexité croissant avec l'idée de tester les limites du modèle.

4.1 Vérification d'un modèle numérique

Il existe plusieurs concepts à comprendre avant de lancer une simulation et d'utiliser les résultats issus de cette dernière. Tout d'abord, la distinction entre le code source, le modèle numérique et une simulation. Essentiellement, le modèle numérique est une façon d'approcher la solution à un certain type de problèmes. Dans notre cas, il s'agit des écoulements diphasiques, ainsi, le modèle numérique d'intérêt doit être capable de différencier chacun des fluides ainsi que connaître la position de l'interface entre ces deux mêmes fluides selon différentes interactions. Le modèle doit aussi respecter la loi de continuité et l'ensemble des règles physiques décrites dans le chapitre 3. Le modèle n'est rien d'autre qu'une interprétation mathématique de la physique. Ce modèle est par la suite implémenté dans le code source choisi (Fortran pour ce travail). Finalement, le code développé est exécuté afin de réaliser

une simulation CFD donnant des résultats utilisés pour une analyse scientifique.

Le *American Institute of Aeronautics and Astronautics* (AIAA) est un organisme professionnel dans le domaine de l'aéronautique et aérospatial formé par de nombreux chercheurs industriels et académiques de haut niveau avec des membres provenant de plusieurs pays. L'objectif principal de cet institut est de soutenir les chercheurs, les développeurs et les utilisateurs de la CFD, entre autres, en fixant une terminologie et une méthodologie commune selon le domaine étudié [7]. Ainsi, le concept de vérification est défini de la manière suivante selon AIAA :

« *Processus qui consiste à déterminer si l'implémentation d'un modèle numérique représente fidèlement la description conceptuelle du modèle établie par le développeur ainsi que la solution au modèle.* » [7]

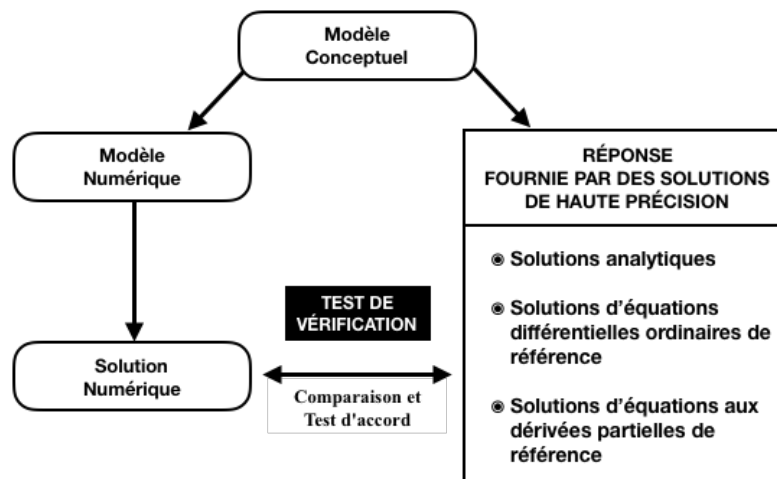


FIGURE 4.1 Processus de vérification d'un modèle numérique (Tiré de AIAA G-077-1998) [7]

En d'autres mots, la vérification consiste à s'assurer que l'implémentation du modèle dans le code source correspond bel et bien à la modélisation numérique que l'on veut exploiter et que les équations ont, elles aussi, bien été implémentées. Le schéma présenté dans la Figure 4.1 décrit le processus recommandé pour effectuer une vérification satisfaisante selon les standards de l'AIAA. Il est important de préciser la différence qui existe avec la validation d'un modèle où on s'intéresse plutôt à étudier sa performance et valider si le modèle numérique implémenté suit de manière fidèle la physique. À cet effet, le processus de validation est souvent réalisé à l'aide de données expérimentales.

Étant donné que nous avons développé un nouveau modèle sur notre code source, il devient impératif de réaliser un processus de vérification pour ce dernier. Le premier cas qui sera

présenté dans les prochaines sections sera utilisé en tant que cas de vérification. Il s'agit d'un cas extrêmement simple dont tous les détails sont énoncés dans la section suivante.

4.2 Piston monophasique à vitesse constante

4.2.1 Présentation du cas

Le piston monophasique à vitesse constante ne représente pas physiquement un piston. La mise en place des conditions limites est faite en sorte qu'il s'agisse d'un piston fictif constitué d'une interface fictive entre deux fluides ayant les mêmes propriétés physiques. Ainsi, le Fluide 1 et le Fluide 2 présentés dans la Figure 4.2 sont identiques et il ne devrait pas y avoir d'interface physique. L'interface fictive est présente afin de pouvoir vérifier le modèle numérique de PCM implémenté. L'idée derrière cette simulation est d'entamer une vérification du modèle à l'aide d'un cas extrêmement simple où la vitesse doit demeurer constante et l'interface doit suivre le champ de vitesse imposé. Ainsi, la solution exacte est connue en tout temps. Ceci agit comme une alternative à un test fait à l'aide de la méthode des solutions manufacturées (MMS).

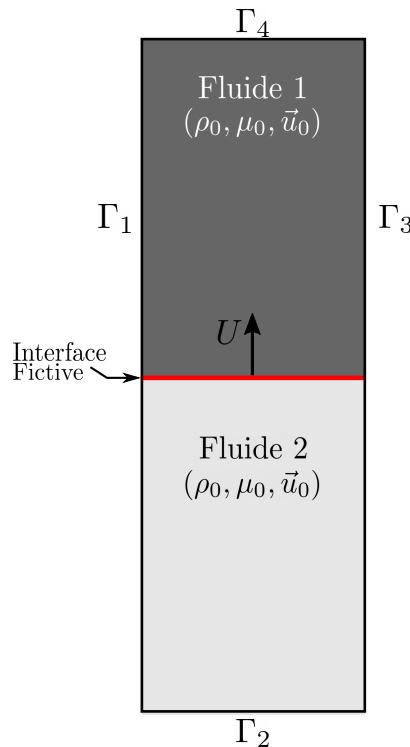


FIGURE 4.2 Piston fictif monophasique à l'état initial ($t=0$)

Cette façon de procéder n'est pas équivalente à un test de vérification aussi robuste comme une MMS, mais elle permet de faire une vérification suffisante pour le temps alloué au dé-

veloppement de ce modèle. Cependant, il est important de préciser qu'une vérification par MMS est recommandée pour les travaux futurs.

Le tableau 4.1 présente de manière détaillée les conditions imposées pour lancer la simulation de vérification. Sachant que les propriétés physiques sont les mêmes pour les deux fluides, nous les inscrivons qu'une seule fois dans le tableau. Les conditions limites imposées à chacune des frontières du domaine sont aussi tabulées et peuvent être traduites comme étant un réservoir infini avec une vitesse verticale initiale unitaire soumis à aucun champ gravitationnel.

TABLEAU 4.1 Propriétés physiques des fluides et conditions limites pour la simulation de vérification - Cas du piston fictif monophasique

PISTON FICTIF MONOPHASIQUE	Liquide 1	Liquide 2
	Masse Volumique ρ_0 (kg/m ³)	x^*
Viscosité dynamique μ_0 (Pa · s)	3.13 · 10 ⁻³	
Champs de pesanteur \mathbf{g} (m/s ²)	$\mathbf{0}$	
Vitesse initiale \mathbf{U}_{init} (m/s)	$[\mathbf{0}, \mathbf{1}]$	
Limite gauche du Piston (Γ_1)	$u = 0 \mid v = 1 \mid \varphi = \text{Libre}$	
Limite basse du Piston (Γ_2)	$u = 0 \mid v = 1 \mid \varphi = \text{Libre}$	
Limite droite du Piston (Γ_3)	$u = 0 \mid v = 1 \mid \varphi = \text{Libre}$	
Limite haute du Piston (Γ_4)	$u = 0 \mid v = \text{Libre} \mid \varphi = \text{Libre}$	
Vitesse initiale du domaine ($\Omega_{\vec{u}}$)	$\mathbf{u} = [0, 1]$	

*La valeur de la masse volumique n'est pas pertinente vu que nous avons un champs gravitationnel nul.

La solution analytique pour ce cas est extrêmement simple. L'interface, et donc le Fluide 2, doit se déplacer à vitesse constante le long du piston en tout temps. La section suivante présente les résultats obtenus à différents moments de la simulation. Une analyse en détail est aussi réalisée afin de passer en revue le comportement du modèle et se prononcer sur la vérification du modèle.

4.2.2 Présentation des résultats

On présente ici les résultats successifs à différents moments de la simulation décrite dans la section précédente. Tel qu'il a été discuté plus haut, la solution analytique pour ce problème s'obtient sans effort. En effet, si le modèle a bien été implémenté, l'interface identifiée en rouge doit sera advectée et suivra le champ de vitesse imposé aux conditions limites. Les résultats obtenus sont illustrés sur la Figure 4.3.

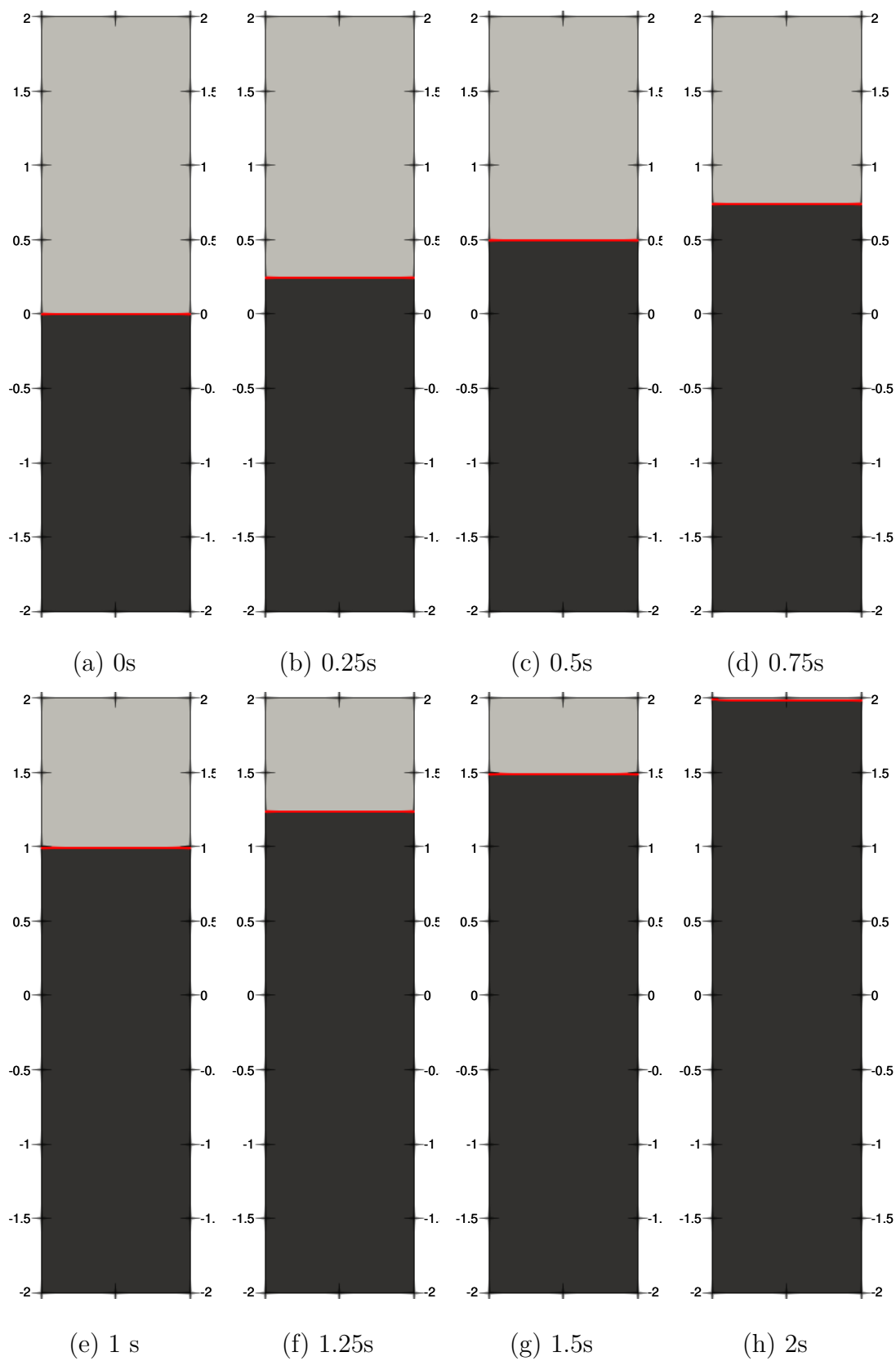


FIGURE 4.3 Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation du piston fictif

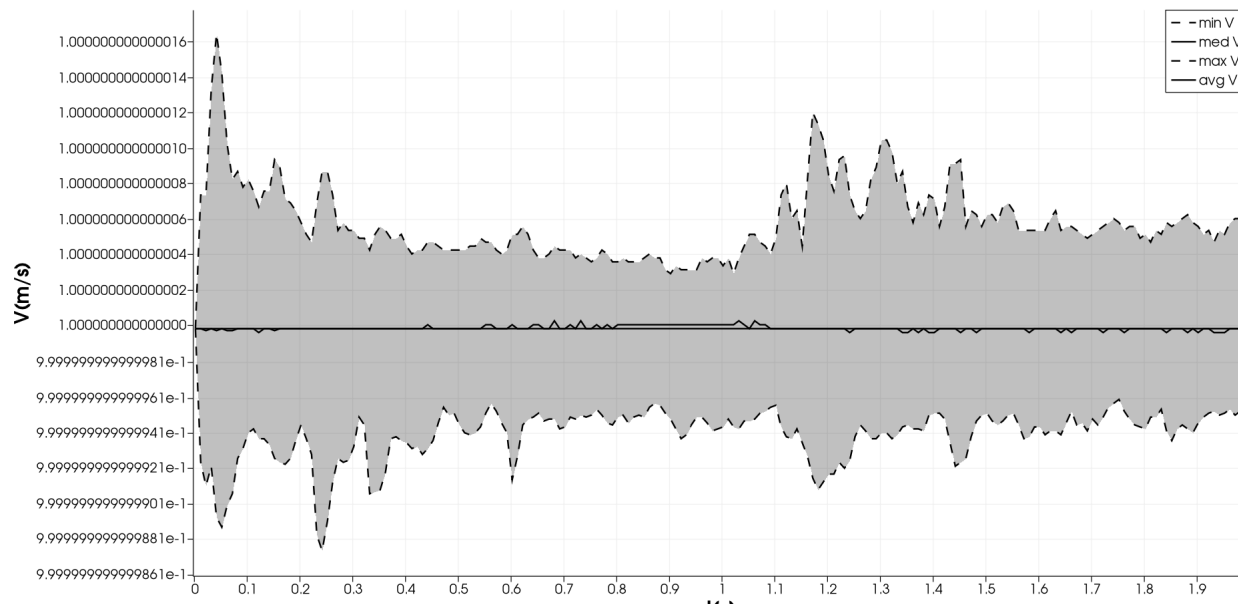


FIGURE 4.4 Variation du champ de vitesse dans l'ensemble du domaine de calcul en fonction du temps pour le piston fictif (Cas de vérification)

La simplicité du cas étudié nous permet de nous concentrer sur le comportement de la vitesse en fonction du temps. En effet, il s'agit d'un simple « piston » qui doit monter à la même vitesse que l'écoulement par lequel il est entraîné.

La Figure 4.4 montre la variation du champ de vitesse pour la totalité du domaine de calcul. De plus, le graphique affiche la valeur maximale et minimale retrouvée dans l'ensemble du domaine ainsi que la vitesse moyenne.

En analysant les résultats présentés dans ce graphique, nous trouvons que la variation maximale de vitesse dans tout le domaine est de l'ordre de 10^{-15} ce qui correspond à l'ordre de l'erreur machine. De plus, la différence la plus étendue qui existe est de l'ordre de 10^{-13} ce qui reste de l'ordre de l'erreur machine est donc extrêmement faible.

Ces résultats témoignent du bon comportement du modèle et signalent que l'implémentation de l'équation de transport d'advection du champ scalaire $\varphi(\mathbf{x}, t)$ a bien été réussie dans le code source CADYF. Le couplage entre les équations de Navier-Stokes et l'équation de pseudo-concentration suit de proche les résultats attendus et montre que le code développé fonctionne de manière adéquate selon le modèle numérique et les équations qui gouvernent cette modélisation en dynamique des fluides computationnelle (CFD).

4.3 Ballotement de grande amplitude

4.3.1 Présentation du cas

Nous présentons ici un cas originellement à surface libre, adapté à une simulation diphasique élaborée à l'aide du modèle de pseudo-concentration. Nous effectuons une étude basée sur une convergence spatiale et temporelle qui sera par la suite comparée aux travaux effectués par Dettmer et Peric (2006) [8]. Nous nous intéressons au ballotement causé par un forçage harmonique du domaine présenté à la Figure 4.5 dont les dimensions géométriques sont de $b = h = 1$ m. Les conditions, les propriétés physiques ainsi que les forces du système étudié sont résumées dans le tableau 4.2. Le forçage est caractérisé par une amplitude $A = 0.075$ et une pulsation $\omega = 1.5$.

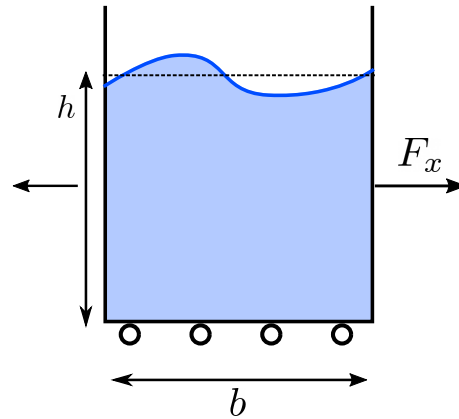


FIGURE 4.5 Ballotement de grande amplitude

BALLOTEMENT	Phase 1	Phase 2
	Masse Volumique ρ_0 (kg/m ³)	0.1
Viscosité dynamique μ_0 (Pa · s)	0.00313	0.01
Champ de pesanteur \mathbf{g} (m/s ²)	[0,-1]	
Limite gauche (Γ_1)	$u = 0 \mid v = \text{Libre} \mid \varphi = \text{Libre}$	
Limite basse (Γ_2)	$u = \text{Libre} \mid v = 0 \mid \varphi = \text{Libre}$	
Limite droite (Γ_3)	$u = 0 \mid v = \text{Libre} \mid \varphi = \text{Libre}$	
Limite haute (Γ_4)	$u = \text{Libre} \mid v = 0 \mid \varphi = \text{Libre}$	
Forces Volumiques sur Ω	$F_x = A\omega^2 \cos(\omega t) \mid A = 0.075$	

TABLEAU 4.2 Description, propriétés physiques et conditions limites du ballotement

4.3.2 Analyse des résultats

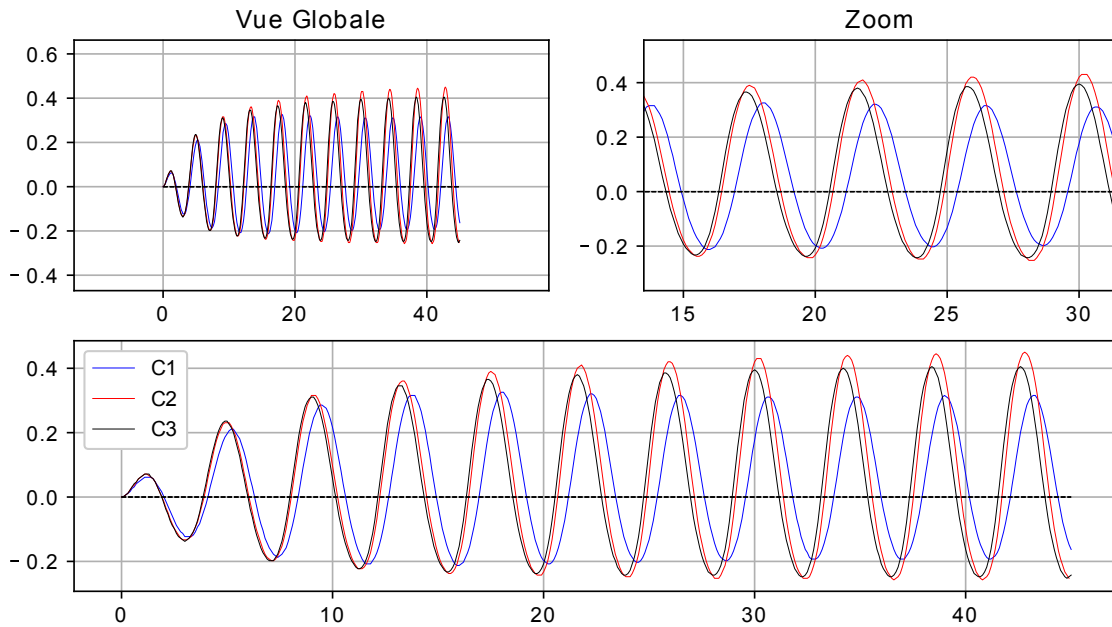


FIGURE 4.6 Évolution de l'interface sur la paroi droite en fonction du temps

La Figure 4.6, montre l'évolution en fonction du temps de l'interface qui est en contact avec la paroi droite de l'enceinte. Les courbes $C1$, $C2$ et $C3$ correspondent à différents essais de simulation qui impliquent (1) le changement de la masse volumique du fluide supérieur pour s'approcher le plus possible d'un cas à surface libre (avec une masse volumique nulle ou proche de 0) et ($C1 \leftrightarrow C2$) (2) la diminution des tolérances temporelles d'un facteur 10 afin d'entamer un travail de convergence temporelle ($C2 \leftrightarrow C3$).

W. Dettmer, D. Perić / Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 195 (2006) 3038–3071

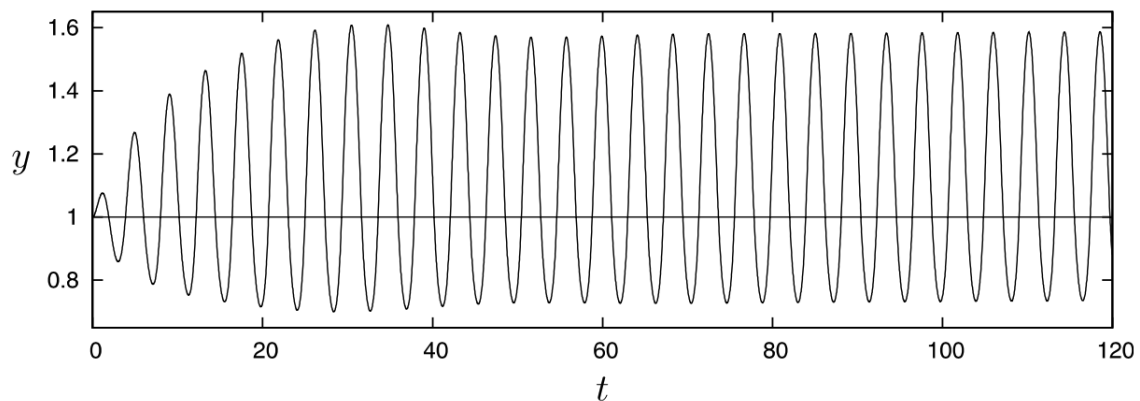


FIGURE 4.7 Résultats de l'évolution de l'interface sur la paroi droite en fonction du temps obtenus par *Dettmer et Peric* (2006) [8]

Modifications $C1 \leftrightarrow C2$:

Changement de la masse volumique du fluide supérieur pour s'approcher d'une simulation de surface libre telle qu'il est fait dans l'article de référence de Dettmer et Peric (2006). Division de la masse volumique par un facteur 1000.

Modifications $C2 \leftrightarrow C3$:

Analyse de convergence temporelle par diminution d'un facteur 10, la tolérance en temps en conservant la modification faite entre les cas $C1$ et $C2$. Ainsi, pour le cas $C3$, nous avons une masse volumique 1000 fois plus petite que pour $C1$ et une tolérance en temps 10 fois plus petite que pour $C2$.

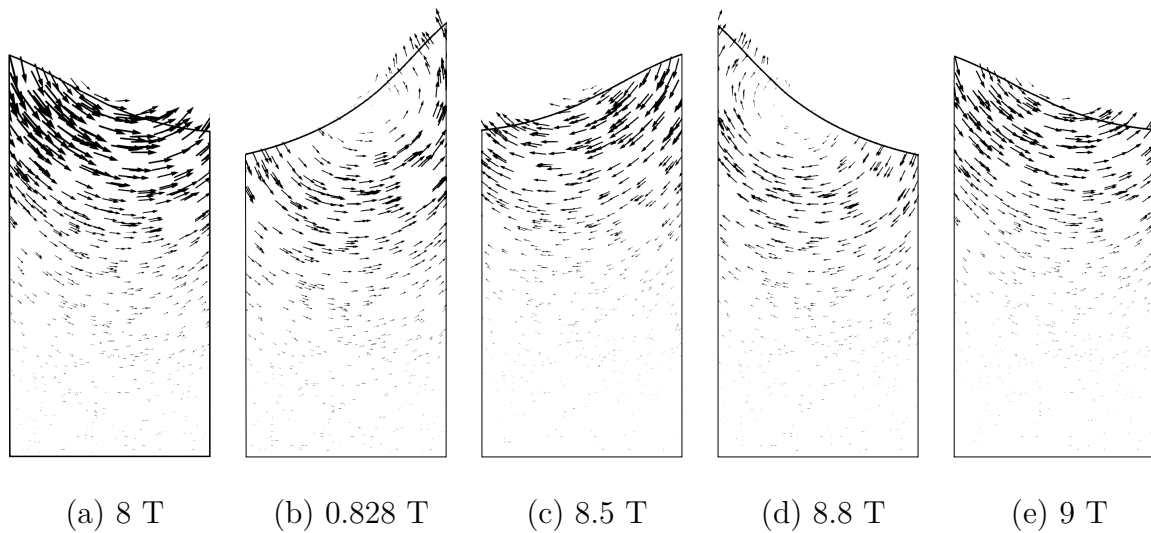


FIGURE 4.8 Interface et champ de vitesse à différents temps du sloshing (Méthode de Pseudo-Concentration) avec T étant la période

Les résultats obtenus par Dettmer et Peric montrent un dépassement de la hauteur de $0.4m$ à partir d'un temps $t \approx 15s$. Avec notre modèle, nous atteignons une hauteur de $0.4m$ aux alentours de $t \approx 17s$. Bien que le comportement soit similaire, l'amplitude maximale atteinte avec notre modèle ne dépasse pas $0.45m$ tandis que les résultats de l'article de référence atteignent une hauteur de $0.6m$. L'une des hypothèses de cette différence est le fait que notre modèle ne simule pas une surface libre, mais plutôt une simulation diphasique d'un liquide contenu dans un réservoir fermé. Cette différence permet de voir l'influence de la phase supérieure sur le liquide en ballotement.

Afin de se comparer à une simulation similaire, nous avons lancé le même cas décrit par le tableau 4.2 mais cette fois-ci en utilisant la méthode de suivi.

Les résultats obtenus sont montrés dans la Figure 4.9 et nous permettent de comparer l'évolution de l'interface sur la paroi droite du réservoir entre la méthode de pseudo-concentration et la méthode de suivi déjà implémentée sur CADYF.

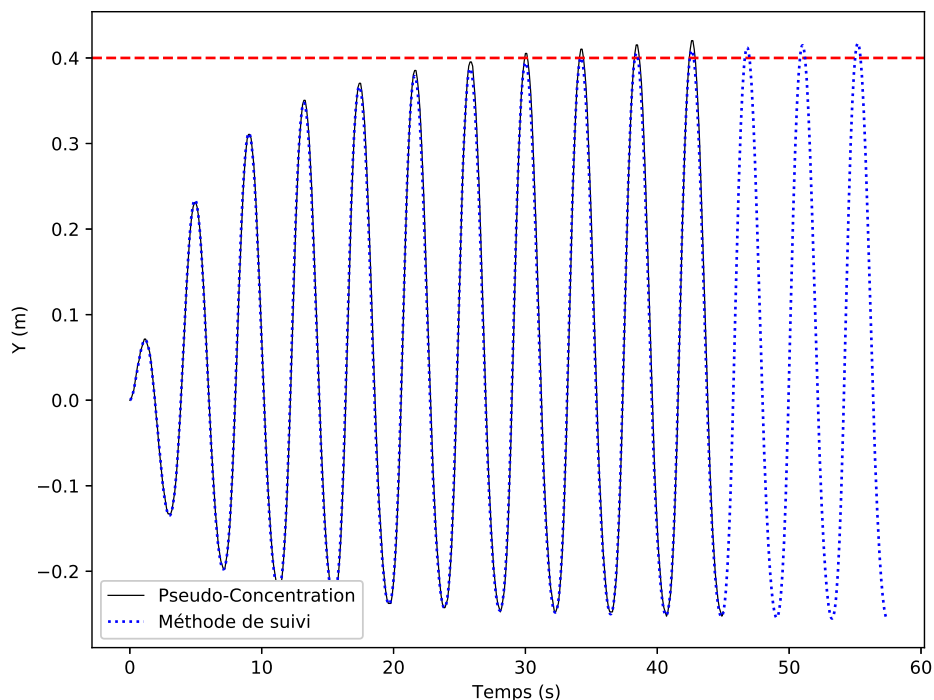


FIGURE 4.9 Résultats de l'évolution de l'interface sur la paroi droite en fonction du temps obtenus par la méthode de suivi (CADYF)

Cette superposition de l'évolution de l'interface entre les deux méthodes montre bien que notre méthode de pseudo-concentration se comporte très fidèlement à la méthode de suivi d'interface qui a déjà été vérifiée et utilisée à plusieurs reprises. Si l'on examine les résultats avec plus de détail, nous pouvons observer que la méthode de pseudo-concentration donne une amplitude plus grande que celle obtenue avec la méthode de suivi. En règle générale, les deux méthodes concordent ce qui corrobore le fait que l'implémentation de l'algorithme de pseudo-concentration semble être réussie, ce qui est l'objectif de cette étude.

L'écart trouvé entre les amplitudes de ces deux méthodes et celles de Dettmer et Perić est discuté dans l'étude réalisée par Charlot [33].

4.4 Instabilité de Rayleigh-Taylor

L'instabilité de Rayleigh-Taylor (IRT) est une instabilité interfaciale entre deux fluides non miscibles et de densités différentes qui se déclenche par la poussée (ou l'accélération) d'un fluide sur l'autre. La présence d'un fluide dense suspendu par-dessus un fluide plus léger soumis à un champ gravitationnel produit ce comportement d'instabilité. Un exemple quotidien de ce phénomène est le comportement de l'eau placée par-dessus de l'huile. D'autres exemples inclus, les nuages en champignons issus d'une éruption volcanique (Figure 4.10) ou lors d'une explosion nucléaire atmosphérique ainsi que les instabilités dans les réacteurs de fusion à plasma Chen *et al.* (1994) [34].



FIGURE 4.10 Éruption du volcan Sarychev (NASA - <https://svs.gsfc.nasa.gov/1144>)

Cette instabilité est fortement caractérisée par le motif que prend l'interface lors de son évolution suite à une perturbation initiale du mode normal à l'interface. La forme prise par l'interface peut être divisée en deux phases. La première consiste en une expansion linéaire du pic suivi par une amplification non linéaire entraînant le développement de brins verticaux ayant une forme de "champignons" à leurs extrémités. L'étude des instabilités de Rayleigh-Taylor et des instabilités hydrodynamiques des écoulements stratifiés en densité est en général caractérisée par un nombre adimensionnel appelé le nombre d'Atwood.

Le nombre d'Atwood (At) est un ratio de densité défini comme suit :

$$At = \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_1 + \rho_2} \quad (4.1)$$

avec :

$\rho_1 \rightarrow$ masse volumique du fluide lourd et $\rho_2 \rightarrow$ masse volumique du fluide léger.

4.4.1 Présentation du cas

Afin d'illustrer la capacité de notre méthode à traiter des cas plus complexes, nous présentons ici un test classique qui consiste à suspendre deux fluides ayant les masses volumiques de l'hélium et de l'air sous le champ gravitationnel terrestre. Ces fluides sont incompressibles et contenus dans le domaine de calcul qui correspond à un rectangle d'un mètre ($L = 1m$) de large et de 4 mètres de hauteur ($h = 4m$). Ce calcul a originellement été réalisé par Puckett *et al.* [35] en utilisant le modèle VOF. Les propriétés physiques ainsi que d'autres informations pertinentes pour ce cas sont tabulées dans le tableau 4.3.

TABLEAU 4.3 Propriétés physiques et conditions limites pour la simulation de Rayleigh-Taylor

RAYLEIGH-TAYLOR	Liquide 1	Liquide 2
Masse Volumique ρ_0 (kg/m ³)	1.225	0.1694
Viscosité dynamique μ_0 (Pa · s)	$3.13 \cdot 10^{-3}$	
Champs de pesanteur \mathbf{g} (m/s ²)	9.81	
Limite gauche (Γ_1)	$u = 0 \mid v = \text{Libre} \mid \varphi = \text{Libre}$	
Limite basse (Γ_2)	$u = \text{Libre} \mid v = 0 \mid \varphi = \text{Libre}$	
Limite droite (Γ_3)	$u = 0 \mid v = \text{Libre} \mid \varphi = \text{Libre}$	
Limite haute (Γ_4)	$u = \text{Libre} \mid v = 0 \mid \varphi = \text{Libre}$	
Vitesse initiale du domaine ($\Omega_{\vec{u}}$)	$\mathbf{u} = [0, 0]$	
Nombre d'Atwood (At)	0.757	

L'interface entre les fluides est une perturbation initiale sinusoïdale d'une amplitude de 0.05 mètre (Fig. 4.11(a)) afin d'amorcer un seul mode normal de la surface d'équilibre horizontale. Finalement, la simulation réalisée dans ce travail ainsi que dans les références citées est sans tension superficielle.

4.4.2 Analyse des résultats numériques

Les figures 4.11(a) à 4.11(l) montrent les résultats et l'évolution de l'interface lors du développement de l'instabilité à plusieurs instants. Ces images montrent les résultats obtenus jusqu'au temps $t = 0.9s$ afin de bien pouvoir se comparer à la méthode de suivi d'interface déjà développée sur le code source CADYF [1] ainsi que pour bien se comparer aux résultats obtenus par Pucket et al. [35] et Popinet et Zaleski [36]. Contrairement à la méthode de suivi [1], notre méthode permet la rupture de phase ainsi que l'impact. Une analyse des résultats pour $t > 0.9s$ pourra aussi être réalisée dans ce travail.

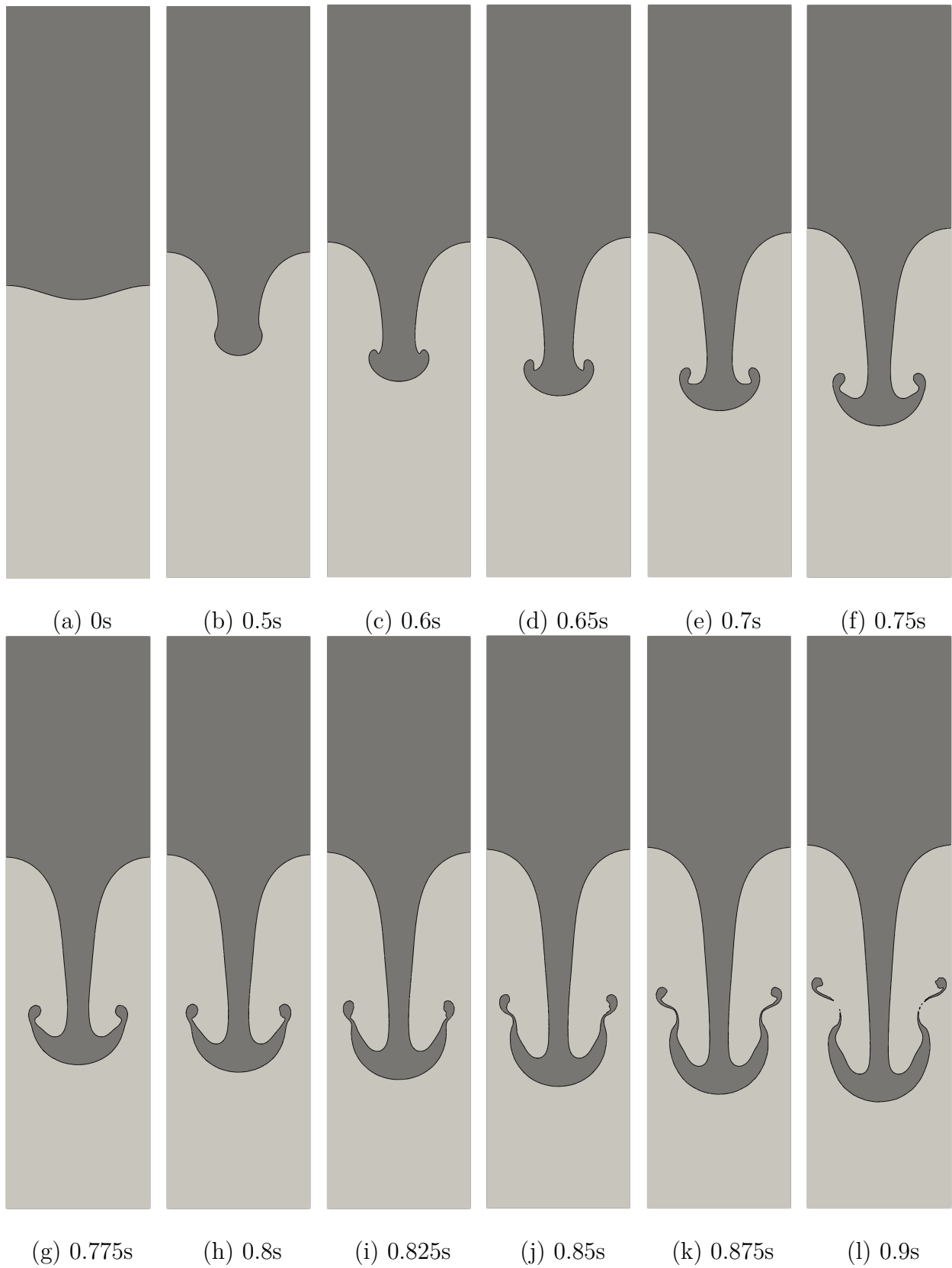


FIGURE 4.11 Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation Rayleigh-Taylor

L'évolution de l'interface se compare bien avec les résultats de la méthode de suivi déjà implémentée sur CADYF [1]. Les figures 4.12a-d présentent la superposition des deux interfaces simulées avec les deux différentes méthodes (méthode de suivi vs. méthode de pseudo-concentration) aux mêmes moments afin de capturer les écarts entre les deux méthodes. On peut apprécier que les résultats sont en étroite concordance non seulement avec la méthode de suivi, mais aussi avec les travaux de Puckett et al. [35], Popinet et al. [36] ainsi que Talat et al. [37].

La variation maximale de la masse avec notre algorithme de pseudo-concentration a été estimée à 0.023%, ce qui est faible lorsque comparé à la variation obtenue avec la méthode de "front tracking" utilisée dans les résultats de Popinet *et al.* [36] (soit environ 0.14%).

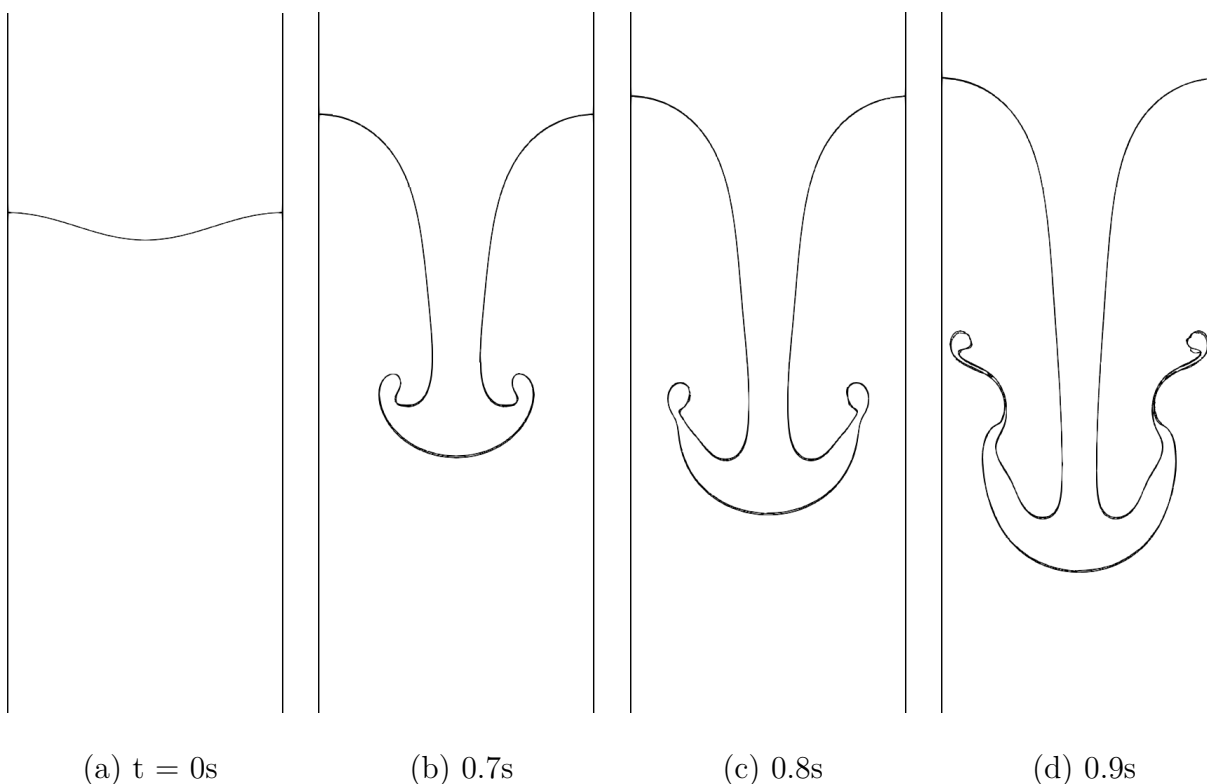
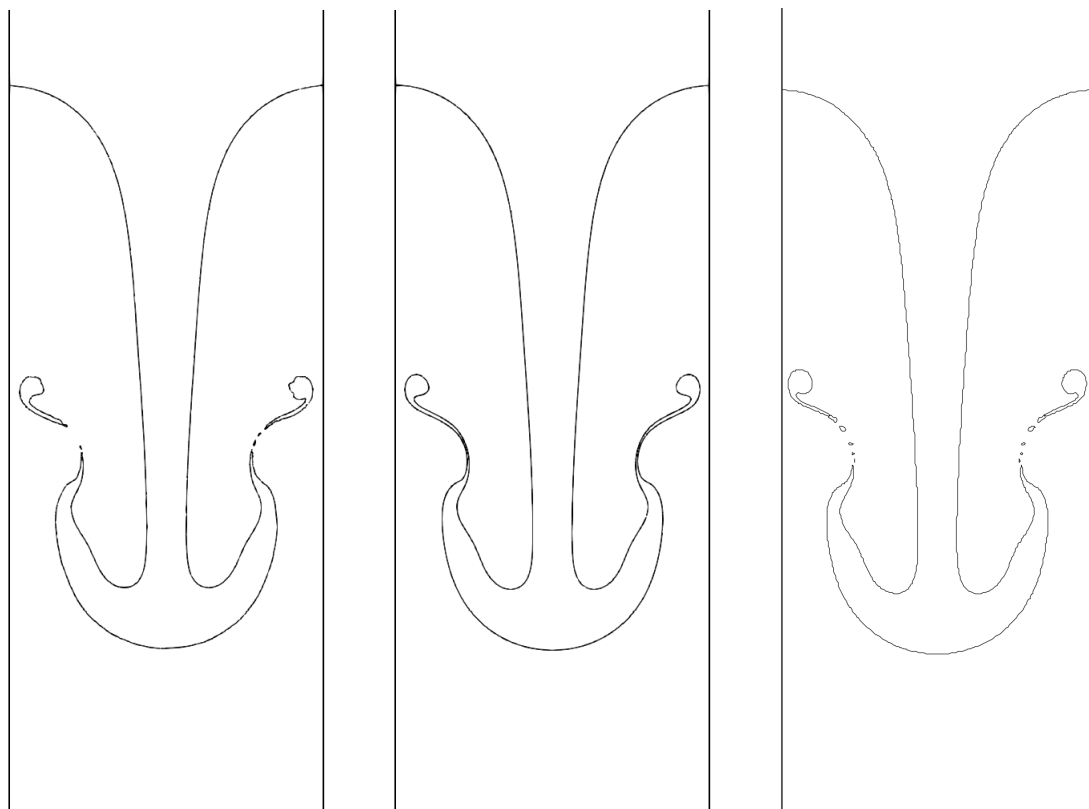


FIGURE 4.12 Superposition des interfaces entre les méthodes de pseudo-concentration et suivi d'interface - Simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor sans tension de surface

Tel qu'il a été mentionné dans le chapitre 2, l'une des limitations de la méthode de suivi d'interface est le fait qu'il est difficile de traiter les ruptures d'interface, par conséquent, cette méthode conserve des petites structures filamenteuses, et ce même pour les simulations à basse résolution. Ce phénomène devient d'autant plus visible lorsqu'on compare l'interface au temps $t = 0.9s$ pour différentes méthodes numériques tel qu'il est fait dans la Figure 4.13.



(a) Pseudo-Concentration (b) Suivi d'interface [1] (c) VOF (PLIC/CIAM) [36]

FIGURE 4.13 Comparaison de l'interface à $t = 0.9s$ pour différentes méthodes numériques

Ici, on fait une comparaison entre les modèles utilisant l'algorithme de pseudo-concentration (a), méthode de suivi d'interface préalablement implémenté sur *CADYF* (b) et la méthode VOF dotée de l'algorithme PLIC/CIAM (c).

La ressemblance entre notre modèle et le modèle VOF (PLIC) utilisé par Popinet et al. [36] est très évidente et montre la capacité de notre modèle à gérer la rupture (ou coalescence) d'interface. Pour obtenir des résultats similaires avec la méthode de suivi d'interface présentée à la Figure 4.13b, il serait nécessaire d'adopter et développer un "mécanisme de reconnexion" pour l'interface basé sur une représentation physique des interactions entre les interfaces. Étant donné que ce développement n'a pas encore été implémenté, nous devons limiter nos comparaisons avec ce modèle jusqu'au temps $t = 0.9s$.

Une comparaison plus quantitative est réalisée en analysant l'évolution de la longueur des brins et la forme générale du "nuage". Cette étude prend comme référence les résultats préalablement convergés de la méthode de suivi (FTM) et une analyse supplémentaire sur l'amplitude de la pointe est menée en se basant sur les résultats de Liu *et al.* [38].

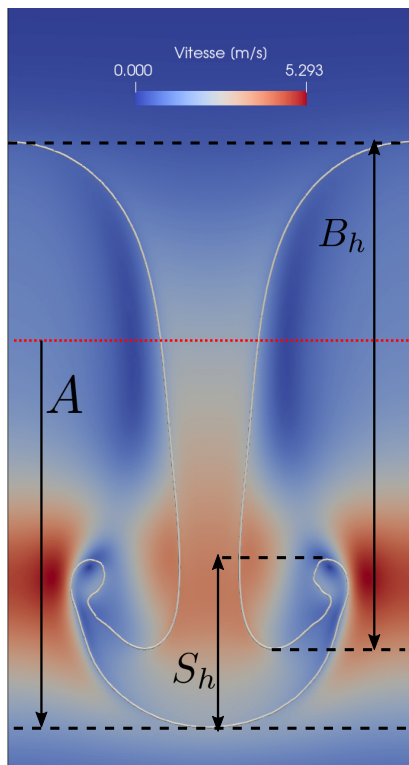


FIGURE 4.14 Interface et métriques pour RT ($t=0.7s$)

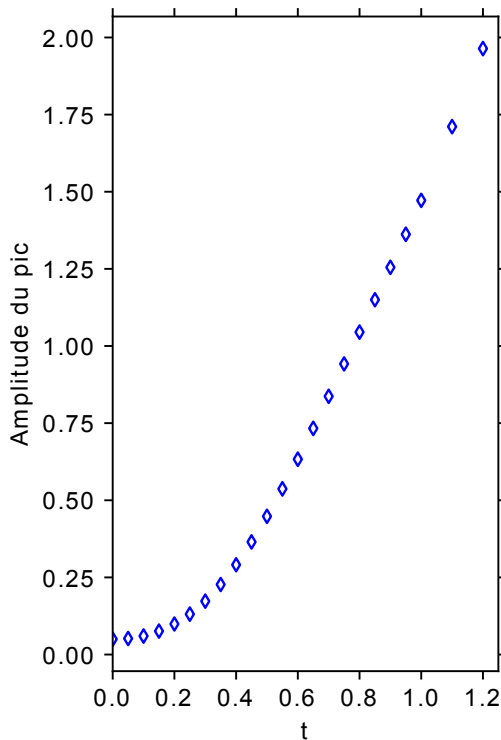


FIGURE 4.15 Amplitude du pic en fonction du temps

Nous débutons notre analyse en examinant la croissance de la perturbation à l'aide de l'amplitude de la bulle. Tel qu'il est illustré à la Figure 4.15, le développement peut se diviser en deux étapes soit une partie linéaire et une autre non-linéaire. L'étude menée montre qu'une troisième étape, dite chaotique, existe. Cette dernière débute lorsque le détachement de gouttelettes est amorcé.

La première étape identifiée se caractérise par une évolution exponentielle adoptée par l'IRT. Cette première phase est facilement visible sur la Figure 4.15 pour la plage de temps allant de $t = 0s$ à $t \approx 0.5s$. Ce comportement est en harmonie avec les résultats obtenus par Liu et al. [38] et Liang et al. [39]. Cette première phase à croissance exponentielle est typique dans les IRT est elle est gouvernée par la théorie de la stabilité linéaire [39]. Cette étape correspond à l'évolution de la perturbation sans formation de nuages et de brins.

Par la suite, la bulle et les brins sont formés (Figure 4.11c). Ceci indique le début de la deuxième phase où l'évolution se fait à une vitesse constante, dite aussi vitesse de saturation de la bulle U_{bmax} . L'évolution à vitesse constante se traduit par une amplitude variant de manière linéaire comme il peut être observé sur la Figure 4.15 pour $\forall t > 0.5s$.

Ces deux étapes d'évolution sont des comportements classiques observés par de nombreuses études faites sur les instabilités de Rayleigh-Taylor. Notamment, nous pouvons citer les travaux de Goncharov [40], Ding et al. [41]. L'obtention de ces résultats avec notre algorithme numérique met en évidence sa capacité à simuler des écoulements visqueux et diphasiques.

La comparaison entre les métriques Bh et Sh (Figure 4.14) ont été mesurées en fonction du temps entre les modèles de suivi et notre modèle de pseudo-concentration afin de faire une comparaison quantitative.

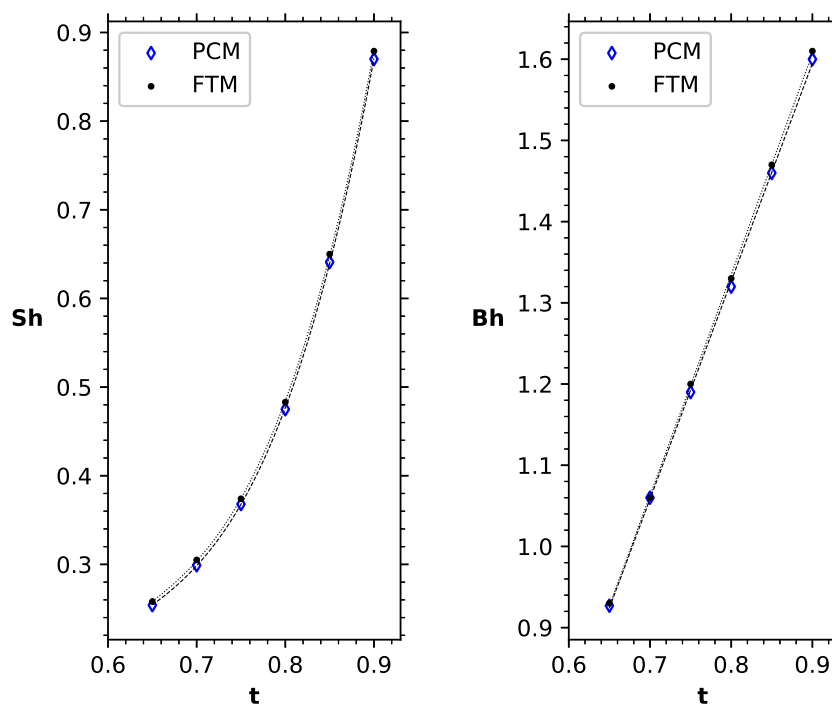


FIGURE 4.16 Comparaison des métriques Bh et Sh entre les modèles de suivi et pseudo-concentration en fonction du temps

Les graphiques des Figures 4.16 et 4.17 témoignent que les résultats obtenus entre les deux méthodes se suivent étroitement. Malgré un faible décalage entre les courbes, notre algorithme a réussi à reproduire les mêmes résultats et nous permet de continuer la simulation à des temps $t > 0.9s$. De plus, en se basant sur l'analyse faite préalablement, notre algorithme suit le comportement dans la littérature.

En se basant sur cette analyse et en sachant que jusqu'ici notre modèle est fidèle à la physique de l'IRT, nous poursuivons notre étude avec l'évolution de l'IRT lorsqu'il y a détachement des gouttelettes et lorsque son comportement devient chaotique.

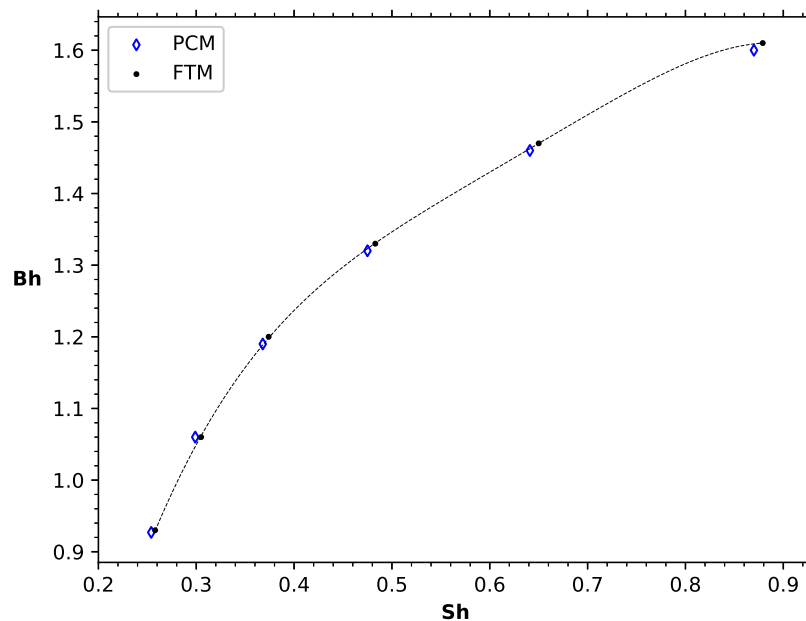


FIGURE 4.17 Comparaison de l'évolution de B_h en fonction de S_h entre le modèle de suivi et le modèle de pseudo-concentration

L'aspect "chaotique" décrit dans les travaux de Liang et al. [39] découle du fait que le nuage et sa vitesse de croissance deviennent instables et fluctuent en fonction du temps. Ce comportement peut être apprécié dans la Figure 4.18 où le nuage perd sa symétrie et le déferlement des brins devient aléatoire.

Un autre phénomène intéressant qui peut être apprécié dans notre simulation est celui de l'impact du nuage avec la limite basse du bassin. Lors de l'impact, le nuage emprisonne le fluide de plus basse densité dans des "poches" de fluide. Ces poches sont identifiées en bleu dans la Figure 4.18 où il est aussi possible d'apprécier la formation des jets horizontaux identifiés en rouge.

Ces résultats démontrent la capacité de notre modèle à reproduire des simulations classiques et en étroite concordance avec des modèles préalablement validés et convergés. D'autre part, ce cas permet d'apprécier la puissance du modèle implémenté et son aptitude à capter la formation de gouttelletes qui lui permet, en théorie, de continuer la simulation jusqu'à atteindre un équilibre et de capturer l'impact avec la paroi inférieure. Cette subtilité propre à notre modèle s'avère fortement intéressante dans d'autres cas plus complexes comme celui présenté dans la section suivante.

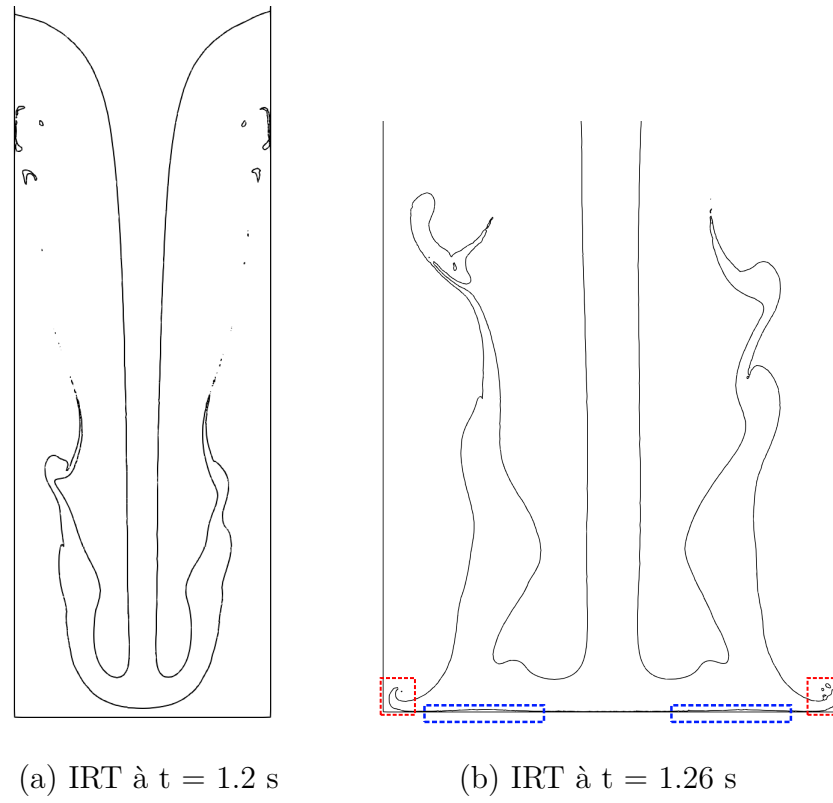


FIGURE 4.18 Interface de l'instabilité de Rayleigh-Taylor à différents instants après rupture des brins

4.5 Large Gas Pocket

4.5.1 Présentation du cas

L'analyse du sloshing des réservoirs de gaz naturel liquéfié (GNL) représente un défi pour l'industrie donnant naissance à un intérêt particulier pour la recherche de ce phénomène. Le transport du GNL se fait généralement par moyen maritime, les mouvements du navire lors de son déplacement induisent des oscillations aléatoires dans les réservoirs contenant le GNL, créant un déplacement périodique propice à la création du sloshing (ballotement). Ces interactions hydrostructurelles donnent naissance à des impacts et influencent l'ondulation sur la charge du système de confinement.

À cet effet, plusieurs analyses expérimentales ont été menées afin de reproduire les effets du sloshing dans les réservoirs maritimes (Figure 4.19). Nous référons tout lecteur intéressé aux travaux de Bogaert et al. [42]. Comme mentionné dans les chapitres 1 et 2, les essais expérimentaux représentent une source de données précieuses et irremplaçables, ceci vient avec un coût monétaire élevé sachant qu'il est extrêmement complexe de reproduire les conditions voulues et forçant une contrainte sur le nombre d'essais possibles à réaliser et la nécessité d'avoir un modèle numérique fiable.

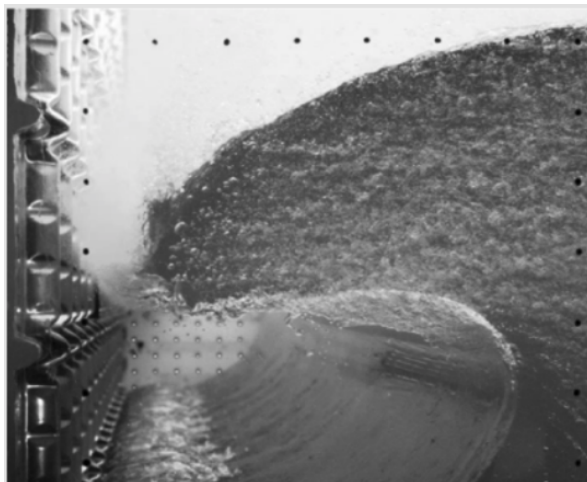


FIGURE 4.19 Crête avant impact lors du sloshing de l'eau

Le cas étudié découle des travaux réalisés par Guilcher et al. [43] à l'aide de la méthode SPH décrite dans le chapitre 2. Il a été repris dans d'autres études telles que Vautrin [1], Étienne et al. [44] qui s'appuient sur la méthode de suivi d'interface sur CADYF. Nous reprenons ce cas lors de ces travaux afin de tenter sa résolution à l'aide de notre nouvel algorithme numérique.

Il s'agit d'un cas à échelle réduite (1 :40) en se basant sur une similarité du nombre de Froude et on utilise toutes les conditions réelles pour la mise en place de la simulation qui est faite en supposant des fluides incompressibles.

Il est pertinent de mentionner que le cas "Large Gas Pocket" représente un défi, non seulement pour notre algorithme, mais aussi pour les divers codes de calcul qui ont déjà été testés. Néanmoins, notre algorithme se confronte à un défi supplémentaire étant donné que les instabilités des surfaces libres sont fortement liées à la tension de surface et la viscosité. La portée de ces travaux a limité le développement de notre algorithme de sorte qu'il n'a pas été doté d'une modélisation pour la tension superficielle amplifiant davantage les instabilités de surface. De plus, notre modèle par sa nature est extrêmement sensible au ratios de densité et de viscosité vu que la distinction entre les fluides se base purement sur ces deux propriétés physiques des fluides.

Comme pour les autres cas, le tableau 4.4 résume les conditions utilisées lors du lancement de la simulation ainsi que les propriétés physiques qui s'y impliquent.

TABLEAU 4.4 Propriétés physiques des fluides et conditions limites pour le cas LGP

LARGE GAS POCKET	Phase 1	Phase 2
Masse Volumique ρ_0 (kg/m ³)	1.2257	998.78
Viscosité dynamique μ_0 (Pa · s)	$1.108 \cdot 10^{-3}$	$1.7965 \cdot 10^{-5}$
Champs de pesanteur \mathbf{g} (m/s ²)	-9.81	
Vitesse initiale \mathbf{U}_{init} (m/s)	[0,0]	
Limite gauche (Γ_1)	$u = 0 \mid v = \text{Libre} \mid \varphi = \text{Libre}$	
Limite basse (Γ_2)	$u = \text{Libre} \mid v = 0 \mid \varphi = \text{Libre}$	
Limite droite (Γ_3)	$u = 0 \mid v = \text{Libre} \mid \varphi = \text{Libre}$	
Limite haute (Γ_4)	$u = \text{Libre} \mid v = \text{Libre} \mid \varphi = \text{Libre}$	

Pour reproduire une vague qui formera l'impact d'intérêt montré à la Figure 4.19, le domaine de calcul est doté d'une limite bathymétrique elliptique ayant un demi-grand axe de 0.45 m et un demi-petit axe de 0.07 m. Ainsi, le cas à résoudre devient celui d'une rupture de barrage avec une forme géométrique définie à l'état initial et soumis à la gravité comme illustrée à la Figure 4.20.

La définition de la forme initiale du liquide et donc de son interface est générée par la formule analytique suivante :

$$y_{int} = \frac{h + a + \tanh(r(x - x_p x_l))}{\lambda} \quad (4.2)$$

avec :

$$h = 7.6 \quad a = 3.6 \quad r = 0.44 \quad x_p = 3.1 \quad \text{et} \quad x_l = 5.0$$

et où la valeur $\lambda = 40$ correspond au ratio d'échelle.

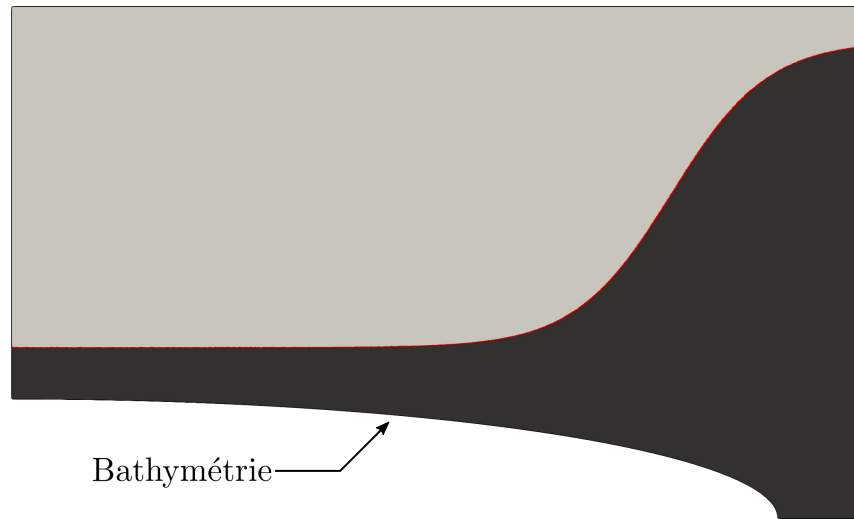


FIGURE 4.20 État initial de la simulation (LGP)

Avant de présenter les résultats obtenus, il est important de comprendre que ce cas a été un vrai défi pour notre modèle. Afin de mieux comprendre pourquoi, nous expliquerons, de manière détaillée, les différentes raisons et astuces qui ont permis de simuler ce problème et nous expliquerons aussi la raison pour laquelle nous obtenons les résultats qui seront présentés plus bas.

Différents aspects sont responsables de la complexité à résoudre ce modèle, en voici les causes principales :

- **Haut Reynolds et Ratio de densité/viscosité** : Le défi des écoulements diphasiques réalistes, comme celui-ci, ne se limite pas seulement à un rapport de densité (et/ou viscosité) élevée, mais est également associé à un nombre de Reynolds élevé. L'effet combiné des deux phénomènes rend la simulation extrêmement difficile à stabiliser, et ce malgré l'utilisation de schémas de marche temporelle implicites comme fait dans `cadyf`. Ces instabilités sont analysées dans les travaux de Wang et al. [26].

- **Adaptation de maillage local** : Comme déjà expliqué dans le chapitre 3, contrairement aux approches d'interface nette, nous développons une interface diffuse avec une épaisseur non nulle pour connecter les deux fluides non miscibles. L'effet du maillage proche de l'interface a donc une grande influence sur l'épaisseur de cette dernière et éprouve un phénomène de diffusion qui est une source d'instabilité directement liée à la modélisation mathématique du modèle.
- **Absence de la tension de surface** : La tension de surface sur un fluide induit une pression normale à la surface libre du fluide qui est proportionnelle à la courbure de la surface. Ce phénomène s'avère être un élément stabilisateur pour le cas LGP. En effet, comme il sera montré dans la section suivante, nous tentons de simuler un vague déferlant d'eau. Ce déferlement fait partie du cas étudié, mais la tension superficielle ajoute une force physico-chimique permettant de réduire ce déferlement jusqu'à un certain point. Son absence dans notre modèle est largement ressentie.

La combinaison des phénomènes mentionnés ci-haut crée un problème de stabilité et fait en sorte que la simulation de ce cas soit extrêmement complexe du point de vue numérique. Cette complexité s'est traduite par de nombreux échecs notamment dû au nombre de Reynolds élevé qui entraîne une région de cisaillement à l'interface, créant ainsi de nombreux tourbillons. Ce phénomène peut être apprécié à la Figure 4.21 où l'on observe le déferlement anticipé de la vague et la raison principale d'échecs pour cette simulation. Malgré toute tentative, la simulation s'arrête au temps $t = 1.652s$ en raison des problèmes d'instabilité numérique combinés avec un coût de calcul élevé.



FIGURE 4.21 Déferlement anticipé dû aux instabilités accrues ($t = 0.17s$)

Le choix de diminuer le nombre de Reynolds est donc nécessaire afin de continuer notre étude. À cet effet, une augmentation de la viscosité des deux fluides a été adoptée inspiré par Vautrin [1]. Les résultats obtenus sont présentés et discutés dans la section suivante.

4.5.2 Analyse des résultats

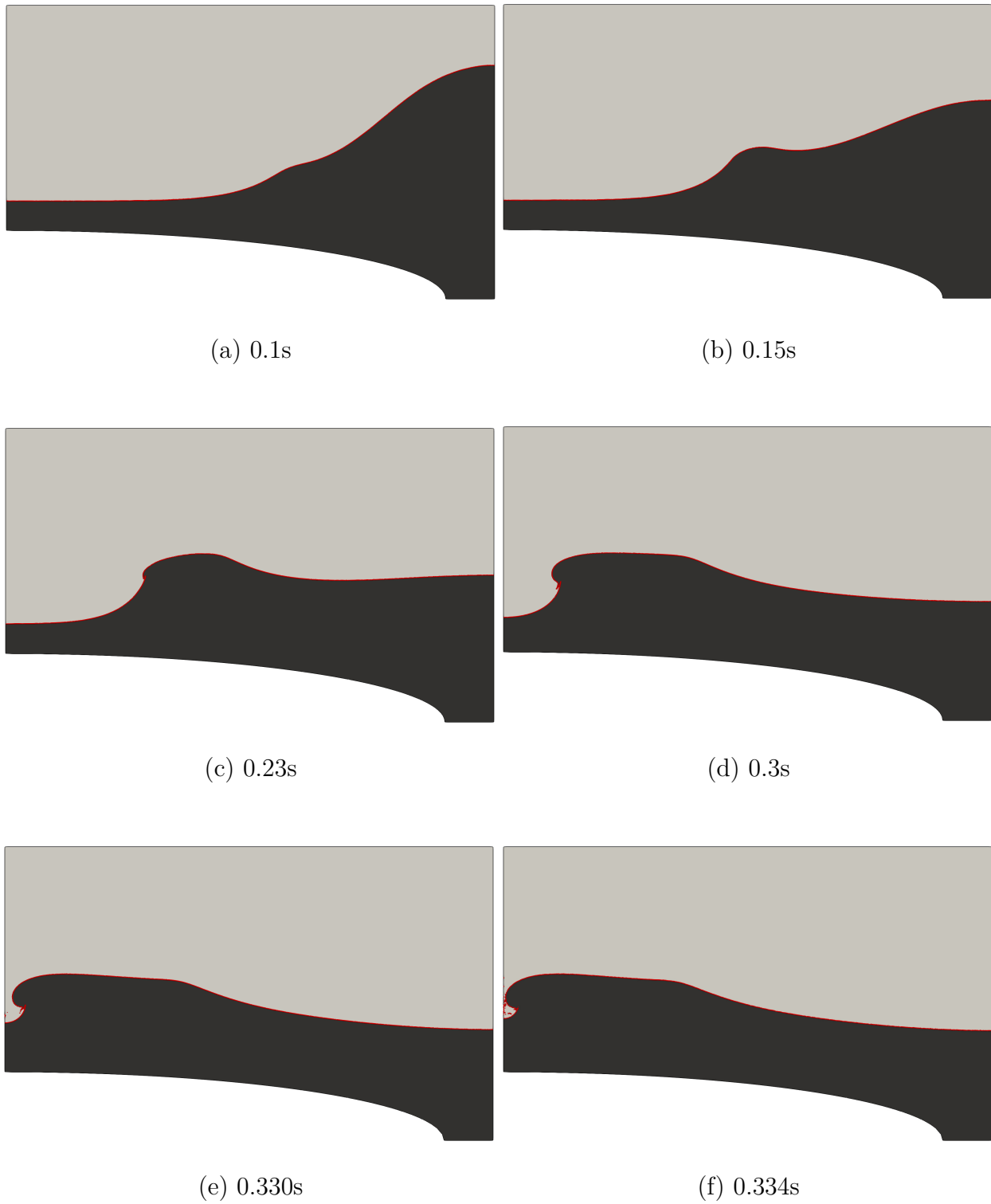


FIGURE 4.22 Évolution du cas Large Gaz Pocket dans le temps (Viscosités $\times 50$)

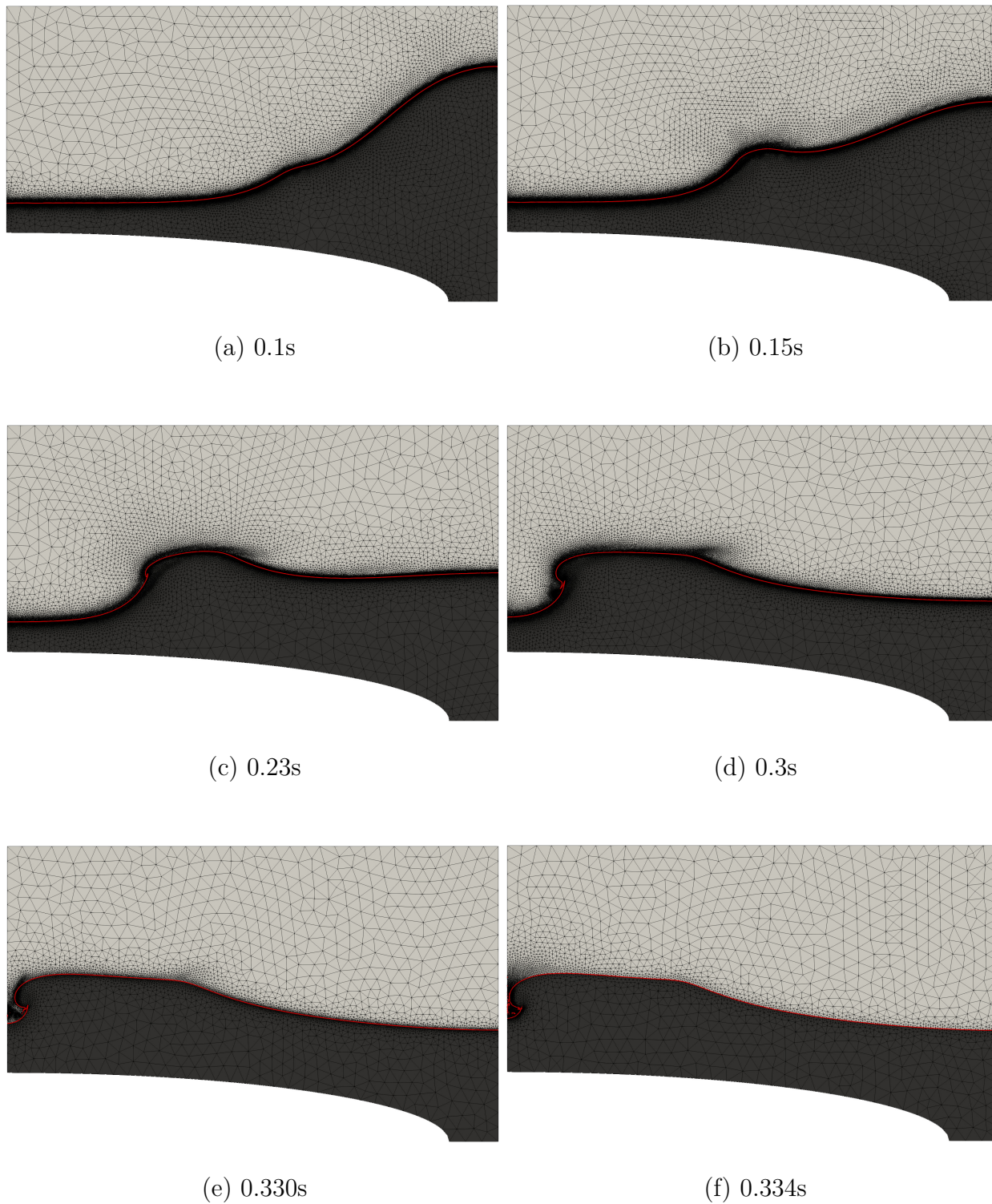


FIGURE 4.23 Comportement de l'adaptation de maillage dans le temps

La diminution du nombre de Reynolds de cette façon, rend le problème extrêmement visqueux et ne permet pas de reproduire avec exactitude les conditions décrites dans le Tableau 4.4.

La viscosité accrue a un impact direct sur la forme de la vague, néanmoins, cette astuce nous permet d'avoir le comportement souhaité qui est celui de la création d'une vague qui impactera la frontière gauche du domaine de calcul et sur lequel réside notre analyse tout en conservant les ratios des propriétés physiques entre les fluides. Une analyse adimensionnelle et une similarité selon le nombre de Prandtl nous permettront, par la suite, de faire une équivalence du cas.

Les Figures 4.22(a-f) montrent l'évolution de l'interface et la formation de la vague et son comportement à différents instants. D'autre part, les Figures 4.23(a-f) nous permettent d'apprécier l'évolution du maillage adaptatif aux mêmes instants et témoignent de la complexité du problème que l'on tente de résoudre.

On débute notre analyse par l'étude de l'adaptation de maillage lorsque celui-ci suit l'interface. Cette adaptation est pilotée par une estimation d'erreur basée sur les normes (1) « énergie », (2) « psi » tel que décrite dans le chapitre 3 avec l'opérateur de réduction des erreurs fixé à 10%. De plus, les tailles minimales et maximales permises pour le module d'adaptation ont été fixées à $15 \cdot 10^{-3}\text{m}$ et $20 \cdot 10^{-5}\text{m}$ respectivement.

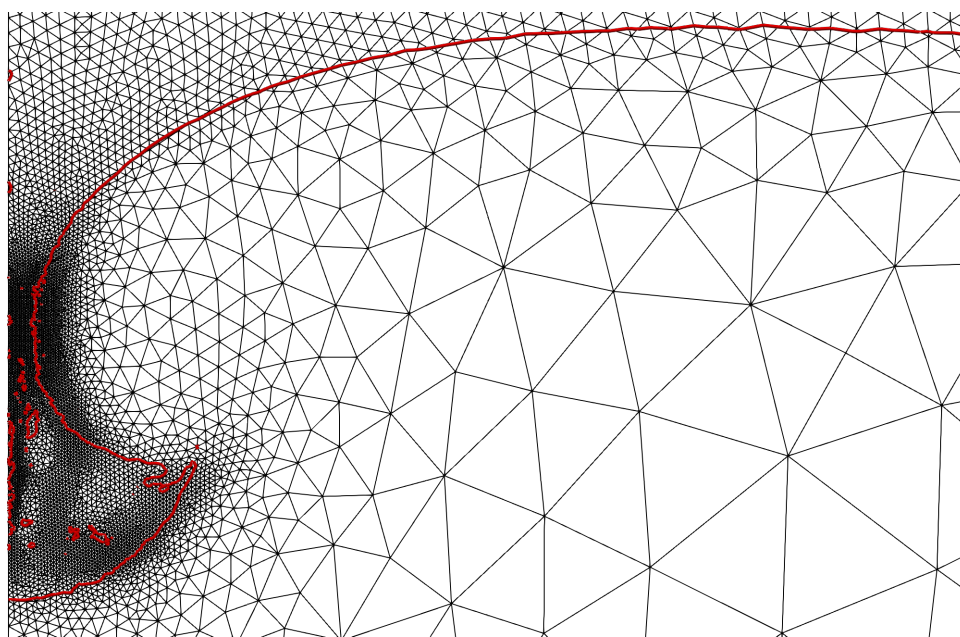


FIGURE 4.24 Maillage généré par le module d'adaptation de maillage pour la vague impactante lors du dernier pas de temps réussi ($t = 0.334\text{s}$) - interface en rouge

Finalement, après plusieurs essais, le remaillage a été établi pour qu'il ait lieu à chaque $15 \cdot 10^{-4}\text{s}$ pour l'obtention des meilleurs résultats, ce qui élève le nombre de remaillages à un total de 335.

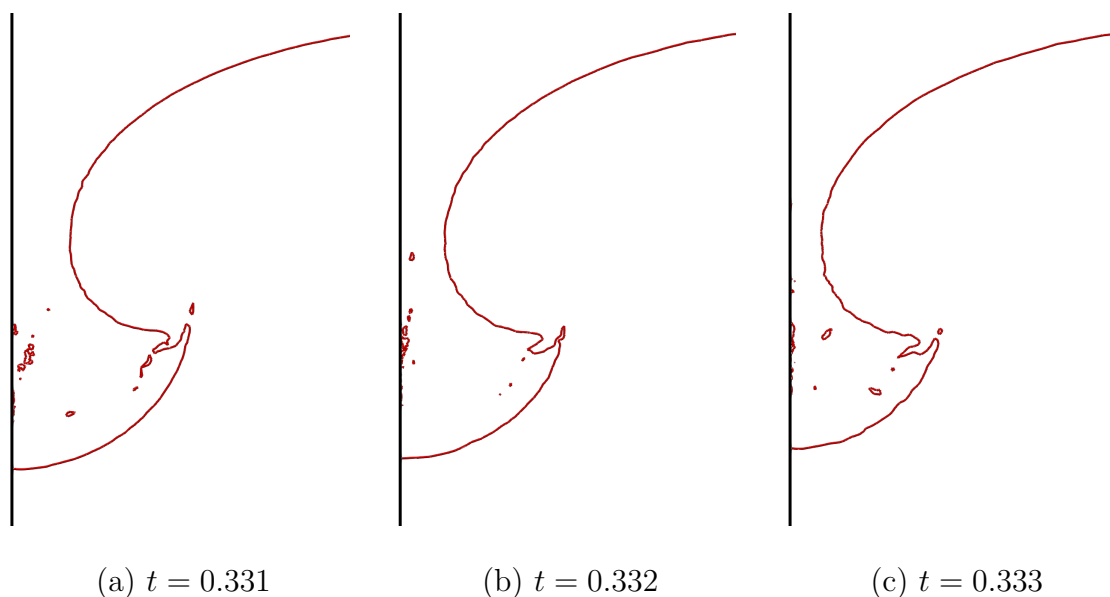


FIGURE 4.25 Lèvre de la vague à des instants consécutifs avant impact

Les Figures 4.25 (a-c) montrent l'avancement de la crête témoignant son déferlement. Il est aussi possible d'apercevoir la diffusion du champ scalaire qui se traduit par une interruption non physique de l'interface.

En plus des difficultés déjà mentionnées, lorsque la vague approche la paroi gauche du bassin, il y a formation d'une poche de gaz qui se trouve emprisonnée par la vague et la paroi du bassin. L'inertie de la vague force cette poche de gaz à être évacuée par l'espace entre la lèvre de la vague et la paroi du bassin, cependant la géométrie créée par la poche de gaz et la crête de la vague est proche de celle d'une tuyère convergente divergente aussi connue sous le nom de tuyère de Laval. Bien que la simulation lancée soit incompressible, cette géométrie fait augmenter la vitesse du gaz très rapidement. Comme montré à la Figure 4.26, la vitesse entre la lèvre de la vague et la paroi est de 38 m/s comparée à une vitesse de 19 m/s au pas de temps précédent (correspondant à une augmentation de 100% en un seul pas de temps).

Cette croissance de vitesse abrupte crée un fort gradient de vitesse de part et d'autre de l'interface et représente une nouvelle difficulté que notre modèle doit surmonter. Ceci se traduit par une taille de maille excessivement fine (voir Figure 4.24) étant donné que la procédure de maillage est forcée à augmenter la densité d'éléments dans cette région critique du domaine de calcul. D'un autre côté, les méthodes adaptatives temporelles se voient obligées de diminuer la taille du pas de temps comme le montre la Figure 4.27. La simulation devient donc excessivement coûteuse pour ce pas de temps et ceux qui suivent causant l'arrêt de la simulation.

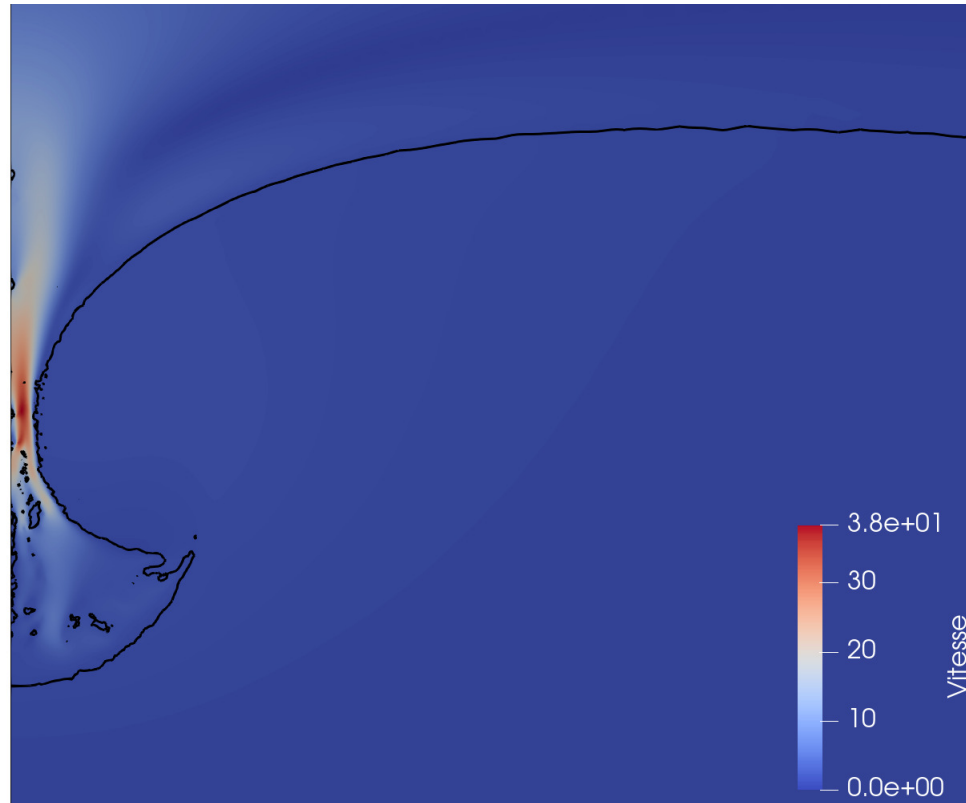


FIGURE 4.26 Contours de vitesse de la vague impactante avant son impact

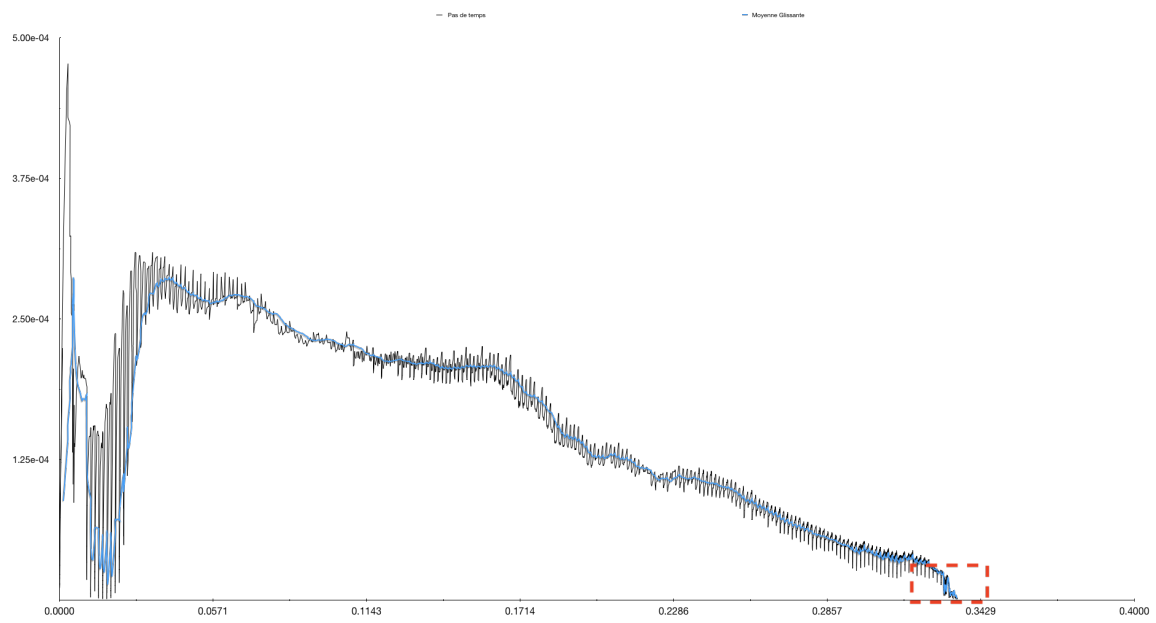


FIGURE 4.27 Moyenne glissante de l'évolution du pas de temps h en fonction du temps

En faisant référence au point mentionné dans le paragraphe précédent, nous pouvons constater la chute du pas de temps désigné par un rectangle rouge sur la Figure 4.27, ce qui correspond au moment où la lèvre de la vague est proche de la paroi du bassin et que l'effet tuyère commence à se créer.

Revenons maintenant à l'analyse de la forme et du comportement global de la vague. Il devient physiquement et par conséquent numériquement impossible d'obtenir la forme et le comportement de la vague avec les propriétés de l'eau et de l'air lorsqu'on vient multiplier par un facteur 50 leurs viscosités. Bien que le ratio de l'ensemble des propriétés reste inchangé, il ne s'agit pas du même cas et donc la forme et le comportement se doivent d'être différents.

Comme déjà expliqué plus haut, malgré un travail ardu et tous les efforts consacrés, la simulation du cas réel s'est avéré impossible à réaliser avec l'implémentation du modèle de pseudo-concentration permis par la portée de ce travail de maîtrise. Néanmoins, les résultats obtenus restent satisfaisants sachant que plusieurs modèles et solveurs numériques d'autres chercheurs éprouvent les mêmes difficultés que celle de notre modèle étant donné qu'il s'agit d'un cas qui fait appel à de la recherche de pointe.

Nous avons tout de même décidé de pousser les limites du modèle et simuler cette même vague avec un Reynolds plus élevé. Cette fois-ci, la viscosité a été multipliée par un facteur 10 et non pas 50. Les résultats obtenus sont présentés et analysés ci-bas.

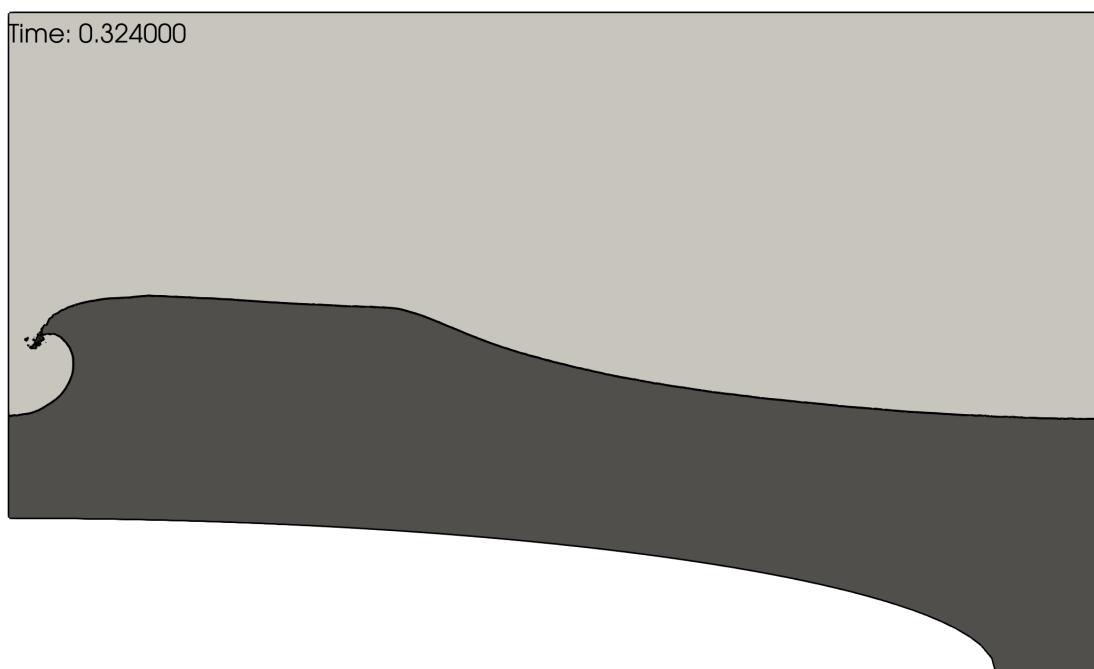


FIGURE 4.28 Dernier pas de temps simulé par Pseudo-Concentration - LGP (avant impact)
(Viscosités x 10)

Tout d'abord, la différence de forme prise par la crête de la vague entre les Figures 4.26 et A.2 permet d'apprécier l'effet de la viscosité sur le problème étudié. Le cas ayant une viscosité plus faible possède une crête plus développée et la poche de gaz formée par la forme générale de la vague est plus grande. Ceci est en accord avec la physique.

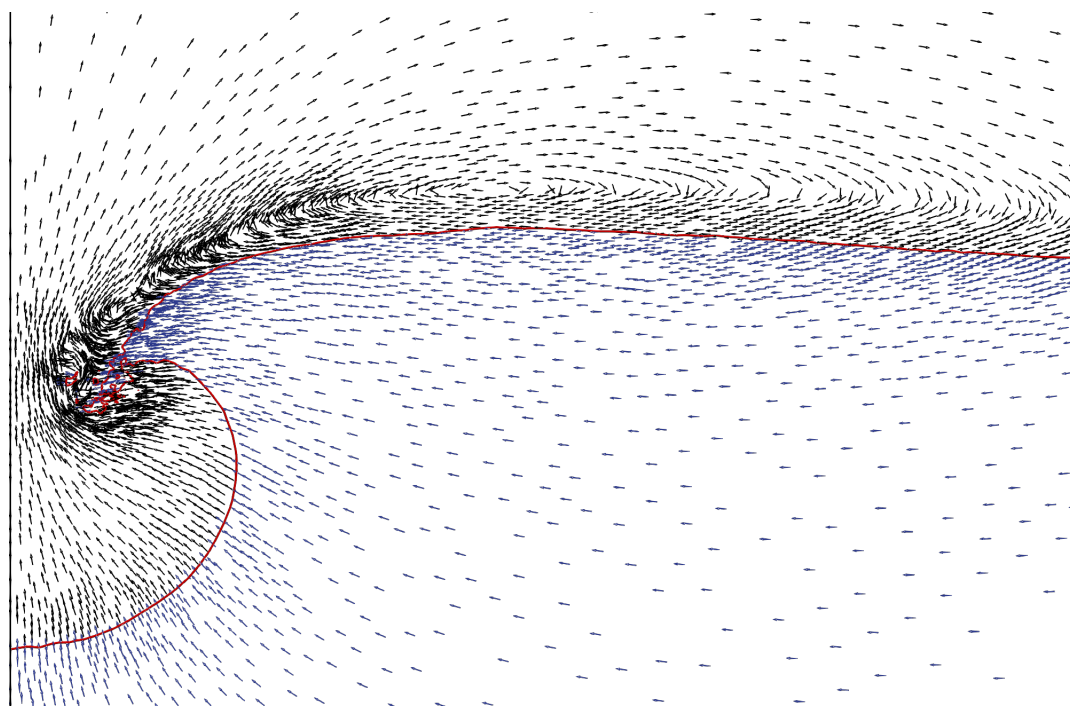


FIGURE 4.29 Adaptation de maillage (e_p, e_u, e_φ) - LGP (avant impact)

La Figure 4.29 montre les vecteurs vitesse de la vague au dernier pas de temps réussi par notre modèle. Nous pouvons témoigner le changement drastique qui existe dans le champ de vitesse de part et d'autre de l'interface qui est présenté en rouge ainsi que la présence des vortex induits par le cisaillement. L'aspect chaotique présent à la lèvre de la vague justifie la complexité subie par le calcul numérique dû au déferlement de la vague.

La croissance des perturbations dépend de l'écoulement gazeux cisailant à l'interface. Pour les vagues déferlantes comme ce cas-ci, cet écoulement gazeux cisailant est associé à de forts tourbillons situés dans une couche de gaz proche de la surface libre, ceci peut être apprécié en examinant les Figures 4.29 et 4.30.

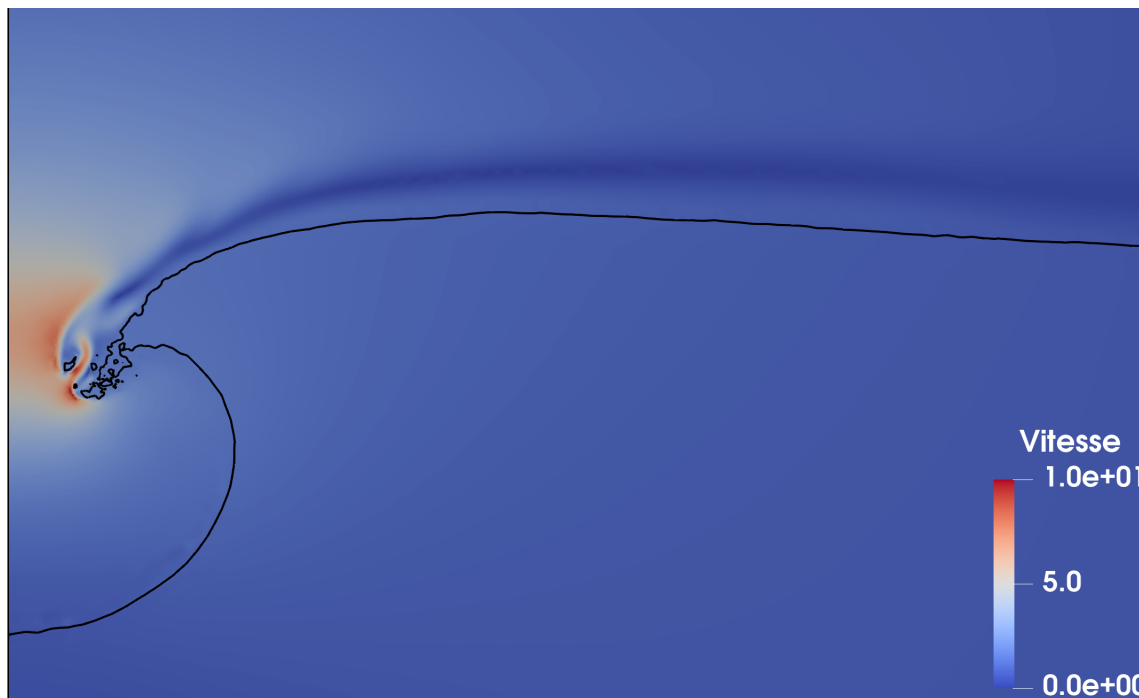


FIGURE 4.30 Interface et contours de vitesse de la vague - LGP (avant impact)

Comme le montre la figure 4.31, cette couche de vorticit   reste relativement constante sur l'extrados de la vague jusqu'   atteindre la cr  te o   la surface libre reste lisse. Elle devient d'autant plus importante au niveau de la cr  te et sur l'  paule de l'onde o   les instabilit  s s'aggravent. Nous pouvons ainsi   mettre l'hypoth  se que plus la courbure de l'interface est grande, plus le flux de gaz cisailant est fort et donc, plus le d  veloppement des instabilit  s est fort. Ceci incite le d  ferlement anticip   de la cr  te et surcharge notre mod  le qui est d  muni de la tension superficielle et qui permettrait d'att  nuer ce ph  nom  ne.

Un dernier point    souligner est la capacit   de notre mod  le    capturer les grandes d  formations topologiques    l'interface. En effet, notre mod  le est en mesure de capturer le d  ferlement et le d  tachement de la cr  te (voir Figure 3.13) que l'on peut aussi observer dans les essais exp  rimentaux (Figure 4.19).

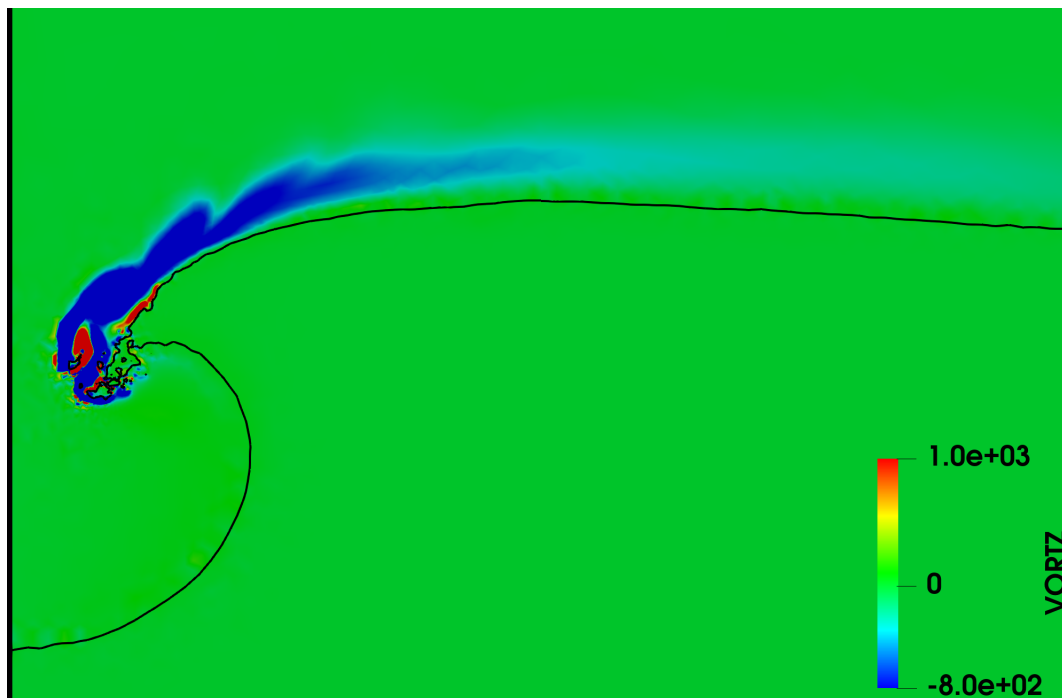


FIGURE 4.31 Vorticité au niveau de la crête de la vague - LGP (dernier pas de temps)

Bien que les résultats ne soient pas ceux désirés, l'étude de ce cas par moyen de la méthode développée dans ce travail permet d'exposer la puissance derrière ce modèle de pseudo-concentration. Sa capacité à capturer de grandes déformations ainsi que le détachement des gouttelettes lui donne un avantage par rapport aux méthodes préalablement utilisées sur *cadyf*. De la même façon, cette étude montre aussi que le développement fait dans la portée de ce travail n'est pas suffisant pour atteindre le plein potentiel de cette méthode numérique. À cet effet, plusieurs ajouts devront être implémentés afin de pouvoir simuler avec succès le cas de la vague impactante exposé dans cette section. Quelques suggestions sont discutées dans la section suivante qui conclut ce travail de maîtrise.

Finalement, la Figure 4.32 montre l'effet de la tension de surface sur la crête de la vague et permet d'apprécier la proximité avec laquelle notre modèle résout le cas de la vague déferlante. Les forces issues de la tension superficielle causant la contraction du liquide viennent contre le déferlement de la crête tel que l'on observe dans la Figure 4.32.

Il ne faut tout de même pas oublier que la dissipation et diffusion du champ scalaire advecté sont des facteurs importants et nuisent énormément à la bonne résolution du problème, ceci montre que l'algorithme d'affûtage de l'interface utilisé dans ce modèle n'est pas suffisant pour éliminer ce problème en sa totalité. Des exemples de la diffusion du champ $\varphi(\mathbf{x}, t)$ sont présentés dans l'annexe A.

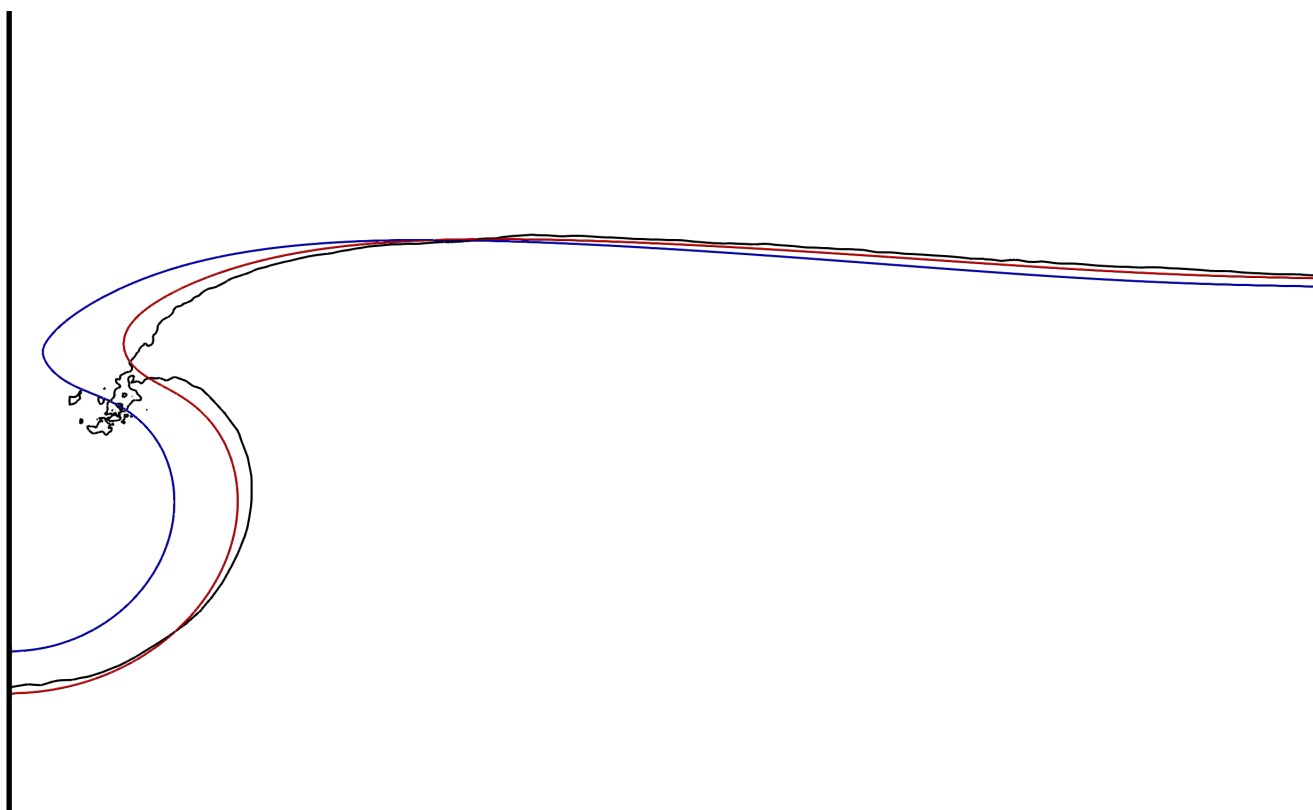


FIGURE 4.32 Comparaison entre le modèle de suivi d'interface en rouge ($t = 0.328s$) et bleu ($t = 0.331s$) et le modèle de pseudo-concentration développé dans ce travail en noir ($t = 0.334s$)

CHAPITRE 5 CONCLUSION

Ce chapitre conclut ce mémoire en débutant par une synthèse des travaux effectués dans le cadre de ce projet. On parlera ensuite des limitations à la solution proposée et donc du modèle développé ainsi que des problèmes qui ont été rencontrés tout au long du développement. Finalement, on effectuera une ouverture sur les possibles améliorations qui permettraient à l'outil développé d'être plus performant, mais aussi des travaux futurs qui devraient être envisagés afin de perfectionner le modèle développé.

5.1 Synthèse des travaux

Dans le cadre de ce projet de recherche, nous avons développé un nouvel algorithme numérique en éléments finis adaptatifs en temps et en espace à l'aide de la méthode de pseudo-concentration. Ce développement se devait d'être le plus fidèle possible aux écoulements diphasiques afin de pouvoir capturer et modéliser l'ensemble des phénomènes physiques qui découlent d'un écoulement polyphasique et qui sont extrêmement difficiles à obtenir avec d'autres modélisations telles que la rupture et coalescence de phases.

La solution développée inclut l'adhérence d'une nouvelle variable dans le code source et le couplage d'une équation de transport entre cette nouvelle variable et les équations de Navier-Stokes en utilisant la méthode des éléments finis. Cette équation de transport est résolue de manière monolithique simultanément avec les autres degrés de liberté présents dans le système d'équations. Cette nouvelle méthode utilise la formulation Eulérienne des équations de Navier-Stokes. Le modèle utilise une adaptation en temps et en espace lui permettant d'être plus efficace lors des résolutions numériques. L'adaptation en espace est basée sur l'ajout d'un nouvel estimateur d'erreur par rapport au nouveau degré de liberté ajouté au système et augmente la robustesse du modèle développé.

Après avoir présenté le développement et l'implémentation du modèle, on l'a vérifié et testé à l'aide de cas purement académiques afin de s'assurer que celui-ci résout comme prévu les équations ajoutées. Nous avons, enfin, réalisé une série de problèmes en ordre de complexité croissante et en se comparant auprès d'autres méthodes numériques afin de valider la correspondance entre les solutions proposées.

Notre méthode a montré de bonnes capacités à suivre des méthodes préalablement testées. Elle se montre aussi capable de modéliser le fractionnement et la coalescence de phases malgré la présence d'instabilités et sans la modélisation de la tension superficielle.

5.2 Limitations de la solution proposée

- **Absence de la modélisation de tension de surface**

La tension de surface est la tendance des surfaces liquides à se rétracter dans la plus petite surface possible. Ceci est un phénomène physico-chimique d'une extrême importance dans les écoulements diphasiques. L'effet global peut être assimilé au fait que le liquide se comporte comme si sa surface (donc l'interface) était recouverte d'une membrane élastique. Cette force de rétention vient diminuer la présence d'instabilités retrouvées lors de ces travaux et rend toute simulation plus physique et proche de la réalité.

- **Gestion de l'adaptation de maillage**

Présentement, l'adaptation de maillage doit être préalablement fixée lors du lancement de la simulation et n'est pas automatique comme pour les autres degrés de liberté. Cette automatisation déclenchée par un seuil d'erreur se doit encore d'être développée.

- **Écoulements compressibles**

Bien que nous avons entamé le développement du code pour traiter les écoulements compressibles, aucune simulation n'a été faite en compressible étant donné que le développement n'a pas encore été vérifié.

- **Modèle développé uniquement en 2D**

Bien que le développement du modèle en 2D est déjà un exploit, il n'existe pas ou presque pas de cas réels d'écoulements diphasiques en 2D. Ceci rend donc l'application de notre modèle à des études très limitées et académiques.

5.3 Améliorations futures et travaux recommandés

- **Ajout d'une stabilisation pour l'équation de transport**

Présentement, aucune méthode de stabilisation numérique n'est ajoutée dans l'implémentation du modèle. L'un des premiers travaux qui devrait être envisagé dans le futur est celui de l'activation de modèles de stabilisation numérique tels que la stabilisation GLS (Galerkin Least Squares). Cette formulation de stabilisation est couramment utilisée étant donné que sa nature stabilisatrice empêche l'oscillation numérique pour les écoulements incompressibles en utilisant des fonctions d'interpolation d'ordre égal pour la vitesse et la pression et préserve la cohérence de la méthode Galerkin standard.

- **Ajout de la tension de surface**

Ceci est un point majeur pour les futurs travaux envisagés en parallèle avec l'ajout d'une méthode de stabilisation numérique. Tel que déjà expliqué, il devient difficile de simuler des écoulements diphasique réalistes en absence de la force tangentielle et normale induite par la tension de surface.

Ce travail doit être fait à l'aide d'une force volumique et la localisation de l'interface. L'ajout se doit d'être ponctuel là où le champ scalaire de pseudo-concentration est nul, témoignant donc la présence de l'interface. Nous référons les travaux de *Dufour et Pelletier* [45] à tout lecteur envisageant tel exploit.

- **Implementer un modèle hybride à l'aide de Cahn-Hilliard**

Comme présenté dans le chapitre 3, l'équation de Cahn-Hilliard serait un ajout de haute pertinence au modèle développé jusqu'ici. Son implémentation viendrait non seulement stabiliser le code, mais pourrait permettre aussi l'intégration de la tension de surface de façon directe lors du traitement du champ scalaire φ et son advection. Une étude plus poussée pourrait déterminer si le couplage Cahn-Hilliard Navier-Stokes pourrait venir remplacer l'équation d'advection pure telle qu'implémentée actuellement dans le code. Ceci ouvre donc une nouvelle possibilité de modélisation pour les écoulements diphasiques sur CADYF.

- **Tester le développement pour les écoulements compressibles**

Dans le chapitre 3, nous avons exposé l'implémentation faite et présente dans le développement actuel pour le traitement des écoulements compressibles à l'aide de la méthode de pseudo-concentration issue de ces travaux. Ces routines se doivent d'être vérifiées et testées à l'aide de cas simple afin de s'assurer de leur bonne implémentation étant donné que cette tâche n'as pas été accomplie dans la portée de ces travaux.

- **Révision de la structure du code et sa documentation**

Malgré les qualités et les capacités démontrées à plusieurs reprises de `cadyf`, celui-ci souffre d'une absence de documentation sur son fonctionnement et ses différentes modalités et est atteint du syndrome appelé « programmation spaghetti ».

Le développement de nouveaux modèles avec un tel manque de documentation exige une grande quantité de temps, nuit au bon développement et incite la création de nouvelles routines plutôt que la généralisation de routines déjà existantes. Ceci demande encore plus de documentation vu que la majorité des développements sur `cadyf` découlent de projets de recherche indépendants.

La documentation nécessaire devient donc extrêmement volumineuse, mais d'autant plus nécessaire pour chaque ajout de code.

Il devient donc intéressant et primordial, à ce stade du code, de le munir d'une documentation bien structurée et à jour contenant l'ensemble des modalités du code ainsi que le transfert d'information entre chacun de ces modules afin de regagner le contrôle sur le flux de données du code.

L'imposition de règles de style de programmation est aussi encouragée. Dans un projet plus ambitieux, l'encapsulation des routines (ou du moins les plus essentielles) serait aussi recommandée afin de contrôler la situation de code spaghetti dans laquelle se trouve le code actuellement.

RÉFÉRENCES

- [1] Y. Vautrin, “Modélisation et simulation numérique d’écoulements diphasiques de fluides séparés par une interface avec une méthode d’éléments finis adaptative en espace et en temps,” Thèse de doctorat, Université de Montréal - Polytechnique Montréal, 2020.
- [2] R. Hellmuth, “Description of Two-phase flow.” [En ligne]. Disponible : https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/0/06/Two-phase_Flow.svg
- [3] S. Mirjalili, S. S. Jain et M. S. Dodd, “Interface-capturing methods for two-phase flows : An overview and recent developments,” 2017.
- [4] K. Luo, C. Shao, M. Chai et J. Fan, “Level set method for atomization and evaporation simulations,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 73, p. 65–94, juill. 2019. [En ligne]. Disponible : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360128518301710>
- [5] S. Fortin, “Étude de bistabilité des bulles ellipsoïdales par une méthode ALE de résolution des écoulements diphasiques,” Thèse de doctorat, Université de Montréal - Polytechnique Montréal, 2019.
- [6] A. Hay, S. Etienne, D. Pelletier et A. Garon, “hp-Adaptive time integration based on the BDF for viscous flows,” *Journal of Computational Physics*, vol. 291, p. 151–176, juin 2015. [En ligne]. Disponible : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999115001692>
- [7] A. I. of Aeronautics and Astronautics, “Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations.”
- [8] W. Dettmer et D. Perić, “A computational framework for free surface fluid flows accounting for surface tension,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 195, n°. 23-24, p. 3038–3071, avr. 2006. [En ligne]. Disponible : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045782505002380>
- [9] A. Faghri et Y. Zhang, “Transport Phenomena in Multiphase Systems,” dans *Transport Phenomena in Multiphase Systems*. Elsevier, 2006, p. 853–949. [En ligne]. Disponible : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780123706102500167>
- [10] C. Hirt et B. Nichols, “Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries,” *Journal of Computational Physics*, vol. 39, n°. 1, p. 201–225, janv. 1981. [En ligne]. Disponible : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0021999181901455>
- [11] A. Prosperetti et G. Tryggvason, *COMPUTATIONAL METHODS FOR MULTIPHASE FLOW*, 2006.

- [12] S. O. Unverdi et G. Tryggvason, “A Front-Tracking Method for Viscous, Incompressible, Multi-fluid Flows,” *Journal of Computational Physics*, 1990.
- [13] I. Roghair, M. Van Sint Annaland et J. Kuipers, “An improved Front-Tracking technique for the simulation of mass transfer in dense bubbly flows,” *Chemical Engineering Science*, vol. 152, p. 351–369, oct. 2016. [En ligne]. Disponible : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009250916303268>
- [14] F. H. Harlow et J. E. Welch, “Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface,” *Phys. Fluids*, vol. 8, n^o. 12, p. 2182, 1965. [En ligne]. Disponible : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1761178>
- [15] S. McKee, M. F. Tomé, J. Ferreira, J. A. Cuminato, A. Castelo, F. Saousa et N. Mangiacchi, “The MAC method (review),” *Computers & Fluids*, 2007.
- [16] S. Osher et J. A. Sethian, “Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations,” *Journal of Computational Physics*, vol. 79, n^o. 1, nov. 1988. [En ligne]. Disponible : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0021999188900022>
- [17] W. F. Noh et P. Woodward, “SLIC (Simple Line Interface Calculation),” dans *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics June 28 – July 2, 1976 Twente University, Enschede*, J. Noh, K. Hepp, H. A. Weidenmüller, J. Zittartz, W. Beiglböck, A. I. van de Vooren et P. J. Zandbergen, édit. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1976, series Title : Lecture Notes in Physics. [En ligne]. Disponible : http://link.springer.com/10.1007/3-540-08004-X_336
- [18] M. D. Torrey, “NASA-VOF2D,” 1985. [En ligne]. Disponible : <https://www.osti.gov/biblio/5502023>
- [19] M. Kronbichler, A. Diagne et H. Holmgren, “A fast massively parallel two-phase flow solver for microfluidic chip simulation,” *The International Journal of High Performance Computing Applications*, vol. 32, n^o. 2, p. 266–287, mars 2018. [En ligne]. Disponible : <http://journals.sagepub.com/doi/10.1177/1094342016671790>
- [20] E. Olsson et G. Kreiss, “A conservative level set method for two phase flow,” *Journal of Computational Physics*, vol. 210, n^o. 1, nov. 2005. [En ligne]. Disponible : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999105002184>
- [21] S. Zahedi, M. Kronbichler et G. Kreiss, “Spurious currents in finite element based level set methods for two-phase flow : SPURIOUS CURRENTS IN FINITE ELEMENT BASED LEVEL SET METHODS,” *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, vol. 69, n^o. 9, p. 1433–1456, juill. 2012. [En ligne]. Disponible : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/flid.2643>

- [22] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor et J. Z. Zhu, *The finite element method : its basis and fundamentals*, 6^e éd. Amsterdam Heidelberg : Elsevier, 2010.
- [23] T. Chung, A. AC04711908] et T. CHUNG, *Computational Fluid Dynamics*, ser. Online access with purchase : Cambridge Books Online. Cambridge University Press, 2002.
- [24] E. Muller, “Application de modèles de turbulence à deux équations à la résolution éléments finis d’écoulements instationnaires,” Thèse de doctorat, Université de Montréal - Polytechnique Montréal, 2017.
- [25] E. Thompson, “Use of pseudo-concentrations to follow creeping viscous flows during transient analysis,” *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, vol. 6, n^o. 10, p. 749–761, oct. 1986. [En ligne]. Disponible : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/flid.1650061005>
- [26] Z. Wang, S. Dong, M. S. Triantafyllou, Y. Constantinides et G. E. Karniadakis, “A stabilized phase-field method for two-phase flow at high Reynolds number and large density/viscosity ratio,” *Journal of Computational Physics*, vol. 397, p. 108832, nov. 2019. [En ligne]. Disponible : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999119305169>
- [27] A. Kačeniauskas, “Dam break flow simulation by the pseudo-concentration method,” *Mechanika / Mechanics*, 2005.
- [28] J. W. Cahn et J. E. Hilliard, “Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 28, n^o. 2, p. 258–267, févr. 1958. [En ligne]. Disponible : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1744102>
- [29] N. Kühn, M. Hinze et T. Rung, “Cahn-Hilliard Navier-Stokes simulations for marine free-surface flows,” *Exp. Comput. Multiph. Flow*, mars 2021. [En ligne]. Disponible : <http://link.springer.com/10.1007/s42757-020-0101-3>
- [30] D. Pelletier, dans *A 2-D Pre-processor for the Cadyf Solver*, 2020.
- [31] O. C. Zienkiewicz et J. Z. Zhu, “A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis,” *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, vol. 24, n^o. 2, p. 337–357, févr. 1987. [En ligne]. Disponible : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/nme.1620240206>
- [32] M. Ainsworth, J. Z. Zhu, A. W. Craig et O. C. Zienkiewicz, “Analysis of the Zienkiewicz-Zhua-posteriori error estimator in the finite element method,” *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, vol. 28, n^o. 9, p. 2161–2174, sept. 1989. [En ligne]. Disponible : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/nme.1620280912>
- [33] L. Charlot, “Calcul et analyse de sensibilité des écoulements à surface libre,” Thèse de doctorat, Université de Montréal - Polytechnique Montréal.

- [34] H. B. Chen, B. Hilko et E. Panarella, “The Rayleigh-Taylor instability in the spherical pinch,” *J Fusion Energ*, vol. 13, n^o. 4, p. 275–280, déc. 1994. [En ligne]. Disponible : <http://link.springer.com/10.1007/BF02215847>
- [35] E. G. Puckett, A. S. Almgren, J. B. Bell, D. L. Marcus et W. J. Rider, “A High-Order Projection Method for Tracking Fluid Interfaces in Variable Density Incompressible Flows,” *Journal of Computational Physics*, vol. 130, n^o. 2, p. 269–282, janv. 1997. [En ligne]. Disponible : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999196955904>
- [36] S. Popinet et S. Zaleski, “A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension,” p. 31.
- [37] N. Talat, B. Mavrič, V. Hatić, S. Bajt et B. Šarler, “Phase field simulation of Rayleigh–Taylor instability with a meshless method,” *Engineering Analysis with Boundary Elements*, vol. 87, p. 78–89, févr. 2018.
- [38] W. Liu, X. Wang, X. Liu, C. Yu, M. Fang et W. Ye, “Pure single-mode Rayleigh-Taylor instability for arbitrary Atwood numbers,” *Sci Rep*, vol. 10, n^o. 1, p. 4201, déc. 2020. [En ligne]. Disponible : <http://www.nature.com/articles/s41598-020-60207-y>
- [39] H. Liang, X. Hu, X. Huang et J. Xu, “Direct numerical simulations of multi-mode immiscible Rayleigh-Taylor instability with high Reynolds numbers,” *Physics of Fluids*, vol. 31, n^o. 11, p. 112104, nov. 2019. [En ligne]. Disponible : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.5127888>
- [40] V. N. Goncharov, “Analytical Model of Nonlinear, Single-Mode, Classical Rayleigh-Taylor Instability at Arbitrary Atwood Numbers,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 88, n^o. 13, p. 134502, mars 2002. [En ligne]. Disponible : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.88.134502>
- [41] J. Ding, P. Sun, S. Huang et X. Luo, “Single- and dual-mode Rayleigh–Taylor instability at microscopic scale,” *Physics of Fluids*, vol. 33, n^o. 4, p. 042102, avr. 2021. [En ligne]. Disponible : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/5.0042505>
- [42] H. Bogaert, M. L. M. Kaminski et L. Brosset, “Full and Large Scale Wave Impact Tests for a Better Understanding of Sloshing : Results of the Sloskel Project,” dans *Volume 1 : Offshore Technology; Polar and Arctic Sciences and Technology*. Rotterdam, The Netherlands : ASMEDC, janv. 2011, p. 663–673. [En ligne]. Disponible : <https://asmedigitalcollection.asme.org/OMAE/proceedings/OMAE2011/44335/663/357418>
- [43] P. M. Guilcher, Y. Jus, N. Couty, L. Brosset, Y. M. Scolan et D. L. Touzé, “2D Simulations of Breaking Wave Impacts on a Flat Rigid Wall - Part 1 : Influence of the Wave Shape,” p. 1.

- [44] S. Etienne, Y.-M. Scolan et L. Brosset, “Numerical Study of Density Ratio Influence on Global Wave Shapes Before Impact,” dans *Volume 9 : Offshore Geotechnics ; Honoring Symposium for Professor Bernard Molin on Marine and Offshore Hydrodynamics*. Madrid, Spain : American Society of Mechanical Engineers, juin 2018, p. V009T13A025. [En ligne]. Disponible : <https://asmedigitalcollection.asme.org/OMAE/proceedings/OMAE2018/51302/Madrid,%20Spain/275677>
- [45] S. Dufour et D. Pelletier, “An adaptive finite element method for multiphase flows with surface tension,” *Computational Mechanics*, 1998.

ANNEXE A COMPARAISON DU CHAMP MARQUEUR SCALAIRE
AVEC ET SANS AFFÛTAGE

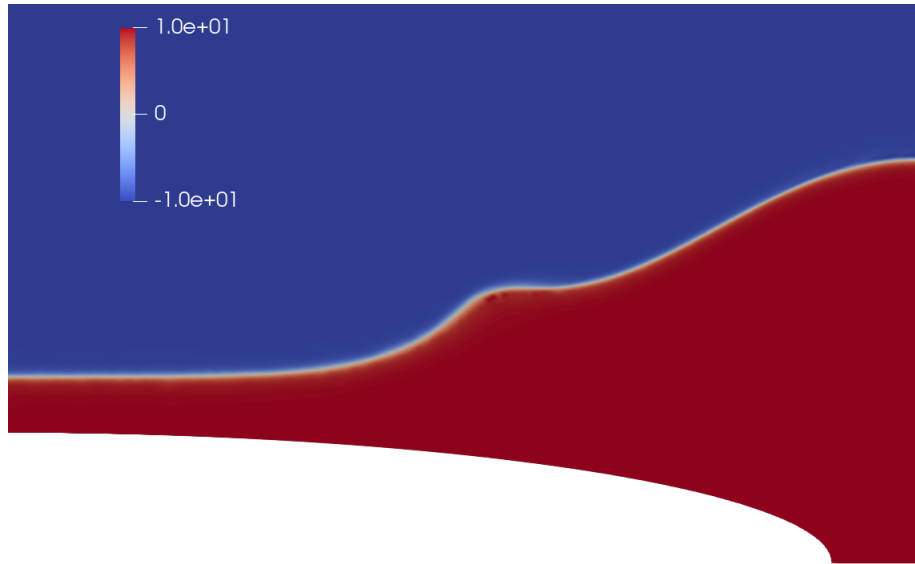


FIGURE A.1 Champ scalaire $\varphi(\mathbf{x}, t)$ pour le cas LGP à $t=0.131$ s

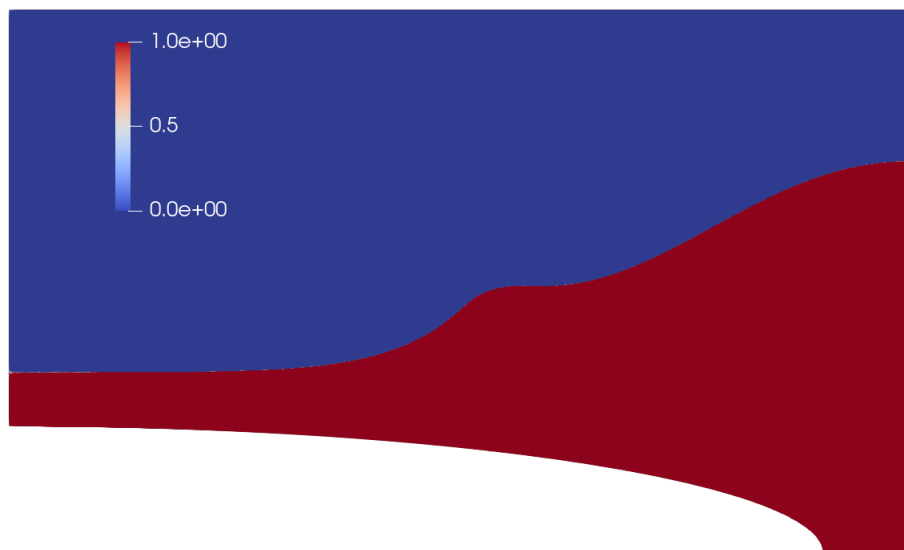


FIGURE A.2 Champ scalaire $\hat{\phi}(\mathbf{x}, t) = \mathcal{F}(\varphi(\mathbf{x}, t))$ pour le cas LGP à $t=0.131$ s