

Titre: Mise en œuvre d'un solveur de Galerkin discontinu pour la modélisation d'écoulements à surfaces libres viscoélastiques tridimensionnels
Title:

Auteur: Yann-Meing Law-Kam-Cio
Author:

Date: 2014

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Law-Kam-Cio, Y.-M. (2014). Mise en œuvre d'un solveur de Galerkin discontinu pour la modélisation d'écoulements à surfaces libres viscoélastiques tridimensionnels [Master's thesis, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.
Citation: <https://publications.polymtl.ca/1502/>

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

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/1502/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Steven Dufour
Advisors:

Programme: Mathématiques appliquées
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MISE EN ŒUVRE D'UN SOLVEUR DE GALERKIN DISCONTINU POUR LA
MODÉLISATION D'ÉCOULEMENTS À SURFACES LIBRES VISCOÉLASTIQUES
TRIDIMENSIONNELS

YANN-MEING LAW-KAM-CIO
DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES ET DE GÉNIE INDUSTRIEL
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES)
AOÛT 2014

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

MISE EN ŒUVRE D'UN SOLVEUR DE GALERKIN DISCONTINU POUR LA
MODÉLISATION D'ÉCOULEMENTS À SURFACES LIBRES VISCOÉLASTIQUES
TRIDIMENSIONNELS

présenté par : LAW-KAM-CIO Yann-Meing

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

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

M. PRUDHOMME Serge, Ph.D., président

M. DUFOUR Steven, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. N'DRI Donatien, Ph.D., membre

DÉDICACE

À mes parents et mon frère

REMERCIEMENTS

Je souhaite tout d'abord remercier mon directeur de recherche, le professeur Steven Dufour, pour m'avoir supporté, encouragé et guidé dans ce projet. Je veux aussi souligner sa disponibilité plus qu'exceptionnelle et sa patience au cours de nos rencontres. De plus, la liberté d'explorer le monde du numérique qu'il m'a accordée a été grandement appréciée.

Je tiens aussi à remercier monsieur Roland Rivard pour ses conseils judicieux, sa disponibilité et sa vision de l'analyse numérique. Son aide a été plus que nécessaire à la réalisation de ce travail.

J'aimerais remercier le président du jury, le professeur Serge Prudhomme, d'avoir accepté d'évaluer ce travail. Je tiens aussi à remercier monsieur Donatien N'dri d'avoir accepté d'être membre de mon jury et de m'avoir initié au monde de l'enseignement.

Finalement, je tiens à remercier du plus profond de mon coeur mes parents et mon frère qui m'ont toujours supporté. Sans vous, rien de cela n'aurait été possible.

RÉSUMÉ

Dans ce mémoire, un solveur de Galerkin discontinu a été implémenté dans un code d'éléments finis tridimensionnel. Le limiteur de pente de Zhang et Shu (2010) a aussi été implémenté. Notre solveur a été vérifié à l'aide du problème de Young-Laplace et du transport d'une bulle et validé avec le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède. Le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède a aussi été utilisé afin de comparer la performance de la méthode de Galerkin discontinue et de la méthode SUPG. Différents modèles pour la modélisation des écoulements viscoélastiques ont été implémentés. Ils ont été vérifiés avec le problème de la déformation d'une bulle dans un écoulement cisailé.

ABSTRACT

In this work, we have implemented a discontinuous Galerkin solver in a three-dimensional finite element code. The Zhang and Shu (2010) slope limiter was also implemented. The discontinuous Galerkin solver was verified using the Young-Laplace problem and a bubble advection problem. It was validated using a buoyancy-driven rising bubble problem. The rising bubble problem was also used to compare the performance of the discontinuous Galerkin method to the SUPG method. Various models for the modeling of viscoelastic flows were implemented. They were verified studying the deformation of a drop in a shear flow.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	vi
TABLE DES MATIÈRES	vii
LISTE DES TABLEAUX	ix
LISTE DES FIGURES	x
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xii
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 PROBLÈMES HYPERBOLIQUES	4
1.1 Motivation	4
1.1.1 Équations de Navier-Stokes incompressibles	4
1.1.2 Modélisation de la dynamique des surfaces libres	5
1.2 Équations hyperboliques	8
1.2.1 Définition du problème	8
1.2.2 Lois de conservation	9
1.3 Système d'équations hyperboliques	10
1.4 Méthodes numériques	11
1.4.1 Discrétisation en temps	12
1.4.2 Analyse numérique des méthodes implicites BDF	14
1.4.3 Discrétisation en espace	17

CHAPITRE 2	MÉTHODE DE GALERKIN DISCONTINUE	22
2.1	Formulation	22
2.2	Limiteur de pente	26
2.3	Résolution du système discret local	30
2.4	Erreur et analyse de convergence	31
CHAPITRE 3	ÉCOULEMENTS À SURFACE LIBRE	33
3.1	Capture eulérienne d’interface	33
3.1.1	Adimensionnalisation	33
3.1.2	Discrétisation des équations	34
3.2	Problème de Young-Laplace	35
3.3	Problème du transport d’une bulle	40
3.4	Bulle soumise à la poussée d’Archimède	45
3.5	Coalescence de bulles soumises à la poussée d’Archimède	53
3.6	Coalescence des bulles en présence d’une surface libre	57
CHAPITRE 4	ÉCOULEMENTS VISCOÉLASTIQUES	60
4.1	Les fluides viscoélastiques	60
4.2	Système d’équations	60
4.2.1	Modélisation de la viscoélasticité	60
4.2.2	Adimensionnalisation	62
4.2.3	Discrétisation des équations	63
4.3	Déformation d’une bulle dans un écoulement cisailé	64
CONCLUSION	70
RÉFÉRENCES	73

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1	Valeur des coefficients des schémas de type BDF.	13
Tableau 1.2	Artifice numérique introduit par les schémas en temps de type BDF.	16
Tableau 3.1	Éléments satisfaisants la condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi.	34
Tableau 3.2	Paramètres pour le problème de Young-Laplace sphérique.	36
Tableau 3.3	Paramètres du solveur.	37
Tableau 3.4	Nombre de pas de temps pour atteindre l'état stationnaire.	38
Tableau 3.5	Norme du champ de vitesse.	39
Tableau 3.6	Erreur absolue du saut en pression.	40
Tableau 3.7	Paramètres pour le problème de transport d'une bulle.	41
Tableau 3.8	Paramètres adimensionnels du problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.	46
Tableau 3.9	Erreur relative des nombres de Reynolds terminaux pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.	52
Tableau 3.10	Paramètres du problème de coalescence de bulles soumises à la poussée d'Archimède.	54
Tableau 3.11	Paramètres du problème de coalescence des bulles en présence d'une surface libre.	57
Tableau 4.1	Paramètres du problème de déformation de bulles dans un écoulement cisailé.	67
Tableau 4.2	Résultats pour le problème de la déformation de la bulle dans un écoulement cisailé.	68
Tableau 4.3	Paramètres du problème de déformation de bulles pour la paire de fluides C1-D2 dans un écoulement cisailé.	69
Tableau 4.4	Résultats du problème de la déformation de la bulle pour la paire de fluides C1-D2 dans un écoulement cisailé.	69

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Ordre de discrétisation des éléments.	20
Figure 2.1	Schéma numérique des différents flux numériques dans le plan xy . . .	24
Figure 3.1	Géométrie du problème de Young-Laplace avec une bulle sphérique. .	36
Figure 3.2	Géométrie pour le problème de transport d'une bulle.	41
Figure 3.3	Maillage pour le problème de transport d'une bulle.	42
Figure 3.4	Erreur relative en pourcentage sur la perte de volume obtenue avec les différents schémas BDF pour le problème de transport d'une bulle. Les courbes des schémas BDF d'ordre 2 à 5 sont superposées.	43
Figure 3.5	Profil de la pseudo-concentration selon l'axe des x à $y = 5$ et $z = 0$ pour le problème du transport d'une bulle. Dans les figures (a) et (b), les courbes des schémas BDF d'ordre 2 à 5 sont superposées.	44
Figure 3.6	Géométrie du problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.	47
Figure 3.7	Erreur relative sur la masse en fonction du temps pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.	48
Figure 3.8	Erreur relative sur le volume de la bulle en fonction du temps pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.	50
Figure 3.9	Forme finale des bulles (SUPG : trait pâle, DG : trait foncé) pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.	50
Figure 3.10	Agrandissement sur les bords de la forme de la calotte sphérique (SUPG : trait pâle, DG : trait foncé) pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.	51
Figure 3.11	Vitesse de montée de la bulle en fonction du temps pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.	52
Figure 3.12	Géométrie du problème de coalescence de bulles soumises à la poussée d'Archimède.	53

Figure 3.13	Erreur relative de la masse et du volume de la bulle en fonction du temps en secondes pour le problème de coalescence de bulles soumises à la poussée d'Archimède.	54
Figure 3.14	Évolution de la coalescence des bulles à différents temps dans le plan xz pour le problème de coalescence de bulles soumises à la poussée d'Archimède.	56
Figure 3.15	Géométrie du problème de coalescence des bulles en présence d'une surface libre.	57
Figure 3.16	Évolution de la coalescence des bulles à différents temps adimensionnels pour le problème de coalescence de bulles avec une surface libre. . . .	58
Figure 3.17	Erreur relative de la masse et du volume du fluide 1 en fonction du temps en secondes pour le problème de coalescence de bulles avec une surface libre.	59
Figure 4.1	Paramètres de déformation.	64
Figure 4.2	Géométrie du problème de la déformation d'une bulle dans un écoulement cisailé.	65
Figure 4.3	Plan xz du maillage pour le problème de la déformation de la bulle dans un écoulement cisailé.	67
Figure 4.4	Paramètre de déformation et erreur relative sur la perte de volume de la bulle en fonction du temps dans le cas NN.	68

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Abbréviations

Méthodes numériques

BDF i	: formule de différence arrière d'ordre i
DG	: méthode de Galerkin discontinue («discontinuous Galerkin»)
DEVSS	: «discrete elastic-viscous-split-stress»
SUPG	: «streamline-upwind/Petrov-Galerkin»
GMRES	: «generalized minimal-residual»
ILU0	: préconditionneur de la factorisation LU incomplète

Méthodes de reconstruction

DL2P	: double projection dans L^2 («double L^2 projection»)
SLF	: simple approximation linéaire («simple linear fitting»)
DLF	: double approximation linéaire («double linear fitting»)
QF	: approximation quadratique («quadratic fitting»)
MR	: développement de Taylor quadratique (Marchandise-Remacle)

Autres

CSF	: «continuum surface force»
TV	: variation totale («total variation»)
TVD	: «total variation diminishing»
TVDM	: «total variation diminishing in the mean»

Espaces

R^3	: espace tridimensionnel des réels
L^2	: espace des fonctions de carré intégrable
H^1	: espace de Sobolev
V_h	: espace discret des polynômes continus par morceaux
W_h	: espace discret des polynômes construits par morceaux

et n'ayant aucune restriction de continuité

Géométrie

K	: élément tétraédrique
∂K^-	: frontière de l'élément en amont de l'écoulement
∂K^+	: frontière de l'élément en aval de l'écoulement
Γ	: interface entre deux fluides
Γ^-	: frontière en amont de l'écoulement
Γ^+	: frontière en aval de l'écoulement
$\partial\Omega$: frontière du domaine de calcul
Ω	: domaine de calcul
Ω_i	: domaine de calcul du fluide i

Nombres adimensionnels

Ca	: nombre capillaire
De	: nombre de Deborah
Fr	: nombre de Froude
Re	: nombre de Reynolds
We	: nombre de Weber
Wi	: nombre de Weissenberg

Symboles mathématiques

δ	: delta de Kronecker
∂_i	: dérivée partielle par rapport à la variable i
∇	: opérateur gradient
$\nabla \cdot$: opérateur divergence
$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$: produit scalaire des vecteurs \mathbf{a} et \mathbf{b}
$\ \mathbf{a}\ _2$: norme euclidienne de \mathbf{a}
$[a]$: saut de a
\bar{a}	: moyenne de a

Variation

a_h	: approximation discrète de la variable a
-------	---

$\text{dist}(a, b)$: distance entre a et b
\mathbf{g}	: gravité
\mathbf{f}	: force extérieure appliquée sur le fluide
\mathbf{f}_v	: force capillaire par unité de volume
\mathbf{f}_ϵ	: fonction de transition
F	: pseudo-concentration
\bar{F}	: pseudo-concentration reconstruite
\mathbf{H}	: fonction vectorielle
λ_i	: temps de relaxation du fluide i
\mathbf{n}	: normale d'une surface
$\hat{\mathbf{n}}$: normale à la surface de l'élément
M	: masse
p	: pression
t	: temps
t_0	: temps initial
t_f	: temps final
\mathbf{u}	: champ de vitesse
u_i	: composante i du champ de vitesse
V	: volume
\mathbf{x}	: coordonnée géométrique
Δt	: pas de temps
ΔM	: variation de la masse
ϵ	: demi-largeur de la zone de transition
γ	: coefficient de tension superficielle
$\dot{\gamma}(\mathbf{u})$: tenseur du taux de déformation
κ	: courbure moyenne
λ	: valeur propre
μ_i	: viscosité newtonienne du fluide i
μ_{v_i}	: viscosité élastique du fluide i
ρ_i	: densité du fluide i

τ : tenseur des contraintes
 τ_v : tenseur des extra-contraintes

INTRODUCTION

Les écoulements à surfaces libres de fluides à rhéologie complexe sont présents dans plusieurs procédés industriels. Un exemple est la microfluidique qui est un domaine de recherche en émergence et intéressant autant au niveau des applications industrielles qu'au niveau de la simulation numérique. Puisque les phénomènes microfluidiques se situent à l'échelle du micromètre, l'analyse d'échantillon d'un fluide se fait à l'aide de faibles quantités de l'échantillon et des produits nécessaires. Les produits sont les mêmes qui auraient normalement servis dans un laboratoire classique. De plus, les temps de réactions sont réduits (Whitesides (2006)). Les microsystèmes permettent donc de diminuer les temps des analyses ainsi que les coûts de celles-ci. Parmi les applications industrielles potentielles, on retrouve l'analyse d'ADN et l'administration de médicaments (Chung et al. (2008)). Un des inconvénients de ces applications est le régime laminaire dans lequel l'écoulement évolue. En effet, certaines applications nécessitent le mélange de deux fluides. Il est alors nécessaire de trouver d'autres moyens de mélanger les substances. Parmi les avantages de la microfluidique, on dénote le contrôle de l'apparition et de la manipulation des bulles au sein de l'écoulement. Ces bulles peuvent être par exemple le milieu dans lequel l'analyse d'une composante organique se fait. Pour ce qui est des avantages et des inconvénients de ces systèmes, on réfère le lecteur à Whitesides (2006).

Les systèmes microfluidiques nécessitent la modélisation d'écoulements à surfaces libres combinée à la modélisation d'écoulements viscoélastiques, puisque le sang peut adopter un comportement viscoélastique sous certaines conditions. De plus, la modélisation de la dynamique des bulles devient un incontournable. Pour ce qui est de la modélisation de la dynamique des interfaces, un marqueur eulérien, la pseudo-concentration, permet d'identifier les différents fluides. Il s'avère que la technique de la pseudo-concentration et les modèles des écoulements de fluides viscoélastiques sont basés sur des équations aux dérivées partielles hyperboliques. Ces équations ne peuvent pas être discrétisées adéquatement à l'aide de la méthode de Galerkin. Nous devons donc nous tourner vers des méthodes mieux adaptées comme la méthode SUPG et la méthode de Galerkin discontinue. Nous avons déjà à notre

disposition un solveur éléments finis tridimensionnel qui utilisait la méthode SUPG pour discrétiser ce type d'équations (Rivard (2012)). La méthode SUPG étant basée sur la méthode de Galerkin pour la discrétisation de problèmes elliptiques, ceci implique une discrétisation complète du domaine de calcul. Il s'agit d'un inconvénient que la méthode de Galerkin discontinue n'a pas. En effet, cette méthode permet une discrétisation plus naturelle de ces équations : la discrétisation se fait élément par élément en suivant les lignes de courant. Celle-ci approximera les équations à moindre coût et nous pensons qu'elle pourrait être plus précise que la méthode SUPG puisqu'elle est mieux adaptée à la nature des équations hyperboliques. De plus, la méthode de Galerkin discontinue permet la discrétisation d'équations hyperboliques non linéaires utilisées, par exemple, pour la modélisation des écoulements en milieux poreux, ce que la méthode SUPG n'est pas apte à faire. Une question pourrait alors se poser : pourquoi la méthode de Galerkin discontinue est-elle aussi peu utilisée en trois dimensions ? Nous croyons que ceci vient du fait que la méthode SUPG est facile à implémenter à partir d'un solveur de Galerkin, tandis que la méthode de Galerkin discontinue nécessite l'implémentation d'un nouveau solveur. Nous espérons que cette étude permettra de justifier cet effort d'implémentation pour le futur.

L'objectif principal de ce mémoire est l'implémentation de la méthode de Galerkin discontinue afin de modéliser les écoulements à surfaces libres viscoélastiques tridimensionnels. Les objectifs spécifiques sont :

- i) implémenter le solveur de Galerkin discontinu et les modèles pour l'étude des écoulements viscoélastiques ;
- ii) vérifier et valider le solveur avec des problèmes d'écoulements à surfaces libres ;
- iii) vérifier et valider les modèles pour l'étude des écoulements viscoélastiques avec des problèmes d'écoulements à surfaces libres viscoélastiques.

Nous nous assurerons d'atteindre ces objectifs en utilisant la méthodologie suivante :

- i) le solveur de Galerkin discontinu sera implémenté à partir du solveur éléments finis tridimensionnel qui utilise la méthode de Galerkin pour les équations de Navier-Stokes et la méthode SUPG pour l'équation de transport de la pseudo-concentration. Certains outils comme les limiteurs de pente et la renumérotation des éléments le long des lignes de courant seront implémentés. À partir de l'expertise acquise lors du projet de

maîtrise de Shahshahani (2005) sur les écoulements viscoélastiques bidimensionnels, ces modèles seront implémentés en trois dimensions ;

- ii) le solveur sera vérifié à l'aide du problème de Young-Laplace et du problème du transport d'une bulle et validé avec le problème de la poussée d'Archimède et de la coalescence de bulles avec et sans surface libre. Le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède servira aussi à comparer la performance de la méthode de Galerkin discontinue et de la méthode SUPG ;
- iii) différents modèles pour la modélisation des écoulements viscoélastiques seront vérifiés et validés à l'aide du problème de la déformation d'une bulle dans un écoulement cisailé.

CHAPITRE 1

PROBLÈMES HYPERBOLIQUES

1.1 Motivation

Plusieurs phénomènes nécessitent la modélisation des écoulements à surface libre comme l'extraction de pétrole par injection d'eau («waterflooding») ou encore les techniques d'analyses sanguines. Afin d'étudier ces phénomènes, nous devons modéliser adéquatement et approximer le comportement de ces fluides. Dans ce mémoire, on considère seulement les fluides dont le volume est constant sous l'action de la pression, c'est-à-dire les fluides incompressibles, et dont le mélange est négligeable, c'est-à-dire les fluides immiscibles. Pour modéliser le comportement des fluides, nous utilisons les équations de Navier-Stokes incompressibles et pour modéliser l'interaction entre les fluides, nous utilisons la technique de la pseudo-concentration. Ce modèle est basé sur la résolution d'une équation de transport afin de marquer les différents fluides.

1.1.1 Équations de Navier-Stokes incompressibles

Les équations de Navier-Stokes sont

$$\rho \partial_t \mathbf{u} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \nabla \cdot \tau = \mathbf{f} \quad (1.1)$$

où ρ est la densité du fluide, $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ est le champ de vitesse, p est la pression, \mathbf{f} est une force extérieure appliquée sur le fluide et τ est le tenseur des contraintes. Dans notre cas, on considère des fluides incompressibles, ce qui se traduit par la contrainte d'incompressibilité

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (1.2)$$

Pour les fluides incompressibles, le tenseur des contraintes s'écrit

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu\dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{u}) - \frac{2}{3}\delta\nabla \cdot \mathbf{u} = 2\mu\dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{u})$$

où $\dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{u}) = \frac{\nabla\mathbf{u}+(\nabla\mathbf{u})^t}{2}$ est le tenseur du taux de déformation, δ est le delta de Kronecker et μ est la viscosité du fluide. Les forces extérieures considérées sont

$$\mathbf{f} = \rho\mathbf{g} + \mathbf{f}_v$$

où \mathbf{g} est la gravité et \mathbf{f}_v est une «force capillaire par unité de volume» qu'on présentera à la prochaine sous-section.

1.1.2 Modélisation de la dynamique des surfaces libres

La technique de la pseudo-concentration considère un domaine $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Gamma$ où Ω_1 est la partie du domaine occupée par le premier fluide, Ω_2 est celle occupée par le deuxième fluide et Γ est l'interface entre ceux-ci. Pour distinguer les deux fluides et identifier l'interface, une équation de transport est utilisée

$$\partial_t F(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla F(\mathbf{x}, t) = 0$$

où

$$F(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_1(t) \setminus \Gamma(t); \\ 1/2 & \text{si } \mathbf{x} \in \Gamma(t); \\ 1 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_2(t) \setminus \Gamma(t). \end{cases}$$

Il est ainsi possible de représenter la densité et la viscosité du milieu :

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, t) &= \rho_1(\mathbf{x}) + (\rho_2(\mathbf{x}) - \rho_1(\mathbf{x}))F(\mathbf{x}, t); \\ \mu(\mathbf{x}, t) &= \mu_1(\mathbf{x}) + (\mu_2(\mathbf{x}) - \mu_1(\mathbf{x}))F(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \tag{1.3}$$

Puisque les équations de Navier-Stokes se basent sur l'hypothèse des milieux continus, il faut que ρ et μ soient continus. Or, en utilisant F directement, on ne peut pas garantir cette

continuité. La force capillaire est une force surfacique qui est définie comme

$$\mathbf{f}_s(\mathbf{x}) = \gamma \kappa \mathbf{n}_\Gamma \delta_s$$

où γ est le coefficient de tension superficielle, κ est la courbure, \mathbf{n}_Γ est la normale à la surface libre et δ_s est le delta de Kronecker qui vaut 1 à la surface libre et 0 sinon. En pratique, nous utilisons le modèle CSF («continuum surface force») de Brackbill et al. (1992) qui est définie comme

$$\mathbf{f}_v(\mathbf{x}) = \gamma \kappa(F) \nabla F$$

où $\kappa(F)$ est la courbure moyenne dont l'expression est

$$\kappa(F) \approx -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla F}{\|\nabla F\|_2} \right).$$

On remarque que la force surfacique est approximée par une force volumique. Non seulement on peut observer que ce modèle fait intervenir le gradient de F , mais aussi ses dérivées partielles secondes. Pour assurer une courbure non nulle et la continuité de ρ et μ , on doit reconstruire F en considérant une zone de transition régulière :

$$\bar{F}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sigma < -\epsilon; \\ 1 & \text{si } \sigma > \epsilon; \\ f_\epsilon(\sigma) = 1 + \frac{\sigma}{\epsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\sigma}{\epsilon}\right) & \text{sinon,} \end{cases}$$

où f_ϵ est une fonction de transition de largeur 2ϵ qui répond à la continuité exigée des variables et

$$\sigma(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} -\text{dist}(\mathbf{x}, \Gamma) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_1(t); \\ \text{dist}(\mathbf{x}, \Gamma) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_2(t). \end{cases}$$

En pratique, on reconstruit les dérivées de F à l'aide des méthodes suivantes : la double projection L^2 , la simple approximation linéaire, la double approximation linéaire, l'approximation quadratique et la méthode du développement de Taylor quadratique. En résumé, la double projection L^2 est une reconstruction du gradient de F sur les noeuds géométriques en utilisant une moyenne pondérée. Puis, on se sert du gradient pour reconstruire le hessien

en utilisant la même stratégie. La simple approximation linéaire reconstruit le gradient de F et on dérive cette reconstruction pour obtenir le hessien. La double approximation linéaire est similaire à la simple approximation linéaire à l'exception qu'on effectue une régression linéaire sur le gradient avant de calculer le hessien. L'approximation quadratique consiste à reconstruire quadratiquement F et de dériver cette reconstruction afin d'obtenir le gradient et le hessien. Finalement, la méthode du développement de Taylor consiste à trouver F et ses dérivées par une méthode des moindres carrés. On se sert de \bar{F} pour calculer les expressions (1.3). Pour plus de détails sur l'analyse du modèle et sur les différentes méthodes de reconstruction, on réfère le lecteur à Rivard (2012). Le système d'équations est donc :

$$\rho \partial_t \mathbf{u} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u})) = \rho \mathbf{g} + \gamma \kappa(\bar{F}) \nabla \bar{F}; \quad (1.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0; \quad (1.5)$$

$$\partial_t F + \mathbf{u} \cdot \nabla F = 0. \quad (1.6)$$

En ce qui concerne l'équation (1.6), on peut noter que cette équation est hyperbolique et elle sera donc discrétisée différemment que le problème de Navier-Stokes qui est un problème elliptique en espace. Nous verrons les différentes discrétisations numériques stables pour ce type de problème. De plus, en utilisant la contrainte d'incompressibilité, on peut réécrire l'équation comme

$$\partial_t w(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{F}(w(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) = 0$$

où $\mathbf{F}(w(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) w(\mathbf{x}, t)$ et $w(\mathbf{x}, t)$ correspond à la pseudo-concentration F (dans ce qui suit, ne pas confondre \mathbf{F} et F). Cette formulation de l'équation de transport est qualifiée de conservative. Ceci permet l'utilisation des limiteurs de pente comme nous le verrons au chapitre 2.

1.2 Équations hyperboliques

1.2.1 Définition du problème

Une équation hyperbolique du premier ordre peut être représentée sous la forme

$$\partial_t w + \nabla \cdot \mathbf{F}(w(\mathbf{x}, t)) + \beta(w(\mathbf{x}, t)) = f(\mathbf{x}, t) \quad (1.7)$$

où w est la variable d'intérêt et $f(\mathbf{x}, t)$ représente un terme source. Il est à noter que les fonctions $\mathbf{F}(w(\mathbf{x}, t)) = (F_1, F_2, F_3)$ et $\beta(w(\mathbf{x}, t))$ peuvent être des fonctions non linéaires par rapport à w . Supposons un domaine spatial $\Omega \subset R^3$, la frontière associée à ce domaine $\partial\Omega$, et un domaine temporel $I \in [t_0, t_f]$. On complète la définition du problème à l'aide de la condition initiale et des conditions frontières :

$$\begin{aligned} w(\mathbf{x}, t_0) &= w_0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega; \\ w(\mathbf{x}, t) &= g(\mathbf{x}, t), \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, \forall t \in I. \end{aligned}$$

Une particularité de ce type de problèmes est la possible présence de discontinuités au sein de la solution (Johnson (1987)). Contrairement aux problèmes elliptiques et paraboliques, il est possible que la solution développe des discontinuités même si la condition initiale est lisse. Pour plus d'informations à ce sujet, on suggère le livre de LeVeque (1992). De plus, dans le cas où $\mathbf{F}(w(\mathbf{x}, t)) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)w(\mathbf{x}, t)$ et $\beta(w(\mathbf{x}, t)) = f_\beta(\mathbf{x}, t)w(\mathbf{x}, t)$, on assure la stabilité de ce problème hyperbolique qualifié de linéaire si

$$\frac{1}{2} \nabla \cdot \mathbf{u} + f_\beta \geq \alpha, \quad \forall x, t,$$

où $\alpha \geq 0$ pour les problèmes instationnaires, c'est-à-dire $\partial_t w \neq 0$, et $\alpha > 0$ pour les problèmes stationnaires, c'est-à-dire $\partial_t w = 0$. Cette condition est importante lors de la conception d'une solution manufacturée pour le problème hyperbolique linéaire nécessaire à la vérification des différentes méthodes numériques.

1.2.2 Lois de conservation

Dans le cas où $\gamma = 0$ et $f = 0$, on retrouve une forme conservative du problème hyperbolique :

$$\partial_t w(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{F}(w(\mathbf{x}, t)) = 0.$$

Une propriété intéressante de cette forme est l'existence de courbes caractéristiques. Celles-ci ne sont que la paramétrisation des variables indépendantes $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ par t . Ceci revient à résoudre un système d'équations aux dérivées partielles de la forme

$$d_t x_i = \partial_w F_i \quad \text{pour } i = 1, 2, 3.$$

Il est possible de montrer que la variable w est constante le long d'une courbe caractéristique (LeVeque (1992)). En effet,

$$\begin{aligned} \frac{dw}{dt} &= \frac{\partial w}{\partial t} + \nabla w \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt}; \\ &= \frac{\partial w}{\partial t} + \nabla w \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial w}; \\ &= \frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}; \\ &= 0. \end{aligned}$$

De plus, dans le cas où \mathbf{F} est une fonction linéaire de la forme $\mathbf{F} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) w(\mathbf{x}, t)$, Johnson (1987) mentionne que si la fonction $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ est continue au sens de Lipschitz, c'est-à-dire

$$|\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}(\mathbf{y})| \leq C|\mathbf{x} - \mathbf{y}|, \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega,$$

alors pour un point $\bar{\mathbf{x}} \in \Omega$, il n'y a qu'une seule courbe caractéristique qui passe par ce point et qui satisfait :

$$\begin{cases} d_t x_i &= u_i \quad \text{pour } i = 1, 2, 3; \\ \mathbf{x}(0) &= \bar{\mathbf{x}}. \end{cases}$$

Pour le cas linéaire, on peut interpréter la solution de ce système comme étant la trajectoire de l'information $w(\mathbf{x}, t)$ qui se déplace selon un champ de vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ à l'intérieur

du domaine. Ceci revient donc à résoudre une équation différentielle ordinaire pour chaque courbe caractéristique. En effet, si w est connu en un point de la caractéristique $\mathbf{x}(t)$, alors w peut être déterminé à n'importe quel autre point de $\mathbf{x}(t)$ (Johnson (1987)). Cette méthode de résolution est appelée la méthode des caractéristiques. Une propriété intéressante de ces courbes est la propagation des discontinuités le long de celles-ci. Pour un saut situé à $\bar{\mathbf{x}}$, la solution w va être discontinue tout le long de la courbe caractéristique qui passe par ce point.

1.3 Système d'équations hyperboliques

Considérons un système d'équations de la forme

$$\partial_t \mathbf{w} + A \cdot \nabla \mathbf{w} + B \mathbf{w} = \mathbf{f} \iff \partial_t \mathbf{w} + \sum_{j=1}^3 A_j \partial_{x_j} \mathbf{w} + B \mathbf{w} = \mathbf{f}. \quad (1.8)$$

Ce système est dit hyperbolique si les matrices carrées A_j de dimensions $n \times n$, ainsi que toutes les combinaisons linéaires de celles-ci, sont diagonalisables et possèdent des valeurs propres réelles. De plus, il est dit strictement hyperbolique si toutes les matrices A_j possèdent n valeurs propres distinctes, ce qui implique qu'elles possèdent aussi des vecteurs propres linéairement indépendants. Si les A_j sont des matrices symétriques, c'est-à-dire $A_j = A_j^T$, alors celles-ci peuvent être diagonalisables avec des valeurs propres réelles et le système est dit symétriquement hyperbolique. Selon LeVeque (1992), des systèmes qui ne sont pas strictement hyperboliques peuvent présenter des difficultés supplémentaires pour certains problèmes. Le problème de Riemann en est un exemple. Ce problème consiste à établir la solution d'une équation hyperbolique dont la condition initiale est discontinue à partir des vecteurs propres de la matrice A . Puisqu'il y a des valeurs propres non distinctes, la matrice formée des vecteurs propres nécessaire à la résolution du problème de Riemann est forcément singulière : il y aura des colonnes linéairement dépendantes, ce qui complexifiera sa résolution (LeVeque (1992)). Finalement, un système non diagonalisable et présentant des valeurs propres réelles est hyperbolique au sens faible.

En ce qui concerne les matrices A_j qui sont à coefficients variables ($A_j = A_j(\mathbf{x}, t)$), ces définitions peuvent s'appliquer à tous les A_j évalués aux points (\mathbf{x}, t) . Pour les systèmes non linéaires, il faut que les définitions s'appliquent pour tous $w(\mathbf{x}, t)$. Dans le cas des lois de

conservation non linéaires, A_j sera la matrice jacobienne de $\mathbf{F}(w(\mathbf{x}, t))$.

Un système hyperbolique peut être découplé. En effet, puisqu'un tel système est diagonalisable, on peut lui associer un ensemble de n vecteurs propres linéairement indépendants qui forment une matrice inversible P . Considérons que tous les $A_j = A$, alors puisque $P^{-1}AP = D$ où D est la matrice diagonale contenant les valeurs propres associées à A , le système (1.8) peut s'écrire :

$$\begin{aligned} P^{-1}\partial_t\mathbf{w} + P^{-1}APP^{-1} \cdot \nabla\mathbf{w} + P^{-1}B\mathbf{w} &= P^{-1}\mathbf{f}; \\ \partial_t\mathbf{z} + D \cdot \nabla\mathbf{z} + C\mathbf{z} &= \mathbf{g}, \end{aligned}$$

où $\mathbf{z} = P^{-1}\mathbf{w}$, $C = P^{-1}B$ et $\mathbf{g} = P^{-1}\mathbf{f}$. Si nous prenons le cas unidimensionnel, ceci revient à résoudre n équations de la forme

$$\partial_t z_i + \lambda_i \partial_x z_i + c_i z_i = g_i \quad \text{pour } i = 1, \dots, n,$$

où λ_i est une des valeurs propres de la matrice A .

En considérant $\mathbf{f} = \mathbf{0}$ et $B = 0$, on obtient un système d'équations sous forme conservative. Puisque $\mathbf{w} = P\mathbf{z}$, on peut interpréter ce système comme étant une combinaison linéaire de n courbes caractéristiques qui passent par chaque point du domaine et qui satisfait

$$d_t x_i = \lambda_i(x_i(t), t) \quad \text{pour } i = 1, \dots, n.$$

Dans le cas où les A_j sont différentes, il faut trouver une matrice inversible P pour chaque A_j . Dans le cas où les A_j sont commutatives ($A_1 A_2 = A_2 A_1$), elles possèdent les mêmes vecteurs propres et il est possible de les diagonaliser à l'aide d'une seule matrice P (LeVeque (1992)).

1.4 Méthodes numériques

Afin de résoudre ce type de problèmes, nous ferons appel aux méthodes numériques qui demandent une discrétisation en espace et en temps. Plusieurs catégories de méthodes s'offrent à nous comme les différences finies, les volumes finis et les éléments finis pour la discrétisation en espace. Dans le cadre de ce mémoire, nous avons opté pour les méthodes d'éléments finis. Notre choix a été motivé par la possibilité d'utiliser des maillages non structurés et pour la

facilité d'imposition des conditions limites. De plus, un code d'éléments finis tridimensionnels résolvant les équations de Navier-Stokes était mis à notre disposition.

1.4.1 Discrétisation en temps

Afin de discrétiser l'équation (1.7) dans le temps, nous allons utiliser la méthode de la semi-discrétisation aussi appelée la méthode des lignes («method of lines»). Cette approche consiste à d'abord discrétiser le problème en espace en considérant le temps comme étant continu. Puis on discrétise en temps à l'aide de méthodes numériques pour les équations différentielles ordinaires, c'est-à-dire en utilisant des différences finies pour approximer la dérivée temporelle. Il existe une grande variété de schémas de discrétisation d'équations différentielles ordinaires qui peuvent être classées en deux grandes catégories : les méthodes explicites et implicites.

Les méthodes implicites

En considérant un intervalle de temps $[t_0, t_f]$, on définit $t_n = t_0 + n\Delta t$ pour $n = 0, 1, \dots, N$ où $N = \frac{t_f - t_0}{\Delta t}$. Supposons une discrétisation spatiale qui mène à un système discret de la forme $\partial_t \mathbf{w} + A \cdot \nabla \mathbf{w} + B\mathbf{w} - \mathbf{f} = \partial_t \mathbf{w}(\mathbf{x}, t_n) + \mathbf{G}(\mathbf{w}(\mathbf{x}, t)) = \mathbf{0}$. Nous avons dans le cas de la méthode d'Euler implicite :

$$\partial_t \mathbf{w}(\mathbf{x}, t_n) + \mathbf{G}(\mathbf{w}(\mathbf{x}, t)) = 0 \implies \frac{\mathbf{w}(\mathbf{x}, t_n) - \mathbf{w}(\mathbf{x}, t_{n-1})}{\Delta t} + \mathbf{G}(\mathbf{w}(\mathbf{x}, t_n)) = 0.$$

Il est à noter que la méthode d'Euler implicite correspond à une formule de différentiation arrière d'ordre 1. Nous considérons une famille de schémas implicites qui est aussi connue sous l'acronyme BDF («backward differentiation formulae»). En reprenant la notation de Ascher (1998), on peut écrire les schémas de type BDF comme

$$\sum_{i=0}^k \alpha_i \mathbf{w}_{n-i} = \Delta t \beta_0 \mathbf{G}(\mathbf{w}_n, t_n),$$

où k correspond au nombre de pas de temps précédents nécessaires à l'obtention de \mathbf{w}_n , et α_i et β_0 sont des coefficients à déterminer. Dans ce cas, k représente aussi l'ordre de précision

du schéma. Les coefficients sont présentés au tableau 1.1 et ont été tirés du livre de Ascher (1998). Considérons une équation de la forme $\partial_t w(\mathbf{x}, t_n) + G(w(\mathbf{x}, t)) = 0$ pour simplifier la présentation. Pour obtenir les coefficients des schémas BDF, il suffit d'utiliser le polynôme d'interpolation de Newton

$$P_n(t) = a_n + a_{n-1}(t - t_n) + a_{n-2}(t - t_n)(t - t_{n-1}) + \cdots + a_0(t - t_n)(t - t_{n-1}) \cdots (t - t_1).$$

Rappelons qu'un polynôme d'interpolation de degré n passe par $n + 1$ points distincts (t_i, w_i) pour $i = n, n - 1, \dots, 0$: ceci assure l'unicité du polynôme d'interpolation. Les coefficients a_{n-i} pour $i = 0, \dots, n$ sont déterminés par les différences divisées :

$$\begin{aligned} a_n &= w[t_n] && := w_n; \\ a_{n-1} &= w[t_n, t_{n-1}] && := \frac{w_n - w_{n-1}}{t_n - t_{n-1}}; \\ a_{n-2} &= w[t_n, t_{n-1}, t_{n-2}] && := \frac{w[t_n, t_{n-1}] - w[t_{n-1}, t_{n-2}]}{t_n - t_{n-2}}; \\ &\vdots && \vdots \\ a_{n-i} &= w[t_n, t_{n-1}, \dots, t_{n-i}]. \end{aligned}$$

Ensuite il suffit de calculer $d_t P_n$ et de l'évaluer à t_n . Finalement, on identifie les coefficients α_i après simplifications.

Tableau 1.1 Valeur des coefficients des schémas de type BDF.

k	β_0	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6
1	1	1	-1	-	-	-	-	-
2	2/3	1	-4/3	1/3	-	-	-	-
3	6/11	1	-18/11	9/11	-2/11	-	-	-
4	12/25	1	-48/25	36/25	-16/25	3/25	-	-
5	60/137	1	-300/137	300/137	-200/137	75/137	-12/137	-
6	60/147	1	-360/147	450/147	-400/147	225/147	-72/147	10/147

En ce qui concerne la stabilité de ces schémas, on se réfère au théorème de la barrière seconde («Second Barrier Theorem») établi par Dahlquist (Ascher (1998)) qui stipule que :

- aucun schéma à pas multiples linéaire explicite est A-stable ;
- aucun schéma à pas multiples linéaire et A-stable peut avoir un ordre de précision plus grand que 2 ;

- le schéma d'ordre 2 à pas multiples A-stable avec la plus petite constante d'erreur est la méthode de Crank-Nicolson (méthode du trapèze).

Nous rappelons qu'un schéma est A-stable si sa zone de stabilité comprend l'entièreté du demi-plan complexe qui possède tous les réels strictements négatifs (Süli (2003)). De plus, Süli (2003) précise que dans le cas des schémas BDF, l'ordre maximal qui offre une zone de stabilité est 6 et que tous les schémas BDF contiennent l'entièreté de l'axe réel négatif dans leur région de stabilité absolue. Bien que la stabilité de certaines méthodes implicites est meilleure que celle des méthodes explicites, il faut mentionner que les méthodes implicites introduisent plus de diffusion numérique que les méthodes explicites (Natvig et Lie (2008)). Dans le cadre de ce mémoire, nous utiliserons ces méthodes implicites.

1.4.2 Analyse numérique des méthodes implicites BDF

Puisque les schémas en temps de type BDF proviennent des différences finies, on peut appliquer le principe de l'équation modifiée. Cette méthode d'analyse consiste à trouver l'équation aux dérivées partielles qui reflète le mieux le comportement de l'équation aux dérivées partielles discrétisée que celle du problème d'origine. Dans le cas de la méthode d'Euler implicite, on a

$$\begin{aligned}
 w(t_n) - w(t_{n-1}) &= \Delta t G(w(t_n), t_n); \\
 w(t_n) - \left(w(t_n) - \frac{\partial w(t_n)}{\partial t} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 w(t_n)}{\partial t^2} \Delta t^2 + \dots \right) &= \Delta t G(w(t_n), t_n); \\
 \frac{\partial w(t_n)}{\partial t} \Delta t - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 w(t_n)}{\partial t^2} \Delta t^2 + \dots &= \Delta t G(w(t_n), t_n); \\
 \frac{\partial w(t_n)}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 w(t_n)}{\partial t^2} \Delta t + \dots &= G(w(t_n), t_n).
 \end{aligned}$$

Donc, l'équation aux dérivées partielles

$$\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \Delta t = G(w, t)$$

reflète mieux le comportement du schéma numérique d'Euler implicite que le problème d'origine $\partial_t w = G(w, t)$. Afin d'appliquer ce principe à l'équation hyperbolique, on choisit le

problème unidimensionnel

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \quad (1.9)$$

afin de simplifier l'analyse. En appliquant le schéma BDF1, on trouve l'équation modifiée

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0. \quad (1.10)$$

De l'équation (1.9), on a

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -u \frac{\partial w}{\partial x}$$

et, en supposant que $w(x, t)$ répond aux hypothèses du théorème de Clairaut (Stewart et Citta-Vanthemsche (2006)), on peut écrire que

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} &= -u \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial w}{\partial x}; \\ &= -u \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial t}; \\ \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} &= u^2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2}. \end{aligned}$$

En substituant dans l'équation (1.10), on a

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{u^2 \Delta t}{2} \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = 0. \quad (1.11)$$

Afin de déterminer l'influence du schéma numérique temporel sur l'approximation, on utilise la méthode de Fourier pour les problèmes linéaires à valeur initiale. Considérons un domaine périodique et la solution

$$w(x, t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{w}_k(t) e^{ikx}$$

exprimée en série de Fourier où $\hat{w}_k(t)$ sont les coefficients à déterminer et supposons une condition initiale $w(x, t_0)$. En substituant cette solution dans l'équation (1.11), on obtient

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \hat{w}_k(t)}{\partial t} + uik \hat{w}_k(t) - \frac{u^2 \Delta t}{2} i^2 k^2 \hat{w}_k(t) \right) e^{ikx} = 0.$$

Puisque $e^{ikx} \neq 0, \forall x, k$, on doit résoudre

$$\frac{\partial \hat{w}_k(t)}{\partial t} + uik \hat{w}_k(t) + \frac{u^2 \Delta t k^2}{2} \hat{w}_k(t) = 0$$

dont la solution est

$$\hat{w}_k(t) = \hat{w}_k(t_0) e^{-uikt} e^{-u^2 \Delta t k^2 t / 2}$$

où $\hat{w}_k(t_0)$ sont les coefficients de Fourier reliés à la condition initiale. La solution de l'équation (1.11) est alors

$$w(x, t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{w}_k(t_0) e^{(x-ut)ik} e^{-u^2 \Delta t k^2 t / 2}.$$

On remarque que le terme $e^{(x-ut)ik}$ correspond au terme de convection, c'est-à-dire au déplacement de la solution initiale selon u . Par contre, le deuxième terme $e^{-u^2 \Delta t k^2 t / 2}$ correspond à un terme de diffusion purement numérique. On peut ainsi conclure que la méthode d'Euler implicite introduit de la diffusion numérique. En appliquant le même raisonnement aux autres schémas BDF, on trouve les artifices numériques introduits par ceux-ci au tableau 1.2. On peut remarquer que le schéma BDF2 introduit des oscillations numériques. En effet, les

Tableau 1.2 Artifice numérique introduit par les schémas en temps de type BDF.

BDF	Artifice numérique
1	$e^{-u^2 \Delta t k^2 t / 2}$
2	$e^{(u^3 \Delta t^2 k^2 t / 3) ik}$
3	$e^{u^4 \Delta t^3 k^4 t / 4}$
4	$e^{(-u^5 \Delta t^4 k^4 t / 5) ik}$
5	$e^{-u^6 \Delta t^5 k^6 t / 6}$

différentes fréquences k auront des vitesses de propagation différentes. Le même phénomène se produit pour le schéma BDF4. Le schéma BDF5 introduit de la diffusion numérique. Par contre, le schéma BDF3 introduit un terme qui ne peut que croître lorsque t augmente, ce qui peut rendre l'équation instable pour de grandes valeurs de t . Cette analyse nous servira de guide pour analyser les problèmes d'écoulement multiphasés.

1.4.3 Discrétisation en espace

Afin de présenter la formulation des différentes méthodes de discrétisation des équations aux dérivées partielles, nous allons considérer l'équation hyperbolique linéaire stationnaire

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \nabla w(\mathbf{x}) + f_\beta(\mathbf{x})w(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}). \quad (1.12)$$

Le domaine Ω est discrétisé à l'aide d'éléments tétraédriques K . On définit la partie amont de la frontière

$$\Gamma^- = \{\mathbf{x} \in \partial\Omega : \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) < 0\}$$

où $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ est la normale unitaire à la frontière $\partial\Omega$ et $\Gamma^+ = \partial\Omega \setminus \Gamma^-$. Dans le cas des courbes caractéristiques, Γ^- représente l'ensemble des points de départ de celles-ci. On considère ensuite les espaces fonctionnels suivants :

— l'espace des fonctions de carré intégrable :

$$L^2(\Omega) = \{w : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \quad : \quad \int_{\Omega} w^2 \, d\mathbf{x} < \infty\};$$

— l'espace de Sobolev :

$$H^1(\Omega) = \{w \in L^2(\Omega) \quad : \quad \frac{\partial w}{\partial x_i} \in L^2(\Omega) \quad \text{pour } i = 1, 2, 3\};$$

— l'espace discret des polynômes continus par morceaux :

$$V_h = \{w \in H^1(\Omega) \quad : \quad w|_K \in P_r(K), \quad \forall K \in \Omega\}$$

où P_r est l'ensemble des polynômes de degré $r \geq 0$;

— l'espace discret des polynômes construits par morceaux et n'ayant aucune restriction de continuité :

$$W_h = \{w \in L^2(\Omega) \quad : \quad w|_K \in P_r(K), \quad \forall K \in \Omega\}.$$

On note l'approximation de la solution exacte w par w_h .

Méthode des caractéristiques

La méthode des caractéristiques que nous avons présentée brièvement est, en pratique, difficile à implémenter surtout lorsqu'il s'agit d'un système hyperbolique (Johnson (1987)). Un avantage de cette méthode est qu'elle est inconditionnellement stable. Par contre, on doit s'assurer de respecter la condition de Courant-Friedrichs-Lewy via le nombre de Courant afin de s'assurer que les grandes variations de la solution soient capturées en établissant une relation entre la taille des éléments du maillage de la discrétisation en espace et le pas de temps. Pour plus de détails, on réfère le lecteur à l'article de El Hadj et al. (1990).

Diffusion artificielle

La méthode des éléments finis, basée sur la méthode de Galerkin, a initialement été développée pour discrétiser les problèmes elliptiques. Pour des équations purement hyperboliques, plusieurs difficultés numériques surviennent comme l'apparition d'oscillations ou de zones de grandes amplitudes qui ne sont pas nécessairement situées aux discontinuités. En effet, on observe même que la solution numérique n'est nullement représentative de la solution exacte (Johnson (1987)). Cette technique de discrétisation classique n'est pas adaptée à ce type de problèmes : elle peut être instable et imprécise.

Il est possible d'exprimer l'équation (1.12) comme un problème elliptique en ajoutant un terme faisant intervenir des dérivées secondes. Le terme $-\epsilon_d \nabla^2 w$ amènera essentiellement de la diffusion numérique dans le schéma, ce qui stabilisera la formulation. Le désavantage de cette méthode est qu'on ne résout plus la bonne équation : plus ϵ_d est grand, plus on dénature notre problème hyperbolique. Le problème s'écrit alors comme suit : trouver $w_h \in V_h$ tel que

$$\int_{\Omega} \epsilon_d \nabla w_h \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla w_h v \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} f_{\beta} w_h v \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f v \, d\mathbf{x}, \quad \forall v \in V_h,$$

où v est une fonction test. Le terme de diffusion est pondéré par ϵ_d qui est sujet à la condition $\epsilon_d \geq h$, où h est la taille de la discrétisation en espace, pour éviter les oscillations de nature purement numérique. Pour une solution discontinue, on peut observer une couche limite de diffusion de largeur de l'ordre de $\sqrt{\epsilon_d}$, le long de la caractéristique porteuse de la discontinuité. En plus, si la solution w sur Γ^+ ne concorde pas avec la condition de Dirichlet imposée sur

Γ^+ , on observera une couche de diffusion autour de cette frontière de l'ordre de ϵ_d . Il est à noter que cette couche de diffusion est de l'ordre de ϵ_d même pour des solutions lisses (Johnson (1987)). On n'imposera donc aucune condition de Dirichlet sur Γ^+ pour éviter de détériorer la solution autour de cette frontière. L'imposition d'une condition sur Γ^+ viendrait à l'encontre de la nature de l'équation originale.

Méthode de la diffusion dans le sens des lignes de courant

Une astuce pour régler la problématique de la diffusion perpendiculaire à la courbe caractéristique est d'obliger la diffusion à s'orienter dans la même direction que la courbe caractéristique. Ceci peut être fait par l'introduction d'un terme de la forme $-\tau_s \mathbf{u} \cdot \nabla(\mathbf{u} \cdot \nabla w)$ qui représente les dérivées partielles du second ordre de w dans la direction de \mathbf{u} . Par contre, ce terme n'est pas optimal et introduira tout de même de la diffusion. Bien que celle-ci sera moindre qu'avec la méthode de la diffusion artificielle, pour éviter une telle perturbation, on choisit la fonction test de la forme

$$v + \tau_s \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \nabla v$$

où τ_s est le paramètre de stabilisation. Le problème peut alors être formulé comme suit : trouver $w_h \in V_h$ tel que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla w_h v \, d\mathbf{x} + \tau_s \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla w_h)(\mathbf{u} \cdot \nabla v) \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} f_{\beta} w_h v \, d\mathbf{x} + \\ \tau_s \int_{\Omega} f_{\beta} w_h \mathbf{u} \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f v \, d\mathbf{x} + \tau_s \int_{\Omega} f \mathbf{u} \cdot \nabla v \, d\mathbf{x}, \quad \forall v \in V_h. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Pour une solution discontinue, il est important de noter qu'il y a tout de même une mince couche où la discontinuité est diffuse et que la solution numérique au sein de celle-ci peut être sur ou sous-estimée. Pour améliorer ce point, il est possible de modifier la forme des fonctions tests (Johnson (1987)). Dans le cas des problèmes multifluides, il existe dans la littérature plusieurs ouvrages discutant des techniques de stabilisation comme la méthode SUPG («streamline-upwind/Petrov-Galerkin») ou la méthode PSPG («pressure-stabilizing/Petrov-Galerkin») qui sont utilisées dans ce domaine et du choix optimal du paramètre de stabilisation τ_s .

Méthode de Galerkin discontinue

La méthode de Galerkin étant plus adéquate pour les problèmes elliptiques, un changement à un noeud affectera la solution à tous les noeuds. Le problème discret mène à la construction d'un système algébrique d'équations linéaires couplées. Ceci est tout à fait justifié lorsqu'on veut discrétiser une équation avec un terme de diffusion comme l'équation de la chaleur. Par contre, pour une équation purement hyperbolique, il est plus naturel de discrétiser le problème élément par élément en considérant la trajectoire des courbes caractéristiques. La stratégie de la méthode de Galerkin discontinue discrétisera l'équation d'abord sur les éléments qui partagent une face avec Γ^- . Ensuite, on discrétise les équations sur les éléments qui sont voisins avec les éléments sur Γ^- , et ainsi de suite. On suit cette procédure

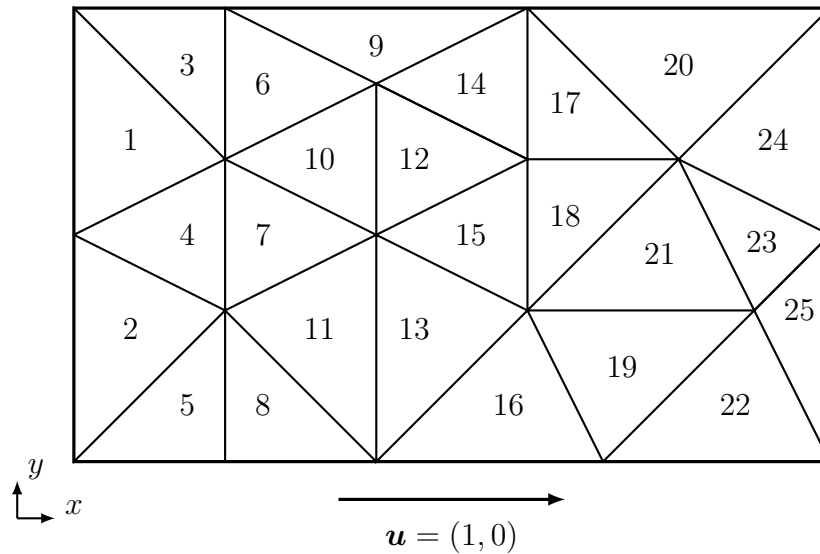


Figure 1.1 Ordre de discrétisation des éléments.

jusqu'à ce que le domaine soit entièrement parcouru. La figure 1.1 illustre l'ordre de discrétisation des éléments pour $\mathbf{u} = (1, 0)$ dans le cas 2D. Pour ce faire, on cherchera la solution dans l'espace W_h . Pour un élément tétraédrique K , la frontière de K , notée ∂K , est divisée en deux parties :

$$\partial K^- = \{\mathbf{x} \in \partial K : \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) < 0\}; \quad (1.14)$$

$$\partial K^+ = \{\mathbf{x} \in \partial K : \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) \geq 0\}, \quad (1.15)$$

où l'ensemble (1.14) représente une frontière par laquelle l'information entre dans K et l'ensemble (1.15) est la frontière par laquelle l'information sort de K . Considérons l'intersection entre deux éléments, on notera :

$$w^-(\mathbf{x}) = \lim_{s \rightarrow 0^-} w(\mathbf{x} + s\mathbf{u});$$

$$w^+(\mathbf{x}) = \lim_{s \rightarrow 0^+} w(\mathbf{x} + s\mathbf{u}).$$

Dans le cas où cette frontière commune possède une discontinuité, on note le saut de w comme $[w] = w^+ - w^-$. On peut maintenant formuler le problème ainsi : trouver $w_h \in W_h$ tel que, pour chaque élément K ,

$$\int_K \mathbf{u} \cdot \nabla w_h v \, d\mathbf{x} + \int_K f_\beta w_h v \, d\mathbf{x} - \int_{\partial K^-} w_h^+ v^+ (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) \, ds =$$

$$\int_K f_h v \, d\mathbf{x} - \int_{\partial K^-} w_h^- v^+ (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) \, ds, \quad \forall v \in W_h.$$

Il est important de noter que w_h^- est connu sur ∂K^- : c'est l'approximation de w faite sur l'élément en amont de K . On peut remarquer que le problème correspond à la méthode de Galerkin appliquée à un élément avec des conditions frontières imposées au sens faible. Les éléments communiqueront entre eux via le terme $\int_{\partial K^-} w_h^- v^+ (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) ds$ qu'on nommera le flux numérique. Dans ce cas, il s'agit du flux numérique en amont. De plus, f_h correspond à la projection du terme source f au sens de L^2 . Dans le prochain chapitre, nous verrons cette méthode plus en détails.

Bien qu'en théorie, la méthode de Galerkin discontinue a une stabilité et une convergence similaire à la méthode de diffusion dans le sens des lignes de courant, en pratique, la méthode de Galerkin discontinue offre de meilleurs résultats (Johnson (1987)). De plus, il a été montré que la méthode de Galerkin discontinue correspond à la méthode des caractéristiques lorsque le pas de temps tend vers 0 (Fortin (1989)).

CHAPITRE 2

MÉTHODE DE GALERKIN DISCONTINUE

2.1 Formulation

Comme nous l'avons mentionné au chapitre précédent, l'idée derrière la méthode de Galerkin discontinue, aussi nommée la méthode de Lesaint-Raviart, est de discrétiser élément par élément les équations sur le domaine de calcul en suivant les courbes caractéristiques. Par conséquent, il est essentiel d'identifier les faces entrantes («inflow») et sortantes («outflow») sur chaque élément du domaine afin d'imposer les conditions limites.

Commençons par énoncer une formulation plus générale de la méthode de Galerkin discontinue appliquée à un problème purement hyperbolique. Pour ce faire, on considère l'équation

$$\partial_t w(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{F}(w(\mathbf{x}, t)) + f_\beta(\mathbf{x}, t) w(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t), \quad (2.1)$$

où

$$\mathbf{F}(w(\mathbf{x}, t)) = (F_1(w(\mathbf{x}, t)), F_2(w(\mathbf{x}, t)), F_3(w(\mathbf{x}, t))),$$

avec les conditions frontières entrantes sur une partie de la frontière de Ω . Dans les problèmes que nous traitons dans ce mémoire, $\mathbf{F}(w(\mathbf{x}, t)) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) w(\mathbf{x}, t)$. La formulation variationnelle associée à cette équation sur Ω est

$$\int_{\Omega} \partial_t w v \, d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{F}(w) v \, d\Omega + \int_{\Omega} f_\beta w v \, d\Omega = \int_{\Omega} f v \, d\Omega$$

où v est une fonction test. Le domaine discrétisé est noté par $\Omega_h = \cup_{n=1}^{N_{el}} K_n$ où K_n représente un élément tétraédrique et N_{el} est le nombre d'éléments dans le domaine. L'inconnue $w(\mathbf{x}, t)$ est approximée par

$$w(\mathbf{x}, t) \approx w_h(\mathbf{x}, t)$$

où $w_h(\mathbf{x}, t)|_K = w_h^n(\mathbf{x}, t)$, $\forall \mathbf{x} \in K, \forall t \in [0, T]$. Afin d'alléger la notation, on notera l'élément

traité K. Localement, la formulation faible élémentaire est

$$\int_K \partial_t w_h v \, d\mathbf{x} + \int_K \nabla \cdot \mathbf{F}(w_h) v \, d\mathbf{x} + \int_K f_\beta w_h v \, d\mathbf{x} = \int_K f_h v \, d\mathbf{x}.$$

Il est important de remarquer que le terme source f est projeté sur l'espace des fonctions définies par morceaux W_h . Dans le cas où $\mathbf{F} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) w(\mathbf{x}, t)$ et en considérant le problème stationnaire, on garantit l'existence et l'unicité de la solution par la projection du terme source comme l'indique le théorème présenté par Zine (1991) :

Si $f \in L^2(\Omega)$ et $0 < m \leq f_\beta(\mathbf{x}) \leq M$, alors le problème discrétisé par la méthode de Galerkin discontinue admet une solution unique $w_h \in W_h$.

En appliquant deux fois le théorème de la divergence sur le terme $\int_K \nabla \cdot \mathbf{F}(w_h) v \, d\mathbf{x}$, on obtient

$$\int_K \partial_t w_h v \, d\mathbf{x} + \int_K \nabla \cdot \mathbf{F}(w_h) v \, d\mathbf{x} + \int_K f_\beta w_h v \, d\mathbf{x} = \int_{\partial K} \hat{\mathbf{n}} \cdot [\mathbf{F}(w_h) - \mathbf{F}^*] v \, ds + \int_K f_h v \, d\mathbf{x} \quad (2.2)$$

où \mathbf{F}^* est la fonction \mathbf{F} évaluée avec les approximations de w_h des éléments voisins, $\hat{\mathbf{n}}$ est la normale extérieure de la surface de l'élément considéré et ∂K est la frontière de l'élément. Il est aussi important de noter que les éléments communiquent via l'intégrale $-\int_{\partial K} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{F}^* v \, ds$: c'est ce qu'on nomme le flux numérique. Dans le cas du problème hyperbolique linéaire, on dénote deux types de flux numérique : en amont et centré. La figure 2.1 représente les différents schémas numériques de ces flux. Les éléments en rouge dénotent ceux qui sont considérés dans la discrétisation de l'équation de l'élément K. Puisque les équations traitées dans ce mémoire sont telles que $\mathbf{F}(w(\mathbf{x}, t)) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) w(\mathbf{x}, t)$, le flux numérique \mathbf{F}^* choisi est celui en amont. Ce type de flux est préférable au flux centré puisqu'il offre de meilleures performances. En effet, le flux centré peut présenter un comportement ne reflétant pas la physique à cause de la diffusion du schéma pour des éléments de degré supérieur à un (Hesthaven (2000) ; Marchandise et al. (2008)). Il est à noter que c'est cette notion de flux qui rend le système inversible pour les problèmes stationnaires. En effet, l'intégrale surfacique $\int_{\partial K} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{F}(w_h) v \, ds$ nécessaire au flux numérique ajouté à $\int_K \nabla \cdot \mathbf{F}(w_h) v \, d\mathbf{x}$ permet d'obtenir une matrice élémentaire non singulière. La façon de calculer ces flux influence donc grandement la stabilité de la méthode.

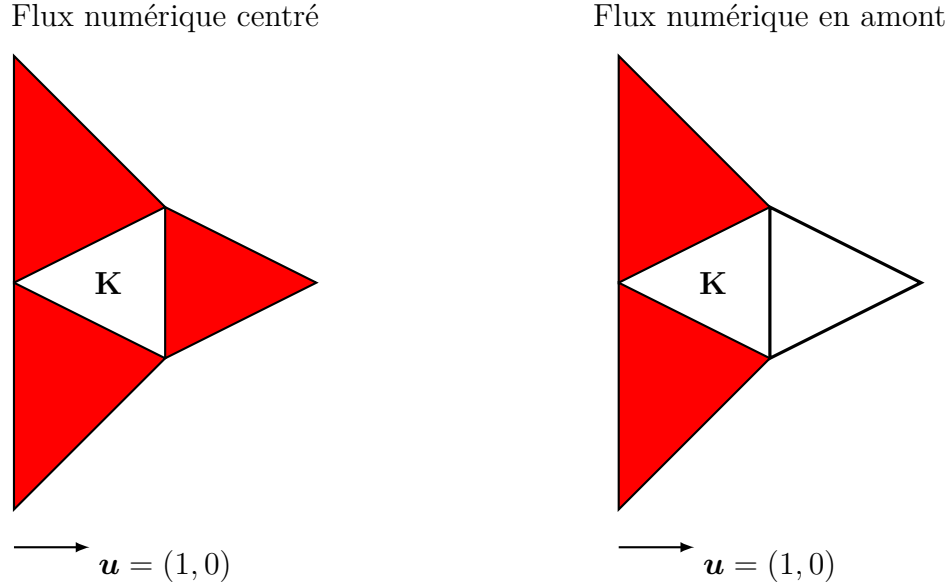


Figure 2.1 Schéma numérique des différents flux numériques dans le plan xy .

En considérant le flux numérique en amont, on obtient

$$\int_K \partial_t w_h v \, d\mathbf{x} + \int_K \nabla \cdot \mathbf{F}(w_h) v \, d\mathbf{x} + \int_K f_\beta w_h v \, d\mathbf{x} = \int_{\partial K^-} \hat{\mathbf{n}} \cdot [\mathbf{F}(w_h) - \mathbf{F}^*] v \, ds + \int_K f_h v \, d\mathbf{x} \quad (2.3)$$

où ∂K^- est la frontière entrante de l'élément. Dans un cadre plus général, il est possible d'identifier les faces entrantes et sortantes de l'élément K :

$$\partial K^- = \{\mathbf{x} \in \partial K : \hat{\mathbf{n}} \cdot \partial_w \mathbf{F} < 0\};$$

$$\partial K^+ = \{\mathbf{x} \in \partial K : \hat{\mathbf{n}} \cdot \partial_w \mathbf{F} \geq 0\},$$

où $\partial K = \partial K^- \cup \partial K^+$ et $\partial_w \mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial w}$. Considérons les approximations :

$$w_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{N_p} w_h(\mathbf{x}_j, t) \phi_j(\mathbf{x});$$

$$f_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{N_p} f_h(\mathbf{x}_j, t) \phi_j(\mathbf{x}),$$

où $w_h \in W_h$, $f_h \in W_h$, $\mathbf{x} \in K$, ϕ est la version tridimensionnelle du polynôme d'interpolation de Lagrange et N_p est le nombre de degrés de liberté sur un élément. Pour obtenir un système discret, nous choisissons la fonction test dans le même espace fonctionnel que l'approximation w_h , c'est-à-dire $v \in W_h$. Cette formulation correspond à la formulation de Galerkin. Les fonctions tests sont alors

$$v = \phi_i \text{ pour } i = 1, \dots, N_p.$$

On projette le terme source en résolvant le problème suivant : pour chaque élément K , trouver les coefficients $f_h(\mathbf{x}_i, t)$ tels que

$$\sum_{j=1}^{N_p} f_h(\mathbf{x}_j, t) \int_K \phi_j(\mathbf{x}) \phi_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_K f(\mathbf{x}, t) \phi_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \text{ pour } i = 1, \dots, N_p. \quad (2.4)$$

La forme discrète de l'équation (2.3) s'écrit alors comme

$$\begin{aligned} \int_K \partial_t \left(\sum_{j=1}^{N_p} w_h \phi_j \right) \phi_i d\mathbf{x} + \int_K \nabla \cdot \left(\sum_{j=1}^{N_p} \mathbf{F}(w_h) \phi_j \right) \phi_i d\mathbf{x} + \int_K f_\beta \left(\sum_{j=1}^{N_p} w_h \phi_j \right) \phi_i d\mathbf{x} = \\ \int_{\partial K^-} \hat{\mathbf{n}} \cdot \left(\sum_{j=1}^{N_p} [\mathbf{F}(w_h) - \mathbf{F}^*] \phi_j \right) \phi_i ds + \int_K \left(\sum_{j=1}^{N_p} f_h \phi_j \right) \phi_i d\mathbf{x}, \text{ pour } i = 1, \dots, N_p, \end{aligned}$$

où les coefficients f_h sont calculés à l'aide de l'expression (2.4). On peut écrire $\partial_t \sum_{j=1}^{N_p} (w_h \phi_j) = \sum_{j=1}^{N_p} \partial_t w_h \phi_j$ puisque ϕ_j est indépendante du temps. En développant, on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N_p} \partial_t w_h \int_K \phi_j \phi_i d\mathbf{x} + \sum_{j=1}^{N_p} w_h \left(\int_K \partial_x \phi_j \phi_i d\mathbf{x} + \int_K \partial_y \phi_j \phi_i d\mathbf{x} + \int_K \partial_z \phi_j \phi_i d\mathbf{x} \right) + \\ \sum_{j=1}^{N_p} w_h \int_K f_\beta \phi_j \phi_i d\mathbf{x} = \sum_{j=1}^{N_p} f_h \int_K \phi_j \phi_i d\mathbf{x} + \\ \sum_{j=1}^{N_p} (\hat{n}_x^\ell [F_1(w_h) - F_1^*] + \hat{n}_y^\ell [F_2(w_h) - F_2^*] + \hat{n}_z^\ell [F_3(w_h) - F_3^*]) \int_{\partial K^-} \phi_j \phi_i ds_\ell, \\ \text{pour } i = 1, \dots, N_p, \end{aligned} \quad (2.5)$$

où s_ℓ représente les faces de l'élément identifiées entrantes et $\hat{\mathbf{n}}^\ell = (n_x^\ell, n_y^\ell, n_z^\ell)$ est la normale extérieure associée à chaque surface s_ℓ . Il y a autant d'intégrales surfaciques à évaluer que

de faces appartenant à ∂K^- .

Afin de faciliter l'évaluation des intégrales sur les éléments tétraédriques, nous utilisons la méthode de l'élément de référence. Nous allons considérer l'élément tétraédrique de référence \hat{K} dans l'espace (ξ, η, ζ) dont les coordonnées des sommets sont $(0, 0, 0)$, $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ et $(0, 0, 1)$. Il sera ainsi possible de calculer les valeurs des fonctions tests et d'interpolation pour tous les éléments du maillage. De plus, un autre avantage de cette technique est l'utilisation directe des points et poids de la quadrature de Hammer tridimensionnelle afin d'évaluer les intégrales. Cette technique effectue une transformation de (x, y, z) à (ξ, η, ζ) définie comme

$$(x, y, z) = T^k(\xi, \eta, \zeta) = \sum_{j=1}^{N_p} (x_j, y_j, z_j) \hat{\phi}_j(\xi, \eta, \zeta)$$

où $T^k : \hat{K} \rightarrow K$. Les fonctions tests sont sous la forme

$$\phi_j(x, y, z) = \phi_j(T^k(\xi, \eta, \zeta)) = \hat{\phi}_j(\xi(x, y, z), \eta(x, y, z), \zeta(x, y, z)).$$

Les équations doivent finalement être réécrites en considérant cette transformation. Les détails sont présentés dans Fortin (2011). Le dernier point important à préciser est que l'imposition des conditions aux frontières entrantes se fera à l'aide du flux numérique. Alors, ce ne sont pas des conditions typiques de Dirichlet, mais des conditions de Cauchy (Zine (1991)). On transmet l'information à travers les surfaces des éléments.

2.2 Limiteur de pente

Comme il a été décrit au chapitre 1, l'apparition d'oscillations numériques dans les solutions autour de discontinuités, c'est-à-dire le phénomène de Gibbs, est un problème de ce type d'approximation (Hesthaven (2000)). Même si l'approximation est linéaire, la solution possèdera tout de même des oscillations purement numériques qui n'ont aucun sens physique. Afin de pallier ce problème, nous pouvons traiter la solution a posteriori à l'aide d'un limiteur de pente («slope limiter») dans le contexte des lois de conservation. Normalement, la solution analytique de ces problèmes doit diminuer ou maintenir la variation totale (TVD) («total

variation diminishing») dans le temps (Di Pietro et Ern (2011) ; LeVeque (2002)), c'est-à-dire

$$TV(w(\mathbf{x}, t_{n+1})) \leq TV(w(\mathbf{x}, t_n)) \quad \text{pour } n = 0, 1, \dots, N - 1,$$

où

$$\begin{aligned} TV(w(\mathbf{x}, t_n)) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sup \frac{1}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} |w(x + \epsilon, y, z, t_n) - w(\mathbf{x}, t_n)| \, d\mathbf{x} \\ &+ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sup \frac{1}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} |w(x, y + \epsilon, z, t_n) - w(\mathbf{x}, t_n)| \, d\mathbf{x} \\ &+ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sup \frac{1}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} |w(x, y, z + \epsilon, t_n) - w(\mathbf{x}, t_n)| \, d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

On peut interpréter la variation totale (TV) («total variation») comme étant une mesure de la variation de la solution à un certain temps. Ainsi, une solution TVD garantit qu'à $t \neq t_0$, elle aura une variation totale qui sera au plus égale à la condition initiale. Malheureusement, on ne peut garantir que l'approximation discrète obtenue par la méthode de Galerkin discontinue soit TVD sur la valeur moyenne de la variable d'intérêt de l'élément, c'est-à-dire à variation totale sur la moyenne (TVDM) («total variation diminishing in the mean»). Comme Hesthaven (2000) le spécifie, les limiteurs de pente doivent respecter trois propriétés :

- la conservation de la quantité ;
- la production d'une solution TVDM ;
- la conservation de l'ordre de précision de la méthode utilisée.

La conception d'un limiteur de pente qui satisfait à ces propriétés et qui est généralisable en trois dimensions est encore un problème ouvert (Di Pietro et Ern (2011)). Il est important de spécifier qu'avec certains limiteurs de pente, la notion de TVD est une mesure des oscillations indésirables au sein de l'approximation, ce qui complexifie l'algorithme en dimensions supérieures.

Dans le cadre de ce mémoire, nous étudierons les lois de conservation pour lesquelles on peut déterminer une valeur maximale et minimale de la solution. On peut penser aux problèmes multifiuides qui nécessitent l'utilisation d'un marqueur eulérien avec une équation de transport. La solution de cette équation sert essentiellement à identifier la nature du fluide dans le domaine. Si on considère deux fluides, la variable peut prendre deux états.

Pour ce type de problème, il est crucial que les valeurs restent dans l'intervalle établi par ces deux états, car une solution erronée pourrait entraîner des solutions qui n'ont aucun sens physique comme des densités négatives (cf. (1.3)). Zhang et Shu (2010) ont développé un limiteur de pente pouvant satisfaire aux exigences de tels problèmes. Ils utilisent le principe du maximum («maximum-principle-satisfying») afin de garantir que l'approximation soit TVDM. Considérons une loi de conservation dont la variable dépendante est $w(\mathbf{x}, t)$ et la valeur de la solution initiale est $w(\mathbf{x}, t_0)$. On définit :

$$\begin{aligned} M &= \max(w(\mathbf{x}, t_0)); \\ m &= \min(w(\mathbf{x}, t_0)). \end{aligned}$$

Si $w(\mathbf{x}, t) \in [m, M]$ pour tout (\mathbf{x}, t) , alors la solution $w(\mathbf{x}, t)$ satisfait le principe du maximum (Zhang et Shu (2010)). Leur limiteur de pente a les caractéristiques suivantes :

- il respecte la conservation de la quantité ;
- il satisfait au principe du maximum («maximum-principle-satisfying») et, par conséquent, donne des solutions TVDM ;
- il conserve l'ordre de précision de la méthode utilisée.

De plus, il est facilement généralisable en trois dimensions, ce qui est notre principal intérêt. On suppose un polynôme p_K obtenu sur l'élément K après une itération de la méthode numérique d'intégration en temps implicite. L'application du limiteur de pente sur cet élément se fait en cinq étapes :

- calculer $\hat{M} = \max(p_K(\mathbf{x}))$ et $\hat{m} = \min(p_K(\mathbf{x}))$ pour tout $\mathbf{x} \in K$;
- calculer la moyenne \bar{w} sur l'élément K ;
- calculer

$$\theta = \min \left\{ \left| \frac{M - \bar{w}}{\hat{M} - \bar{w}} \right|, \left| \frac{m - \bar{w}}{\hat{m} - \bar{w}} \right|, 1 \right\};$$

- pour chaque coefficient du polynôme $w(\mathbf{x}_i, t)$, on évalue le nouveau coefficient

$$w^*(\mathbf{x}_i, t) = \theta(p_K(\mathbf{x}_i) - \bar{w}) + \bar{w} \quad \text{pour } i = 1, \dots, N_p;$$

- substituer les w_i par w_i^* dans le vecteur des approximations.

En pratique, on calcule les extremums du polynôme p_K en évaluant ce polynôme aux points de Gauss et aux noeuds des éléments. Pour plus de détails à propos de son analyse, on réfère à Zhang et Shu (2011).

En se basant sur cette idée, nous avons conçu une autre version de ce type de limiteur de pente qui considère les variations du polynôme afin de tenter de diminuer la diffusion de la solution autour de la discontinuité. L'idée de base est de répartir la différence entre la valeur des degrés de liberté qui ne sont pas dans l'intervalle $[m, M]$ (le sur-dépassement ou le sous-dépassement) sur les autres degrés de liberté qui sont dans l'intervalle $[m, M]$. Cette idée est inspirée du limiteur de pente du gradient limité de Tu et Aliabadi (2005). Si w_i^F représente les degrés de liberté qui ne sont pas dans $[m, M]$ et w_i^V représente ceux qui le sont, l'algorithme est donné par :

- calculer de \bar{w} ;
- calculer les gradients de chaque w_i pour $i = 1, \dots, N_p$;
- tant qu'il y a au moins un $w_i \notin [m, M]$ et que $\bar{w} \in [m, M]$:
 - identifier les w_i^F ;
 - calculer les dépassements, c'est-à-dire le sur-dépassement ou le sous-dépassement total, Δw ;
 - corriger les w_i^F : si $w_i^F > M$ alors $w_i^* = M$ et si $w_i^F < m$ alors $w_i^* = m$;
 - calculer la norme euclidienne des gradients $\|\nabla w_i^V\|$ et les sommer pour obtenir S ;
 - calculer les poids :

$$P_i = \frac{\|\nabla w_i^V\|}{S};$$

- calculer pour chaque w_i^V :

$$w_i^* = w_i^V + P_i \Delta w;$$

- calculer \bar{w} ;
- substituer w_i par w_i^* dans le vecteur des approximations.

Le désavantage de ce limiteur de pente est qu'il requiert un processus itératif. De plus, on peut seulement garantir la conservation de la quantité. Par contre, on prend en considération la variation du polynôme d'interpolation contrairement au limiteur de pente de Zhang et Shu (2010). Nous pensons qu'on peut réduire la diffusion numérique du limiteur de pente

en considérant le gradient de chaque degré de liberté de l'élément. Plus le gradient est élevé en un point, ce qui correspond à la discontinuité, plus on le considère dans la répartition du dépassement calculé. Ainsi, plus le degré d'interpolation augmente, plus le gradient variera et mieux on devrait limiter la diffusion numérique. Nous n'avons pas poussé plus loin l'analyse de ce limiteur de pente. En pratique, il est commun de déterminer une tolérance sur la norme de la correction et sur la norme du résidu afin de déterminer si la convergence est atteinte. Dans le cas de tous les limiteurs de pente, il est important de mentionner qu'il n'est pas possible de satisfaire une condition sur la norme du résidu puisqu'on modifie l'approximation a posteriori afin qu'elle respecte certaines propriétés de la solution analytique.

2.3 Résolution du système discret local

Bien que la méthode de Galerkin discontinue ait une interprétation intuitive de la propagation de l'information élément par élément, il faut se rappeler qu'il est possible d'obtenir un système global couplé en considérant les degrés de liberté nécessaires au calcul des flux entrants comme des inconnues. De ce système global, on peut, dans certains cas, obtenir une matrice triangulaire inférieure par blocs en renumérotant les degrés de liberté sur les éléments : chaque bloc représentera les inconnues sur un élément. Si une telle manipulation peut se faire, on peut résoudre le système par une simple descente triangulaire en résolvant bloc par bloc ou élément par élément le système global à la façon de la méthode de Gauss-Seidel. Ceci requiert donc une seule itération. Par contre, si ce n'est pas possible comme dans le cas où on a des zones de recirculation dans l'écoulement, il faut répéter cette résolution jusqu'à convergence. En pratique, on garde en mémoire un vecteur de la taille du nombre d'éléments et on l'actualise au fur et à mesure que la résolution du système avance. On identifie d'abord les éléments qui partagent au moins une face avec une condition frontière entrante. Ensuite, on identifie les faces de ces éléments qui possèdent un flux sortant et on ajoute le numéro de tous les éléments qui partagent ces faces dans le vecteur. On effectue ceci jusqu'à ce que le domaine soit complètement parcouru. Dans le cas où il reste des éléments à discrétiser, on procède sans ordre précis. Il est important de mentionner que cette méthode n'est pas optimale, mais elle est simple à implémenter et peu coûteuse en calculs et en mémoire.

Puisque les éléments communiquent à travers les flux, il est essentiel que l'information

propagée soit la plus précise possible. Puisque les systèmes locaux ont au plus une centaine d'inconnues dans les problèmes étudiés dans ce mémoire, on les résout à l'aide d'une factorisation LU standard. De plus, nous la combinons à une mise à l'échelle et à un raffinement itératif. Pour un système de la forme $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ où A est de dimensions $n \times n$, la mise à échelle des composantes de la matrice entre $[-1, 1]$ se fait comme suit :

- calculer la matrice diagonale $L : \ell_{ij} = \max_{1 \leq i \leq N} \sqrt{|a_{ij}|}$;
- calculer la matrice diagonale $R : r_{ij} = \max_{1 \leq j \leq N} \sqrt{|a_{ij}|}$;
- résoudre $L^{-1}AR^{-1}R\mathbf{x} = L^{-1}\mathbf{b}$.

En ce qui concerne le raffinement itératif, nous utilisons l'algorithme de Wilkinson (1994) : tant que la tolérance sur le résidu et le nombre d'itérations maximales ne sont pas atteints :

- calculer le résidu : $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}$;
- calculer la norme du résidu ;
- calculer la correction : $A\delta\mathbf{x} = \mathbf{r}$;
- appliquer la correction : $\mathbf{x} = \mathbf{x} + \delta\mathbf{x}$.

2.4 Erreur et analyse de convergence

L'analyse de convergence de la méthode de Galerkin discontinue utilise une norme particulière qui prend en considération les sauts possibles que la solution peut prendre. Dans le cas où $\mathbf{F} = \mathbf{u} w$, Johnson (1987) montre que

$$\|w - w^h\|_\beta \leq Ch^{r+1/2}\|w\|_{r+1}$$

où r est le degré du polynôme, h est la taille des éléments, C est une constante positive et w^h est la solution numérique. La norme $\|w\|_\beta$ est définie comme

$$\|w\|_\beta^2 = |w|_\beta^2 + h \sum_{\mathbf{K}} \|\mathbf{u} \cdot \nabla w\|^2$$

où, en utilisant la notation du chapitre 1,

$$|w|_\beta^2 = \|w\|_2^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{K}} \int_{\partial\mathbf{K}^-} [w]^2 |\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}| \, ds + \frac{1}{2} \int_{\Gamma^+} (w^-)^2 \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} \, ds.$$

$\|w\|_2$ est la norme L^2 . Il est possible de montrer que la convergence est $O(h^{r+1/2})$ pour des maillages non structurés et $O(h^{r+1})$ pour des maillages structurés (Fortin et al. (2010)).

CHAPITRE 3

ÉCOULEMENTS À SURFACE LIBRE

3.1 Capture eulérienne d'interface

La méthodologie numérique développée pour la discrétisation des équations hyperboliques sera d'abord vérifiée dans le cadre de l'étude de problèmes d'écoulements à surfaces libres. La stratégie numérique utilisée implique la discrétisation d'une équation de transport pour un marqueur qui est utilisé pour identifier où se trouve chaque fluide dans le temps. Les problèmes choisis nous permettront de vérifier les différentes composantes de la méthodologie numérique choisie en se basant sur diverses quantités d'intérêts :

- identifier la meilleure combinaison d'éléments en (\mathbf{u}, p, F) à l'aide du problème de Laplace ;
- comparer la performance des différents schémas de type BDF ;
- comparer la performance de la méthode de Galerkin discontinue avec et sans limiteur de pente ;
- comparer la méthode de Galerkin discontinue et SUPG au niveau de la conservation de matière.

3.1.1 Adimensionnalisation

L'adimensionnalisation des équations nous permet de résoudre des problèmes dont la physique s'exprime par des nombres adimensionnels. Cette analyse découle du théorème de Buckingham. Dans notre cas, nous utiliserons les nombres adimensionnels suivants :

- Nombre de Reynolds : $Re = \frac{\bar{\rho}\bar{u}\bar{L}}{\bar{\mu}}$ qui représente le rapport entre les forces inertielles et visqueuses ;
- Nombre de Froude : $Fr = \frac{\bar{u}}{\sqrt{g\bar{L}}}$ qui représente le rapport entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle gravitationnelle ;
- Nombre de Weber : $We = \frac{\bar{\rho}\bar{u}^2\bar{L}}{\bar{\gamma}}$ qui représente le rapport entre les forces inertielles et

la tension superficielle ;

- Nombre capillaire : $Ca = \frac{\bar{\mu}\bar{a}}{\bar{\gamma}}$ qui représente le rapport entre les forces visqueuses et la tension superficielle.

On note que \bar{a} est la grandeur caractéristique d'une variable a telle que $a = \bar{a}\hat{a}$ où \hat{a} est adimensionnelle. Pour simplifier la notation, on omet le « $\hat{}$ ». On peut aussi écrire le nombre de Weber comme $We = Re Ca$. Le système d'équations adimensionnel est donc :

$$\rho\partial_t\mathbf{u} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re}\nabla \cdot (2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u})) = \frac{1}{Fr^2}\rho\mathbf{g} + \frac{1}{We}\gamma\kappa(\bar{F})\nabla\bar{F}; \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0; \quad (3.2)$$

$$\partial_t F + \mathbf{u} \cdot \nabla F = 0. \quad (3.3)$$

3.1.2 Discrétisation des équations

On discrétise les équations (3.1) et (3.2) à l'aide de la méthode de Galerkin standard et en s'assurant de satisfaire la condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi (Brezzi (1974)). Le tableau 3.1 présente les différentes combinaisons d'éléments en (\mathbf{u}, p) considérées dans ce mémoire. On note l'interpolant linéaire P1 et l'interpolant quadratique P2. De plus, P1B signifie l'interpolant linéaire auquel on ajoute une bulle à son barycentre et P2⁺ est l'interpolant quadratique enrichi. Il est à noter que la pression est approximée par un interpolant discontinu dans le cas de l'élément de Crouzeix-Raviart. On réfère le lecteur à l'annexe dans Rivard (2012) pour le détail de la version tridimensionnelle de ces éléments. Pour ce qui est

Tableau 3.1 Éléments satisfaisants la condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi.

Élément	Interpolants ($\mathbf{u} - p$)
Mini	P1B - P1
Taylor-Hood	P2 - P1
Crouzeix-Raviart	P2 ⁺ - P1 ^d

de l'équation (3.3), on peut noter qu'elle est hyperbolique et doit donc être discrétisée à l'aide de la méthode de Galerkin discontinue ou de la méthode SUPG. Les équations (2.5) et (1.13) donnent la forme faible de ces deux méthodes. Pour ce qui est de l'équation (3.3), les termes f , f_h et f_β sont nuls.

La stratégie est de discrétiser d’abord les équations (3.1) et (3.2), puis de discrétiser l’équation (3.3). Cette approche est qualifiée de découplée. Le désavantage de cette approche est l’augmentation du nombre d’itérations des méthodes de point fixe pour atteindre la convergence. Par contre, elle a l’avantage de réduire la taille des systèmes linéaires à résoudre.

3.2 Problème de Young-Laplace

Ce problème consiste à submerger une gouttelette d’un premier fluide dans un deuxième fluide au repos. Sous l’action de la tension superficielle, le premier fluide prendra la forme d’une sphère qui est la forme minimisant l’énergie. Lorsque cette forme est obtenue, l’état stationnaire est atteint. De plus, on doit observer un champ de vitesse nul et un saut en pression respectant

$$\Delta p = \frac{2\gamma}{r} \quad (3.4)$$

où r est le rayon de la sphère. Rivard (2012) mentionne que la solution à l’état stationnaire de ce problème est

$$p = \pm \frac{2\gamma}{r} F + c \quad (3.5)$$

où c est une constante qui provient de l’intégration du problème en considérant le champ de vitesse nul. Ce résultat nous permet de remarquer qu’une oscillation sur F se transmettra aussitôt à p . Même si ce problème semble stationnaire, il est courant de le modéliser comme un problème transitoire. Cette astuce permet d’éviter la singularité du système à résoudre. En effet, la discrétisation du terme $(\mathbf{u} \cdot \nabla)F$ mène à une matrice élémentaire nulle pour un champ de vitesse nul. Malheureusement, cette approche introduit des courants parasites numériques dans le champ de vitesse, ce qui peut affecter la qualité de la solution. Pour plus de détails, on réfère le lecteur à Jamet et al. (2002) et Popinet (2009).

Nous étudions ce problème pour évaluer les différentes combinaisons d’éléments en (\mathbf{u}, p, F) et pour tester la méthode de reconstruction de F et le limiteur de pente. Pour ce faire, nous utilisons les paramètres présentés au tableau 3.2. Le problème est illustré à la figure 3.1. Le domaine de calcul est une boîte cubique de dimensions $[-0,5, 0,5] \times [-0,5, 0,5] \times [-0,5, 0,5]$. On utilise les équations de Stokes plutôt que les équations de Navier-Stokes, c’est-à-dire qu’on néglige le terme de convection $\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$, et on ne considère pas l’effet de la gravité $\frac{1}{Fr^2}\rho\mathbf{g}$.

Avec les données du tableau 3.2, on devrait observer un saut en pression de 1. Des conditions de glissement sont imposées à toutes les parois du domaine, c'est-à-dire $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = 0$ où \mathbf{n} est la normale extérieure à la frontière du domaine de calcul. La condition initiale correspond à une bulle de rayon 0,25 et un champ de vitesse nul. Les paramètres du solveur sont présentés au tableau 3.3. De plus, on permet 100 itérations de point fixe sur le système obtenu avec la méthode de Galerkin discontinue et une durée de résolution maximale de 72 heures. Si ces critères ne sont pas atteints, on considère que le système n'a pas convergé.

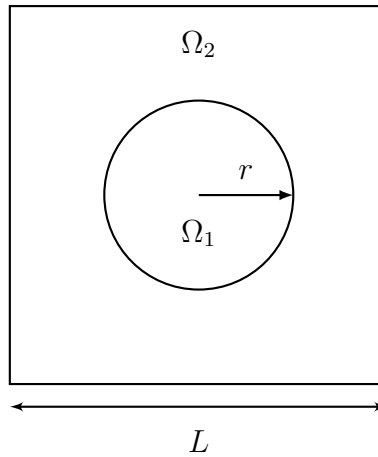


Figure 3.1 Géométrie du problème de Young-Laplace avec une bulle sphérique.

Tableau 3.2 Paramètres pour le problème de Young-Laplace sphérique.

$\rho_1 = 1$	$h = 0,02$	$L = 1$
$\rho_2 = 1$	$r = 0,25$	$\Delta t = 0,01$
$\mu_1 = 1$	$\gamma = 0,125$	$Re = 1$
$\mu_2 = 1$	$\epsilon = 0,03$	$We = 1$

Afin de comparer la méthode SUPG et la méthode de Galerkin discontinue, avec et sans limiteur de pente, nous évaluons trois quantités : la norme du champ de vitesse calculée à l'aide du maximum de la norme euclidienne sur tous les degrés de liberté, l'erreur absolue sur le saut en pression et le nombre de pas de temps nécessaire pour atteindre l'état stationnaire. Pour la méthode SUPG, on considère que l'état stationnaire est atteint lorsque la norme du résidu sur toutes les variables respecte la tolérance établie dès le début des itérations de point

Tableau 3.3 Paramètres du solveur.

Schéma en temps	BDF2
Nombre de pas de temps	200
Solveur itératif	GMRES
Nombre d'itérations maximal de point fixe	200
Nombre d'itérations maximal DG	100
Préconditionnement	ILU0 à droite
Tolérance sur le résidu du système	10^{-6}
Tolérance sur la correction (relative)	10^{-6}

fixe. Dans le cas de la méthode de Galerkin discontinue, on établit que l'état stationnaire est atteint lorsque la norme du résidu sur le champ de vitesse et sur la pression respecte la tolérance établie dès le début des itérations. Ceci est justifié par l'approche découplée utilisée. En effet, on discrétise d'abord le problème de Stokes, puis on discrétise l'équation de transport avec la nouvelle approximation du champ de vitesse. La pseudo-concentration est alors nécessairement une approximation compatible avec ce champ de vitesse puisqu'il respecte les critères établis sur les différentes normes. Pour la méthode SUPG, nous avons fait les simulations en utilisant seulement la double projection dans L^2 (DL2P). D'après Rivard (2012), c'est la méthode de reconstruction de F qui est la plus efficace. Les résultats sont présentés dans les tableaux 3.4, 3.5 et 3.6. Il est à noter que les résultats de la méthode de Galerkin discontinue ont été obtenus sans limiteur de pente. Nous avons obtenu des résultats similaires en utilisant les limiteurs de pente. D'après les résultats des tableaux, on note que les éléments mini et de Taylor-Hood associés à un interpolant linéaire pour F et à une méthode de reconstruction DL2P présentent les meilleurs résultats pour la méthode de Galerkin discontinue. L'élément mini présente une erreur absolue sur le saut en pression légèrement supérieure à celle obtenue avec l'élément de Taylor-Hood. Par contre, la norme sur le champ de vitesse avec l'élément mini est légèrement inférieure à celle de l'élément de Taylor-Hood, mais ce dernier élément prend une itération de moins à converger. Nous déterminons que l'élément de Taylor-Hood combiné à un interpolant linéaire en F est la meilleure combinaison d'éléments testée. Pour ce qui est des autres éléments, on observe que l'élément de Crouzeix-Raviart donne une solution complètement erronée avec un saut

en pression nul, autant pour l'interpolant linéaire que quadratique en F . Ceci est expliqué par le mauvais conditionnement observé de la matrice assemblée pour cette combinaison d'éléments en trois dimensions, alors qu'il est excellent en deux dimensions. On peut aussi noter que l'élément de Taylor-Hood jumelé avec un interpolant quadratique en F a donné le saut en pression et la norme du champ de vitesse les plus près de ceux attendus. Par contre, nous n'avons pas réussi à converger à l'intérieur du nombre d'itérations maximal. En effet, la norme sur le résidu et la correction oscille autour de 10^{-5} .

Tableau 3.4 Nombre de pas de temps pour atteindre l'état stationnaire.

Méthode	Éléments	Méthode de reconstruction				
SUPG	$(\mathbf{u}-p-F)$	DL2P				
	P1B-P1-P1	161				
	P2-P1-P1	>72h				
	P2-P1-P2	4				
	P2 ⁺ -P1 ^d -P1	>72h				
	P2 ⁺ -P1 ^d -P2	>72h				
DG		DL2P	SLF	DLF	QF	MR
	P1B-P1-P1	5	14	16	N/A	N/A
	P2-P1-P1	4	12	14	N/A	N/A
	P2-P1-P2	N/A	8	6	N/A	N/A
	P2 ⁺ -P1 ^d -P1	4	N/A	9	13	13
	P2 ⁺ -P1 ^d -P2	3	4	4	>72h	>72h

En ce qui concerne la comparaison avec la méthode SUPG, on note que la convergence a été atteinte avec l'élément mini associé à un interpolant linéaire en F et avec l'élément de Taylor-Hood combiné à un interpolant quadratique en F . On observe un saut en pression et une norme du champ de vitesse similaires à ceux obtenus avec la méthode de Galerkin discontinue. Par contre, on dénote une différence de deux ordres de grandeur entre le nombre de pas de temps requis pour la méthode de Galerkin discontinue et la méthode SUPG dans le cas de l'élément mini. En effet, la méthode SUPG atteint rapidement (généralement en un ou deux pas de temps) un résidu à l'initialisation de l'ordre de 10^{-5} , mais prend un nombre de pas de temps considérable pour atteindre 10^{-6} .

On a utilisé les méthodes de reconstruction de F afin d'avoir un minimum de régularité

Tableau 3.5 Norme du champ de vitesse.

Méthode	Éléments	Méthode de reconstruction				
SUPG	$(\mathbf{u}-p-F)$	DL2P				
	P1B-P1-P1	6,61e-8				
	P2-P1-P1	7,54e-8				
	P2-P1-P2	6,10e-8				
	P2 ⁺ -P1 ^d -P1	-				
	P2 ⁺ -P1 ^d -P2	-				
DG		DL2P	SLF	DLF	QF	MR
	P1B-P1-P1	9,95e-8	8,73e-6	1,27e-5	4,54e-5	4,54e-5
	P2-P1-P1	1,26e-7	1,11e-5	1,52e-5	5,28e-5	5,28e-5
	P2-P1-P2	4,90e-8	5,91e-6	1,68e-6	1,04e-4	1,04e-4
	P2 ⁺ -P1 ^d -P1	1,30e-7	1,01e-5	1,56e-5	5,25e-5	5,25e-5
	P2 ⁺ -P1 ^d -P2	5,35e-8	1,30e-7	1,74e-6	-	-

pour ρ et μ , et une courbure moyenne non nulle et continue. Il serait intéressant de ne pas utiliser de méthodes de reconstruction afin d'éviter d'imposer une zone de transition à F et ainsi laisser les équations choisir celle qui est naturellement la plus adéquate. Pour ce faire, nous avons essayé l'approche suivante : choisir un interpolant quadratique en F , appliquer un limiteur de pente et calculer la moyenne des degrés de liberté discontinus. Nous savons que les limiteurs de pente amènent de la diffusion tout en éliminant les oscillations pouvant mener à des quantités non physiques. Les limiteurs nous assurent donc que ρ et μ resteront dans l'intervalle désiré. Nous avons donc choisi la combinaison de l'élément de Taylor-Hood avec l'interpolant quadratique pour la pseudo-concentration. Nous espérons que l'élément quadratique en F avec l'application du limiteur de pente nous évitera une courbure nulle, ce qui correspond à $\mathbf{f}_v = \mathbf{0}$. Nous avons calculé la moyenne des degrés de liberté discontinus avant le calcul de la courbure pour éviter qu'elle soit discontinue. Malheureusement, nous avons observé que la solution ne converge pas dû à la courbure moyenne nulle.

Tableau 3.6 Erreur absolue du saut en pression.

Méthode	Éléments	Méthode de reconstruction				
SUPG	$(\mathbf{u}-p-F)$	DL2P				
	P1B-P1-P1	9,98e-3				
	P2-P1-P1	7,29e-3				
	P2-P1-P2	3,99e-3				
	P2 ⁺ -P1 ^d -P1	-				
	P2 ⁺ -P1 ^d -P2	-				
DG		DL2P	SLF	DLF	QF	MR
	P1B-P1-P1	1,13e-2	5,25e-2	1,20e-1	2,38e-1	2,38e-1
	P2-P1-P1	7,44e-3	4,89e-2	8,30e-2	2,12e-1	2,12e-1
	P2-P1-P2	3,61e-3	9,97e-1	7,23e-3	5,37e-1	5,37e-1
	P2 ⁺ -P1 ^d -P1	1	1	1	1	1
	P2 ⁺ -P1 ^d -P2	1	1	1	-	-

3.3 Problème du transport d'une bulle

Ce problème consiste à évaluer la précision de la méthode de Galerkin discontinue pour la capture de la dynamique des surfaces libres et sur la conservation du volume d'une bulle en fonction des différents schémas d'intégration en temps de type BDF et des limiteurs de pente. La géométrie choisie est une boîte de dimensions $[-1,5, 1,5] \times [0, 6] \times [-1,5, 1,5]$ illustrée à la figure 3.2 et correspondant à $H = 6$ et $L = 3$. La taille des éléments du maillage varie entre 0,5 et 0,08. Nous avons raffiné le maillage dans la zone de déplacement de la bulle comme le montre la figure 3.3. La condition initiale correspond à une bulle de rayon 0,5 centrée en $(0, 1, 0)$. On impose un champ de vitesse $\mathbf{u} = (0, 1, 0)$ sur toutes les parois du domaine. Tout comme pour le problème de Young-Laplace, on considère le problème de Stokes. Les paramètres du solveur sont donnés au tableau 3.2 à l'exception du nombre de pas temps qui est 400 et du schéma d'intégration en temps utilisé. On ne considère pas la gravité ni la tension superficielle. Les autres paramètres sont donnés au tableau 3.7. Une difficulté liée à l'utilisation des schémas BDF d'ordre supérieur est la nécessité d'obtenir plusieurs solutions dès le départ. La stratégie adoptée est d'augmenter graduellement l'ordre du schéma BDF en partant du schéma BDF1. L'erreur relative sur la perte de volume de

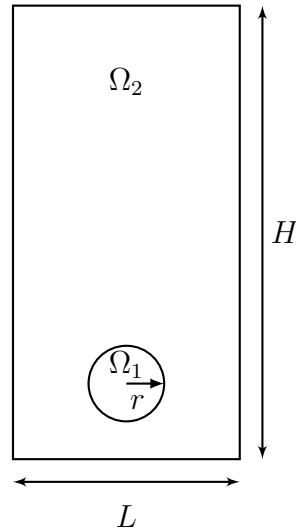


Figure 3.2 Géométrie pour le problème de transport d'une bulle.

Tableau 3.7 Paramètres pour le problème de transport d'une bulle.

$\rho_1 = 1$	$\Delta t = 0,01$
$\rho_2 = 1$	$r = 0,5$
$\mu_1 = 1$	$\epsilon = 0,08$
$\mu_2 = 1$	$Re = 1$

la bulle est présentée à la figure 3.4. Pour ces résultats, nous avons utilisé l'élément mini et un polynôme d'interpolation linéaire pour la pseudo-concentration. On remarque que la perte de volume obtenue sans limiteur de pente est plus faible qu'avec les limiteurs de pente. De plus, le limiteur de pente développé dans ce mémoire est nettement moins efficace pour la conservation du volume que celui de Zhang et Shu (2010). On a près de deux fois plus de perte de volume dans le cas de notre limiteur de pente. En comparant la méthode de Galerkin discontinue sans limiteur de pente et avec le limiteur de pente de Zhang et Shu (2010), on remarque aussi que la perte de volume est deux fois plus importante avec le limiteur de pente. On peut donc conclure que l'utilisation de limiteurs de pente augmente la perte de volume de la bulle. En comparant les différents schémas de type BDF, on note que le schéma BDF1, ou la méthode d'Euler implicite, est de loin la méthode la moins efficace sur la conservation du volume. On note une perte de volume trois fois plus importante qu'avec les autres schémas. Ceci est facilement expliqué par l'analyse faite au chapitre 1. Plus l'ordre

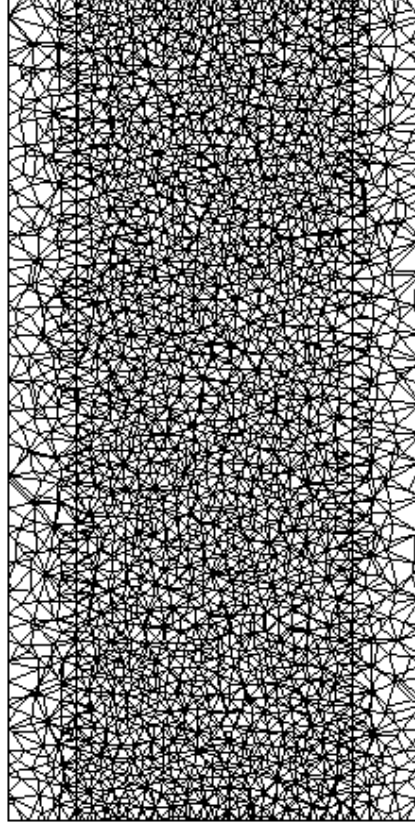
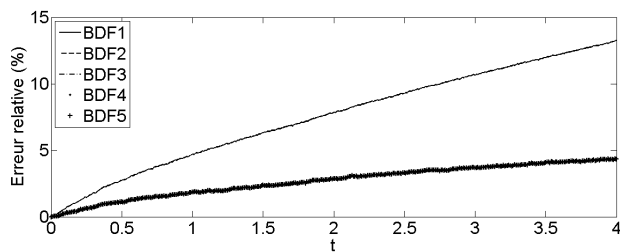


Figure 3.3 Maillage pour le problème de transport d'une bulle.

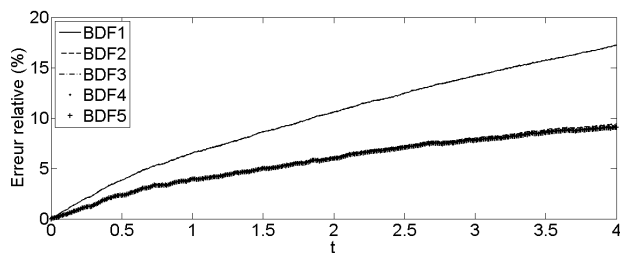
est élevé, plus l'influence du terme d'erreur diminuera pour un temps donné. La diffusion numérique du schéma BDF1 mènera donc à la disparition des bulles dans un écoulement multiphase. Rivard (2012) fournit une estimation de la variation de la masse ΔM liée aux schémas d'intégration en temps d'Euler implicite (BDF1) et de Gear (BDF2) :

$$|\Delta M| \leq K \Delta t \Delta \rho 2\epsilon \quad (3.6)$$

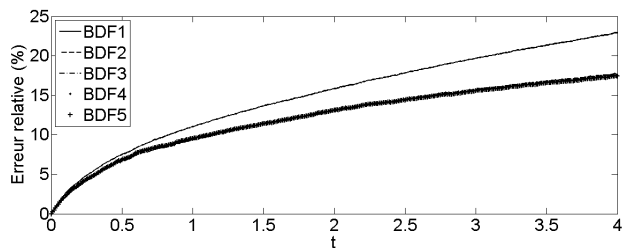
où $K \geq 0$ et $\Delta \rho = |\rho_2 - \rho_1|$. On peut observer que plus la zone de transition de la pseudo-concentration et le pas en temps diminuent, plus la masse est préservée. La constante K pour le schéma BDF2 est plus petite que celle du schéma BDF1. On note aussi que les autres schémas BDF donnent sensiblement les mêmes résultats à différentes échelles. Ceci est expliqué par la diminution de l'importance du terme d'erreur lié à l'intégration en temps pour un schéma BDF d'ordre plus élevé. On préférera donc le schéma BDF2 puisqu'il ne nécessite



(a) DG sans limiteur de pente.

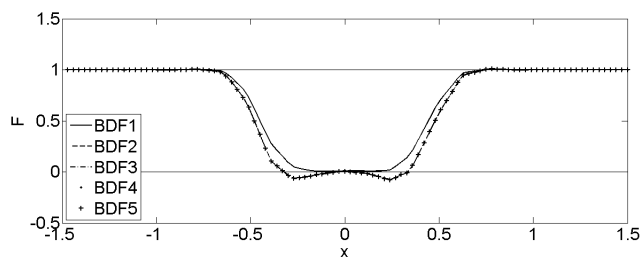


(b) DG avec le limiteur de pente de Zhang et Shu (2010).

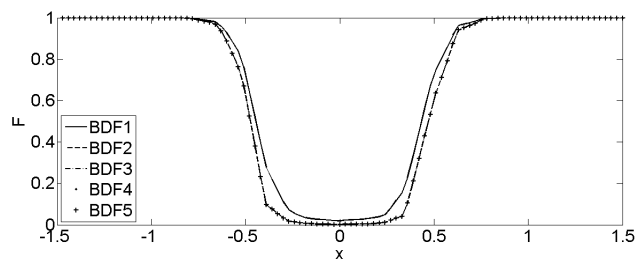


(c) DG avec le limiteur de pente développé.

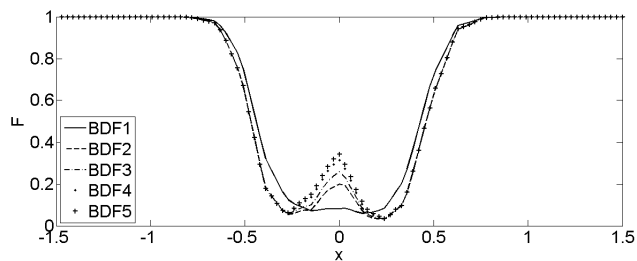
Figure 3.4 Erreur relative en pourcentage sur la perte de volume obtenue avec les différents schémas BDF pour le problème de transport d'une bulle. Les courbes des schémas BDF d'ordre 2 à 5 sont superposées.



(a) DG sans limiteur de pente.



(b) DG avec le limiteur de pente de Zhang et Shu (2010).



(c) DG avec le limiteur de pente développé.

Figure 3.5 Profil de la pseudo-concentration selon l'axe des x à $y = 5$ et $z = 0$ pour le problème du transport d'une bulle. Dans les figures (a) et (b), les courbes des schémas BDF d'ordre 2 à 5 sont superposées.

que deux approximations. On peut donc conclure que le choix optimal est le schéma BDF2 sans limiteur de pente.

En ce qui concerne les oscillations, le profil de la pseudo-concentration à $t = 400$ selon l'axe des x avec $y = 5$ et $z = 0$ est présenté à la figure 3.5. On remarque que le limiteur de pente développé par Zhang et Shu (2010) est efficace : il enlève complètement les oscillations et garde la «forme» de la bulle. Le limiteur de pente que nous avons développé ne fait qu'empêcher les dépassements, mais il y a toujours présence d'oscillations. Il est aussi intéressant d'observer qu'il n'y a aucun dépassement avec le schéma BDF1 sans limiteur de pente. La diffusion numérique a tendance à lisser la pseudo-concentration et ainsi à éliminer les dépassements.

3.4 Bulle soumise à la poussée d'Archimède

Ce problème permettra d'évaluer la qualité de la méthodologie de capture d'interface proposée en estimant le nombre de Reynolds terminal et la forme finale d'une bulle soumise à la poussée d'Archimède. Le nombre de Reynolds terminal est calculé à partir de la vitesse terminale constante de la bulle. Nous évaluerons aussi la qualité de la conservation de la masse à l'aide de ce problème de validation. Une perte de masse trop importante de la bulle modifie la dynamique de l'écoulement. En effet, la masse de la bulle influence la force de traînée, la poussée d'Archimède et par conséquent le champ de vitesse (Pillapakam et al. (2007)). Pillapakam et al. (2007) ont toléré une erreur relative sur le volume de la bulle de 1%. Pour caractériser la montée de la bulle, on utilise le diagramme de Grace et al. (1976). Ce diagramme, basé sur des observations expérimentales, nous permet de déterminer la forme de la bulle et le nombre de Reynolds terminal que nous devrions obtenir en fonction de deux nombres adimensionnels : le nombre de Morton,

$$Mo = \frac{We^3}{FrRe^4},$$

et le nombre de Eötvös,

$$Eo = \frac{\Delta\rho g L^2}{\gamma}.$$

Comme Rivard (2012) le montre, on peut établir des correspondances entre les nombres de Weber, de Froude et de Reynolds. En prenant la densité caractéristique $\rho_0 = \rho_2$ où $\rho_2 \gg \rho_1$,

nous avons $\Delta\rho \approx \rho_2$. La vitesse caractéristique sera $\bar{u} = \sqrt{\bar{g}L}$, ce qui nous donne $We = E_0$, $Fr = 1$ et $Re \approx \frac{E_0^{3/4}}{Mo^{1/4}}$. Nous reprenons les paramètres utilisés par Rivard (2012) qui sont présentés au tableau 3.8. Dans tous les cas, $\rho_1 = 1,29 \times 10^{-3}$, $\mu_1 = 1,56 \times 10^{-2}$, $\rho_2 = \mu_2 = 1$, $\mathbf{g} = -\mathbf{j}$ et $\gamma = 1$. Le maillage est le même que celui utilisé à la section précédente. La géométrie du problème est illustrée à la figure 3.6. Il est à noter que la largeur et l'épaisseur de la géométrie ont été choisies de façon à ce que les parois n'influencent pas la déformation des bulles. Typiquement, on choisit une largeur et une épaisseur qui sont au moins trois fois supérieures au diamètre des bulles (Marchandise (2006)). Le pas de temps choisi est 0,025, la demi-largeur de la zone de transition est 0,12 avec l'élément de Taylor-Hood et un interpolant linéaire pour la pseudo-concentration, où la méthode de reconstruction DL2P a été utilisée. Nous avons choisi une zone de transition de trois éléments de largeur afin de comparer la méthode SUPG et de Galerkin discontinue. Il est toutefois possible de réduire davantage la zone de transition à deux éléments avec la méthode de Galerkin discontinue. Les paramètres du solveur sont les mêmes que ceux présentés au tableau 3.3 sauf pour ce qui est du nombre de pas de temps qui est de 100 afin d'obtenir un intervalle de temps $t \in [0, 2,5]$ et les tolérances sont à 10^{-4} . Des conditions de glissement sont imposées sur toutes les parois du domaine. La condition initiale correspond à une bulle de rayon 0,5 centrée en $(0, 1, 0)$ avec un champ de vitesse nul. Le tableau 3.8 présente les différentes combinaisons des nombres adimensionnels utilisées pour obtenir les diverses formes terminales des bulles. Nous comparons les deux méthodes par l'évaluation des pertes de masse dans le temps et de l'erreur commise sur le nombre de Reynolds terminal. Afin de calculer l'erreur sur la masse, nous avons utilisé la

Tableau 3.8 Paramètres adimensionnels du problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.

Forme	Re	Fr	Eo	Mo
Sphère	1	1	1	1
Ellipse	10	1	10	0,1
Fossette	10	1	100	100
Callote sphérique	31,6228	1	100	1

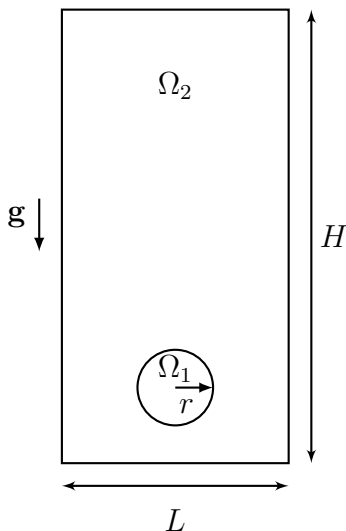


Figure 3.6 Géométrie du problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.

formule

$$\text{Erreur relative} = \frac{|M(t_0) - M(t_f)|}{|M(t_0)|}$$

où

$$M(t) = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) \, d\Omega.$$

Les résultats sont présentés à la figure 3.7. On obtient des résultats similaires à Marchandise (2006). On peut aussi remarquer que la méthode de Galerkin discontinue offre des pertes de masse légèrement plus basses que la méthode SUPG. Nous pensons que cette mesure de la perte de masse est influencée par la masse totale des deux fluides. En effet, plus la masse totale est grande, plus l'influence de la perte de masse associée à la bulle se verra diminuée. Afin d'éviter cette situation, nous avons calculé l'erreur relative sur la perte de masse de la

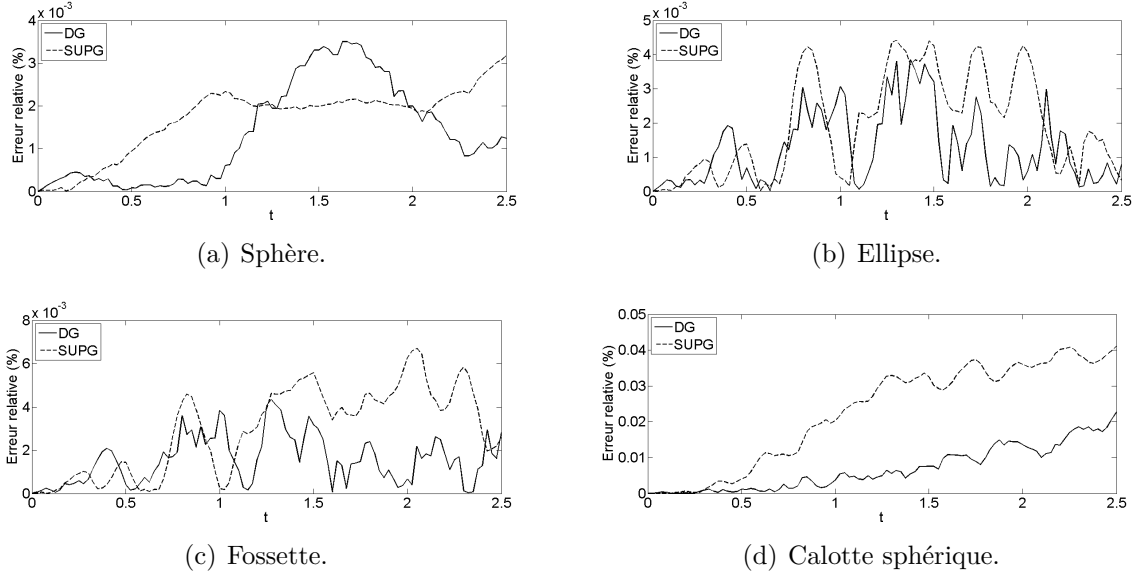


Figure 3.7 Erreur relative sur la masse en fonction du temps pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.

bulle avec la formule

$$\begin{aligned}
 \text{Erreur relative} &= \frac{|M_{F \leq 0,5}(t_0) - M_{F \leq 0,5}(t_f)|}{|M_{F \leq 0,5}(t_0)|} \\
 &= \frac{|\int_{F \leq 0,5, t=t_0} \rho_1 \, d\mathbf{x} - \int_{F \leq 0,5, t=t_f} \rho_1 \, d\mathbf{x}|}{|\int_{F \leq 0,5, t=t_0} \rho_1 \, d\mathbf{x}|} \\
 &= \frac{|\int_{F \leq 0,5, t=t_0} d\mathbf{x} - \int_{F \leq 0,5, t=t_f} d\mathbf{x}|}{|\int_{F \leq 0,5, t=t_0} d\mathbf{x}|} \\
 &= \frac{|V_{F \leq 0,5}(t_0) - V_{F \leq 0,5}(t_f)|}{|V_{F \leq 0,5}(t_0)|}
 \end{aligned}$$

où ρ_1 est la densité du fluide formant la bulle. L'erreur relative sur la perte de masse est alors équivalente à l'erreur relative sur la perte de volume. Les résultats sont présentés à la figure 3.8. On peut remarquer la différence entre la méthode SUPG et celle de Galerkin discontinue. La méthode de Galerkin discontinue réussit à maintenir une perte de volume inférieure à 1% même dans le cas de la calotte sphérique, tandis que la méthode SUPG a une perte de volume plus importante, plus la bulle se déforme. On note que l'erreur relative sur le volume de la méthode SUPG est environ 6,9 fois plus importante qu'avec la méthode de Galerkin discontinue pour la calotte sphérique à $t = 2,5$. La figure 3.9 montre la forme

terminale de la bulle : la méthode de Galerkin discontinue est en trait foncé et la méthode SUPG est en trait pâle. Pour la sphère et l'ellipse, les contours obtenus avec les deux méthodes sont similaires. Par contre, pour la fossette et la calotte sphérique, on observe un décalage. Dans le cas de la calotte sphérique, les extrémités de la bulle sont mieux représentées dans le cas de la méthode de Galerkin discontinue d'où la différence entre les pertes de volume. La figure 3.10 montre un agrandissement au niveau des extrémités de la calotte sphérique.

Afin de calculer le nombre de Reynolds terminal, nous avons approximé la vitesse à l'interface, c'est-à-dire aux valeurs de \mathbf{x} telles que $F = 0,5$, au plus haut point de la bulle à l'aide d'une formule de différentiation avant d'ordre 1. Cette mesure de la vitesse est sensible au maillage utilisé. Afin d'en diminuer l'effet, nous avons choisi d'utiliser la position de l'interface séparée d'un intervalle de $15\Delta t$ dans la formule de différence. Nous savons que certains auteurs utilisent la vitesse moyenne sur le volume de la bulle (Pillapakam et Singh (2001), Pillapakam et al. (2007)). Bien que cette méthode soit moins sensible aux maillages, nous pensons qu'elle est inadéquate puisque la bulle n'a pas une vitesse uniforme comme dans le cas de la calotte sphérique : le dessous de la bulle est plus rapide que le dessus. Lorsque la vitesse semblait être constante, c'est-à-dire à partir de $t = 0,5$, nous l'avons utilisée pour déterminer le nombre de Reynolds terminal obtenu à partir de notre approximation qu'on notera Re_t^* . La figure 3.11 présente les graphiques de la vitesse de montée en fonction du temps. On remarque que la méthode de Galerkin discontinue donne une vitesse de montée qui varie avec une plus grande amplitude que la méthode SUPG. Puisque la méthode de Galerkin discontinue repose sur la transmission de l'information d'un élément à l'autre au travers de ses faces en suivant les lignes de courant, il est normal qu'elle soit plus sensible au maillage d'où les variations plus prononcées sur la vitesse de montée. Comme il a été montré par Rivard (2012), la perte de masse est étroitement liée à la taille de la zone de transition. Il est alors envisageable qu'un maillage plus fin permette de mieux localiser le point $F = 0,5$ et ainsi réduise l'amplitude des variations. de Sousa et al. (2004) ont aussi remarqué qu'un maillage raffiné réduit les variations du nombre de Reynolds terminal. Il est toutefois important de mentionner que de Sousa et al. (2004) ont pris la position du centroïde de la bulle afin de calculer la vitesse de la bulle et ils ont utilisé un maillage structuré. Le tableau 3.9 donne le nombre de Reynolds terminal expérimental Re_t , la vitesse moyenne

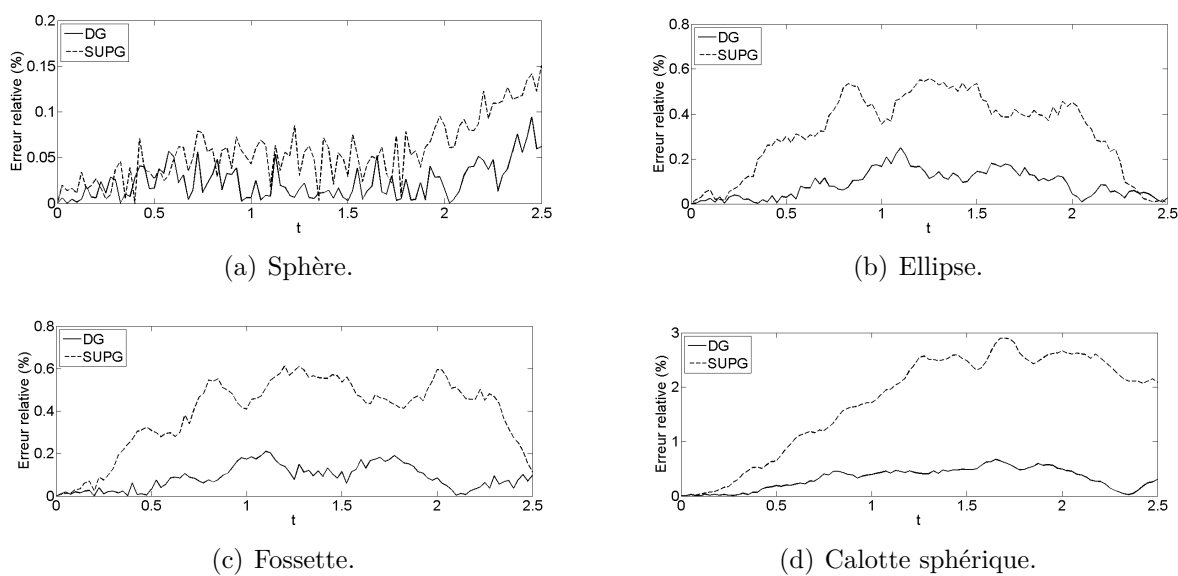


Figure 3.8 Erreur relative sur le volume de la bulle en fonction du temps pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.

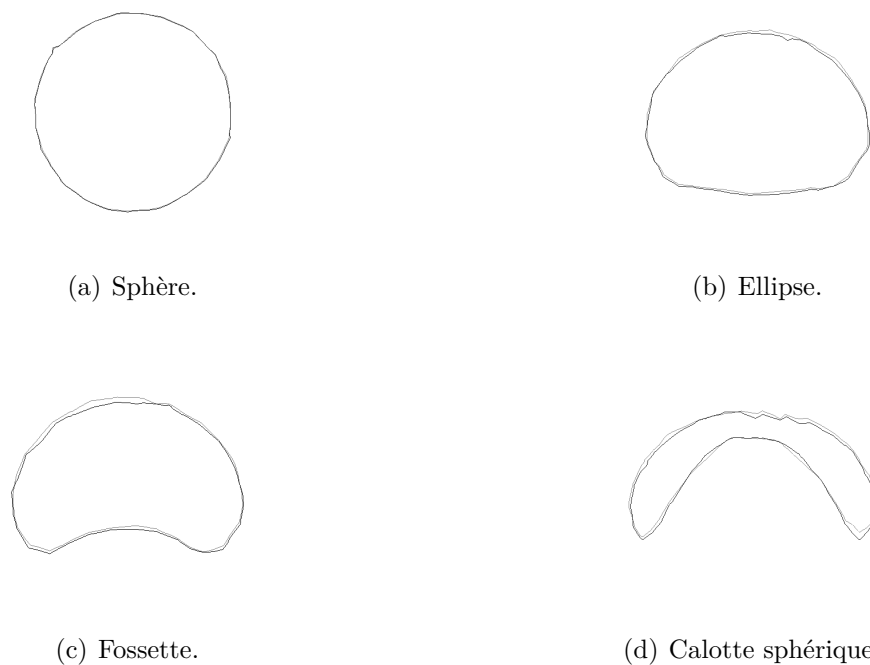


Figure 3.9 Forme finale des bulles (SUPG : trait pâle, DG : trait foncé) pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.

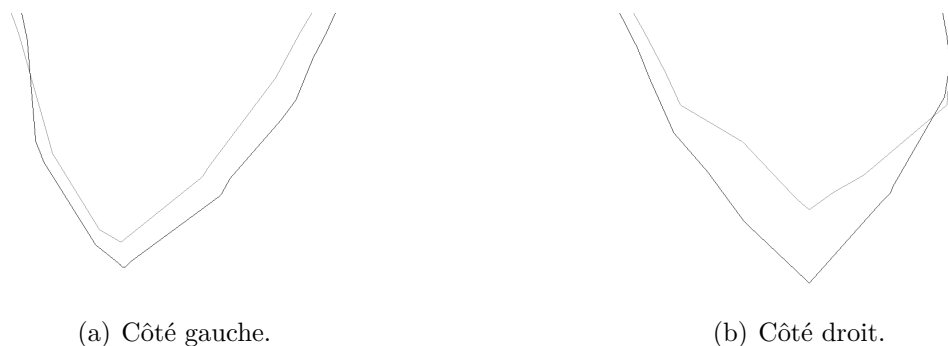
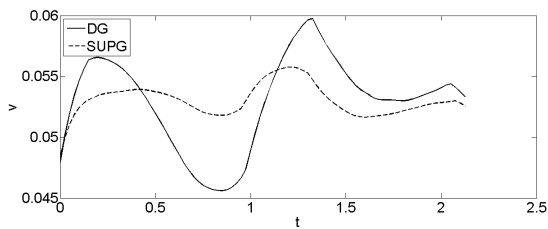


Figure 3.10 Agrandissement sur les bords de la forme de la calotte sphérique (SUPG : trait pâle, DG : trait foncé) pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.

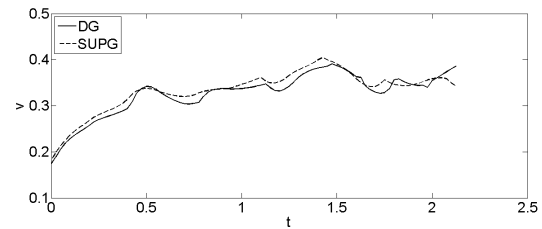
calculée \bar{v} , l'écart-type σ_v sur celle-ci, le nombre de Reynolds terminal obtenu ainsi que l'erreur relative sur ce dernier. On observe qu'à l'exception de la bulle sphérique, les erreurs relatives sont élevées. Les vitesses moyennes sont fiables puisque les écart-types sont environ un ordre de grandeur plus petits que la moyenne. Comme Rivard (2012) le mentionne, il faut se rappeler que le diagramme de Grace et al. (1976) possède une erreur sur les courbes d'environ 15%. De plus, l'échelle logarithmique du graphique rend difficile la lecture précise du nombre de Reynolds terminal. Rivard (2012) a obtenu des erreurs relatives de moins de 20% en utilisant la même méthodologie sauf pour ce qui est de l'utilisation de l'élément mini, et il a utilisé un maillage dont la taille des éléments de la zone d'ascension de la bulle était 0,05. Puisque nous avons utilisé la même méthodologie que Rivard (2012) dans le cas de la méthode SUPG à l'exception du choix de l'élément et de la taille du maillage, on peut encore conclure que le raffinement du maillage permettrait de réduire les variations et améliorerait les nombres de Reynolds terminaux.

Tableau 3.9 Erreur relative des nombres de Reynolds terminaux pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.

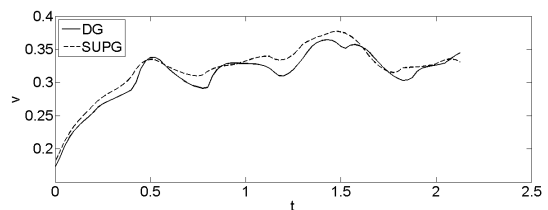
Méthode DG					
Forme	Re_t	\bar{v}	σ_v	Re_t^*	Erreur relative
Sphère	0,05	0,5253e-1	0,4046e-2	0,5253e-1	5%
Ellipse	4,6	0,3463	0,2270e-1	3,463	25%
Fossette	4	0,3276	0,1915e-1	3,276	18%
Calotte sphérique	20	0,4258	0,5388e-1	13,47	33%
Méthode SUPG					
Forme	Re_t	\bar{v}	σ_v	Re_t^*	Erreur relative
Sphère	0,05	0,5306e-1	0,1263e-2	0,5306e-1	6%
Ellipse	4,6	0,3523	0,2120e-1	3,523	23%
Fossette	4	0,3358	0,1874e-1	3,358	16%
Calotte sphérique	20	0,4273	0,4961e-1	13,51	32%



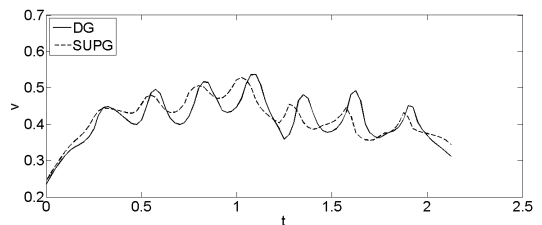
(a) Sphère.



(b) Ellipse.



(c) Fossette.



(d) Calotte sphérique.

Figure 3.11 Vitesse de montée de la bulle en fonction du temps pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède.

3.5 Coalescence de bulles soumises à la poussée d'Archimède

Ce problème consiste à observer la coalescence de deux bulles sous l'effet de la poussée d'Archimède. Initialement, les bulles sont sphériques et elles sont placées l'une au dessus de l'autre comme le montre la figure 3.12. La première est centrée en $(0, 1, 0)$ et la deuxième en

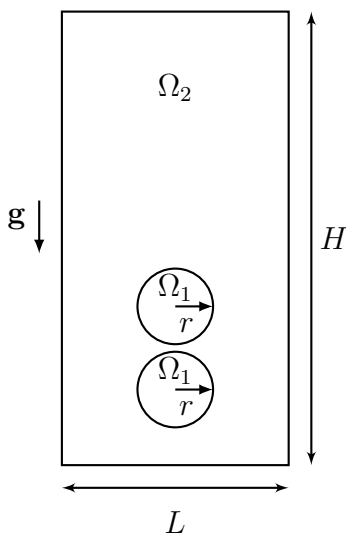


Figure 3.12 Géométrie du problème de coalescence de bulles soumises à la poussée d'Archimède.

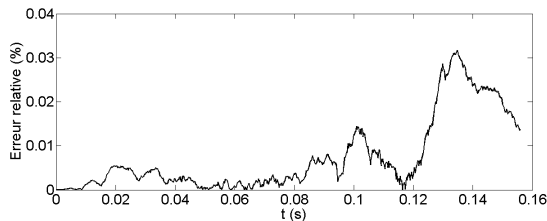
$(0, 2,3, 0)$. La géométrie et le maillage sont les mêmes qu'au problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède. De plus, les paramètres du problème sont présentés au tableau 3.10. On considère les équations de Stokes et les paramètres du solveur du tableau 3.2 à l'exception du nombre de pas temps qui est 500 et les tolérances sont fixées à 10^{-4} . L'intervalle de temps est $t \in [0, 5]$. Les paramètres du problème sont tirés de de Sousa et al. (2004). Il est à noter qu'ils définissent une distance adimensionnelle de $\frac{2}{13} \approx 0,1538$ entre les deux bulles. Normalement, on devrait observer que la bulle supérieure prend la forme d'une calotte sphérique, tandis que la bulle inférieure, sous l'effet du champ de vitesse, devrait accélérer vers l'autre bulle tout en prenant la forme d'une poire avant de coalescer avec elle. Nous avons dû augmenter cette distance à 0,3 à cause de la zone de transition qui doit contenir au moins deux éléments. Un maillage plus fin éviterait ce problème. Puisque la distance entre les bulles est plus grande, on observe que la bulle inférieure a le temps d'adopter une forme conique creuse plutôt qu'une poire. Ce problème est plus difficile que le problème original, car nous avons les extrémités

de la bulle inférieure qui sont plus fines, en plus de la coalescence entre les deux bulles. Les conditions de glissement sont imposées sur toutes les parois du domaine à l'exception du dessus de la boîte, c'est-à-dire en $y = 6$, où on a un champ de vitesse libre. Nous n'avons utilisé que la méthode de Galerkin discontinue. La méthode SUPG prenait beaucoup trop de temps à effectuer ses itérations de point fixe. La figure 3.14 montre l'ascension des bulles à différents

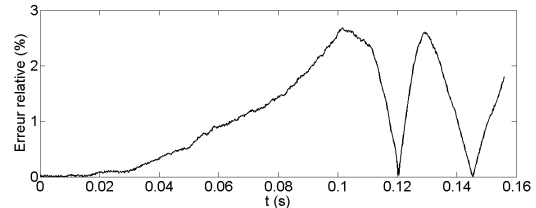
Tableau 3.10 Paramètres du problème de coalescence de bulles soumises à la poussée d'Archimède.

$\rho_1 = 0,5$	$\Delta t = 0,01$	$\mathbf{g} = -\mathbf{j}$
$\rho_2 = 1$	$r = 0,5$	$Fr = 1$
$\mu_1 = 0,5$	$H = 6$	$Re = 30$
$\mu_2 = 1$	$L = 1$	$We = 100$
$\epsilon = 0,12$		

temps (en secondes) et la figure 3.13 montre l'erreur relative sur la perte de volume et l'erreur relative sur la perte de masse en fonction du temps en seconde. Il est à noter que la figure 3.14 est une coupe dans le plan xz de la bulle. On peut remarquer que la coalescence commence au temps 0,12 seconde, tandis que de Sousa et al. (2004) et Rivard (2012) ont obtenu une coalescence après environ 0,06 seconde. Cette différence s'explique par l'augmentation de la distance initiale entre les deux bulles. Dans notre cas, on remarque que la bulle supérieure est aplatie et elle commence à se détériorer à $t = 0,12$. De plus, la bulle inférieure prend une forme de calotte sphérique avant d'amorcer la coalescence. On peut encore observer que la perte du volume est plus grande que la perte de masse. Toutefois, la perte de volume



(a) Erreur relative sur la masse.



(b) Erreur relative sur le volume de la bulle.

Figure 3.13 Erreur relative de la masse et du volume de la bulle en fonction du temps en secondes pour le problème de coalescence de bulles soumises à la poussée d'Archimède.

ne dépasse pas 3%. On remarque que l'erreur relative sur la perte de volume atteint un maximum à environ $t = 0,1$ seconde. Après, il y a une diminution de l'erreur relative juste avant le début de la coalescence, c'est-à-dire à $t = 0,12$ seconde. Puis l'erreur recommence à augmenter. On remarque un autre cycle de ce type. Nous pensons que cette diminution soudaine de la perte de volume est due tout simplement à la superposition des deux zones de transition des deux bulles, ce qui permet de regagner la perte de volume perdue lors de l'ascension. On peut toutefois remarquer que l'erreur augmente tout aussi rapidement après. Bien que le problème abordé est plus complexe que le problème de de Sousa et al. (2004), la méthode de Galerkin discontinue a maintenu une erreur relative sur la masse inférieure à 3%. À titre indicatif, Rivard (2012) a obtenu une erreur relative de 39% sur le même problème. Il est toutefois important de mentionner que ce dernier utilisait la méthode SUPG, adaptait le maillage et effectuait une mise-à-jour de la pseudo-concentration. La taille des éléments de la zone d'intérêt était de 0,02. De plus, Rivard (2012) a montré qu'il avait une perte de masse jusqu'à 15 fois plus importante avec la mise-à-jour de la pseudo-concentration. On peut tout de même conclure que la méthode de Galerkin discontinue se compare avantageusement aux autres méthodes pour ce qui est de la conservation de la masse des bulles.

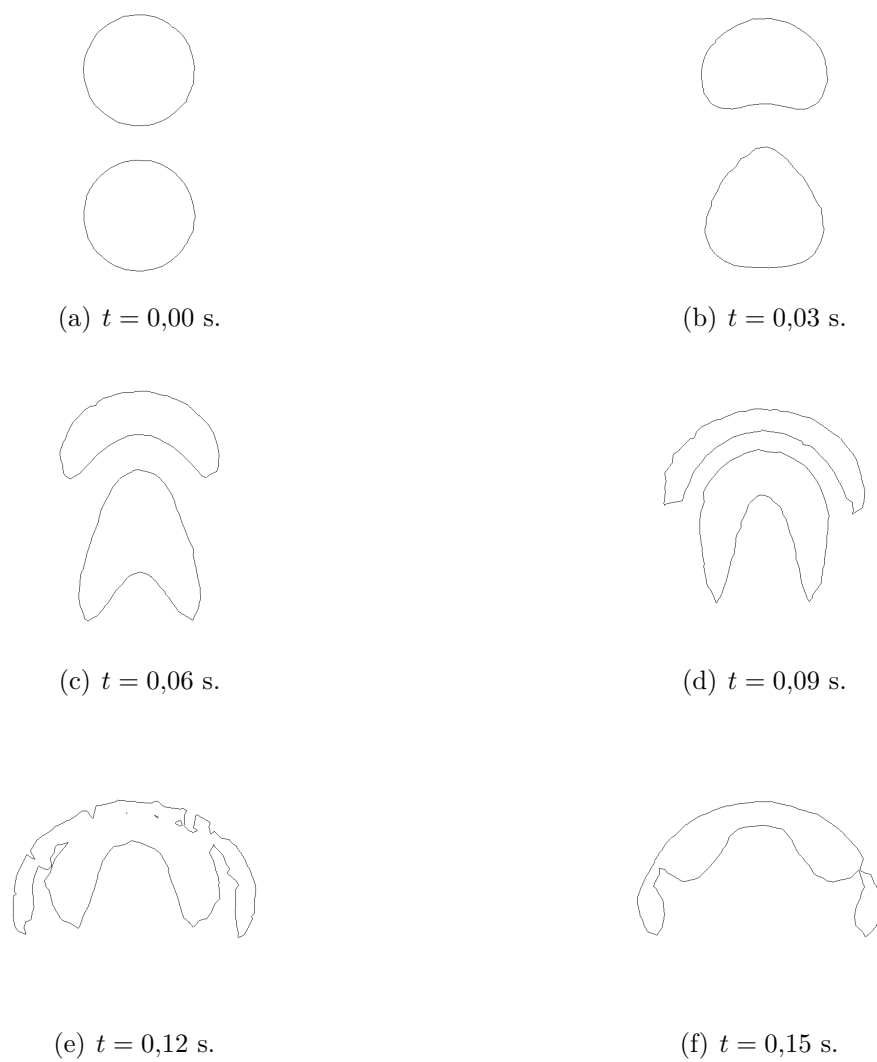


Figure 3.14 Évolution de la coalescence des bulles à différents temps dans le plan xz pour le problème de coalescence de bulles soumises à la poussée d'Archimède.

3.6 Coalescence des bulles en présence d'une surface libre

Ce problème consiste à disposer deux bulles sous une surface libre comme le montre la figure 3.15. La distance entre les bulles du problème tel que présenté par Tornberg et Engquist (2000) est de $\frac{r_1}{5}$. Encore une fois nous augmentons la distance entre les bulles à $\frac{2r_1}{5}$ à cause de la zone de transition. Les paramètres du problème sont présentés au tableau 3.11. Les nombres adimensionnels pour ce problème sont $Mo = 0,1$ et $Eo = 10$. Les conditions aux parois sont les mêmes qu'avec le problème de coalescence ainsi que les dimensions de la géométrie. Nous n'avons utilisé que la méthode de Galerkin discontinue. Normalement, la

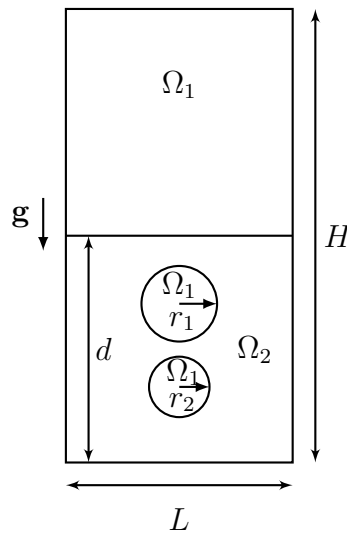


Figure 3.15 Géométrie du problème de coalescence des bulles en présence d'une surface libre.

Tableau 3.11 Paramètres du problème de coalescence des bulles en présence d'une surface libre.

$\rho_1 = 0,01$	$\Delta t = 0,01$	$d = 3$
$\rho_2 = 1$	$r_1 = 0,5$	$\mathbf{g} = -\mathbf{j}$
$\mu_1 = 0,5$	$r_2 = 0,4$	$Fr = 1$
$\mu_2 = 1$	$H = 6$	$Re = 10$
$\epsilon = 0,12$	$L = 1$	$We = 10$

bulle inférieure monte plus vite que la bulle supérieure, tandis que cette dernière pousse la

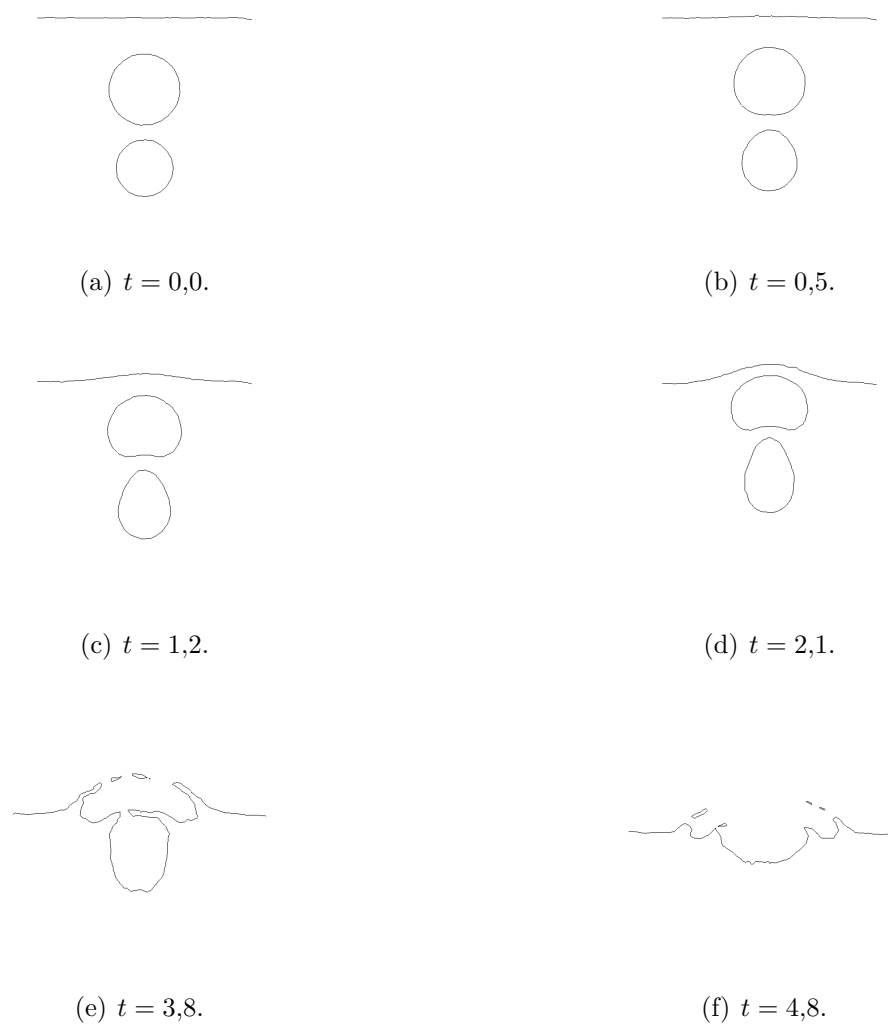
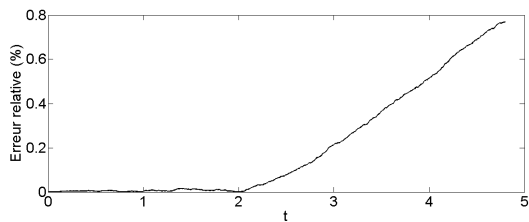
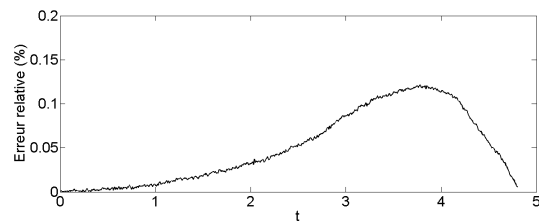


Figure 3.16 Évolution de la coalescence des bulles à différents temps adimensionnels pour le problème de coalescence de bulles avec une surface libre.

surface libre qui s'arrondit. Dans un premier temps, les bulles coalesceront, puis entreront en contact avec la surface libre. La première coalescence devrait se faire à $t = 2,1$ et la deuxième à $t = 3,8$ (Marchandise (2006)). Nos résultats sont présentés à la figure 3.16. Nous avons arrêté la simulation lorsque les bulles ont coalescé entre elles et avec la surface libre. Dans notre cas, on observe que la bulle supérieure a le temps de coalescer avec la surface libre avant que la bulle inférieure la rejoigne. La figure 3.17 montre l'erreur relative sur la masse totale et l'erreur relative sur le volume du fluide 1. Dans le cadre de ce problème, nous n'avons pas pu calculer la perte de volume de la bulle. Nous nous sommes contentés de calculer la perte de volume du fluide 1. On observe que l'erreur relative sur le volume du fluide 1 ne dépasse pas 0,15%. On remarque que l'erreur relative sur la masse totale atteint 0,8%. L'erreur relative sur la masse totale est plus élevée que l'erreur relative sur le volume du fluide 1. Cette observation s'explique par l'«évaporation numérique» des gouttelettes du fluide 2 due à la diffusion numérique lorsque les bulles coalescent avec la surface libre. On remarque ces gouttelettes à $t = 3,8$ et $t = 4,8$ à la figure 3.16. On note que la méthode de Galerkin discontinue semble tout de même bien conserver la masse de la bulle.



(a) Erreur relative sur la masse.



(b) Erreur relative sur le volume du fluide 1.

Figure 3.17 Erreur relative de la masse et du volume du fluide 1 en fonction du temps en secondes pour le problème de coalescence de bulles avec une surface libre.

CHAPITRE 4

ÉCOULEMENTS VISCOÉLASTIQUES

4.1 Les fluides viscoélastiques

Un fluide viscoélastique a un comportement qui est à la fois visqueux et élastique. Les polymères (les matières plastiques) sont un exemple bien connu de fluides viscoélastiques. Le domaine des pâtes et papiers (Kane et al. (2009)) ou encore la modélisation des écoulements sanguins nécessite aussi la modélisation de la viscoélasticité (Fraser et al. (2011), Galdi et al. (2008)). Ce chapitre permettra de :

- vérifier l'implémentation des équations constitutives de la viscoélasticité à l'aide du problème d'une bulle dans un écoulement cisailé ;
- comparer la déformation d'une bulle newtonienne dans une matrice viscoélastique avec la théorie des petites déformations.

4.2 Système d'équations

4.2.1 Modélisation de la viscoélasticité

Puisqu'on ne considère que les fluides incompressibles, on utilisera les équations (1.1) et (1.2) présentées au chapitre précédent. Par contre, afin de tenir compte de la viscoélasticité du fluide, on décomposera le tenseur des contraintes comme

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu\dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\tau}_v$$

où $2\mu\dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{u})$ représente le comportement newtonien et $\boldsymbol{\tau}_v$ représente le comportement élastique du fluide. On obtient $\boldsymbol{\tau}_v$ d'une loi de comportement qui peut s'écrire sous la forme

$$\lambda\left(\partial_t\boldsymbol{\tau}_v + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{\tau}_v - (\nabla\mathbf{u})\boldsymbol{\tau}_v - \boldsymbol{\tau}_v(\nabla\mathbf{u})^t\right) + T(\boldsymbol{\tau}_v) = 2\mu_v\dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{u}) \quad (4.1)$$

où τ_v est le tenseur d'ordre 2 des extra-contraintes, μ_v est la viscosité élastique, λ est le temps de relaxation du fluide et $T(\tau_v)$ est une fonction qui est déterminée par le modèle utilisé. On dénote plusieurs modèles :

$$\begin{aligned}
\text{Maxwell} & : T(\tau_v) = \tau_v && \text{avec } \mu = 0; \\
\text{Oldroyd-B} & : T(\tau_v) = \tau_v; \\
\text{Phan-Tien-Tanner} & : T(\tau_v) = e^{\frac{\lambda \epsilon}{\mu_v} \text{tr}(\tau_v)} && \text{où } \text{tr}(\tau_v) \text{ est la trace du tenseur } \tau_v; \\
\text{Giesekus} & : T(\tau_v) = \tau_v + \frac{\alpha \lambda}{\mu_v} \tau_v^2.
\end{aligned}$$

Pour les modèles de Phan-Tien-Tanner et de Giesekus, ϵ et α sont des paramètres matériels adimensionnels propres au fluide considéré. Il est aussi commun d'approximer le modèle de Phan-Tien-Tanner par

$$T(\tau_v) = e^{\frac{\lambda \epsilon}{\mu_v} \text{tr}(\tau_v)} \approx 1 + \frac{\lambda \epsilon}{\mu_v} \text{tr}(\tau_v)$$

pour un ϵ suffisamment petit afin de faciliter la discrétisation du problème. Cette approximation correspond aux deux premiers termes du développement de Taylor de $T(\tau_v)$. Pour le modèle de Giesekus, il est important de préciser que $\tau_v^2 = \tau_v \tau_v$ qui correspond à une multiplication matricielle. Afin de simplifier la notation, on écrira τ au lieu de τ_v . Le système d'équations à discrétiser est donc :

$$\begin{aligned}
\rho \partial_t \mathbf{u} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u})) - \nabla \cdot \tau &= 0; \\
\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0; \\
\lambda (\partial_t \tau + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau - (\nabla \mathbf{u}) \tau - \tau (\nabla \mathbf{u})^t) + T(\tau) &= 2\mu_v \dot{\gamma}(\mathbf{u}).
\end{aligned}$$

Dans le cas des écoulements multifluides, les paramètres viscoélastiques sont calculés à l'aide de :

$$\begin{aligned}
\lambda(\mathbf{x}, t) &= \lambda_1(\mathbf{x}) + (\lambda_2(\mathbf{x}) - \lambda_1(\mathbf{x})) \bar{F}(\mathbf{x}, t); \\
\mu_v(\mathbf{x}, t) &= \mu_{v_1}(\mathbf{x}) + (\mu_{v_2}(\mathbf{x}) - \mu_{v_1}(\mathbf{x})) \bar{F}(\mathbf{x}, t).
\end{aligned}$$

Ceci assure que ces paramètres satisfont l'hypothèse des milieux continus nécessaire aux équations de Navier-Stokes.

4.2.2 Adimensionnalisation

L'adimensionnalisation du système nécessite l'introduction de deux nombres adimensionnels supplémentaires :

- Nombre de Weissenberg : $Wi = \frac{\bar{\lambda}\bar{u}}{L}$ qui représente le rapport entre les forces élastiques et visqueuses ;
- Nombre de Deborah : $De = \frac{\bar{\lambda}}{\bar{t}}$ qui représente le rapport entre le temps de relaxation et le temps caractéristique de la déformation.

Un bel exemple pour comprendre le nombre de Deborah est le jouet «silly putty». Si ce polymère est soumis à des contraintes pendant un laps de temps très court, c'est-à-dire $\bar{\lambda} \gg \bar{t}$, il agira comme un solide. Par contre, pour des contraintes appliquées pendant un long intervalle de temps, c'est-à-dire $\bar{t} \gg \bar{\lambda}$, il adoptera le comportement d'un fluide. Il est important de spécifier qu'il n'est pas toujours possible d'établir une correspondance entre les deux nombres. En effet, ceci est possible si le temps caractéristique de la déformation du fluide peut s'écrire $\bar{t} = c \frac{\bar{L}}{\bar{u}}$ où c est une constante de proportionnalité (Poole (2012)). La viscosité caractéristique est $\bar{\mu} = \mu + \mu_v$. En considérant seulement le nombre de Weissenberg et le problème à surface libre, le système d'équations adimensionnel est donné par :

$$\rho \partial_t \mathbf{u} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u})) - \frac{1}{Re} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \frac{1}{Fr^2} \rho \mathbf{g} + \frac{1}{We_e} \gamma \kappa(\bar{F}) \nabla \bar{F}; \quad (4.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0; \quad (4.3)$$

$$\partial_t F + \mathbf{u} \cdot \nabla F = 0; \quad (4.4)$$

$$Wi \lambda \left(\partial_t \boldsymbol{\tau} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau} - (\nabla \mathbf{u}) \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} (\nabla \mathbf{u})^t \right) + T(\boldsymbol{\tau}) = 2\mu_v \dot{\gamma}(\mathbf{u}). \quad (4.5)$$

Les problèmes abordés dans ce mémoire sont à bas nombre de Weissenberg. On souligne cependant la conformation en logarithme qui consiste à effectuer un changement de variable sur τ_v et de prendre le logarithme afin de pouvoir résoudre des problèmes à haut nombre de Weissenberg (Hulsen et al. (2005), Kane et al. (2009)). En effet, Hulsen et al. (2005) ont montré que la solution avait une croissance exponentielle et cela expliquerait les instabilités observées à haut nombre de Weissenberg. L'utilisation de la conformation en logarithme permet de capturer cette croissance exponentielle. Nous avons débuté l'implémentation de

cette formulation et elle sera utilisée dans une étude future.

4.2.3 Discrétisation des équations

Afin de résoudre le système formé par les équations (4.2), (4.3) et (4.5), plusieurs formulations dites mixtes existent (Marchal et Crochet (1987), Brown et al. (1993), Guénette et Fortin (1995)). Dans le cadre de ce mémoire, nous utilisons la formulation DEVSS («discrete elastic-viscous-split-stress») établie par Guénette et Fortin (1995). Cette formulation renforce la coercivité du problème de Stokes tout en conservant la nature résiduelle («consistency») de la discrétisation. De plus, elle permet d'utiliser un plus grand nombre de modèles, car elle ne nécessite aucun changement de variable. Par contre, elle doit respecter une condition de stabilité généralisée de type Babuška-Brezzi (Fortin et al. (2000)) pour la combinaison des éléments sur le champ de vitesse, la pression et le tenseur des extra-contraintes τ_v . Il semble que l'élément de Taylor-Hood associé à un interpolant linéaire continu ou discontinu en τ_v et l'élément de Crouzeix-Raviart associé à un interpolant quadratique continu en τ_v respectent cette condition (Fortin et al. (2000), Bogaerds et al. (1999), Kane et al. (2009)). De plus, la formulation DEVSS introduit une nouvelle variable d . La formulation mixte du problème s'écrit alors comme :

$$\rho \partial_t \mathbf{u} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u})) - \nabla \cdot (2\alpha \dot{\gamma}(\mathbf{u})) + \nabla p = \nabla \cdot \tau - \nabla \cdot (2\alpha d); \quad (4.6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0; \quad (4.7)$$

$$\lambda \left(\partial_t \tau + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau - (\nabla \mathbf{u}) \tau - \tau (\nabla \mathbf{u})^t \right) + T(\tau) = 2\mu_v \dot{\gamma}(\mathbf{u}); \quad (4.8)$$

$$d = \dot{\gamma}(\mathbf{u}). \quad (4.9)$$

Pour les équations (4.6) et (4.7), on utilise la méthode de Galerkin. En ce qui concerne l'équation (4.8), chaque composante du tenseur τ_v provient de la discrétisation d'une équation hyperbolique. Nous devons alors utiliser la méthode de Galerkin discontinue ou la méthode SUPG. Les formes faibles de ces méthodes sont une variante de celles présentées au chapitre 2. De plus, τ_v est un tenseur symétrique, ce qui réduit le nombre de composantes à discrétiser à six au lieu de neuf. Pour l'équation (4.9), on obtient d en calculant la projection du tenseur du taux de déformation $\dot{\gamma}(\mathbf{u})$ dans L^2 . Cette variable prend tout son sens lors de la discrétisation.

Nous devons la projeter au sens de L^2 sur l'espace discret de τ_v . Le problème à résoudre est donné par l'équation (2.4). Il est à noter qu'on projette le tenseur du taux de déformation au lieu de projeter un terme source f . Guénette et Fortin (1995) suggèrent d'utiliser $\alpha = \mu_v$ comme choix optimal pour obtenir une convergence rapide du système. C'est ce qui est utilisé dans ce mémoire.

4.3 Déformation d'une bulle dans un écoulement cisailé

Ce problème de déformation consiste à submerger une bulle sphérique d'un fluide dans un autre fluide soumis à un écoulement cisailé. Sous l'action du champ de vitesse, la bulle se déforme jusqu'à prendre une forme ellipsoïdale. Afin de caractériser sa déformation, deux paramètres sont calculés : le paramètre de déformation D et l'angle θ . Le paramètre de déformation est calculé à l'aide de

$$D = \frac{a - b}{a + b}$$

où a et b sont respectivement la plus grande et la plus petite distance entre la surface de la bulle et son centre. L'angle θ correspond à l'angle entre la direction de la plus grande déformation et celle de l'écoulement. La figure 4.1 présente ces deux paramètres dans le cas bidimensionnel. La géométrie est un cube de dimensions $[-2, 2] \times [0, 4] \times [-2, 2]$ présenté à la

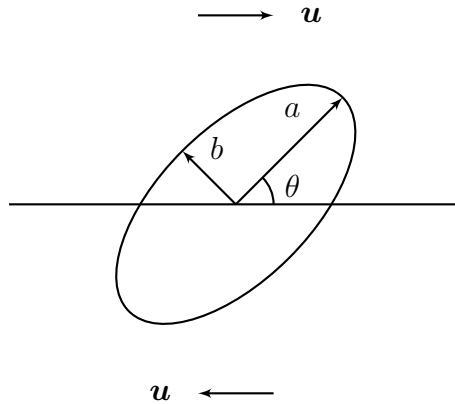


Figure 4.1 Paramètres de déformation.

figure 4.2. Afin d'éviter que la bulle interagisse avec les parois, on choisit $L = \frac{\pi}{8}$ (Chinyoka et al. (2005), Chung et al. (2008)). Nous avons choisi $r = 0,5$ et $L = 4$. Le modèle utilisé est

celui d’Oldroyd-B (Chinyoka et al. (2005), Pillapakam et al. (2007), Kane et al. (2009)). Nous avons imposé le champ de vitesse sur les faces situées à $x = -\frac{L}{2}$, $x = \frac{L}{2}$, $z = -\frac{L}{2}$ et $z = \frac{L}{2}$ avec $\mathbf{u} = (z, 0, 0)$. Des conditions de glissement ont été imposées sur les autres faces. Puisque nous considérons déjà l’écoulement cisailé comme établi au départ, la condition initiale sur le champ de vitesse est $\mathbf{u} = (z, 0, 0)$ et $\tau_v = 0$. Nous pouvons distinguer quatre

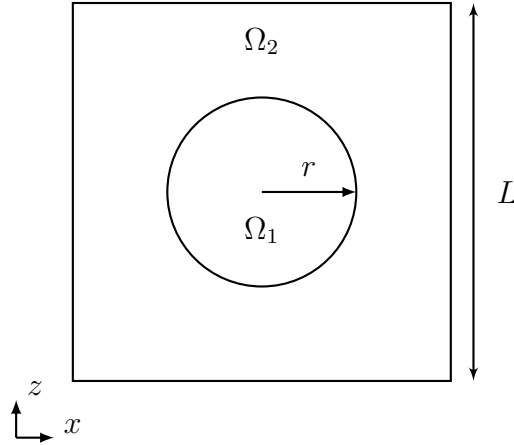


Figure 4.2 Géométrie du problème de la déformation d’une bulle dans un écoulement cisailé.

possibilités différentes sur les caractéristiques des fluides. En effet, les fluides de la bulle et de la matrice qui contient la bulle peuvent être newtoniens ou viscoélastiques. Nous prenons comme convention que l’acronyme NV correspond à une bulle newtonienne dans une matrice viscoélastique (Chinyoka et al. (2005)). Le même principe s’applique aux cas NN, VV et VN. Les paramètres du problème sont présentés au tableau 4.1. Il est important de noter que $\mu = 1$, $\mu_v = 0$ et $\lambda = 0$ pour un fluide newtonien et que $\mu = \mu_v = 0,5$ pour un fluide viscoélastique. De plus, la gravité est négligée et les équations de Stokes sont utilisées. Les paramètres du solveur sont présentés au tableau 3.3 à l’exception des tolérances sur la correction et le résidu qui sont respectivement donnés par 10^{-3} et 10^{-1} . De plus, nous avons dû accepter un pas de temps qui n’avait pas réussi à converger dans la plupart des simulations. La bulle est centrée en $(0, 2, 0)$. Les paramètres de déformation doivent être mesurés lorsque l’état stationnaire est atteint. Malheureusement, la taille des éléments du maillage rend difficile l’atteinte de cet état. En effet, on se rend compte que la zone de transition s’évase dans la direction des lignes de courant, ce qui affecte la force capillaire. Afin d’éviter ce problème, une mise-à-jour de la pseudo-concentration pour maintenir la taille de la zone de transition pourrait permettre

d'éviter ce problème de diffusion numérique à l'interface. Bien que Rivard (2012) mentionne que la mise-à-jour de la pseudo-concentration augmente la perte de masse dans un problème transitoire, il est important de noter que Rivard (2012) avait appliqué ce raisonnement sur les problèmes de la bulle soumise à la poussée d'Archimède et de la coalescence des bulles qui sont deux problèmes qui n'atteignent pas un état stationnaire contrairement au problème de la bulle dans un écoulement cisailé. Un autre aspect à considérer est la taille des éléments qui peut altérer les résultats (Kane et al. (2009)). À titre de comparaison, nous avons un maillage dont la taille des éléments est de 0,08 dans la zone raffinée, tandis que Chinyoka et al. (2005) utilisent un maillage structuré dont la taille des éléments est de l'ordre de 0,001. De plus, ils résolvent le problème en deux dimensions. Le maillage que nous avons utilisé est présenté à la figure 4.3. Afin d'identifier les paramètres de déformation, nous avons pris les mesures au moment où l'erreur relative sur la perte du volume de la bulle atteignait 1%. Ce choix est motivé par l'argument qu'une trop grande perte de masse affecte l'écoulement (Pillapakkam et al. (2007)). De plus, le début de «l'évasement» de la région de transition est un signe que l'état stationnaire est atteint et que sans mise-à-jour du marqueur, la diffusion numérique est alors responsable de sa déformation. Cette façon de faire est qualitative, mais nous avons dû nous contenter de cela pour le moment. La figure 4.4 montre l'évolution de l'erreur relative sur la perte de volume de la bulle et du paramètre D . Le tableau 4.2 présente les paramètres de déformation obtenus. Nous avons remarqué que θ variait beaucoup plus que D . Par exemple, pour le cas VN, l'angle oscillait entre $27,30^\circ$ et $36,08^\circ$. Nous attribuons cela à la taille des éléments utilisés. Normalement, on devrait observer que l'angle est plus petit pour le cas NV que pour le cas NN comme le prédit la théorie des petites déformations (Chinyoka et al. (2005)). Nos résultats semblent aller dans la même direction. Bien que Chinyoka et al. (2005) ont approximé le problème en 2D, ils avaient remarqué une différence d'environ 4° alors que nous observons un écart d'environ 1° . Compte tenu que l'angle varie beaucoup, nous ne pouvons pas conclure à partir de cette mesure. Toujours selon Chinyoka et al. (2005), on devrait observer que la combinaison VN a un paramètre D plus élevé que les combinaisons NV et VV. Encore une fois, nos résultats semblent être en accord, mais la différence entre nos valeurs est plus petite que 1 lorsque comparé aux résultats de ces auteurs. Nous ne savons pas si la différence vient seulement du fait que nous avons fait les simulations

en 3D ou encore de notre méthode pour mesurer les paramètres. Afin de trancher, nous avons simulé le problème présenté dans Khismatullin et al. (2006). Ils étudient le cas d'une bulle newtonienne d'huile de silicone, identifiée par D2, dans un fluide viscoélastique identifié par C1. Il est important de mentionner que la théorie des petites déformations de Greco (2002) a été validée expérimentalement par Guido et al. (2003) en utilisant, entre autres, cette paire de fluide.

Tableau 4.1 Paramètres du problème de déformation de bulles dans un écoulement cisailé.

$\rho_1 = 1$	$\Delta t = 0,025$	$Ca = 0,24$
$\rho_2 = 1$	$r = 0,5$	$Re = 0,3$
$\lambda_1 = 1$	$L = 4$	$Wi = 0,4$
$\lambda_2 = 1$	$\epsilon = 0,12$	

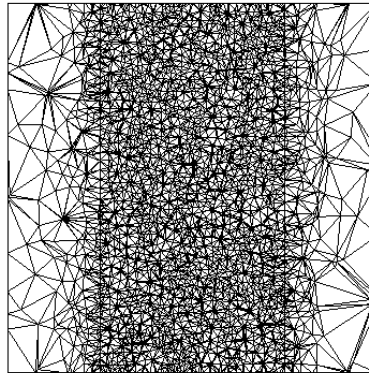
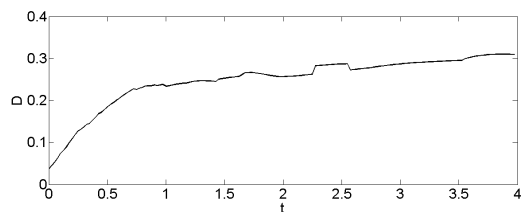
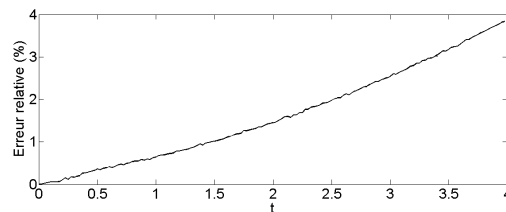


Figure 4.3 Plan xz du maillage pour le problème de la déformation de la bulle dans un écoulement cisailé.

Les paramètres de ce problème sont présentés au tableau 4.3. Bien que Khismatullin et al. (2006) ne mentionnent pas les densités des fluides utilisés, Guido et al. (2003) spécifient qu'ils ont choisi des fluides dont les densités sont similaires afin d'éviter l'ascension de la bulle. Nous choisissons alors $\rho_1 = \rho_2 = 1$. Pour le nombre capillaire, nous avons simulé deux cas : $Ca = 0,1$ et $Ca = 0,14$. Les paramètres de déformation sont présentés au tableau 4.4. Les

(a) Paramètre de déformation D .

(b) Erreur relative sur la perte de volume.

Figure 4.4 Paramètre de déformation et erreur relative sur la perte de volume de la bulle en fonction du temps dans le cas NN.

Tableau 4.2 Résultats pour le problème de la déformation de la bulle dans un écoulement cisailé.

Composition	D	θ
NN	0,2518	28,97°
NV	0,2329	27,21°
VN	0,2354	36,08°
VV	0,2274	27,97°

paramètres de déformation prédits par la théorie des petites déformations sont notés D^{th} et θ^{th} . On peut observer une erreur élevée dans les deux cas. Khismatullin et al. (2006) avaient obtenu des erreurs qui ne dépassaient pas 12,6% pour D et 4% pour θ , mais ils utilisaient un maillage structuré dont la taille des éléments était $\frac{r}{16}$ et la dimension du domaine était $[0, 16r] \times [0, 8r] \times [0, 8r]$. Pour un $r = 0,5$, la taille des éléments serait 0,03125, ce qui est environ deux fois plus petit que la taille des éléments utilisés au cours de nos simulations. De plus, ils ont utilisé un pas en temps de 0,0002. Malheureusement, nous ne pouvons pas conclure : il nous faudrait utiliser un maillage plus fin avec une stratégie comme la mise-à-jour de la pseudo-concentration afin d'être capable d'appliquer des tolérances plus basses.

Tableau 4.3 Paramètres du problème de déformation de bulles pour la paire de fluides C1-D2 dans un écoulement cisailé.

$\rho_1 = 1$	$\mu_1 = 0,1$	$\Delta t = 0,025$
$\rho_2 = 1$	$\mu_2 = 0,127$	$r = 0,5$
$\lambda_1 = 0$	$\mu_{v_1} = 0$	$L = 1$
$\lambda_2 = 1$	$\mu_{v_2} = 0,873$	$\epsilon = 0,12$
$Wi = 0,4$	$Re = 0,07$	

Tableau 4.4 Résultats du problème de la déformation de la bulle pour la paire de fluides C1-D2 dans un écoulement cisailé.

Ca	D	D^{th}	Erreur relative - D	θ	θ^{th}	Erreur relative - θ
0,1	0,152	0,102	49%	22,6°	32,6°	31%
0,14	0,212	0,142	49%	20,4°	27,7°	26%

CONCLUSION

L'objectif principal de ce mémoire était l'implémentation de la méthode de Galerkin discontinue afin de modéliser des écoulements à surfaces libres viscoélastiques tridimensionnels. Nous nous sommes assurés d'atteindre cet objectif à l'aide de trois objectifs spécifiques :

- i) implémenter le solveur de Galerkin discontinu et les modèles d'écoulements viscoélastiques ;
- ii) vérifier et valider le solveur avec des problèmes d'écoulements à surfaces libres ;
- iii) vérifier les modèles pour l'étude des écoulements viscoélastiques avec des problèmes d'écoulements à surfaces libres viscoélastiques.

Nous avons vérifié le solveur à l'aide de problèmes d'écoulements à surfaces libres tels que le problème de Laplace et le problème de transport d'une bulle. Pour le problème de Laplace, nous avons remarqué que la méthode de Galerkin discontinue prenait moins de pas en temps que la méthode SUPG pour atteindre l'état stationnaire avec l'élément mini associé à un interpolant linéaire en F et l'élément de Taylor-Hood associé à un interpolant linéaire en F . Le problème du transport d'une bulle a montré que la méthode de Galerkin discontinue avec l'application d'un limiteur de pente augmentait la perte de masse de la bulle. Il n'y avait aucune différence notable entre les schémas BFD d'ordre supérieure. Nous avons choisi le schéma BDF2 puisqu'il ne nécessite que deux approximations.

Nous avons validé la stratégie de capture d'interface basée sur la méthode de Galerkin discontinue en utilisant le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède. Le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède a révélé que la méthode de Galerkin discontinue était plus apte à capturer l'interface et conserver la masse de la bulle que la méthode SUPG. On observait que la perte de masse de la bulle était jusqu'à 6,9 fois plus importante pour la méthode SUPG que la méthode de Galerkin discontinue. Nous avons observé une erreur relative notable sur les nombres de Reynolds terminaux pour les deux méthodes. Nous avons conclu que ces résultats étaient une conséquence de la taille des éléments du maillage utilisé. Un maillage plus fin améliorerait nos résultats. À l'aide du problème de coalescence de bulles sans surface libre, nous avons conclu que la méthode de Galerkin discontinue se compare

avantageusement aux autres méthodes pour ce qui est de la conservation de la masse des bulles.

Le problème de déformation d'une bulle dans un écoulement cisailé nous a servi à vérifier que les modèles du comportement des fluides viscoélastiques étaient bien implémentés. Nous avons observé que nos résultats semblaient aller dans la même direction que les prévisions de la théorie des petites déformations et que les résultats de Chinyoka et al. (2005). Nous ne pouvons pas affirmer hors de tout doute la précision du modèle proposé, car la taille des éléments du maillage ainsi que la diffusion numérique de l'interface rendaient difficile la convergence du système. Nous avons aussi repris le problème de Khismatullin et al. (2006) qui simulait le comportement d'une bulle newtonienne dans une matrice viscoélastique. Nos résultats ont montré une erreur relative de 49% pour le paramètre de déformation D et d'au maximum 31% pour l'angle de déformation θ . Nous avons conclu qu'il nous faudrait utiliser un maillage structuré plus fin avec une stratégie comme la mise-à-jour de la pseudo-concentration afin d'être en mesure d'appliquer des tolérances plus basses.

Améliorations futures

Les simulations qui ont été faites souffraient toutes de la taille du maillage. Nous avons l'intention de refaire ces simulations sur des maillages plus fin à l'aide d'un solveur parallèle qui en cours de développement. Ceci nous permettra de comparer de façon plus précise les méthodes de SUPG et de Galerkin discontinue sur les problèmes de coalescence des bulles. De plus, les mesures des caractéristiques de déformation du problème de la bulle dans un écoulement cisailé pourra aussi être faite avec plus de précision. En ce qui concerne ce problème, une étude de la mise-à-jour de la pseudo-concentration sur la perte de masse serait intéressante puisque la bulle atteint un état stationnaire. Il serait aussi intéressant d'étudier le comportement des schémas d'adaptation en temps sur la perte de masse des problèmes abordés dans ce travail.

Afin de pouvoir s'attaquer à des géométries plus réalistes, la méthode de la conformation en logarithme est en cours de développement. Cette méthode va nous permettre d'utiliser des géométries possédant des singularités et des problèmes avec des nombres Weissenberg plus élevés. Il reste encore des problèmes classiques à vérifier dans le cadre des écoulements visco-

élastiques tels que le problème de la contraction 4 :1 et le problème d'une bulle newtonienne soumise à la poussée d'Archimède dans une matrice viscoélastique. Ces problèmes seront abordés dans un futur projet de doctorat sur la modélisation des écoulements sanguins.

RÉFÉRENCES

- ASCHER, U.M. ET PETZOLD, L. (1998). *Computer Methods of Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations*. SIAM.
- BOGAERDS, A. C., VERBEETEN, W. M., PETERS, G. W. et BAAIJENS, F. (1999). 3d viscoelastic analysis of a polymer solution in a complex flow. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 180, 413–430.
- BRACKBILL, J., KOTHE, D. B. et ZEMACH, C. (1992). A continuum method for modeling surface tension. *Journal of computational physics*, 100, 335–354.
- BREZZI, F. (1974). On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis-Modelisation Mathématique et Analyse Numérique*, 8, 129–151.
- BROWN, R., SZADY, M., NORTHEY, P. et ARMSTRONG, R. (1993). On the numerical stability of mixed finite-element methods for viscoelastic flows governed by differential constitutive equations. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 5, 77–106.
- CHINYOKA, T., RENARDY, Y., RENARDY, M. et KHISMATULLIN, D. (2005). Two-dimensional study of drop deformation under simple shear for oldroyd-b liquids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 130, 45–56.
- CHUNG, C., HULSEN, M. A., KIM, J. M., AHN, K. H. et LEE, S. J. (2008). Numerical study on the effect of viscoelasticity on drop deformation in simple shear and 5 : 1 : 5 planar contraction/expansion microchannel. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 155, 80–93.
- DE SOUSA, F., MANGIAVACCHI, N., NONATO, L., CASTELO, A., TOMÉ, M., FERREIRA, V., CUMINATO, J. et MCKEE, S. (2004). A front-tracking/front-capturing method for the simulation of 3d multi-fluid flows with free surfaces. *Journal of Computational Physics*, 198, 469–499.
- DI PIETRO, D. A. et ERN, A. (2011). *Mathematical aspects of discontinuous Galerkin methods*, vol. 69. Springer.

- EL HADJ, M., TANGUY, P. et FORTIN, A. (1990). A numerical comparison of two decoupled methods for the simulation of viscoelastic fluid flows. *Rheologica Acta*, 29, 342–351.
- FORTIN, A., GUÉNETTE, R. et PIERRE, R. (2000). On the discrete evss method. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 189, 121–139.
- FORTIN, A. ET GARON, A. (2011). *Les éléments finis : de la théorie à la pratique*. École Polytechnique de Montréal.
- FORTIN, M. ET FORTIN, A. (1989). Une note sur les méthodes des caractéristiques et de lesaint-raviart pour les problèmes hyperboliques stationnaires. *RAIRO M2AN*, 23, 593–596.
- FRASER, K. H., TASKIN, M. E., GRIFFITH, B. P. et WU, Z. J. (2011). The use of computational fluid dynamics in the development of ventricular assist devices. *Medical engineering & physics*, 33, 263–280.
- GALDI, G. P., RANNACHER, R., ROBERTSON, A. M. et TUREK, S. (2008). *Hemodynamical flows*. Springer.
- GRACE, J., WAIREGI, T. et NGUYEN, T. (1976). Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids. *Trans. Inst. Chem. Eng*, 54, 167–173.
- GRECO, F. (2002). Drop deformation for non-newtonian fluids in slow flows. *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, 107, 111–131.
- GUÉNETTE, R. et FORTIN, M. (1995). A new mixed finite element method for computing viscoelastic flows. *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, 60, 27–52.
- GUIDO, S., SIMEONE, M. et GRECO, F. (2003). Deformation of a newtonian drop in a viscoelastic matrix under steady shear flow : Experimental validation of slow flow theory. *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, 114, 65–82.
- HESTHAVEN, J.S. ET WARBURTON, T. (2000). *Nodal Discontinuous Galerkin Methods : Algorithms, Analysis, and Application*. Springer.
- HULSEN, M. A., FATTAL, R. et KUPFERMAN, R. (2005). Flow of viscoelastic fluids past a cylinder at high weissenberg number : stabilized simulations using matrix logarithms. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 127, 27–39.

JAMET, D., TORRES, D. et BRACKBILL, J. (2002). On the theory and computation of surface tension : the elimination of parasitic currents through energy conservation in the second-gradient method. *Journal of Computational Physics*, 182, 262–276.

JOHNSON, C. (1987). *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. Dover Publications.

KANE, A., GUÉNETTE, R. et FORTIN, A. (2009). A comparison of four implementations of the log-conformation formulation for viscoelastic fluid flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 164, 45–50.

KHISMATULLIN, D., RENARDY, Y. et RENARDY, M. (2006). Development and implementation of vof-prost for 3d viscoelastic liquid–liquid simulations. *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, 140, 120–131.

LEVEQUE, R. (1992). *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser.

LEVEQUE, R. (2002). *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press.

MARCHAL, J. et CROCHET, M. (1987). A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 26, 77–114.

MARCHANDISE, E. (2006). *Simulation of three-dimensional two-phase flows : coupling of a stabilized finite element method with a discontinuous level set approach*. Thèse de doctorat, UCL.

MARCHANDISE, E., CHEVAUGEON, N. et REMACLE, J. (2008). Spatial and spectral superconvergence of discontinuous galerkin method for hyperbolic problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 215, 484–494.

NATVIG, J. R. et LIE, K.-A. (2008). Fast computation of multiphase flow in porous media by implicit discontinuous galerkin schemes with optimal ordering of elements. *Journal of Computational Physics*, 227, 10108–10124.

PILLAPAKKAM, S. et SINGH, P. (2001). A level-set method for computing solutions to viscoelastic two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 174, 552–578.

- PILLAPAKKAM, S. B., SINGH, P., BLACKMORE, D. et AUBRY, N. (2007). Transient and steady state of a rising bubble in a viscoelastic fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 589, 215–252.
- POOLE, R. (2012). The Deborah and Weissenberg numbers. *The British Society of Rheology*, 52, 32–39.
- POPINET, S. (2009). An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. *Journal of Computational Physics*, 228, 5838–5866.
- RIVARD, R. (2012). Simulation des grandes échelles appliquée à la modélisation des écoulements turbulents à surface libre.
- SHAHSHAHANI, A. (2005). *Numerical modeling of the deformation in polymer blends under shear flow*. Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.
- STEWART, J. et CITTA-VANTHEMSCHE, M. (2006). *Analyse. Concepts et contextes : Volume 2. Fonctions de plusieurs variables*. Analyse : concepts et contextes. De Boeck Supérieur.
- SÜLI, E. ET MAYERS, D. F. (2003). *An Introduction to Numerical Analysis*. Cambridge University Press.
- TORNBERG, A.-K. et ENGQUIST, B. (2000). A finite element based level-set method for multiphase flow applications. *Computing and Visualization in Science*, 3, 93–101.
- TU, S. et ALIABADI, S. (2005). A slope limiting procedure in discontinuous galerkin finite element method for gasdynamics applications. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, 2, 163–178.
- WHITESIDES, G. M. (2006). The origins and the future of microfluidics. *Nature*, 442, 368–373.
- WILKINSON, J. H. (1994). *Rounding errors in algebraic processes*. Courier Dover Publications.
- ZHANG, X. et SHU, C.-W. (2010). On maximum-principle-satisfying high order schemes for scalar conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 229, 3091–3120.

ZHANG, X. et SHU, C.-W. (2011). Maximum-principle-satisfying and positivity-preserving high-order schemes for conservation laws : survey and new developments. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Science*, 467, 2752–2776.

ZINE, A. (1991). Méthode d'éléments finis pour la résolution de problèmes d'écoulements de fluides viscoélastiques.