

Titre: Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques de fluides séparés par une interface avec une méthode d'éléments finis adaptatives en espace et en temps
Title:

Auteur: Yohann Vautrin
Author:

Date: 2020

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Vautrin, Y. (2020). Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques de fluides séparés par une interface avec une méthode d'éléments finis adaptatives en espace et en temps [Thèse de doctorat, Polytechnique Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/5337/>
Citation:

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

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/5337/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Dominique Pelletier
Advisors:

Programme: Génie mécanique
Program:

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

**Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques de fluides
séparés par une interface avec une méthode d'éléments finis adaptative en
espace et en temps**

YOHANN VAUTRIN

Département de génie mécanique

Thèse présentée en vue de l'obtention du diplôme de *Philosophiæ Doctor*
Génie mécanique

Juillet 2020

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

Cette thèse intitulée :

**Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques de fluides
séparés par une interface avec une méthode d'éléments finis adaptative en
espace et en temps**

présentée par **Yohann VAUTRIN**

en vue de l'obtention du diplôme de *Philosophiæ Doctor*
a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

Stéphane ÉTIENNE, président

Dominique PELLETIER, membre et directeur de recherche

André GARON, membre

Florin ILINCA, membre

Frédéric DIAS, membre externe

DÉDICACE

*À Élise et à mes parents
pour leur soutien indéfectible.*

REMERCIEMENTS

La réalisation de ce projet de thèse est le fruit d'une aventure débutée il y a un peu plus de quatre années à l'heure où j'écris ces lignes. Cette expérience a été extrêmement enrichissante pour moi sur le plan technique et scientifique, mais aussi d'un point de vue humain, et n'aurait pas pu être complétée sans le soutien et l'aide de tous ceux que j'ai côtoyés durant ce projet et lors d'expériences passées.

Mes premières pensées vont à mon directeur de recherche, Dominique PELLETIER, qui a très largement contribué à la réussite de cette thèse, notamment en me transmettant ses connaissances dans de nombreux domaines mais aussi en me fournissant un environnement de travail propice à la réalisation d'un tel projet. Je tiens également à remercier Stéphane ÉTIENNE et Cédric BÉGUIN pour avoir réalisé le suivi au jour le jour de mes travaux mais aussi pour leurs conseils avisés, leurs idées originales et les discussions techniques que nous avons pu avoir. J'ai eu la chance d'être encadré et suivi par une équipe d'experts qui ont su me faire réfléchir et m'ont orienté dans les bonnes directions.

Ces travaux n'auraient pas pu être réalisés sans le soutien financier qui m'a été accordé par mes encadrants dans le cadre de plusieurs programmes de recherche et partenariats. Je tiens notamment à souligner la participation du gouvernement du Canada au travers (a) du programme FONCER/CREATE¹ « Génie par la simulation / *Simulation-Based Engineering Science* », et (b) du programme de subventions à la découverte du CRSNG/NSERC², de Polytechnique Montréal *via* le programme BSFD³ et de Gaztransport & Technigaz S.A. (GTT).

Cette thèse a également été l'occasion pour moi de découvrir l'envers du décor et d'enseigner la mécanique des fluides aux étudiants au baccalauréat. Cette expérience m'a beaucoup apporté et m'a permis d'approfondir mes connaissances sur le sujet et de découvrir d'autres aspects que je ne connaissais pas. Merci à Jérôme VÉTEL qui m'a proposé la charge de travaux dirigés et à Christophe TRIBES qui a su adapter rapidement et efficacement le cours pour l'enseignement à distance.

Je tiens également à souligner le rôle essentiel qu'ont joué les étudiants et les stagiaires

1. Programme de formation orientée vers la nouveauté, la collaboration et l'expérience en recherche / *Collaborative Research and Training Experience Program*

2. Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada / *Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada*

3. Bourses de soutien à la formation doctorale

que j'ai côtoyés au laboratoire, et plus particulièrement Francis LACOMBE, Victor AMRON, Sébastien LORTIE, Simon FORTIN et Étienne MULLER, grâce à leur bonne humeur et par leurs contributions respectives au climat de bonne ambiance et d'entraide. Mes remerciements les plus sincères vont à Étienne MULLER avec qui j'ai eu le plaisir et la chance de collaborer étroitement tout au long de ma thèse. Je suis persuadé que sans ton aide, tes conseils judicieux et l'immense travail que tu as accompli, je n'aurai pas réussi à mener mon projet à terme.

À titre plus personnel, je souhaite remercier les amis, rencontrés à Montréal ou bien avant, ainsi que les anciens collègues à Safran Tech pour le soutien qu'ils ont pu m'apporter (sans nécessairement le savoir) et les bons moments passés ensemble. Merci particulièrement à ceux qui ont fait le déplacement depuis la France pour venir visiter Montréal et le Québec et me rendre visite par la même occasion ainsi qu'à tous ceux qui, par un simple courriel, message ou appel ont rendu mes journées meilleures.

Mes parents, Michel et Sylvie, et mon frère Antony, m'ont aussi apporté un soutien infailible lors de cette aventure (et de toutes les précédentes). Merci à vous pour tous les moments partagés ensemble lors de vos excursions québécoises et lorsque je revenais en France. La collation des grades n'est que partie remise, rendez-vous l'année prochaine !

Enfin, je souhaitais adresser mes plus chaleureux et profonds remerciements à Élise qui m'a soutenu et encouragé tout au long de ce projet et qui a toujours su trouver les mots pour me motiver et me refaire prendre confiance dans les moments difficiles. Ces dernières années en ta compagnie, et encore plus depuis que Nessa et Freya nous ont rejoint, ont été parmi les meilleures que j'ai vécues. J'ai eu la chance de découvrir et d'apprendre beaucoup à ton contact. Tu ensoleilles mon quotidien et ajoutes de la couleur à la vie de ceux qui te connaissent.

RÉSUMÉ

Nous présentons dans ce mémoire les développements qui ont été réalisés afin de mettre en place des modèles et des méthodes permettant de simuler numériquement des problèmes d'écoulements diphasiques de fluides séparés par une interface avec une méthode d'éléments finis adaptative en espace et en temps sur des domaines bidimensionnels. Nous proposons pour cela une méthodologie conçue de façon à simultanément « calculer juste et au juste coût ». La réalisation de ces deux objectifs repose respectivement sur l'utilisation (1) de modèles représentatifs de la physique des écoulements diphasiques à phases séparées et de méthodes numériques à ordre élevé très précises, et (2) de méthodes adaptatives en espace et en temps.

L'approche développée se base sur l'utilisation d'une méthode de suivi d'interface dans laquelle les interfaces qui séparent deux fluides non miscibles sont représentées explicitement au sein du maillage du domaine de calcul. Cette méthode permet de représenter fidèlement et avec une grande précision les phénomènes se produisant dans la région interfaciale mais nécessite de déformer le maillage pour suivre les déplacements des interfaces. La méthode du pseudo-solide et une formulation *Arbitrary Lagrangian-Eulerian* (ALE) des équations de Navier-Stokes fournissent dans notre implémentation une manière robuste et efficace d'effectuer la déformation du maillage.

Les activités de modélisation de la physique sont concentrées sur deux aspects fondamentaux pour les écoulements diphasiques à phases séparées : (1) la modélisation de la force de tension superficielle et du comportement de la ligne de contact, et (2) la prise en compte de la compressibilité des fluides. Nous avons implémenté pour cela une formulation de la tension superficielle qui, grâce à l'utilisation de l'opérateur de Laplace-Beltrami, est parfaitement compatible avec la méthode des éléments finis. Deux modèles pour la compressibilité des fluides nous permettent par ailleurs de représenter le comportement des gaz et des liquides faiblement compressibles.

L'approche adaptative en espace et en temps assure d'une part que l'erreur de discrétisation est connue et contrôlée tout au long de la simulation et d'autre part que le coût de calcul est aussi faible possible pour atteindre la précision demandée par l'utilisateur. L'algorithme d'adaptation de maillage pour les simulations instationnaires et la méthode de remaillage que nous avons développée contribuent par ailleurs à minimiser la charge de travail de l'utilisateur et permettent d'automatiser et de rendre autonome l'ensemble de la chaîne de calcul.

La réalisation de simulations de vérification et de validation permet de confirmer que les diffé-

rents modèles et méthodes numériques utilisés sont correctement implémentés et fournissent une représentation correcte de la physique des problèmes auxquels nous nous intéressons. Le processus de vérification basé sur l'utilisation de la méthode des solutions manufacturées (MMS) permet de confirmer que l'implémentation des équations est correcte. La validation des modèles est ensuite réalisée en confrontant les résultats obtenus numériquement à des données issues de modèles analytiques simples.

Enfin, nous illustrons les capacités de la chaîne de calcul complète en réalisant la simulation de différents phénomènes qui sont typiquement rencontrés dans les problèmes d'écoulements diphasiques à phases séparées : instabilités de Rayleigh-Taylor et de Kelvin-Helmholtz et ascension d'une bulle de gaz sous l'effet de la poussée d'Archimède. Un cas plus complexe représentant l'impact d'une vague déferlante sur une paroi solide met par ailleurs en œuvre l'ensemble des développements réalisés. Ces simulations mettent en évidence que les algorithmes employés sont capables de capturer et représenter efficacement à la fois les déplacements et déformations à grande échelle des interfaces mais aussi les phénomènes à haute fréquence et ayant une petite échelle spatiale. Les comparaisons des résultats issus de ces simulations à des résultats théoriques, expérimentaux et numériques indiquent que notre formulation est capable de fournir des données très précises pouvant être utilisées pour la conception de systèmes complexes ou l'étude de phénomènes physiques fondamentaux.

ABSTRACT

This work presents an adaptive in space and time approach for the simulation of two-dimensional unsteady interfacial flows based on the finite element method that takes into account the influence of surface tension. Our proposed solution relies on models and numerical methods that are able to provide accurate results in a cost-efficient manner. Achieving these two objectives is done through the joint use of (1) accurate models for the physics of interfacial flows and high-order numerical methods, and (2) adaptive numerical methods in space and time.

The approach we have developed takes advantage of an interface tracking method in which the interfaces separating two immiscible fluids are explicitly represented within the mesh of the computational domain. This method allows us to accurately represent and capture the various phenomena occurring in the interfacial region but requires the computational grid to be deformed in order to track the displacements of the interfaces. The pseudo-solid method and an Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) formulation of the Navier-Stokes equations provide, in our implementation, a robust and efficient way to perform mesh deformation.

Modeling activities are focused on two fundamental aspects for separated two-phase flows: (1) modeling surface tension effects and the behavior of the moving contact line, and (2) taking into account the influence of fluid compressibility. The formulation of the surface tension force we have implemented provides, thanks to the use of the Laplace-Beltrami operator, an accurate formulation that is fully compatible with the finite element method. Compressibility effects in gases and nearly incompressible liquids are modeled using two distinct equations of state.

The adaptive approach in space and time ensures that, on the one hand, the discretization error is known and controlled throughout the simulation and, on the other hand, that the computational cost is as low as possible to achieve the user-requested accuracy. The mesh adaptation algorithm for unsteady simulations and the remeshing method that we have developed additionally minimize the user's workload and automate the entire simulation process.

Verification and validation simulations are performed to confirm that the various models and numerical methods used are correctly implemented and provide a correct representation of the physics of the problems of interest. The verification process based on the use of the Method of Manufactured Solutions (MMS) allows us to confirm that the implementation of the equations

and methods has been done correctly. The validation of the models is then carried out by comparing the results obtained numerically with data derived from simple analytical models. Lastly, we illustrate the capabilities of our approach with the simulation of various phenomena typically encountered in two-phase flow problems: Rayleigh-Taylor and Kelvin-Helmholtz instabilities and the rise of a gas bubble due to buoyant forces. A fourth and more complex case representing the impact of a breaking wave on a solid wall demonstrates the simultaneous use of all the developments carried out in this project. These simulations show that the algorithms used are capable of efficiently capturing and representing both large-scale displacements and deformations of the interfaces, as well as high-frequency, small-scale phenomena. Comparisons of the data extracted from these simulations with theoretical, experimental and numerical results show excellent agreement, suggesting that our formulation provides very accurate and physically meaningful results that can be used to design complex systems or to study fundamental physical phenomena.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	viii
TABLE DES MATIÈRES	x
LISTE DES TABLEAUX	xiv
LISTE DES FIGURES	xvi
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xxi
LISTE DES ANNEXES	xxvi
LISTE DES ALGORITHMES	xxvii
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Présentation générale du sujet et contexte	1
1.2 Travaux précédents et état des lieux	4
1.3 Objectifs de recherche et développements effectués	7
1.4 Plan du présent mémoire	10
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	11
2.1 Méthodes pour la modélisation des écoulements polyphasiques	11
2.1.1 Méthodes de capture d'interface pour la modélisation des écoulements polyphasiques à phases séparées	11
2.1.2 Méthodes de suivi d'interface pour la modélisation des écoulements polyphasiques à phases séparées	14
2.2 Modélisation de la force de tension superficielle	17
2.2.1 Approche CSF (<i>Continuum Surface Force</i>)	18
2.2.2 Formulation intégrale et approche CSS (<i>Continuum Surface Stress</i>)	19
2.2.3 Imposition de la tension superficielle comme une conditions aux limites	20

2.2.4	Calcul du vecteur normal et de la courbure moyenne	20
2.3	Modélisation du déplacement de la ligne de contact et du mouillage	21
2.3.1	Phénomène de mouillage	22
2.3.2	Condition de glissement de Navier	22
CHAPITRE 3 MÉTHODES NUMÉRIQUES ADAPTATIVES POUR LA RÉSOLU-		
TION DES ÉCOULEMENTS POLYPHASIQUES		24
3.1	Méthodes numériques mises en œuvre pour la résolution du système d'équa-	
	tions aux dérivées partielles	24
3.1.1	Méthode des éléments finis	24
3.1.2	Méthode de représentation des interfaces	32
3.1.3	Formulation ALE et méthode du pseudo-solide	34
3.1.4	Intégrateurs en temps de type <i>Backward Differentiation Formula</i> .	38
3.1.5	Résolution du système d'équations	42
3.2	Estimation d'erreur spatiale et méthode d'adaptation de maillage	46
3.2.1	Estimateurs d'erreur <i>a posteriori</i> et normes d'erreur	47
3.2.2	Méthode de reconstruction des gradients	49
3.2.3	Stratégie d'adaptation de maillage	52
3.2.4	Adaptation de maillage pour les simulations instationnaires	58
3.3	Méthodes adaptatives pour l'intégration en temps	61
3.3.1	Algorithme adaptatif de la procédure d'intégration en temps	62
3.3.2	Estimation de l'erreur due à l'intégration en temps	62
3.3.3	Indicateur de stabilité pour les méthodes BDF	69
3.3.4	Stratégie d'adaptation du pas de temps	72
3.3.5	Stratégie d'adaptation de l'ordre	73
3.4	Algorithme de remaillage par front mobile pour les problèmes instationnaires	
	avec frontières déformables	75
3.4.1	Algorithme de maillage par front mobile	77
3.4.2	Transfert de la solution vers le nouveau maillage par interpolation	
	quadratique	82
3.4.3	Algorithme de remaillage adaptatif modifié	83
CHAPITRE 4 MODÉLISATION DE LA PHYSIQUE DES ÉCOULEMENTS POLY-		
PHASIQUES		89
4.1	Équations d'état pour les fluides compressibles	89
4.1.1	Caractérisation de la compressibilité d'un fluide	89
4.1.2	Décomposition de la pression et de la température	90

4.1.3	Équation d'état des gaz parfaits	91
4.1.4	Équation d'état des gaz raidis (<i>stiffened gas law</i>)	92
4.1.5	Équation d'état de Van der Waals	93
4.2	Équations de Navier-Stokes pour les écoulements polyphasiques	94
4.2.1	Équations de Navier-Stokes pour les écoulements compressibles et incompressibles	94
4.2.2	Phénomène de tension superficielle et mouillage	96
4.2.3	Conditions à l'interface entre deux fluides immiscibles	98
4.3	Implémentation des équations pour la méthode des éléments finis	100
4.3.1	Formulation variationnelle des équations de Navier-Stokes	101
4.3.2	Formulation variationnelle de la tension superficielle	101
4.3.3	Implémentation des conditions de saut à l'interface	103
CHAPITRE 5 VÉRIFICATION ET VALIDATION DES MODÈLES IMPLÉMENTÉS ET UTILISÉS		105
5.1	Vérification de l'implémentation	105
5.1.1	Solution manufacturée sur un domaine annulaire	106
5.1.2	Vérification de l'implémentation des équations	109
5.1.3	Vérification de l'intégrateur en temps	112
5.2	Validation de l'implémentation	115
5.2.1	Propagation d'une discontinuité dans un liquide	115
5.2.2	Modèle généralisé de Bagnold	130
5.2.3	Équation de Young-Laplace	140
CHAPITRE 6 VALIDATION DES DÉVELOPPEMENTS ET APPLICATIONS		144
6.1	Instabilité de Rayleigh-Taylor	145
6.1.1	Description du cas de calcul	145
6.1.2	Analyse des résultats numériques	146
6.1.3	Comportement de la procédure de remaillage	149
6.2	Instabilité de Kelvin-Helmholtz	153
6.2.1	Expérience de Thorpe	155
6.2.2	Mise en place de la simulation et comportement numérique	156
6.2.3	Étude de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz	159
6.3	Ascension d'une bulle de gaz dans un liquide	167
6.3.1	Description des cas du <i>benchmark</i>	168
6.3.2	Étude du premier cas du <i>benchmark</i>	171
6.3.3	Étude du second cas du <i>benchmark</i>	178

6.4	Ballotement d'un liquide dans une enceinte confinée partiellement remplie .	187
6.4.1	Description du cas de calcul	187
6.4.2	Mise en place de la simulation	188
6.4.3	Comportement de la procédure de remaillage	191
6.4.4	Analyse des résultats numériques	198
CHAPITRE 7	CONCLUSION	201
7.1	Synthèse des travaux réalisés	201
7.2	Limitations de l'approche développée et propositions d'améliorations . . .	203
RÉFÉRENCES	207
ANNEXES	219

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1	Définition des normes d'erreur utilisées dans ces travaux	48
Tableau 3.2	Valeurs maximales admissibles pour la variation du pas de temps (<i>swing factor</i>) en fonction de l'ordre de la méthode BDF	71
Tableau 5.1	Propriétés physiques des fluides et propriétés thermodynamiques de référence utilisées pour la procédure de vérification	107
Tableau 5.2	Ordres de convergence théoriques de l'erreur pour un élément de Taylor-Hood P_2 - P_1 isoparamétrique dans les normes L^2 et H^1	110
Tableau 5.3	Propriétés physiques du fluide et propriétés thermodynamiques de référence pour les simulations de l'étude de la propagation d'une discontinuité dans un liquide	120
Tableau 5.4	Nombres adimensionnels utilisés pour l'analyse des résultats théoriques et numériques du modèle généralisé de Bagnold	132
Tableau 5.5	Propriétés physiques des fluides et propriétés thermodynamiques de référence pour les simulations du modèle généralisé de Bagnold	135
Tableau 5.6	Propriétés physiques des fluides utilisés pour le cas de validation utilisant l'équation de Young-Laplace	142
Tableau 5.7	Comparaison des résultats numériques et théoriques pour le cas de validation utilisant l'équation de Young-Laplace	142
Tableau 6.1	Propriétés physiques des fluides pour les simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor	146
Tableau 6.2	Propriétés physiques des fluides utilisés pour la simulation de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz	156
Tableau 6.3	Propriétés physiques des fluides et nombres adimensionnels pour le premier cas du <i>benchmark</i> de l'ascension d'une bulle	171
Tableau 6.4	Comparaison des valeurs extrêmes des quantités étudiées dans le premier cas du <i>benchmark</i> de l'ascension d'une bulle	175
Tableau 6.5	Propriétés physiques des fluides et nombres adimensionnels pour le second cas du <i>benchmark</i> de l'ascension d'une bulle	179
Tableau 6.6	Comparaison des valeurs extrêmes des quantités étudiées dans le second cas du <i>benchmark</i> de l'ascension d'une bulle	183

Tableau 6.7	Paramètres utilisés dans la définition de la forme initiale de l'interface pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie	188
Tableau 6.8	Propriétés physiques des fluides et propriétés thermodynamiques de référence pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie	189

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Représentation des principales classes d'écoulements diphasiques	1
Figure 1.2	Représentation des chargements élémentaires pouvant être causés par une vague impactante	3
Figure 2.1	Représentation du maillage et d'une interface pour une méthode de suivi d'interface à maillage fixe et à maillage mobile	15
Figure 3.1	Représentation des éléments finis de Lagrange de degrés 1 et 2 dans le système de coordonnées de référence	30
Figure 3.2	Représentation d'un élément fini de Lagrange de degré 2 subparamétrique et isoparamétrique dans l'espace cartésien	30
Figure 3.3	Représentation de l'élément fini de Taylor-Hood de degré 2 isoparamétrique dans le système de coordonnées de référence et pour un élément réel	32
Figure 3.4	Représentation d'une interface séparant des groupes d'éléments disjoints dans un maillage d'éléments triangulaires P_2 - P_1 isoparamétriques . . .	33
Figure 3.5	Comparaison des différentes descriptions utilisées en mécanique des milieux continus	34
Figure 3.6	Représentation des approximations numériques de la solution utilisées par les différentes méthodes BDF	39
Figure 3.7	Illustration du support (<i>patch</i>) utilisé par la méthode de Zienkiewicz et Zhu pour un problème bidimensionnel	50
Figure 3.8	Reconstruction d'une solution à partir de projections nodales sur une base polynômiale de degré deux par la méthode de Zienkiewicz et Zhu illustrée sur un problème unidimensionnel	53
Figure 3.9	Histogrammes de l'erreur relative élémentaire calculée avec une norme d'erreur quelconque dans différents cas	55
Figure 3.10	Valeurs prises par le facteur de réduction de l'erreur en fonction du rapport entre l'erreur relative η_q et la tolérance d'erreur relative η_{\max} .	57
Figure 3.11	Illustration de l'enchaînement de l'exécution des programmes utilisés pour la procédure automatique de remaillage adaptatif pour les écoulements instationnaires	59

Figure 3.12	Illustration de la discrétisation générée par l'algorithme d'échantillonnage adaptatif dans l'espace du paramètre t pour une courbe et de l'arbre binaire représentant cette discrétisation	79
Figure 4.1	Représentation des forces attractives s'exerçant sur les molécules d'un fluide	97
Figure 4.2	Goutte d'eau contenant une bulle d'air et plusieurs gouttes d'huile piquante en micro-gravité	97
Figure 4.3	Représentation de deux gouttes liquides sur une surface solide	98
Figure 5.1	Représentation du domaine de calcul utilisé pour la procédure de vérification	106
Figure 5.2	Évolution avec le raffinement de maillage de l'erreur exacte et de l'erreur estimée pour les variables p , \mathbf{u} , T et χ	111
Figure 5.3	Étude de convergence des méthodes de Newton-Raphson et de Picard .	112
Figure 5.4	Évolution de l'erreur exacte en fonction du nombre de pas de temps pour les variables p , \mathbf{u} , T et χ	114
Figure 5.5	Représentation du comportement théorique du cas de la propagation d'une discontinuité dans un liquide au cours du temps	116
Figure 5.6	Évolution théorique de la pression au cours du temps et en espace pour l'étude de la propagation d'une discontinuité dans un liquide	118
Figure 5.7	Évolution théorique de la vitesse au cours du temps et en espace pour l'étude de la propagation d'une discontinuité dans un liquide	119
Figure 5.8	Évolution de la pression au cours du temps pour plusieurs points de la colonne dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 1$ m/s	121
Figure 5.9	Évolution de la vitesse au cours du temps pour plusieurs points de la colonne dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 1$ m/s	122
Figure 5.10	Évolution de la pression dans la colonne à plusieurs instants dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 1$ m/s	123
Figure 5.11	Évolution de la vitesse dans la colonne à plusieurs instants dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 1$ m/s	124
Figure 5.12	Évolution de la pression au cours du temps pour plusieurs points de la colonne dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 10$ m/s	126
Figure 5.13	Évolution de la vitesse au cours du temps pour plusieurs points de la colonne dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 10$ m/s	127
Figure 5.14	Évolution de la pression dans la colonne à plusieurs instants dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 10$ m/s	128

Figure 5.15	Évolution de la vitesse dans la colonne à plusieurs instants dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 10$ m/s	129
Figure 5.16	Représentations schématiques des différents cas considérés pour l'étude du modèle généralisé de Bagnold	131
Figure 5.17	Résultats théoriques obtenus à partir du modèle généralisé de Bagnold dans le cas où le liquide est incompressible	133
Figure 5.18	Comparaison des résultats numériques et théoriques pour le modèle généralisé de Bagnold dans le cas où le liquide est incompressible (nombre de Froude variable)	136
Figure 5.19	Comparaison des résultats numériques et théoriques pour le modèle généralisé de Bagnold dans le cas où le liquide est incompressible (coefficient adiabatique du gaz variable)	137
Figure 5.20	Résultats numériques obtenus pour le modèle généralisé de Bagnold dans le cas où le liquide est compressible	139
Figure 5.21	Représentation du domaine utilisé pour le cas de validation utilisant l'équation de Young-Laplace	141
Figure 6.1	Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor sans force de tension superficielle	147
Figure 6.2	Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor avec force de tension superficielle	148
Figure 6.3	Maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor sans force de tension superficielle	150
Figure 6.4	Évolution du nombre de nœuds dans le maillage et de la taille du pas de temps au cours du temps pour les simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor	151
Figure 6.5	Évolution de l'erreur relative commise sur le volume des deux domaines au cours du temps pour les simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor	152
Figure 6.6	Instabilités de Kelvin-Helmholtz se produisant à la séparation entre les bandes et les zones constituant la haute atmosphère de Jupiter	153
Figure 6.7	Représentation de l'expérience de Thorpe	155
Figure 6.8	Maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour la simulation de l'expérience de Thorpe à $t = 2,296$ s	157
Figure 6.9	Évolution du nombre de nœuds dans le maillage et de la taille du pas de temps au cours du temps pour la simulation de l'expérience de Thorpe	158

Figure 6.10	Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation de l'expérience de Thorpe montrant le développement d'instabilités de Kelvin-Helmholtz (domaine de calcul complet)	160
Figure 6.11	Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation de l'expérience de Thorpe montrant le développement d'instabilités de Kelvin-Helmholtz (tiers central du domaine de calcul)	162
Figure 6.12	Représentation graphique de la condition de stabilité théorique pour l'instabilité de Kelvin-Helmholtz	164
Figure 6.13	Spectrogramme de la simulation de l'expérience de Thorpe	165
Figure 6.14	Évolution au cours du temps de données extraites du spectrogramme de la simulation de l'expérience de Thorpe	166
Figure 6.15	Évolution au cours du temps de l'amplitude de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz apparaissant dans la simulation de l'expérience de Thorpe	167
Figure 6.16	Représentation du domaine utilisé pour les simulations de l'ascension d'une bulle de gaz dans un liquide	169
Figure 6.17	Évolution de l'interface au cours du temps pour le premier cas du <i>benchmark</i> de l'ascension d'une bulle	172
Figure 6.18	Forme prise par la bulle à $t = 3$ s pour le premier cas du <i>benchmark</i>	173
Figure 6.19	Évolution au cours du temps des quantités étudiées pour le premier cas du <i>benchmark</i> de l'ascension d'une bulle	174
Figure 6.20	Maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour le premier cas du <i>benchmark</i> de l'ascension d'une bulle	176
Figure 6.21	Évolution du nombre de nœuds dans le maillage, de la taille du pas de temps et de l'erreur relative sur le volume au cours du temps pour les simulations du premier cas du <i>benchmark</i> de l'ascension d'une bulle	177
Figure 6.22	Évolution de l'interface au cours du temps pour le second cas du <i>benchmark</i> de l'ascension d'une bulle	180
Figure 6.23	Forme prise par la bulle à $t = 3$ s pour le second cas du <i>benchmark</i>	181
Figure 6.24	Évolution au cours du temps des quantités étudiées pour le second cas du <i>benchmark</i> de l'ascension d'une bulle	182
Figure 6.25	Maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour le second cas du <i>benchmark</i> de l'ascension d'une bulle	184
Figure 6.26	Évolution du nombre de nœuds dans le maillage, de la taille du pas de temps et de l'erreur relative sur le volume au cours du temps pour les simulations du second cas du <i>benchmark</i> de l'ascension d'une bulle	185

Figure 6.27	Représentation du domaine utilisé pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie	187
Figure 6.28	Maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie	191
Figure 6.29	Évolution du nombre de nœuds dans le maillage et de la taille du pas de temps au cours du temps pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie	193
Figure 6.30	Évolution de l'erreur relative commise sur la masse des deux domaines au cours du temps pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie	194
Figure 6.31	Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie (domaine de calcul complet)	195
Figure 6.32	Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie (lèvre de la vague)	197
Figure 6.33	Représentation du nombre de Mach et de la vorticité au niveau de la crête de la vague pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie	198
Figure 6.34	Évolution de la pression relative, de la température relative et du nombre de Mach au cours du temps sur la paroi de gauche du réservoir pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie	200
Figure A.1	Illustration de la transformation de coordonnées entre l'élément de référence et l'élément réel	219
Figure B.1	Représentation du volume matériel utilisé pour la dérivation des conditions d'interface	221

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Caractères usuels

NOMBRES ADIMENSIONNELS

At	Nombre de Atwood
Eo	Nombre de Eötvös
Fr	Nombre de Froude
Ma	Nombre de Mach
Re	Nombre de Reynolds
S	Nombre d'impact

PARAMÈTRES DES ÉQUATIONS D'ÉTAT

a	Terme de cohésion de l'équation de Van der Waals	$\text{Pa} \cdot \text{m}^6/\text{mol}$
b	Covolume molaire de l'équation de Van der Waals	m^3/mol
p_∞	Constante de modélisation de l'équation d'état des gaz raidis	Pa
V_m	Volume molaire	m^3/mol

ESPACES FONCTIONNELS

$H^1(\Omega)$	Espace des fonctions de carré intégrable sur Ω dont les dérivées sont de carré intégrable sur Ω (Espace de Sobolev d'ordre 1)
$L^2(\Omega)$	Espace des fonctions de carré intégrable sur Ω

VARIABLES THERMODYNAMIQUES

a_{son}	Vitesse du son	m/s
c_p	Capacité thermique massique à pression constante	J/kg/K
c_V	Capacité thermique massique à volume constant	J/kg/K
e	Énergie interne	J
h	Enthalpie	J
s	Entropie	J/K
k	Indice ou coefficient adiabatique	
n	Quantité de matière	mol
r	Constante spécifique d'un gaz parfait	J/kg/K

VARIABLES DE LA FORMULATION ALE

\mathbf{u}_{ALE}	Vitesse des points du domaine	m/s
---------------------------	-------------------------------	-----

\mathbf{u}_{conv}	Vitesse de convection dans la formulation ALE	m/s
----------------------------	---	-----

VARIABLES DÉPENDANTES

p	Champ de pression	Pa
T	Champ de température	K
\mathbf{u}	Champ de vitesse	m/s
u, v, w	Composantes du champ de vitesse	m/s

VARIABLES INDÉPENDANTES

t	Temps	s
x, y, z	Coordonnées cartésiennes	m

AUTRES NOTATIONS

\mathbf{g}	Champ de pesanteur	m/s ²
$\overline{\mathbf{I}}$	Tenseur identité	
\mathbf{n}	Vecteur normal unitaire	
\mathbf{q}	Flux de chaleur	W/m ²

Lettres calligraphiques
ESPACES FONCTIONNELS

$\mathcal{C}^0(\Omega)$	Espace des fonctions continues sur Ω	
-------------------------	---	--

AUTRES NOTATIONS

\mathcal{C}	Circularité	
\mathcal{M}	Masse molaire	kg/mol
\mathcal{R}	Constante des gaz parfaits ($\mathcal{R} = 8,314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	J/mol/K

Lettres grecques
PROPRIÉTÉS PHYSIQUES

γ	Coefficient de tension superficielle	N/m
λ	Conductivité thermique	W/m/K
μ	Viscosité dynamique	Pa · s
ρ	Masse volumique	kg/m ³

VARIABLES THERMODYNAMIQUES

α	Coefficient de compressibilité isotherme	Pa ⁻¹
----------	--	------------------

β	Coefficient de dilatation thermique isobare	K^{-1}
---------	---	----------

VARIABLES DE LA FORMULATION ALE

χ	Déplacements des points du domaine	m
κ	Courbure moyenne	m^{-1}

VARIABLES DÉPENDANTES

λ_T	Flux de chaleur normal équivalent (méthode des réactions)	W/m^2
λ_u	Force normale équivalente (méthode des réactions)	Pa

AUTRES NOTATIONS

ϕ_u, ϕ_p, ϕ_T	Fonctions test pour la vitesse, la pression et la température	
$\bar{\sigma}$	Tenseur des contraintes	Pa
$\bar{\tau}$	Tenseur des contraintes visqueuses	Pa
θ	Angle de contact	rad

Opérateurs et fonctions
FONCTIONS

Id	Fonction identité
----	-------------------

OPÉRATEURS TENSORIELS

$\bar{\bar{A}} : \bar{\bar{B}}$	Double contraction tensorielle de $\bar{\bar{A}}$ et $\bar{\bar{B}}$
$\bar{\bar{A}}^+$	Pseudo-inverse de Moore-Penrose de la matrice $\bar{\bar{A}}$
$\bar{\bar{A}}^T$	Transposée du tenseur $\bar{\bar{A}}$

OPÉRATEURS VECTORIELS

∇	Gradient surfacique
Δ	Laplacien surfacique ou opérateur de Laplace-Beltrami
∇	Opérateur nabla

AUTRES NOTATIONS

$\frac{D}{Dt}$	Dérivée convective
$[[V]]$	Saut d'une variable au passage d'une discontinuité (interface)

Indices
AUTRES NOTATIONS

$(\cdot)_h$	Approximation d'un champ par la méthode des éléments finis
-------------	--

$(\cdot)_m$	Composante mécanique de la décomposition d'une variable
$(\cdot)_r$	Composante thermodynamique ou de référence de la décomposition d'une variable

Acronymes

ALE	<i>Arbitrary Lagrangian Eulerian</i>
BDF	<i>Backward Differentiation Formula</i>
BVP	<i>Boundary Value Problem</i>
CADYF	Calcul et Analyse en DYnamique des Fluides / <i>Computer-Assisted DYnamics of Fluids</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CFL	Condition de Courant-Friedrichs-Lewy
CSF	<i>Continuum Surface Force</i>
CSS	<i>Continuum Surface Stress</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
ELP	<i>Elementary Loading Processes</i>
FEM	<i>Finite Element Method</i>
FFT	<i>Fast Fourier Transform</i>
FMM	<i>Fast Marching Method</i>
FTI	<i>Flip-Through Impact</i>
GCL	<i>Geometric Conservation Law</i>
GFM	<i>Ghost Fluid Method</i>
IBM	<i>Immersed Boundary Method</i>
IGP	<i>Intermediate Gas Pocket</i>
IRK	<i>Implicit Runge-Kutta</i>
IVP	<i>Initial Value Problem</i>
LBB	Condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi
LBM	<i>Lattice Boltzmann Method</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
LGP	<i>Large Gas Pocket</i>
LNG	<i>Liquified Natural Gas</i>
LU	<i>Lower-Upper decomposition</i>
MD	<i>Molecular Dynamics</i>
MMS	<i>Method of Manufactured Solutions</i>
MPI	<i>Message Passing Interface</i>

OpenMP	<i>Open Multi-Processing</i>
PARDISO	<i>PARallel DIrect Sparse sOlver</i>
PLIC	<i>Piecewise Line Interface Calculation</i>
PSPG	<i>Pressure-Stabilizing Petrov-Galerkin</i>
RANS	<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
RBF	<i>Radial Basis Functions</i>
RMS	<i>Root Mean Square</i>
SGP	<i>Small Gas Pocket</i>
SLIC	<i>Simple Line Interface Calculation</i>
SPH	<i>Smoothed-Particle Hydrodynamics</i>
SUPG	<i>Streamline Upwind Petrov-Galerkin</i>
URANS	<i>Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
VOF	<i>Volume of Fluid</i>
XFEM	<i>eXtended Finite Element Method</i>

LISTE DES ANNEXES

Annexe A	Transformation entre l'élément de référence et l'élément réel	219
Annexe B	Dérivation des conditions de saut à l'interface entre deux fluides	221
B.1	Conservation de la masse	222
B.2	Conservation de la quantité de mouvement	223
B.3	Conservation de l'énergie	224

LISTE DES ALGORITHMES

Algorithme 3.1	Présentation simplifiée en langage naturel structuré de l'intégration de la procédure de remaillage adaptatif pour les écoulements instationnaires dans l'architecture logicielle	60
Algorithme 3.2	Algorithme simplifié de la procédure adaptative d'intégration en temps	63
Algorithme 3.3	Algorithme simplifié décrivant les étapes qui permettent de générer un cas de calcul complet avec amiral	76
Algorithme 3.4	Algorithme modifié pour permettre le remaillage des problèmes instationnaires avec frontières déformables et interfaces	84

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

1.1 Présentation générale du sujet et contexte

Les écoulements polyphasiques, définis comme l'écoulement simultané de deux ou plus fluides, se produisent dans de très nombreuses situations de la vie courante, naturellement ou en étant causés par les activités humaines. Deux exemples très simples d'écoulements polyphasiques impliquant l'air (à l'état gazeux) et l'eau (à l'état liquide) sont l'écoulement d'une rivière et la houle à la surface de plans d'eau. Les différents fluides d'un écoulement polyphasique peuvent être (a) le même fluide dans deux états différents (*e.g.* : oxygène liquide et oxygène gazeux dans un réservoir cryogénique), (b) deux fluides différents dans le même état (*e.g.* : mélange d'eau liquide et d'huile), ou (c) deux fluides différents dans deux états différents (*e.g.* : bulles d'air gazeux dans de l'eau à l'état liquide).

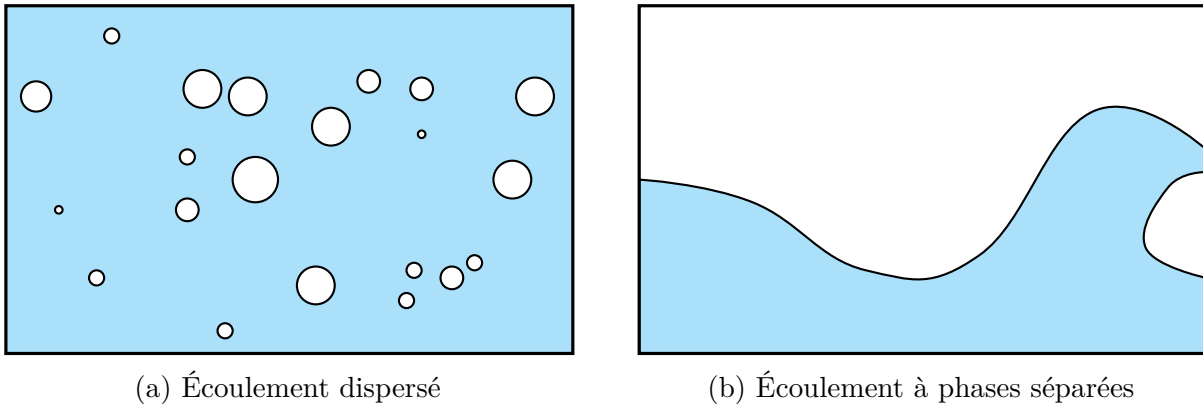


Figure 1.1 Représentation des principales classes d'écoulements diphasiques. Les interfaces entre les différents fluides sont représentées par les traits fins.

La grande majorité des écoulements polyphasiques est constituée des écoulements qui impliquent uniquement deux fluides, appelés écoulements diphasiques. Les écoulements diphasiques sont généralement catégorisés selon deux classes : les écoulements à phases séparées et les écoulements dispersés. Dans le premier cas, les fluides sont séparés par une interface continue, tandis que dans le second cas l'un des fluides est présent sous forme de particules, bulles, ou gouttelettes qui sont transportées par l'autre fluide. Ces différents types d'écoulements peuvent également coexister au sein d'un même système.

La physique des écoulements polyphasiques est généralement plus complexe et plus riche que celle des écoulements monophasiques. Dans les écoulements à phases séparées, cette

complexité et cette richesse proviennent (a) du couplage fort de la dynamique des fluides, (b) des divers phénomènes physico-chimiques (tension superficielle, transfert de masse et d'énergie, mécanisme de changement de phase, transport d'agents de surface (*surfactants*), ...) se produisant dans la région interfaciale, (c) des possibles changements de topologie des interfaces (coalescence de gouttes, atomisation d'une nappe de fluide, vague déferlante, ...), et (d) des phénomènes locaux, à petite échelle et haute fréquence (instabilités de Rayleigh-Taylor, de Kelvin-Helmholtz ou de Plateau-Rayleigh) susceptibles de se développer à proximité des interfaces.

Des avancées considérables en matière de simulation numérique de la mécanique des fluides (*Computational Fluid Dynamics* ou CFD) pour les problèmes monophasiques ont été accomplies durant les dernières décennies, notamment grâce, d'une part, au développement de modèles mathématiques à haute fidélité et de méthodes numériques avancées et, d'autre part, à l'augmentation continue des ressources de calcul disponibles. La mécanique des fluides numérique est de nos jours utilisée, dans un contexte industriel ou scientifique, pour des applications de plus en plus complexes et fournit des résultats dont la précision s'améliore avec l'évolution de la discipline. Elle permet ainsi aux chercheurs d'effectuer des avancées dans l'étude de phénomènes physiques complexes et dans la compréhension de la physique fondamentale et aux concepteurs industriels de concilier amélioration des performances, réduction des coûts et amélioration de la sûreté de fonctionnement sans nécessiter l'utilisation de coûteux moyens d'expérimentation.

Ces avancées servent par ailleurs le développement des capacités de simulation des écoulements polyphasiques (et diphasiques, conséquemment) et ont contribué à la création d'outils efficaces permettant d'obtenir de précieuses informations sur ces écoulements complexes. Malgré tout, des méthodes spécifiquement conçues pour répondre aux problématiques soulevées par la simulation des écoulements polyphasiques restent à développer afin d'obtenir, à moindre coût et avec la meilleure précision possible, des résultats quantitatifs et représentatifs de la réalité physique.

Les objectifs de recherche de ce projet ont été formulés pour répondre à un besoin industriel de simulation de vagues impactantes (voir Dias et Ghidaglia [115] pour une revue de littérature sur le sujet), bien que le cadre d'application des développements effectués ne soit pas limité à ce seul cas d'utilisation et couvre en réalité un large domaine de cas d'écoulements polyphasiques à phases séparées. Sans trop entrer dans les détails, le transport de gaz naturel liquéfié (*Liquefied Natural Gas* ou LNG) par voie maritime présente un risque de sûreté majeur lorsque les cuves sont partiellement remplies. Le ballotement (*sloshing*) du liquide transporté, causé

principalement par les effets de l'état de mer sur le navire, entraîne la formation de vagues qui, en impactant les parois, induisent des efforts importants sur les structures, ce qui à terme peut entraîner leur rupture, avec les dangers que cela représente pour les humains et l'environnement (risque d'incendie et d'explosion, pollution maritime et atmosphérique, ...).

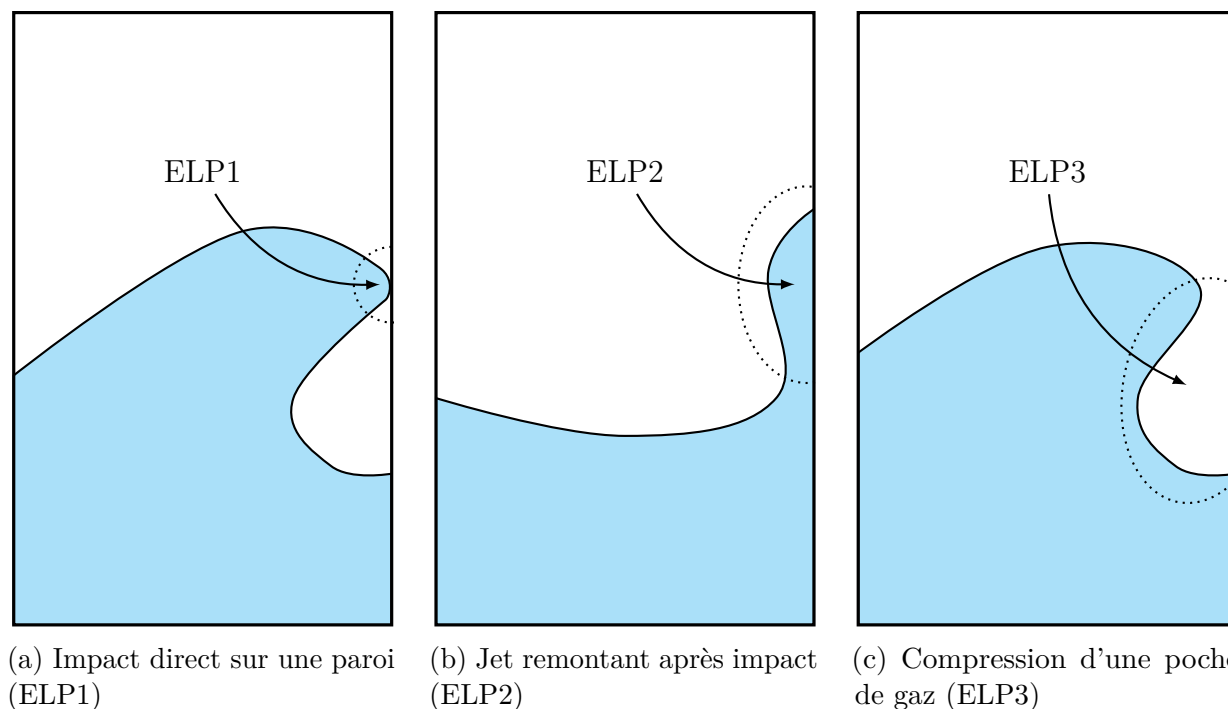


Figure 1.2 Représentation des chargements élémentaires (*Elementary Loading Processes*) pouvant être causés par une vague impactante

L'expression des besoins pour la simulation de vagues impactantes requiert une analyse préliminaire des différents types de chargements pouvant se produire. La catégorisation en *Elementary Loading Processes* ou ELP de Lafeber *et al.* [92] retient trois processus élémentaires : l'impact direct du liquide sur une paroi solide, la création d'un jet remontant le long d'une paroi solide depuis la zone d'impact et la compression d'une poche de gaz, souvent causée par son emprisonnement par une vague déferlante (voir Figure 1.2). L'apparition de ces différents processus élémentaires est par ailleurs directement liée à la forme prise par la vague avant l'impact, qui elle-même dépend fortement de la dynamique de l'écoulement dans la zone interfaciale et des phénomènes physiques s'y produisant. Ces travaux de recherche se sont ainsi naturellement orientés sur les aspects suivants :

- Modélisation de la compressibilité des gaz et des liquides pour permettre de déterminer les efforts causés par les différents processus élémentaires sur les parois solides
- Modélisation de la force de tension superficielle dans le but de prendre en compte son

effet sur la forme des interfaces et sur les instabilités interfaciales

- Utilisation d’une méthode numérique de représentation explicite et précise des interfaces, pour les mêmes raisons
- Développement d’estimateurs d’erreur et d’un algorithme de remaillage pour les problèmes polyphasiques afin de maîtriser l’erreur commise lors de la résolution numérique

1.2 Travaux précédents et état des lieux

On s’intéresse, dans le cadre des travaux présentés dans ce mémoire, à la simulation numérique d’écoulements bidimensionnels polyphasiques à phases séparées non miscibles ne faisant pas intervenir, entre autres, de phénomènes de transfert de masse, de mécanisme de changement d’état ou d’effets d’agents tensioactifs. Les fluides impliqués sont des fluides newtoniens et peuvent être présents dans le problème à l’état gazeux ou liquide. Ces fluides sont modélisés comme des milieux continus dans lesquels s’appliquent les équations de Navier-Stokes, en formulation incompressible ou compressible selon les cas, auxquelles viennent s’ajouter des conditions de couplage au niveau des interfaces. Le système d’équations non linéaires est résolu par la méthode des éléments finis.

La simulation numérique de tels problèmes repose principalement sur les méthodes issues de la simulation de problèmes monophasiques auxquelles on additionne des traitements numériques et des modèles nécessaires à la bonne simulation du comportement complexe de l’interface séparant deux fluides non miscibles. L’ensemble logiciel utilisé comprend trois programmes principaux :

amiral un logiciel permettant de préparer le cas de calcul, de générer le maillage et de transférer la solution d’un maillage à un autre

cadyf le solveur éléments finis monolithique à proprement parler

adapt un programme permettant d’estimer et de réduire (par adaptation de maillage) l’erreur spatiale commise par la résolution numérique

On présente ci-après, de façon relativement succincte, les choix et les développements précédents sur lesquels ces travaux s’appuient.

Représentation et suivi d’interfaces. Un aspect particulièrement important pour la simulation des écoulements polyphasiques à phases séparées est la méthode utilisée pour représenter les interfaces dans la simulation numérique. Plusieurs méthodes sont ici en compétition, chacune avec ses avantages et ses défauts. Le choix s’est porté sur l’utilisation

d'une méthode où les interfaces sont explicitement représentées dans le maillage : une interface est définie comme une collection d'arêtes ou de faces des éléments qui sont utilisés pour discrétiser le domaine de calcul. On parle de méthode *body-fitted* et plus généralement de suivi d'interface (*interface tracking*), en opposition aux méthodes de capture d'interface (*interface capturing*) dans lesquelles la position d'une interface est connue implicitement, généralement à partir d'un champ scalaire. Il est très simple de connaître précisément la position des interfaces et de modéliser précisément certains comportements physiques grâce à cette méthode mais son utilisation nécessite non seulement de déformer le maillage au cours de la simulation afin de suivre les déformations et les déplacements des interfaces mais aussi de remailler et d'adapter le maillage lorsque les déformations deviennent trop importantes. L'implémentation de cette méthode a été effectuée par Charlot [87] et Charlot *et al.* [102] pour les problèmes d'écoulements à surface libre puis par Hay *et al.* [104, 108] et Hay et Pelletier [109] pour les écoulements diphasiques.

Déformation de maillage et méthode ALE. La déformation de maillage est effectuée par la méthode dite du « pseudo-solide », dans laquelle le domaine de calcul est considéré comme un solide linéaire hyperélastique suivant la loi de comportement de Saint Venant-Kirchhoff. Le domaine se déforme sous l'effet de déplacements imposés par les frontières et les interfaces et la résolution du système d'équations permet d'accéder aux déplacements des points du domaine et par conséquent à ceux des nœuds du maillage. Puisque le domaine se déforme de façon arbitraire (la position des points du domaine est indépendante des caractéristiques de l'écoulement), on adopte une formulation ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*). Ces méthodes ont été développées tant pour la simulation des problèmes d'interactions fluide-structure que pour la résolution de problèmes d'écoulements polyphasiques.

Méthodes adaptatives en espace. L'adaptation du maillage est réalisée par une méthode d'estimation d'erreur *a posteriori* basée sur les travaux de Zienkiewicz et Zhu [33, 42, 43] et mise en place par Hétu [38] pour les simulations stationnaires. Cette technique permet d'estimer l'erreur commise à partir d'une solution reconstruite par projection de la solution éléments finis calculée. On utilise ensuite cette estimation de l'erreur dans deux buts : (a) réduire l'erreur globale estimée, et (b) équilibrer l'erreur en raffinant ou déraffinant localement les zones où l'erreur est supérieure ou inférieure à une valeur cible. On parle ici donc de méthodes dites « *h-adaptive* » : on agit sur la taille des éléments pour contrôler l'erreur commise. Les travaux récemment effectués par Muller [113] et Muller *et al.* [119, 123] ont permis de rendre possible l'utilisation de la méthode d'estimation d'erreur dans le cadre de simulations instationnaires et ont menés au développement d'un algorithme pour effectuer l'adaptation du maillage au

cours de la résolution en temps, lorsque cela est jugé nécessaire.

Méthodes adaptatives en temps. La formulation de l'intégrateur temporel est basée sur la méthode BDF (*Backward Differentiation Formula*). Cette méthode fournit des schémas numériques implicites qui permettent généralement d'employer des tailles de pas de temps plus grandes que des méthodes explicites, et ne sont pas soumis à des restrictions comme la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). Des intégrateurs d'ordre 1 à 5 sont disponibles dans l'implémentation utilisée. L'adaptation de l'ordre de l'intégrateur (*p-adaptivity*) ainsi que celle du pas de temps (*h-adaptivity*) peuvent être effectuées dynamiquement lors de simulation afin d'assurer la stabilité de la méthode numérique et de contrôler l'erreur de discrétisation temporelle. Cette implémentation des méthodes BDF, présentée par Hay *et al.* [105], a notamment prouvé ses capacités et sa robustesse pour la simulation de problèmes d'interactions fluide-structure et diphasiques par Hay *et al.* [103] et Hay et Pelletier [109]. Muller [113] a plus récemment étendu les capacités d'adaptation du pas de temps afin de considérer les variables du problème indépendamment.

Formulation pour les fluides compressibles. Notre implémentation permet la simulation de fluides incompressibles et de fluides compressibles avec l'équation d'état des gaz parfaits. La formulation pour les fluides compressibles repose sur l'utilisation des coefficients de compressibilité isotherme et de dilatation thermique isobare pour caractériser la compressibilité d'un fluide. Les travaux de Lortie [118] ont apporté la possibilité d'utiliser conjointement des formulations différentes dans chaque fluide (*e.g.* : deux fluides compressibles qui suivent deux équations d'état différentes et un troisième fluide incompressible).

Modélisation de la tension superficielle. Une implémentation de la force de tension superficielle se basant sur l'expression classique nécessitant le calcul de la courbure moyenne de l'interface a été réalisée par les travaux de Fortin *et al.* [117] et Fortin [121]. La force de tension superficielle est appliquée aux éléments constituant l'interface comme une condition de saut dans les équations de conservation de la quantité de mouvement par la méthode des réactions.

Formulation monolithique entièrement couplée. La résolution du système d'équations linéarisées est réalisée itérativement par la méthode de Newton-Raphson. Afin de faciliter l'implémentation de nouveaux modèles dans le code, le calcul des systèmes matriciels élémentaires (et donc de la matrice globale) est effectué par la méthode du Jacobien numérique. La matrice jacobienne élémentaire est ainsi évaluée à partir d'une méthode de différences

finies basée sur une perturbation du résidu élémentaire. Les différents systèmes d'équations couplées sont linéarisés et résolus en même temps par la méthode de Newton-Raphson, ce qui permet de récupérer ses propriétés de convergence quadratique lorsque l'estimation courante de la solution est proche de la solution exacte du problème.

1.3 Objectifs de recherche et développements effectués

Plusieurs développements nécessaires pour permettre de réaliser des simulations numériques précises et fiables d'écoulements polyphasiques à phases séparées ont été identifiés au début de ce projet. Ces objectifs s'articulent autour d'un besoin d'avoir une excellente représentativité de la réalité à travers la modélisation de la physique et de la nécessité d'obtenir des résultats quantitatifs et qualitatifs, avec un niveau d'erreur maîtrisé et quantifiable, tout en limitant la quantité de ressources de calcul mises en œuvre. Nous avons identifié pour cela quatre axes d'amélioration qui constituent les objectifs poursuivis par ces travaux de recherche auxquels s'ajoute un cinquième objectif complémentaire :

1. Compléter la formulation en régime instationnaire pour les fluides compressibles et l'enrichir avec une équation d'état pour les fluides faiblement compressibles
2. Généraliser l'implémentation des interfaces et supporter le cas où une interface sépare deux fluides qui ne sont pas modélisés de la même manière
3. Intégrer une formulation variationnelle entièrement monolithique de la force de tension superficielle et un modèle pour le comportement de la ligne de contact
4. Développer et implémenter des méthodes adaptatives spécifiques pour les simulations polyphasiques afin de mesurer et contrôler l'erreur et remailler le domaine si nécessaire
5. Vérifier et valider les développements effectués et faire la démonstration de leurs capacités sur des cas variés d'écoulements à phases séparées

On donne ci-après plus de détails pour chacun de ces objectifs ainsi que la liste des développements qui ont été effectués afin d'y répondre.

Compléter la formulation en régime instationnaire pour les fluides compressibles et l'enrichir avec une équation d'état pour les fluides faiblement compressibles.

La formulation pour les fluides compressibles disponible au début de ce projet était limitée aux simulations en régime stationnaire et a dû être étendue aux simulations en régime instationnaire par l'addition de termes supplémentaires dans les équations résolues et par la modification de certains termes pour la formulation ALE.

Le second aspect abordé ici a été d'implémenter une équation d'état pour les fluides faiblement compressibles, afin notamment de permettre de modéliser des liquides (notamment de l'eau), sans recourir à une modélisation de fluide incompressible.

Concrètement, les développements suivants ont été effectués pour répondre à cet objectif :

1. Intégration du calcul de la dérivée temporelle de la pression dans l'intégrateur en temps
2. Ajout des termes instationnaires et de la formulation ALE des termes convectifs pour les fluides compressibles dans les équations de continuité et de conservation de l'énergie
3. Implémentation d'une équation d'état pour les fluides faiblement compressibles (équation d'état des gaz raidis)

Généraliser l'implémentation des interfaces et supporter le cas où une interface sépare deux fluides qui ne sont pas modélisés de la même manière.

Des limitations techniques et des lacunes dans la modélisation de l'implémentation des problèmes avec interfaces ont dû être levées. Notamment, il était initialement impossible d'effectuer une simulation faisant intervenir un fluide incompressible et un fluide compressible séparés par une interface. Les conditions de couplage pour la température et l'équation de conservation de l'énergie n'étaient par ailleurs pas implémentées.

Les développements réalisés ici permettent maintenant d'utiliser des modèles différents dans chaque phase fluide sans nécessiter de développements particuliers additionnels. Il est ainsi possible, entre autres, d'utiliser des équations d'état et des modèles pour le tenseur des contraintes visqueuses qui représentent fidèlement le comportement de chacun des fluides.

La réalisation de cet objectif a nécessité les développements suivants :

1. Amélioration des capacités des algorithmes afin de supporter un nombre arbitraire d'interfaces ayant chacune ses propres propriétés
2. Généralisation de l'implémentation pour permettre d'avoir des modélisations différentes pour les fluides de part et d'autre d'une interface
3. Implémentation du calcul du flux de chaleur normal par la méthode des réactions
4. Implémentation des conditions de couplage à l'interface pour la température et le flux de chaleur normal

Intégrer une formulation variationnelle entièrement monolithique de la force de tension superficielle et un modèle pour le comportement de la ligne de contact.

L'implémentation des effets de tension superficielle disponible au début du projet a été entièrement repensée et retravaillée pour mieux l'intégrer avec les méthodes utilisées. Une

première partie du travail a nécessité de substituer au terme faisant intervenir la courbure moyenne de l'interface un opérateur vectoriel, appelé opérateur de Laplace-Beltrami, qui a permis de développer une formulation variationnelle de la tension superficielle compatible avec l'utilisation d'éléments finis de type Taylor-Hood. La deuxième partie du travail a permis d'obtenir une condition aux limites très simple pour modéliser le comportement de la ligne de contact dans le cas des interfaces ouvertes afin de fermer le problème.

Les développements suivants ont permis de répondre à ce troisième objectif :

1. Implémentation d'une formulation faible de la force de tension superficielle en utilisant l'opérateur de Laplace-Beltrami
2. Intégration de la force de tension superficielle à la formulation monolithique
3. Implémentation de routines pour les transformations entre un élément de référence et l'élément réel pour les éléments de codimension supérieure ou égale à 1 (*e.g.* : un segment dans un domaine bi/tridimensionnel)
4. Implémentation d'une condition aux limites pour modéliser le comportement de la ligne de contact

Développer et implémenter des méthodes adaptatives spécifiques pour les simulations polyphasiques afin de mesurer et contrôler l'erreur et remailler le domaine si nécessaire. Le travail pour ce quatrième objectif a permis d'étendre les capacités des méthodes adaptatives disponibles afin de fournir les outils nécessaires à la réalisation de simulations adaptatives d'écoulements avec interfaces. Deux aspects sont ici abordés : l'estimation d'erreur et le remaillage. Les méthodes d'estimation d'erreur ont d'abord été étendues pour être utilisées avec les variables importantes pour nos cas d'application. La suite des développements a porté sur la création d'algorithmes permettant d'effectuer le remaillage d'un domaine possédant des frontières mobiles et de transférer la solution de l'ancien maillage vers le nouveau, le tout de façon automatique.

Les travaux spécifiques à la réalisation de cet objectif sont :

1. Ajout de l'estimation d'erreur commise sur les déplacements du pseudo-solide et sur la pression pour l'intégrateur en temps
2. Développement d'un estimateur d'erreur pour la déformation du maillage basé sur le tenseur des déformations de Green-Lagrange (formulation non linéaire)
3. Implémentation d'un mécanisme de remaillage pour les simulations instationnaires avec des frontières déformables à partir de la définition géométrique d'origine
4. Amélioration du mécanisme d'interpolation pour le transfert de la solution sur les frontières

Vérifier et valider les développements effectués et faire la démonstration de leurs capacités sur des cas variés d'écoulements à phases séparées. Ce dernier objectif vient faire la synthèse des développements effectués et est complémentaire aux précédents objectifs. Le premier aspect du travail effectué ici a pour but de vérifier et de valider l'implémentation des différents modèles dans le code de simulation (équations d'état, conditions de couplage à l'interface et force de tension superficielle) pour s'assurer que ceux-ci sont bien implémentés et permettent de reproduire fidèlement les phénomènes physiques. Le deuxième aspect de cet objectif permet de prouver que les développements effectués possèdent bel et bien les capacités de simulation pour les écoulements polyphasiques à phases séparées qui ont été demandées.

1.4 Plan du présent mémoire

Les travaux réalisés sont présentés dans quatre parties principales. Les deux premières parties sont consacrées aux aspects théoriques et à leur implémentation dans un code de calcul basé sur la méthode des éléments finis. Le Chapitre 3 est entièrement dédié aux méthodes numériques (intégration en espace et en temps, représentation des interfaces, méthodes adaptatives, ...) tandis que le Chapitre 4 traite de la modélisation de la physique (équations d'état, équations de Navier-Stokes pour les écoulements polyphasiques, tension superficielle, ...). Les deux parties qui suivent présentent les résultats numériques obtenus grâce aux développements effectués. Le Chapitre 5 permet de prouver que les développements sont vérifiés (implémentation correcte) et validés (résultats en accord avec la physique) sur des cas académiques et assure que les simulations numériques de cas applicatifs (instabilités de Rayleigh-Taylor et de Kelvin-Helmholtz, vagues impactantes, ...) présentées dans le Chapitre 6 fournissent des résultats dignes de confiance. Une revue de littérature (Chapitre 2) précède ces quatre parties et présente l'état des connaissances sur certains aspects importants pour ce projet.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

Ce chapitre passe en revue l'état des connaissances actuelles concernant la modélisation des problèmes d'écoulements polyphasiques. Les aspects les plus importants pour les travaux contenus dans ce mémoire sont abordés et présentés succinctement. Le lecteur est invité à consulter en complément les ouvrages de Prosperetti et Tryggvason [74], Groß et Reusken [89] et Tryggvason *et al.* [91] qui abordent de façon détaillée d'autres sujets que ceux auxquels nous nous sommes ici intéressés.

2.1 Méthodes pour la modélisation des écoulements polyphasiques

Les méthodes permettant d'effectuer la simulation d'écoulements polyphasiques dépendent généralement de la classe d'écoulement qui est rencontrée. On distingue ainsi des méthodes dédiées aux écoulements dispersés et des méthodes conçues pour modéliser les écoulements à phases séparées. Pour ces dernières, on distingue de plus deux grandes familles : les méthodes de capture d'interface et celles de suivi d'interface. Les premières permettent de déterminer la position des interfaces séparant des fluides non miscibles de manière implicite tandis que les secondes utilisent une représentation explicite des interfaces.

Les principales méthodes pouvant servir à modéliser les écoulements polyphasiques à phases à séparées sont présentées par la suite. La revue de Scardovelli et Zaleski [57] et les livres de Prosperetti et Tryggvason [74] et Tryggvason *et al.* [91] abordent d'autres approches, notamment celles qui ne nécessitent pas de maillage, telles que les méthodes de Boltzmann sur réseau (*Lattice Boltzmann Method* ou LBM) et SPH (*Smoothed-Particle Hydrodynamics*).

2.1.1 Méthodes de capture d'interface pour la modélisation des écoulements polyphasiques à phases séparées

Les méthodes de capture d'interface (*interface capturing*) sont des méthodes qui permettent de déterminer la position d'une interface séparant deux fluides non miscibles de façon implicite. La position d'une interface n'est donc pas connue explicitement mais est déterminée en utilisant une fonction qui prend généralement la forme d'un champ scalaire dont le transport est modélisé par une équation d'advection.

Les deux grandes familles de méthodes numériques de capture d'interface sont les méthodes du volume de fluide (*Volume of Fluid* ou VOF) et les méthodes des surfaces de niveaux (*level set*). Mirjalili *et al.* [112] par exemple présente une revue de ces différentes méthodes et met

en avant certains développements récents.

La formulation des méthodes de capture d'interface permet de traiter simplement les problèmes où se produisent des changements dans la topologie d'une interface et sont par ailleurs très bien adaptées aux situations où une interface subit de grandes déformations et/ou des déplacements importants. Ces méthodes souffrent cependant généralement d'un problème de précision à proximité des interfaces pouvant empêcher de résoudre correctement les petites structures telles que les instabilités de surface libre. L'implémentation de méthodes précises permettant de modéliser les phénomènes physiques interfaciaux est par ailleurs parfois complexe avec ces formulations.

Méthode du volume de fluide (*Volume of Fluid* ou VOF)

La méthode du volume de fluide introduite par Hirt et Nichols [25] utilise une fonction indicatrice ou fonction caractéristique χ permettant de déterminer si un point du domaine de calcul appartient au volume occupé par l'un des fluides ou non. En notant $\Omega_m \subset \Omega$ le sous-domaine occupé par un certain fluide, la fonction indicatrice est définie par :

$$\chi_m(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_m \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.1)$$

ce qui rend cette fonction discontinue au passage d'une interface. L'évolution de la fonction indicatrice au cours du temps est modélisée avec l'équation d'advection suivante :

$$\frac{\partial \chi_m}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \chi_m = 0 \quad (2.2)$$

où \mathbf{u} , la vitesse d'advection, correspond ici à la vitesse du fluide. Cette équation d'advection traduit le principe de conservation du volume occupé par le fluide repéré par l'indice m .

On construit en pratique une approximation de la fonction indicatrice appelée fraction volumique qui correspond à la fraction du volume d'une cellule occupée par un fluide. La fraction volumique C_m d'un fluide varie entre 0 et 1 avec la contrainte $\sum_m C_m = 1$ sur chaque cellule et suit la même équation de transport que la fonction indicatrice. Pour un problème impliquant n fluides distincts, il est ainsi nécessaire de résoudre $n - 1$ équations modélisant le transport des fractions volumiques et une seule équation (vectorielle) de conservation de la quantité de mouvement.

On détecte la présence d'une interface au sein d'une cellule de calcul lorsque l'une des fractions volumiques prend une valeur strictement comprise entre 0 et 1 (ce qui indique que plusieurs

fluides sont présents dans la même cellule). Cette information peut par ailleurs être utilisée pour raffiner localement le maillage afin de capturer plus précisément les interfaces.

Enfin, les propriétés physiques dans le domaine de calcul sont déterminées en calculant une moyenne des propriétés des différents fluides pondérée par les fractions volumiques :

$$\rho = \sum_m \rho_m C_m \quad (2.3)$$

en prenant la masse volumique ρ comme exemple.

Le choix du schéma utilisé pour résoudre l'équation de transport est primordial pour les méthodes VOF afin de bien représenter les fractions volumiques (qui sont discontinues) et ainsi les interfaces. Celui-ci ne doit ainsi ni causer d'oscillations numériques parasites, ni être trop diffusif.

On distingue généralement des méthodes VOF dites algébriques (la méthode de Hirt et Nichols [25] par exemple) et des méthodes dites géométriques qui effectuent une reconstruction des interfaces afin d'être plus précises. Une interface peut être reconstruite par la méthode SLIC (*Simple Line Interface Calculation*) de Noh et Woodward [22] ou une méthode PLIC (*Piecewise Line Interface Calculation*) telle que celle introduite par Youngs [27]. La première méthode aligne les segments utilisés pour représenter une interface avec les axes du système de coordonnées tandis que la seconde approche est plus précise mais aussi plus complexe à mettre en place puisque ces segments peuvent prendre n'importe quelle orientation. Des études comparatives de différentes formulations de type PLIC sont disponibles dans la littérature, par exemple dans les travaux de Scardovelli et Zaleski [65] et Pilliod et Puckett [67].

Méthode des surfaces de niveaux (*level set*)

La méthode des surfaces de niveaux développée par Osher et Sethian [35] est une méthode numérique utilisée dans de nombreux domaines comme l'illustre Sethian [50] : optimisation, traitement d'image ou encore simulation numérique. Cette méthode a rapidement été utilisée pour réaliser des simulations d'écoulements diphasiques et polyphasiques. Les travaux de Sussman *et al.* [46] et Chang *et al.* [48] ont notamment mis en place une formulation permettant de traiter les cas où les propriétés des fluides de part et d'autre d'une interface sont très différentes (rapports des masses volumiques et/ou des viscosités importants) tout en prenant en compte la force de tension superficielle. Les méthodes des frontières immergées (*Immersed Boundary Method*) utilisent parfois aussi la méthode des surfaces de niveaux afin de représenter les parois solides.

La détermination de la position d'une interface dans cette méthode repose sur l'idée générale de construire une isosurface d'un champ scalaire Φ , c'est-à-dire trouver le lieu des points du domaine de calcul où Φ prend une même valeur Φ_0 . À la différence des méthodes VOF, le champ scalaire est ici continu dans le domaine de calcul. Le choix le plus courant est d'initialiser Φ avec la distance signée à une interface. Les interfaces correspondent donc aux isosurfaces de valeur nulle de Φ par construction et le signe de Φ permet de déterminer les portions du domaine de calcul occupées par chaque fluide pour un écoulement diphasique. Les propriétés physiques dans le domaine de calcul s'expriment en utilisant la fonction Φ sous la forme :

$$\rho(\Phi) = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1) H(\Phi) \quad (2.4)$$

où H est la fonction de Heaviside. Une régularisation de cette fonction peut être nécessaire si l'on ne veut pas avoir des propriétés physiques discontinues dans le domaine. L'Équation (2.8) est un exemple de régularisation couramment employé.

Le champ scalaire Φ est transporté lui aussi avec l'équation d'advection utilisée pour la méthode VOF :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \Phi = 0 \quad (2.5)$$

et doit correspondre à la fonction de distance signée tout au long de la simulation. Il est parfois nécessaire de réinitialiser ce champ lorsque les déformations des interfaces deviennent trop importantes (voir Russo et Smereka [60] par exemple). De nombreuses manières d'effectuer la réinitialisation de Φ existent, notamment des méthodes basées sur la résolution d'une équation aux dérivées partielles ou les méthodes de type *Fast Marching Method* ou FMM. En fonction de la méthode utilisée, cette opération peut avoir un coût assez important.

Contrairement aux méthodes VOF, les méthodes des surfaces de niveaux n'assurent pas naturellement la conservation de la masse mais la discrétisation de l'équation de transport est ici beaucoup plus simple à réaliser puisque la fonction Φ est continue. Des méthodes hybrides VOF-*level set* ont été développées afin de tirer parti des avantages des deux méthodes et pallier ce défaut.

2.1.2 Méthodes de suivi d'interface pour la modélisation des écoulements polyphasiques à phases séparées

À la différence des méthodes de capture d'interface, les méthodes de suivi d'interface (*interface tracking*) implémentent une façon permettant de connaître la position d'une interface de façon explicite, c'est-à-dire sans nécessiter de la déterminer à partir d'une quantité auxiliaire. L'idée sur laquelle se basent ces méthodes est d'utiliser des marqueurs lagrangiens connectés

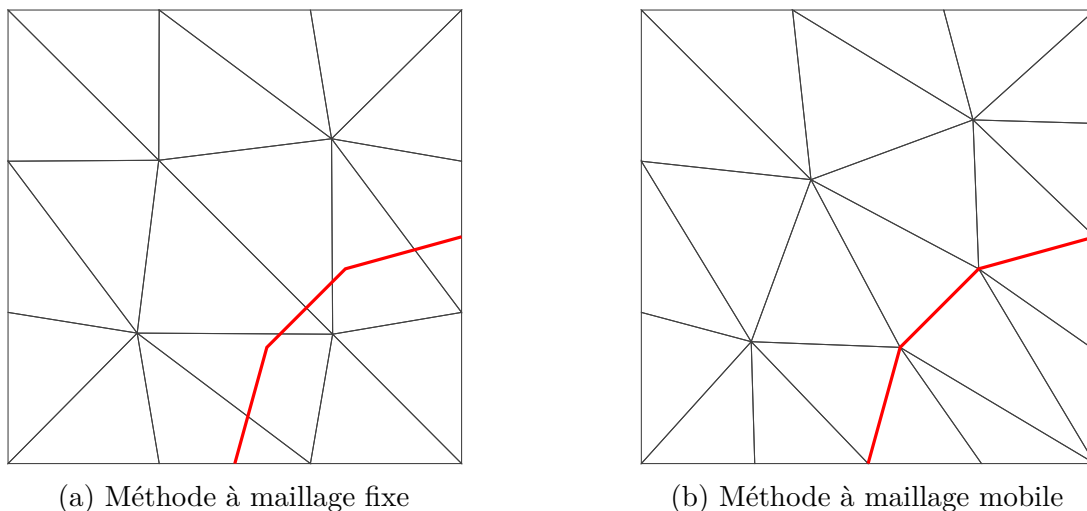


Figure 2.1 Représentation du maillage et d'une interface (en rouge) pour une méthode de suivi d'interface (a) à maillage fixe et (b) à maillage mobile

entre eux qui définissent une représentation discrète des interfaces. Les marqueurs sont dits « lagrangiens » puisqu'ils sont transportés par l'écoulement et sont ainsi analogues à des dispositifs flottants sur l'eau tels que des bouées maritimes.

Les avantages et inconvénients de ces méthodes sont presque les exacts opposés de ceux des méthodes de capture d'interface. Ces méthodes sont bien adaptées si l'on souhaite résoudre précisément la forme prise par les interfaces et simplifient généralement l'implémentation de modèles fidèles pour simuler les phénomènes physiques interfaciaux (tension superficielle, transport d'agents tensioactifs, ...) mais se prêtent souvent moins bien aux simulations où les interfaces subissent des déformations de grande amplitude ou des grands déplacements. La prise en compte des changements de topologie est par ailleurs particulièrement difficile à réaliser avec ces méthodes.

Approches de suivi d'interface basées sur une formulation eulérienne

La famille de méthodes de suivi d'interface à maillage fixe, parfois dénommée *front-tracking*, repose sur l'utilisation de deux maillages indépendants l'un de l'autre et rappelle certaines approches employées dans le cadre de la famille des méthodes des frontières immergées. Le premier maillage est un maillage eulérien fixe discrétisant le domaine de calcul sur lequel sont résolues les équations de la mécanique des fluides tandis que le second maillage est lagrangien et discrétise les interfaces. Le second maillage peut ainsi se déplacer et se déformer sans altérer le maillage du domaine de calcul. La Figure 2.1a fournit un exemple de maillages pouvant être utilisés pour une méthode de suivi d'interface à maillage fixe.

Puisque la position des interfaces est connue explicitement, il est facile de déterminer quelles parties du domaine de calcul sont occupées par les différents fluides et d'imposer les conditions de saut au passage d'une interface. L'imposition correcte et précise de ces conditions repose sur une méthode permettant de transférer l'information d'un maillage à l'autre et de coupler la dynamique de l'interface à la résolution des équations de Navier-Stokes. Une telle méthode peut s'avérer difficile à mettre en place et peut nécessiter en pratique d'adapter régulièrement le maillage du domaine de calcul afin d'obtenir une résolution spatiale suffisante au niveau des interfaces.

Le maillage utilisé pour les interfaces doit par ailleurs permettre de représenter fidèlement leurs déformations à petites et grandes échelles. On peut par exemple utiliser à cet effet une représentation d'ordre élevé (par splines cubiques par exemple) des éléments formant une interface. Si cela est nécessaire, les interfaces peuvent également être rediscrétisées au cours de la simulation afin que le nombre de marqueurs lagrangiens reste suffisant pour les représenter avec précision.

Cette approche a été mise en place par plusieurs groupes de recherche et est utilisée par exemple dans les travaux de Glimm *et al.* [31], Unverdi et Tryggvason [41], Popinet et Zaleski [56], Muradoglu et Tryggvason [78] et Muradoglu et Tasoglu [86]. La revue de Tryggvason *et al.* [64] fournit des détails complémentaires pour cette famille de méthodes et présente de nombreux cas d'application.

Approches de suivi d'interface basées sur une formulation lagrangienne ou ALE

L'autre possibilité qui s'offre dans la catégorie des méthodes de suivi d'interface est d'intégrer les marqueurs lagrangiens au sein du maillage du domaine de calcul. Cette approche permet de n'utiliser qu'un seul maillage qui représente alors à la fois la discrétisation du domaine et la discrétisation des interfaces. Ce maillage doit nécessairement être déformable pour permettre aux interfaces de se déplacer et de se déformer. Dans cette approche, les interfaces sont représentées en utilisant les arêtes ou les faces (respectivement pour un domaine bidimensionnel ou tridimensionnel) des éléments constituant le maillage. La Figure 2.1b présente un exemple d'un maillage où une interface est représentée par une collection de trois segments qui sont également des arêtes appartenant à des éléments triangulaires de la discrétisation du domaine de calcul.

Il est possible pour ces méthodes d'adopter soit une approche entièrement lagrangienne soit une méthode à mi-chemin entre une formulation eulérienne et une formulation lagrangienne, ce qui est souvent préférable. Une telle formulation, appelée formulation *Arbitrary Lagrangian Eulerian* ou ALE, permet de découpler les déplacements des interfaces qui suivent un mouve-

ment purement lagrangien et les déplacements des autres nœuds du domaine de calcul afin d'éviter d'induire des déformations trop importantes au sein du maillage. Les déplacements des nœuds du maillage qui n'appartiennent pas aux interfaces sont en cela arbitraires et sont déterminés généralement en propageant les déplacements des interfaces à l'intérieur du domaine de calcul.

Cette approche possède l'avantage de rendre très facile la modélisation des phénomènes physiques se produisant sur les interfaces et permet, par adaptation du maillage du domaine de calcul, de représenter fidèlement l'ensemble des structures interfaciales. Le déplacement des interfaces a l'inconvénient majeur d'étirer ou de comprimer les éléments, ce qui peut causer des problèmes de convergence voire rendre le volume de certains éléments nul ou négatif. On remédie à ce problème en modifiant le maillage lorsque la qualité de ses éléments est trop dégradée, par exemple en insérant/supprimant/fusionnant localement des éléments ou en remaillant entièrement ou partiellement le domaine de calcul avec une méthode d'adaptation de maillage.

Différentes implémentations de cette méthode sont présentées par exemple dans les travaux de Cairncross *et al.* [58], Bänsch [61], Behr [62] et Dettmer et Perić [71] pour les écoulements à surface libre et par Ganesan et Tobiska [80, 81] et Ganesan *et al.* [111] pour les problèmes diphasiques. L'implémentation utilisée dans les travaux présentés par la suite est par ailleurs décrite et utilisée par Charlot *et al.* [102], Hay *et al.* [104, 108], Hay et Pelletier [109], Fortin *et al.* [117] et Vautrin *et al.* [124].

2.2 Modélisation de la force de tension superficielle

La force de tension superficielle est une force agissant sur une interface séparant deux fluides non miscibles qui résulte de la différence d'attraction entre les molécules des différents fluides. Le phénomène en lui-même est décrit plus en détails dans la Section 4.2.2 et nous nous intéressons ici uniquement à sa modélisation numérique. La tension superficielle intervient dans les conditions de saut au passage d'une interface comme un terme dans l'équation donnant le saut de contrainte normale (Équation (4.23)). Si l'on omet le terme de Marangoni, la force de tension superficielle prend la forme :

$$\gamma (\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \quad (2.6)$$

où γ est le coefficient de tension superficielle, ∇ est l'opérateur de gradient surfacique et $\nabla \cdot \mathbf{n} = \kappa$ est la courbure moyenne de l'interface.

Deux aspects doivent donc être considérés. Il est nécessaire de déterminer d'une part comment

modéliser une force agissant sur une hypersurface (une courbe ou une surface en deux et trois dimensions respectivement) et d'autre part comment calculer la courbure moyenne de l'interface. Les modèles les plus couramment employés dans la littérature sont décrits succinctement ci-après (voir également la revue de Popinet [120] en complément).

2.2.1 Approche CSF (*Continuum Surface Force*)

Les travaux de Brackbill *et al.* [39] ont développé l'une des premières méthodes permettant de modéliser numériquement la force de tension superficielle dans une approche appelée *Continuum Surface Force* ou CSF. Au lieu de considérer que la tension superficielle est une force qui s'applique uniquement sur une surface ou une courbe, cette approche introduit un terme source volumique dans les équations de la mécanique des fluides. La formulation de ce terme source est alors régularisée pour ne pas créer de discontinuité et agit donc sur un volume de faible épaisseur de part et d'autre d'une interface. Dans l'idée, l'approche CSF est ainsi similaire à la méthode développée par Peskin [17] pour la méthode des surfaces immergées (*Immersed Boundary Method*).

Notons δ une fonction de Dirac et Γ une interface contenue dans un domaine Ω . L'intégrale du terme de tension superficielle sur Γ peut être réécrite comme une intégrale sur le domaine Ω :

$$\int_{\Gamma} \gamma (\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \, d\Gamma = \int_{\Omega} \gamma (\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \delta(|\mathbf{x}_{\Gamma} - \mathbf{x}|) \, d\Omega \quad (2.7)$$

où $|\mathbf{x}_{\Gamma} - \mathbf{x}|$ est la distance d'un point de Ω à l'interface. La régularisation δ_{ε} de la fonction de Dirac est ensuite réalisée sur un voisinage de Γ aussi réduit que possible. Le choix suggéré par Sussman *et al.* [46] est de définir δ_{ε} d'intégrale unitaire indirectement *via* une fonction de Heaviside H_{ε} qui dépend de la distance signée Φ d'un point à l'interface :

$$H_{\varepsilon}(\Phi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \Phi < -\varepsilon \\ 1 & \text{si } \Phi > \varepsilon \\ \frac{1 + \Phi/\varepsilon + \sin(\pi\Phi/\varepsilon)/\pi}{2} & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.8)$$

avec ε un paramètre de lissage donnant une épaisseur fictive aux interfaces.

L'approche CSF a l'avantage d'être compatible avec la plupart des méthodes de représentation des interfaces qui ont été présentées précédemment. À titre d'exemple, elle a notamment été mise en œuvre conjointement avec une méthode VOF (Brackbill *et al.* [39]), une méthode des surfaces de niveaux (Sussman *et al.* [46] et Chang *et al.* [48]) et une méthode de suivi d'interface de type *front-tracking* (Unverdi et Tryggvason [41]). Groß et Reusken [73, 89] ont

par ailleurs combiné cette approche dans le cadre de la méthode des surfaces de niveaux avec l'utilisation d'une méthode XFEM (*eXtended Finite Element Method*) pour mieux modéliser la discontinuité de la pression au passage d'une interface. On notera par ailleurs que l'approche *Ghost Fluid Method* ou GFM de Fedkiw *et al.* [54] est similaire à l'approche CSF, comme le souligne Popinet [120].

2.2.2 Formulation intégrale et approche CSS (*Continuum Surface Stress*)

La formulation dite intégrale de la tension superficielle aborde le problème de la discrétisation de cette force sous un autre angle. Pour un problème bidimensionnel où la tension superficielle s'applique sur une courbe, le produit de la courbure et du vecteur normal est remplacé par une expression fournie par la première formule de Frenet-Serret :

$$\frac{d\mathbf{t}}{ds} = \kappa \mathbf{n} \quad (2.9)$$

où \mathbf{t} et \mathbf{n} sont respectivement le vecteur tangent et le vecteur normal à la courbe, κ est la courbure moyenne et s est l'abscisse curviligne. En reprenant les notations utilisées auparavant, la force s'exerçant sur un segment AB d'une interface Γ s'exprime alors :

$$\int_A^B \gamma (\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} d\Gamma = \int_A^B \gamma d\mathbf{t} = \gamma_B \mathbf{t}_B - \gamma_A \mathbf{t}_A \quad (2.10)$$

ce qui permet de prendre en compte naturellement le terme de Marangoni et ne requiert que l'évaluation du vecteur tangent en deux points. On calcule en pratique cette force sur un volume de contrôle (qui permet de définir le segment sur lequel on réalise l'intégration) puis on ajoute sa contribution dans les équations de conservation de la quantité de mouvement. Une formulation similaire en trois dimensions est par exemple présentée par Tryggvason *et al.* [91].

Popinet [120] note que cette formulation a l'avantage de conserver localement et globalement la quantité de mouvement et qu'elle est similaire à l'approche CSS (*Continuum Surface Stress*) de Lafaurie *et al.* [45] et Gueyffier *et al.* [55]. Malgré d'intéressantes propriétés, son utilisation reste assez rare dans la littérature. Les exemples les plus pertinents d'implémentation sont celles de Popinet et Zaleski [56], revisitée récemment par Abu-Al-Saud *et al.* [114] avec une méthode *level set*, ainsi que la formulation de Tryggvason *et al.* [64].

2.2.3 Imposition de la tension superficielle comme une conditions aux limites

L'utilisation d'une méthode de suivi d'interface avec une formulation purement lagrangienne ou ALE permet d'intégrer simplement et naturellement les conditions de saut au passage des interfaces ainsi que la force de tension superficielle à la formulation du problème. En effet, puisque les interfaces coïncident dans ce cas avec les frontières des domaines contenant les différents fluides, les conditions de saut se traduisent par des conditions aux limites couplées à imposer aux deux fluides de part et d'autre d'une interface. Cette formulation permet ainsi d'imposer exactement les conditions de saut ainsi que la force de tension superficielle et les variables dépendantes du problème (notamment la pression) peuvent être discontinues au passage de l'interface sans que cela ne pose de problèmes.

La formulation d'une telle méthode n'est pas récente et est illustrée par exemple par Fyfe *et al.* [34] dans le cadre d'une approche purement lagrangienne ainsi que par Saksono et Perić [69, 70]. Son utilisation conjointe avec une méthode de suivi d'interface est tellement naturelle que l'ensemble des travaux cités dans la Section 2.1.2 en font également usage.

2.2.4 Calcul du vecteur normal et de la courbure moyenne

La plupart des formulations de la tension superficielle requièrent de calculer le vecteur normal et la courbure moyenne des interfaces. Si le vecteur normal est généralement simple à calculer, la courbure est plus difficile à évaluer précisément, en partie parce qu'elle nécessite le calcul des dérivées secondes de la géométrie des interfaces.

Le vecteur normal et la courbure sont aisément définis lorsque l'on utilise une méthode où l'interface correspond à une isosurface d'un champ scalaire. Pour une méthode des surfaces de niveaux, ces deux quantités s'expriment naturellement en utilisant le champ scalaire Φ :

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\Phi}{|\nabla\Phi|} \quad \kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\Phi}{|\nabla\Phi|} \right) \quad (2.11)$$

et Brackbill *et al.* [39] utilise une formulation similaire pour une méthode VOF en se servant dans ce cas de la fraction volumique.

Les méthodes de suivi d'interface permettent quant à elle de générer une représentation paramétrique de l'interface à partir de laquelle il est possible de calculer la courbure. En deux dimensions, la courbure s'exprime à partir des dérivées secondes de la représentation

paramétrique $(x(t), y(t))$ de l'interface :

$$\kappa = \frac{x'y'' - y'x''}{(x'^2 + y'^2)^{3/2}} \quad (2.12)$$

Le principal défaut de cette formulation est l'utilisation des dérivées secondes de la représentation paramétrique. Selon la méthode de représentation employée, ces dérivées secondes peuvent ne pas être définies localement et ne permettent parfois pas de calculer la courbure précisément.

On peut alors tenter d'abaisser le degré de régularité nécessaire pour la représentation de la géométrie de l'interface. On utilise pour cela la méthode proposée par Dziuk [37] qui repose sur l'opérateur de Laplace-Beltrami et une relation de géométrie différentielle. Cette méthode est couverte avec plus de détails dans la Section 4.3.2.

La première méthode de calcul basée sur l'Équation (2.12) a été utilisée par exemple par Fortin *et al.* [117] et Fortin [121] tandis que la seconde a été mise en œuvre par exemple par Bänisch [61] pour des écoulements à surface libre, Hysing [72] et Groß et Reusken [89] dans le cadre d'une méthode *level set* ainsi que Ganesan et Tobiska [80, 81], Ganesan *et al.* [111] et Vautrin *et al.* [124] pour une méthode de suivi d'interface basée sur une formulation ALE.

2.3 Modélisation du déplacement de la ligne de contact et du mouillage

On appelle ligne de contact, ou ligne triple, la ligne où une interface séparant deux fluides non miscibles est connectée à une paroi solide (cette ligne est réduite à deux points pour une interface bidimensionnelle). Au niveau de la ligne de contact, on observe des phénomènes à échelle macroscopique ainsi que des phénomènes qui agissent au niveau moléculaire. La grande variété d'ordres de grandeur fait que l'on utilise généralement un modèle macroscopique de la dynamique de la ligne de contact au lieu de simuler le comportement exact des fluides par des méthodes dites de dynamique moléculaire (*Molecular Dynamics* ou MD).

À l'échelle macroscopique, la condition d'adhérence des fluides aux parois rend en principe impossible le déplacement de la ligne de contact puisqu'elle devrait faire apparaître une singularité dans les contraintes [16, 20]. L'application d'une telle condition sur la ligne de contact n'est donc pas représentative de la physique se produisant à échelle moléculaire. On présente ici certains modèles pouvant modéliser au niveau macroscopique la dynamique de la ligne de contact. Les revues de Snoeijer et Andreotti [96] et Sui *et al.* [100] traitent également de ce sujet et de sa modélisation.

2.3.1 Phénomène de mouillage

Le mouillage est le comportement d'un liquide mis en contact avec une paroi solide. Au raccord avec une paroi solide, une interface qui sépare un liquide d'un gaz présente un angle de contact qui dépend de la dynamique de l'écoulement. On distingue l'angle de contact statique θ_e , qui est l'angle de contact lorsque la ligne de contact est stationnaire, l'angle de contact dynamique θ_d et l'angle de contact apparent qui est l'angle de contact observé au niveau macroscopique. L'angle de contact statique satisfait l'équation de Young-Dupré [1] qui exprime l'équilibre des forces sur la ligne de contact :

$$\gamma_{SG} = \gamma_{SL} + \gamma \cos(\theta_e) \quad (2.13)$$

où γ_{SG} , γ_{SL} et γ sont les coefficients de tension superficielle solide-gaz, solide-liquide et liquide-gaz respectivement. Cet angle est en principe unique mais on observe généralement un effet d'hystérésis si la surface solide n'est pas idéale (rugosité, contamination, ...) qui fait que l'angle de contact est compris en réalité en une valeur maximale et une valeur minimale appelées respectivement angles de contact avançant et reculant. Le phénomène de mouillage est traité avec plus de détails par de Gennes *et al.* [66] par exemple.

La modélisation de l'évolution de l'angle de contact dynamique est difficile à réaliser en pratique. L'approche de Ganesan et Tobiska [81] impose par exemple un angle de contact constant égal à θ_e afin de fermer le système d'équations. Avec cette modélisation, la valeur imposée correspond à l'angle de contact qui sera observé à l'équilibre lorsque l'écoulement devient stationnaire. On peut ainsi considérer différents cas de mouillage partiel. Une approche plus générique consiste à modéliser l'angle de contact en fonction de la vitesse de glissement de la ligne de contact. On peut par exemple utiliser un modèle expérimental ou choisir d'imposer simplement les valeurs des angles de contact avançant et reculant ou de l'angle de contact statique si la vitesse de glissement est respectivement positive, négative ou nulle [81].

2.3.2 Condition de glissement de Navier

La modélisation à l'échelle macroscopique vise à approximer les phénomènes se produisant au niveau microscopique près de la ligne de contact. L'approche la plus couramment utilisée est d'imposer une vitesse de glissement à la ligne de contact ou une contrainte nulle [76].

La condition de Navier [2] est une condition très générale qui est souvent employée afin de modéliser le glissement de la ligne de contact. Cette condition exprime la vitesse de la ligne

de contact le long de la paroi solide par l'expression :

$$\beta_s v_{\text{slip}} = (\overline{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{n}) \cdot \mathbf{t} \quad (2.14)$$

où $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$ est le tenseur des contraintes, β_s est un coefficient de frottement et \mathbf{n} et \mathbf{t} sont respectivement les vecteurs unitaires tangent et normal à la paroi solide. On peut ensuite déduire une longueur de glissement l_s du coefficient de frottement. Cette longueur de glissement est une longueur fictive similaire à la distance de raccordement qui est utilisée pour les lois de paroi dans le cadre de la modélisation de la turbulence. On retrouve la condition d'adhérence et la condition de glissement si $l_s = 0$ et $l_s = \infty$ respectivement. Des extensions de cette modélisation comme la condition de Navier généralisée développée par Shikhmurzaev [52] ont été proposées.

En pratique la détermination de la longueur de glissement est difficile à réaliser et des modèles basés sur des mesures expérimentales sont souvent nécessaires. Ganesan et Tobiska [81] explore par exemple l'influence de la longueur de glissement sur l'angle de contact dynamique pour des gouttes pendantes. Dans le cadre de cette étude, nous ne considérerons que le cas où le glissement du fluide sur la paroi est libre (longueur de glissement infinie).

CHAPITRE 3 MÉTHODES NUMÉRIQUES ADAPTATIVES POUR LA RÉSOLUTION DES ÉCOULEMENTS POLYPHASIQUES

On présente ici les méthodes numériques et techniques adaptatives employées dans le cadre de ce projet ainsi que les algorithmes spécifiquement développés pour la résolution des écoulements polyphasiques. Les premières sections présentent les méthodes numériques de résolution en espace et en temps des systèmes d'équations aux dérivées partielles utilisées ainsi que les méthodes adaptatives spatiales et temporelles permettant de contrôler l'erreur commise lors de la résolution du problème. La dernière partie détaille le travail effectué sur le développement d'algorithmes spécifiquement conçus dans le cadre de l'utilisation de méthodes adaptatives pour la résolution d'écoulements avec interfaces.

3.1 Méthodes numériques mises en œuvre pour la résolution du système d'équations aux dérivées partielles

On emploie dans le cadre de ce projet la méthode des éléments finis pour résoudre un système d'équations aux dérivées partielles. La semi-discrétisation en temps du problème est basée sur des intégrateurs temporels de type BDF (*Backward Differentiation Formula*) qui sont particulièrement bien adaptés aux problèmes raides.

Les interfaces sont représentées explicitement et précisément en utilisant les arêtes et les faces des éléments du maillage (respectivement pour un domaine bidimensionnel ou tridimensionnel). Les déformations et les déplacements d'une interface entraînent ainsi la déformation du domaine de calcul qui est prise en compte par la formule ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*) des équations résolues. La méthode dite du pseudo-solide permet de déplacer les nœuds des éléments du domaine afin d'éviter des problèmes numériques (volumes nuls ou négatifs notamment).

Enfin, la méthode de Newton-Raphson, couplée à une méthode de jacobien numérique, est utilisée pour résoudre de façon monolithique le système d'équations.

3.1.1 Méthode des éléments finis

Le comportement d'un système physique est généralement décrit par un ensemble d'équations aux dérivées partielles formant un problème aux limites (*Boundary Value Problem* ou BVP). De nombreux exemples de tels problèmes existent, comme par exemple les équations de Maxwell en électromagnétisme, les lois d'élasticité en mécanique des solides déformables,

l'équation de conduction de la chaleur ou encore les équations d'Euler et de Navier-Stokes en mécanique des fluides. La résolution d'un problème aux limites consiste à rechercher une fonction à valeurs scalaires ou vectorielles $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ qui (1) satisfait un ensemble d'équations aux dérivées partielles sur un domaine Ω , et (2) prend des valeurs imposées sur la frontière $\partial\Omega$ du domaine (conditions aux limites). Ces conditions aux limites imposent généralement soit la valeur de la fonction (conditions de Dirichlet) ou soit la valeur de ses dérivées (conditions de Neumann). La question de l'existence et de l'unicité de cette solution est parfois sans réponse, l'exemple le plus connu étant (à ce jour) les équations de Navier-Stokes.

La méthode des éléments finis (FEM ou *Finite Element Method*) est une technique très utilisée pour déterminer une solution discrète et approximative de problèmes aux limites, à l'instar notamment des méthodes de volumes finis et de différences finies. Cette méthode est généralement expliquée en la présentant dans le cas particulier de la méthode de Galerkin appliquée à une équation simple telle que l'équation de la chaleur en régime stationnaire. Son fonctionnement repose sur la combinaison de deux principes fondamentaux :

- la division du domaine de calcul $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ en un certain nombre (fini) de sous-domaines ne se chevauchant pas appelés « éléments finis » sur lesquels une fonction définie sur Ω est approximée par des fonctions définies localement sur les éléments (des polynômes le plus souvent)
- la formulation du problème aux limites auquel on s'intéresse sous la forme d'une intégrale sur le domaine de calcul que l'on va pouvoir calculer en décomposant le problème sur chaque sous-domaine et en sommant leurs contributions (« formulation variationnelle » ou « formulation faible »)

Cette section présente de manière relativement succincte l'ensemble des concepts employés par la méthode des éléments finis et ne se veut pas être une présentation exhaustive. On réfère le lecteur intéressé, par exemple, aux livres de Zienkiewicz *et al.* [97, 101] pour un traitement plus complet du sujet.

Espaces fonctionnels de Lebesgue et de Sobolev

Avant de poursuivre, il est utile d'introduire et de définir les espaces fonctionnels de Lebesgue L^p , de Sobolev $W^{k,p}$ ($p \in \mathbb{N}^*$, $k \in \mathbb{N}$) et le cas particulier des espaces H^k . Les solutions qui seront obtenues par la résolution du problème variationnel appartiendront à l'un (au moins)

de ces espaces fonctionnels. Leurs définitions respectives sont :

$$L^p(\Omega) = \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \ / \ \int_{\Omega} |f|^p \, d\Omega < \infty \right\} \quad (3.1a)$$

$$W^{k,p}(\Omega) = \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \ / \ \forall q \in [0, k] \, f^{(q)} \in L^p(\Omega) \right\} \quad (3.1b)$$

$$H^k(\Omega) = W^{k,2}(\Omega) \quad (3.1c)$$

Essentiellement, $L^p(\Omega)$ est l'espace des fonctions qui sont intégrables au sens de Lebesgue sur Ω une fois élevées à la puissance p . Le plus utilisé des espaces de Lebesgue est l'espace des fonctions de carré intégrable $L^2(\Omega)$. En ce qui concerne les espaces de Sobolev, nous nous contenterons de travailler avec les espaces $H^k(\Omega)$ qui contiennent les fonctions de carré intégrable et dont les k premières dérivées sont aussi de carré intégrable. Ces espaces fonctionnels sont particulièrement importants pour l'étude théorique des formulations éléments finis. Nous nous servirons en pratique principalement des normes canoniques qui sont induites par ces espaces, définies ainsi :

$$\|f\|_{L^p} = \left(\int_{\Omega} |f|^p \, d\Omega \right)^{\frac{1}{p}} \quad (3.2a)$$

$$\|f\|_{W^{k,p}} = \left(\sum_{q=0}^k \int_{\Omega} |f^{(q)}|^p \, d\Omega \right)^{\frac{1}{p}} \quad (3.2b)$$

$$\|f\|_{H^k} = \sqrt{\sum_{q=0}^k \int_{\Omega} |f^{(q)}|^2 \, d\Omega} \quad (3.2c)$$

Approximation d'un champ continu par la méthode des éléments finis

Soit u une fonction appartenant à l'un des espaces fonctionnels susmentionné noté V et un sous-espace $V_h \subset V$ de dimension finie. On construit de façon générale une approximation unique $u_h \in V_h$ de u comme une combinaison linéaire des fonctions qui forment une base de V_h :

$$u_h(\mathbf{x}) = \sum_i u_i \Phi_i(\mathbf{x}) \quad (3.3)$$

où les fonctions Φ_i sont appelées fonctions de base (*basis functions*) et les coefficients u_i sont appelés degrés de liberté (*degrees of freedom*).

Dans la méthode des éléments finis, les fonctions de base sont construites par morceaux à partir des fonctions N_i^e définies localement sur chaque élément fini de façon que leur support soit minimal. Ces fonctions, appelées fonctions d'interpolation ou de forme (*shape functions*),

permettent quant à elles d'écrire la restriction de l'approximation de la fonction u sur un élément ainsi :

$$u_h^e(\mathbf{x}) = \sum_i u_i^e N_i^e(\mathbf{x}) \quad (3.4)$$

où chaque u_i^e correspond à un unique degré de liberté global.

Les fonctions de base qui sont ainsi construites doivent notamment être linéairement indépendantes et suffisamment continues sur le domaine sur lequel on résout le problème (en particulier sur les frontières entre les éléments finis). Pour les équations aux dérivées partielles du second degré qui nous intéressent, les fonctions de base doivent être simplement continues (C^0), ce qui impose par conséquent des contraintes sur les fonctions de forme. En pratique, les fonctions de base (définies globalement) sont très rarement utilisées et on préfère travailler au niveau d'un élément avec les fonctions de forme (définies localement).

Formulation variationnelle d'un problème aux limites

La formulation variationnelle ou faible d'un problème aux limites est une formulation équivalente au système d'équations différentielles à résoudre (la forme dite forte) dans laquelle le degré de régularité requis pour la solution u est abaissé et transféré à des fonctions appelées fonctions test (*test functions*). La forme variationnelle est le plus souvent obtenue soit en calculant la première variation d'une fonctionnelle à minimiser, quand celle-ci existe, soit en procédant de la manière suivante :

1. On multiplie l'équation différentielle par une fonction test notée v
2. On intègre l'équation différentielle modifiée sur le domaine Ω
3. On effectue une intégration par parties en utilisant le théorème de la divergence (théorème de Green-Ostrogradski) afin de réduire le plus possible le degré des dérivées partielles de u

Considérons par exemple l'équation type de Laplace sur un domaine Ω avec des conditions de Dirichlet et de Neumann sur les bords :

$$\Delta u = 0 \quad \text{sur } \Omega \quad (3.5a)$$

$$u = g \quad \text{sur } \partial\Omega_d \quad (3.5b)$$

$$\nabla u \cdot \mathbf{n} = h \quad \text{sur } \partial\Omega_n \quad (3.5c)$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal unitaire sortant du domaine. Une forme variationnelle de ce

problème s'écrit alors :

$$\text{Trouver } u \in U \text{ tel que } \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dV = \int_{\partial\Omega} \nabla u \cdot \mathbf{n} v \, dV \quad \forall v \in V \quad (3.6)$$

où u est une solution faible du problème, v est une fonction test et U et V sont des espaces fonctionnels qui assurent que les intégrales sont finies. L'espace des solutions U (*trial functions*) et l'espace des fonctions test V sont généralement les mêmes espaces fonctionnels. Dans le problème fort (Équation (3.5)), la solution forte u du problème doit posséder une dérivée seconde continue tandis qu'il suffit que la solution du problème faible (Équation (3.6)) soit une fonction de $H^1(\Omega)$, ce qui n'impose aucune contrainte sur ses dérivées secondes.

Le problème continu écrit sous forme variationnelle reste impossible à résoudre numériquement dans sa forme actuelle, ce qui nous oblige à réaliser une discrétisation. On obtient le problème faible discrétisé en remplaçant u par son approximation $u_h \in U_h \subset U$ (Équation (3.3)) et en testant l'équation avec l'ensemble des fonctions tests $v_h \in V_h \subset V$:

$$\text{Trouver } u_h \in U_h \text{ tel que } \int_{\Omega} \nabla u_h \cdot \nabla v_h \, dV = \int_{\partial\Omega} \nabla u_h \cdot \mathbf{n} v_h \, dV \quad \forall v_h \in V_h \quad (3.7)$$

En particulier, il suffit de tester avec un ensemble de fonctions Ψ_i formant une base de V_h . Dans le cas particulier de la méthode de Galerkin, qui sera le seul cas considéré par la suite, les fonctions Ψ_i sont égales aux fonctions de base Φ_i .

Si l'on note N la dimension des espaces fonctionnels, le problème discrétisé est un système de N inconnues u_i à N équations (une équation par fonction test) qui peut être réarrangé et réécrit sous forme matricielle $\overline{\mathbf{A}}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ et résolu numériquement. Pour le problème utilisé en exemple, les éléments A_{ij} de la matrice globale seront ainsi $\int_{\Omega} \nabla \Phi_i \cdot \nabla \Phi_j \, dV$.

Le problème global est construit en pratique en calculant et en sommant les contributions de chaque élément fini aux intégrales présentes dans l'Équation (3.7). On calcule pour chaque élément une matrice et un membre de droite élémentaires contenant uniquement les contributions de cet élément puis on assemble ces contributions dans la matrice globale du problème. La restriction des fonctions de base aux éléments finis correspond à leurs fonctions de forme par construction et les coefficients de la matrice élémentaire d'un élément s'écriront donc sous la forme $\int_{\Omega_e} \nabla N_i^e \cdot \nabla N_j^e \, dV$ pour l'exemple ici choisi. Ces intégrales sont en pratique calculées de façon approximative, en utilisant par exemple une règle de quadrature de Gauss-Legendre.

Éléments finis de Lagrange

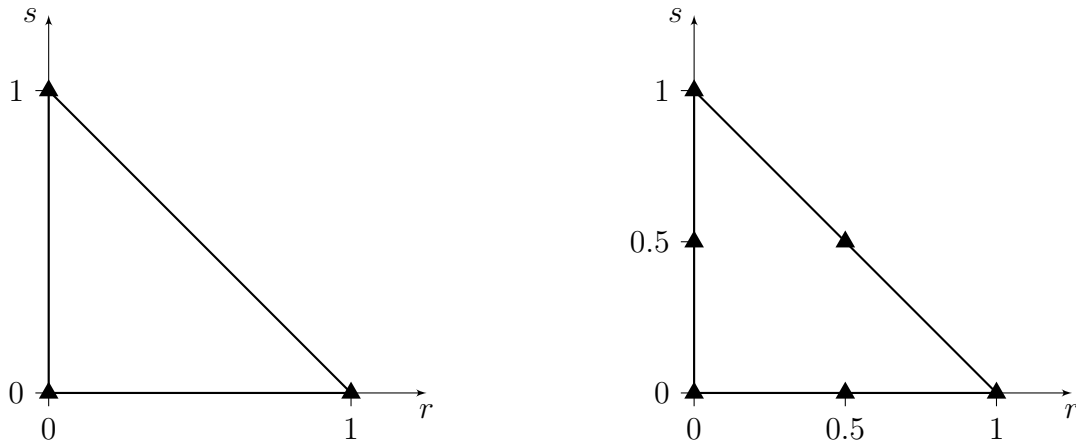
Par simplification de la définition formelle de la notion d'élément fini, on associe généralement à un élément fini :

1. Un domaine $\Omega_e \subset \mathbb{R}^d$ non dégénéré
2. Un ensemble de fonctions N_i^e (généralement polynômiales) appelées fonctions d'interpolation ou de forme (*shape functions*)
3. Un ensemble de valeurs vectorielles ou scalaires u_i^e appelées degrés de liberté (*degrees of freedom*) associés un à un aux fonctions de forme

Le domaine d'un élément fini est quasi systématiquement un polygone ou un polyèdre simple. Les éléments finis les plus courants sont ainsi (1) des segments, (2) des triangles ou des quadrilatères, ou (3) des tétraèdres, des hexaèdres, des pyramides ou des prismes respectivement pour des éléments uni-, bi- et tridimensionnels. La définition de la géométrie de ces éléments est connue implicitement à travers les coordonnées d'un certain nombre de points, appelés « nœuds » de l'élément. Les nœuds et les éléments finis forment le maillage, c'est-à-dire la discrétisation du domaine de calcul, qui est utilisé pour la simulation.

On définit pour chaque type d'élément fini un élément appelé « élément de référence » dans un système de coordonnées paramétriques notées (r, s, t) . Toutes les informations concernant chaque type d'élément fini sont connues sur son élément de référence et on utilise donc cet élément en pratique pour effectuer l'ensemble des calculs (notamment l'intégration de la formulation faible). On définit pour cela une transformation de coordonnées (*mapping* en anglais) permettant de passer d'un élément réel à l'élément de référence et vice-versa (la transformation de coordonnées doit donc être inversible).

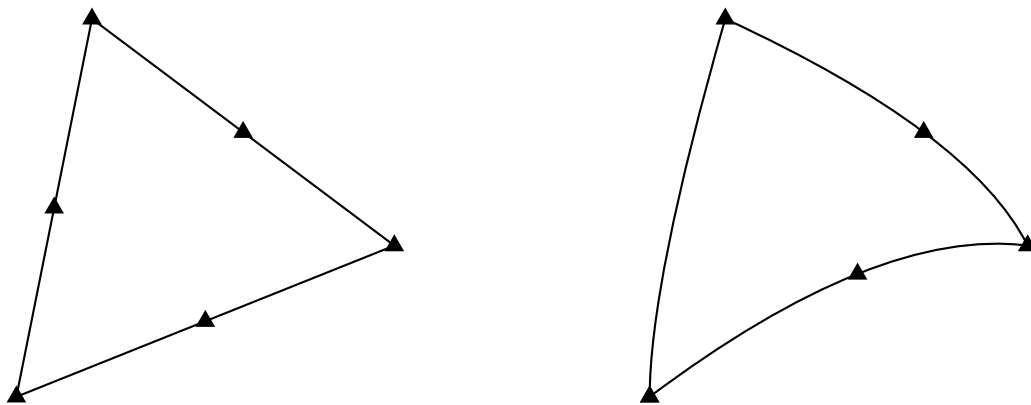
Les éléments finis les plus souvent utilisés et les plus simples sont les éléments finis de Lagrange. Ces éléments sont construits en suivant le principe des polynômes d'interpolation de Lagrange : on associe à chaque nœud i de coordonnées \mathbf{x}_i d'un élément une fonction de forme polynômiale N_i^e que l'on construit telle que $N_i^e(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$ avec δ_{ij} le symbole de Kronecker. En pratique, cela signifie que la valeur prise par l'approximation u_h^e à un chaque nœud i d'un élément (valeur nodale) est égale à la valeur du degré de liberté associé à la fonction de forme N_i^e : $u_h^e(\mathbf{x}_i) = u_i^e$. Le nombre de nœuds des éléments finis de Lagrange est égal au nombre de termes apparaissant dans les fonctions de forme polynômiales. On utilise généralement des polynômes à deux variables (en deux dimensions) complets et d'ordre n arbitraire, c'est-à-dire des polynômes où l'ensemble des monômes $x^\alpha y^\beta$ vérifiant $\alpha + \beta \leq n$ apparaissent ($\alpha, \beta \in \mathbb{N}$). On forme ainsi une famille d'éléments triangulaires de type P_n qui contient notamment les triangles à trois nœuds (triangles linéaires ou P_1) et à six nœuds (triangle quadratique ou P_2).



(a) Élément fini de Lagrange de degré 1 (P_1) (b) Élément fini de Lagrange de degré 2 (P_2)

Figure 3.1 Représentation des éléments finis de Lagrange de degrés 1 et 2 dans le système de coordonnées de référence (r, s) . La localisation des degrés de liberté est indiquée par les symboles triangulaires.

La Figure 3.1 représente les éléments de référence classiquement utilisés pour ces deux types d'éléments finis.



(a) Élément fini de Lagrange de degré 2 subparamétrique (b) Élément fini de Lagrange de degré 2 isoparamétrique

Figure 3.2 Représentation d'un élément fini de Lagrange de degré 2 subparamétrique et isoparamétrique dans l'espace cartésien. La localisation des degrés de liberté est indiquée par les symboles triangulaires.

La géométrie d'un élément fini est généralement elle aussi représentée en utilisant des fonctions de forme et les coordonnées des nœuds associés à celles-ci. Si on utilise les mêmes fonctions de forme pour représenter la solution du problème et la géométrie, on dit que l'élément est isoparamétrique. Si des polynômes de degré supérieur à un sont utilisés, les éléments

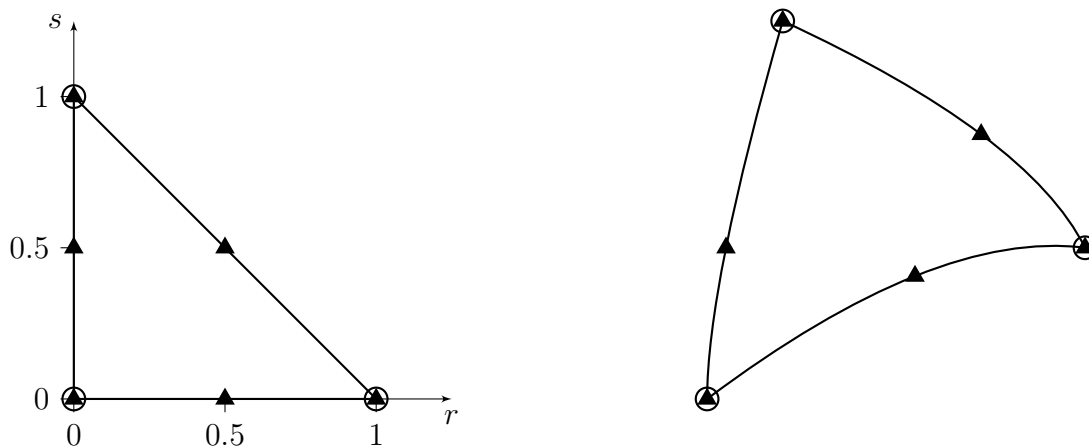
peuvent alors avoir une géométrie courbe qui permet de créer des discrétisations plus fidèles des domaines de calculs ayant une géométrie complexe. Au contraire, on dira que l'élément est subparamétrique (respectivement superparamétrique) si l'on utilise pour représenter la géométrie des fonctions de forme d'un degré plus faible (respectivement plus élevé) que celles utilisées pour représenter la solution. La différence entre un élément quadratique subparamétrique et isoparamétrique est illustrée sur la Figure 3.2. Nous utiliserons en pratique uniquement des éléments isoparamétriques dans ces travaux.

Méthode des éléments finis mixte et éléments de Taylor-Hood

Dans la formulation en régime incompressible, les équations de Stokes et de Navier-Stokes ont la particularité d'être des problèmes de point-selle (*saddle point problem*) puisque l'équation de conservation de la masse (ou de continuité) agit comme une contrainte sur le problème. La variable (inconnue) de pression joue pour ces problèmes le rôle d'un multiplicateur de Lagrange qui permet d'imposer la contrainte d'incompressibilité.

Différentes approches sont envisageables pour traiter ces problèmes : on peut soit utiliser une formulation découplée en éliminant les inconnues de pression à l'aide d'une méthode de pénalisation, de Lagrangien augmenté ou de la méthode d'Uzawa, soit employer une formulation mixte (aussi appelée formulation vitesse-pression) où les inconnues du problème (vitesse, déplacements, température, ...) et les multiplicateurs de Lagrange sont résolus au sein d'un même système. La deuxième méthode (qui sera utilisée pour ces travaux) augmente certes la taille du système à résoudre mais simplifie largement le traitement de la contrainte d'incompressibilité.

Seules certaines discrétisations sont stables pour les problèmes de point-selle. La condition inf-sup ou condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi (LBB) définit une condition suffisante permettant de déterminer si une formulation d'un tel problème est stable. Dans le cas contraire, il est possible d'ajouter des termes de stabilisation dans la formulation faible (*e.g.* : formulation *Pressure-Stabilizing Petrov-Galerkin* ou PSPG) mais le plus simple reste encore d'utiliser une discrétisation qui satisfait la condition LBB. Nous utiliserons pour cela les éléments de Taylor-Hood (éléments de type $P_{n+1}-P_n$) qui représentent la pression avec des fonctions de forme polynômiales de degré n et toutes les autres inconnues du problème avec des fonctions de forme polynômiales de degré $n + 1$. La Figure 3.3 représente un élément de Taylor-Hood P_2-P_1 isoparamétrique dans le système de coordonnées de référence et dans le plan cartésien.



(a) Élément fini de Taylor-Hood de degré 2 isoparamétrique dans le système de coordonnées de référence

(b) Élément fini de Taylor-Hood de degré 2 isoparamétrique pour un élément réel dans le plan cartésien

Figure 3.3 Représentation de l'élément fini de Taylor-Hood de degré 2 isoparamétrique dans le système de coordonnées de référence (r, s) et pour un élément réel dans le plan cartésien. La localisation des degrés de liberté pour la pression est indiquée par les symboles circulaires et celle des degrés de liberté de toutes les autres variables par les symboles triangulaires.

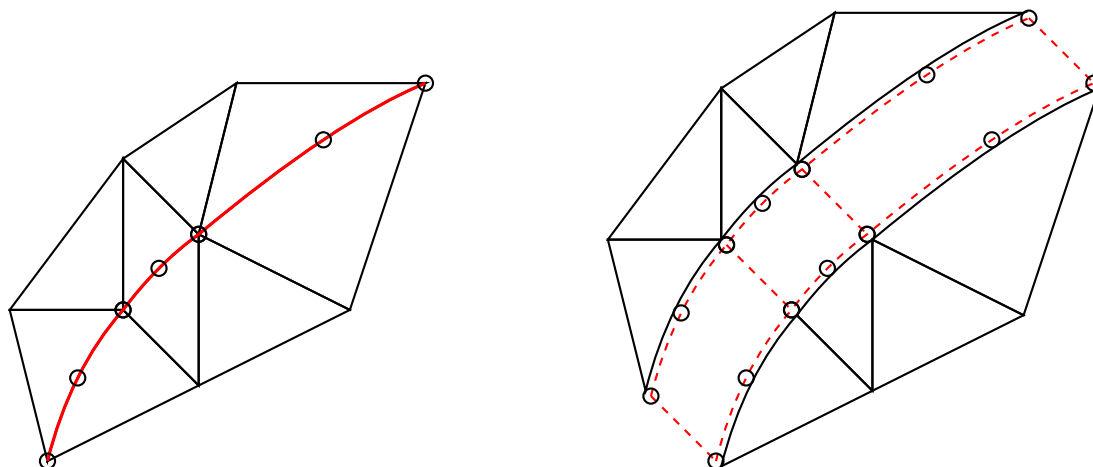
3.1.2 Méthode de représentation des interfaces

La formulation que nous utilisons pour représenter les interfaces entre fluides non miscibles fait partie des méthodes de suivi d'interface (*interface tracking*) et plus particulièrement des méthodes *body-fitted*. Dans ces méthodes, la discrétisation d'une interface est contenue et représentée explicitement dans le maillage utilisé et concorde avec la géométrie de l'interface en tout temps, ce qui signifie que les nœuds et éléments qui composent le maillage des interfaces doivent être capables de se déplacer et se déformer.

À l'opposé, certaines méthodes de suivi d'interface se servent de deux discrétisations indépendantes : une pour l'ensemble du domaine de calcul ne prenant pas en compte la position des interfaces et une autre discrétisation qui représente uniquement les interfaces. On parle généralement dans ce cas de méthodes de frontières immergées.

Les sous-domaines occupés par chacun des fluides sont discrétisés par des maillages disjoints au sens des graphes (ils forment chacun un sous-graphe qui ne partagent aucun point ou élément entre eux) et n'ont ainsi aucun lien topologique les uns avec les autres. Chaque interface est ainsi discrétisée au total deux fois : une fois pour chaque sous-domaine qu'elle délimite.

Pour permettre l'implémentation simple des conditions de saut au niveau des interfaces, on



(a) Situation réelle montrant la position de l'interface (indiquée en trait continu rouge) (b) Vue éclatée mettant en évidence les éléments d'interface (indiqués par des tirets)

Figure 3.4 Représentation d'une interface (en rouge) séparant des groupes d'éléments disjoints dans un maillage d'éléments triangulaires P_2 - P_1 isoparamétriques. La figure de gauche représente la situation réelle tandis que la figure de droite est une vue éclatée mettant en évidence les éléments d'interface. La localisation des degrés de liberté des éléments d'interface est indiquée par les symboles circulaires.

impose que les deux discrétisations soient identiques : les nœuds et les éléments qui constituent la discrétisation de chaque côté d'une interface doivent se correspondre deux à deux et doivent avoir la même définition (les points doivent être confondus deux à deux et les éléments doivent avoir des connectivités compatibles). En principe, cela revient à utiliser la même discrétisation pour les deux côtés d'une interface et à la dupliquer, bien que l'algorithme de discrétisation des frontières qui est utilisé n'opère pas ainsi dans la réalité.

Les points et éléments qui se correspondent des deux côtés de chaque interface sont utilisés pour définir des éléments d'épaisseur nulle qui permettent d'avoir accès rapidement aux données de part et d'autre de l'interface et ainsi d'imposer facilement les conditions de saut. Leurs degrés de liberté sont les mêmes que ceux des éléments dont ils extraits.

Pour les problèmes bidimensionnels, les éléments qui constituent les interfaces sont extraits des arêtes des triangles qui discrétisent les domaines occupés par les fluides. Ainsi, pour un maillage utilisant des éléments triangulaires P_2 - P_1 isoparamétriques, les éléments d'interface sont des segments de paraboles et ont trois degrés de liberté pour la pression et six degrés de liberté pour toutes les variables. La Figure 3.4a représente une interface telle qu'elle serait visible dans la réalité pour un tel maillage. Les éléments d'interface ont une épaisseur nulle et les nœuds et éléments des discrétisations des deux côtés de l'interface se correspondent deux à deux. La connectivité des éléments d'interface est montrée sur la Figure 3.4b où les trois

éléments qui constituent l'interface représentée sont tracés en pointillés.

3.1.3 Formulation ALE et méthode du pseudo-solide

La représentation explicite des interfaces entre deux fluides dans le maillage nécessite que des traitements particuliers soient réalisés afin de correctement prendre en compte leurs déplacements et leurs déformations au cours de la simulation. Il est évidemment nécessaire de propager les déplacements des interfaces à l'intérieur du domaine de calcul afin de s'assurer que les éléments qui longent les interfaces n'aient pas un volume nul ou négatif, ce qui rendrait l'intégration numérique, et donc la résolution du problème, impossible.

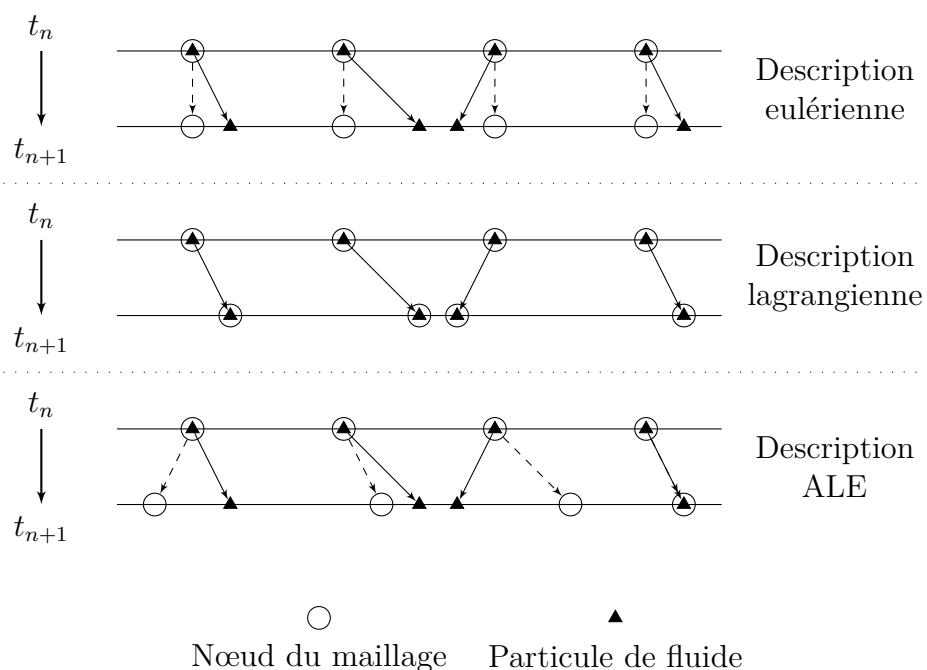


Figure 3.5 Comparaison des différentes descriptions utilisées en mécanique des milieux continus sur un cas unidimensionnel entre deux instants temporels (de haut en bas : description eulérienne, description lagrangienne et description ALE). Les nœuds du maillage sont représentés par des cercles et les particules de fluide par des triangles.

Ce besoin de déplacer arbitrairement les nœuds du maillage du domaine impose à son tour l'utilisation d'une formulation particulière des équations. D'une part, il est impossible d'utiliser une description purement eulérienne puisque la grille de calcul n'est plus fixe, et d'autre part, une approche purement lagrangienne impose que les nœuds du maillage se déplacent à la même vitesse que l'écoulement. On utilise donc une généralisation de ces formulations dans laquelle les nœuds du maillage peuvent se déplacer de façon arbitraire, ce qui explique son nom : la formulation *Arbitrary Lagrangian Eulerian* (ALE). La Figure 3.5 fournit une

comparaison des différentes descriptions sur un cas unidimensionnel. On réfère le lecteur intéressé à l'exhaustive revue de Donea *et al.* [110] sur le sujet.

Description ALE et loi de conservation géométrique

La formulation ALE permet de naturellement prendre en compte la déformation du domaine de calcul au cours du temps dans les équations. Dans la formulation ALE, la dérivée convective d'un scalaire a est exprimée par :

$$\frac{Da}{Dt} = \frac{\partial a}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{conv}} \cdot \nabla) a \quad (3.8)$$

où la vitesse de convection est ici égale à la différence de la vitesse du milieu continu et de la vitesse de déplacement des points du domaine :

$$\mathbf{u}_{\text{conv}} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{ALE}} \quad (3.9)$$

Il est facile de voir que les cas particuliers des descriptions lagrangienne et eulérienne peuvent être retrouvés pour certaines valeurs de \mathbf{u}_{ALE} :

- $\mathbf{u}_{\text{ALE}} = \mathbf{u}$ pour obtenir la description lagrangienne
- $\mathbf{u}_{\text{ALE}} = \mathbf{0}$ pour se placer dans une description eulérienne

La mise en place de la formulation ALE est relativement simple et demande uniquement, *a priori*, de connaître la vitesse de déplacement des points du domaine. Cette simplicité et sa grande versatilité l'ont rendue très populaire pour les simulations de type *body-fitted* où les frontières sont conformes à la géométrie : simulations de problèmes d'interactions fluide-structure ou d'écoulements polyphasiques, problèmes où des éléments se déforment ou se déplacent au cours du temps (*e.g.* : moteur à piston, machines tournantes), ... Elle sert aussi parfois pour des applications utilisant des méthodes de frontières immergées (*immersed* ou *embedded boundary method*), pour représenter un mouvement de corps rigide par exemple.

La notion de loi de conservation géométrique (*Geometric Conservation Law* ou GCL), introduite par Lesoinne et Farhat [49], est une condition qui doit être vérifiée par l'implémentation de la formulation ALE pour assurer la précision des résultats (ainsi que la stabilité numérique selon certains auteurs, bien que cela soit disputé). Dans son expression la plus simple, elle requiert que la solution d'un écoulement uniforme sur un maillage mobile soit exacte. La GCL peut être formulée comme une loi de conservation du volume des éléments du maillage : le changement de volume d'un élément doit correspondre au volume balayé par ses faces entre deux instants. Dans le contexte de notre utilisation de la formulation ALE, les travaux de

Hay *et al.* [99] ont déterminé que la GCL était automatiquement satisfaite pour des éléments finis ayant une géométrie linéaire. Persson *et al.* [84] montre de plus qu'il est important que l'intégration numérique du déterminant de la transformation entre l'élément réel et l'élément de référence soit très précise, voire exacte, pour satisfaire exactement la GCL.

Méthode du pseudo-solide

La détermination de la vitesse de déplacement des points du domaine peut être faite de diverses manières qui peuvent fournir des résultats différents puisque seuls les déplacements des frontières sont imposés (afin que celles-ci restent conformes à la géométrie) et les déplacements sont généralement arbitraires à l'intérieur du domaine. Les méthodes qui permettent de déformer le domaine de calcul sont nombreuses mais on retrouve principalement (a) des méthodes algébriques où la fonction donnant les déplacements est fournie par l'utilisateur, (b) des méthodes utilisant des fonctions de base radiale (*Radial Basis Functions* ou RBF), et (c) des méthodes basées sur la résolution d'une équation différentielle comme le lissage Laplacien (*Laplacian smoothing*) ou la méthode du pseudo-solide. Cette dernière catégorie repose sur la vision du domaine de calcul comme un milieu continu se déformant sous l'action des déplacements de ses frontières, qui constituent des conditions aux limites. Cette analogie est intéressante car elle assure en principe que le maillage restera valide, ce qui suggère que ces méthodes numériques sont robustes.

Dans la méthode du pseudo-solide que nous utilisons, le domaine de calcul est vu comme un solide linéaire hyperélastique suivant la loi de comportement de Saint Venant-Kirchhoff. Notons par $\boldsymbol{\chi}$ les déplacements des points du domaine et par $\overline{\overline{\mathbf{E}}}$ le tenseur de Green-Lagrange linéarisé. Le comportement du pseudo-solide est alors régi par l'équation différentielle :

$$\nabla \cdot (\lambda_{\text{ps}} \text{Tr}(\overline{\overline{\mathbf{E}}}) \overline{\overline{\mathbf{I}}} + 2\mu_{\text{ps}} \overline{\overline{\mathbf{E}}}) = 0 \quad (3.10)$$

où λ_{ps} et μ_{ps} sont les coefficients de Lamé du pseudo-solide et le tenseur de Green-Lagrange a pour expression :

$$\overline{\overline{\mathbf{E}}} = \frac{1}{2} (\nabla \boldsymbol{\chi} + \nabla \boldsymbol{\chi}^\top) \quad (3.11)$$

La vitesse de déformation du domaine utilisée pour la formulation ALE est alors simple à obtenir à partir du vecteur des déplacements :

$$\mathbf{u}_{\text{ALE}} = \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial t} \quad (3.12)$$

Les coefficients de Lamé λ_{ps} et μ_{ps} peuvent être variables en espace et en temps, pour rigidifier

une zone du domaine par exemple, et sont exprimables sous la forme du module de Young E et du coefficient de Poisson ν , comme cela est courant en mécanique des solides déformables, par les formules suivantes :

$$E = \frac{\mu_{\text{ps}}(3\lambda_{\text{ps}} + 2\mu_{\text{ps}})}{\lambda_{\text{ps}} + \mu_{\text{ps}}} \quad \nu = \frac{\lambda_{\text{ps}}}{2(\lambda_{\text{ps}} + \mu_{\text{ps}})} \quad (3.13)$$

Il est important de faire attention à ce que le matériau ne soit pas incompressible ($\nu = 0,5$) puisque cela demanderait un traitement particulier des équations (tout comme l'hypothèse d'incompressibilité entraîne l'introduction de la pression comme un multiplicateur de Lagrange en mécanique des fluides).

Implémentation du pseudo-solide pour la méthode des éléments finis

La loi de comportement du pseudo-solide est résolue avec la méthode des éléments finis, de la même manière que les autres équations du problème.

Soit Ω , de bord $\partial\Omega$, un domaine de \mathbb{R}^n (avec n compris entre 1 et 3) et soit $\phi_{\chi} \in X$ une fonction test admissible provenant de l'espace fonctionnel X (e.g. : $H^1(\Omega)^n$). La forme variationnelle utilisée pour les équations du pseudo-solide est :

$$\int_{\Omega} \{\bar{\mathbf{S}} : \nabla \phi_{\chi}\} dV = \int_{\partial\Omega} \{(\bar{\mathbf{S}}\mathbf{n}) \cdot \phi_{\chi}\} dS \quad (3.14)$$

en notant $\bar{\mathbf{S}} = \lambda_{\text{ps}} \text{Tr}(\bar{\mathbf{E}}) \bar{\mathbf{I}} + 2\mu_{\text{ps}} \bar{\mathbf{E}}$. On considère généralement que les conditions de Neumann dans le membre de droite de cette équation sont nulles et les déplacements des frontières du domaine sont imposées par des conditions de Dirichlet.

La variable des déplacements du domaine χ peut, en principe, être discrétisée sans tenir compte de la discrétisation des autres variables. Dans notre cas cependant, il est nécessaire que la vitesse du fluide et les déplacements soient discrétisés de la même façon afin de pouvoir implémenter les conditions de saut pour les interfaces, comme discuté dans la Section 4.3.3. On utilise ainsi des éléments dits « isoparamétriques » (en opposition aux éléments subparamétriques), ce qui signifie que les mêmes fonctions d'interpolation sont utilisées pour représenter le champ de vitesse et la géométrie des éléments. L'utilisation d'éléments de Taylor-Hood P_2 - P_1 isoparamétriques permet ainsi d'obtenir une représentation de la géométrie à partir de fonctions polynomiales de degré deux, ce qui améliore considérablement la précision de la représentation des frontières du domaine et diminue l'erreur numérique due aux approximations.

3.1.4 Intégrateurs en temps de type *Backward Differentiation Formula*

L'application de la méthode des éléments finis permet d'obtenir une semi-discrétisation de la partie spatiale du problème à résoudre (les termes faisant intervenir les dérivées partielles par rapport aux coordonnées d'espace). On obtient ainsi un système d'équations différentielles ordinaires représentant un problème aux valeurs initiales ou problème de Cauchy où seules les dérivées par rapport au temps sont présentes. Les méthodes d'intégration en temps réalisent la discrétisation temporelle de ce problème et permettent d'obtenir un problème entièrement discrétisé qui peut alors être résolu numériquement. De nombreuses méthodes numériques, implicites ou explicites, peuvent être utilisées pour cela. Parmi les plus courantes, on trouve notamment (a) au premier ordre, les méthodes Euler implicite et Euler explicite, (b) au second ordre, la méthode Newmark-beta et le schéma de Crank-Nicolson, (c) et à ordre plus élevé, les méthodes Runge-Kutta (implicites et explicites) et les méthodes linéaires à étapes multiples comme les méthodes d'Adams-Bashforth, d'Adams-Moulton et les méthodes BDF (*Backward Differentiation Formula*).

Formulation des méthodes BDF

Les méthodes BDF [10] sont une famille de méthodes numériques implicites linéaires à étapes multiples (*linear multistep methods*) qui sont généralement utilisées pour effectuer la résolution d'équations différentielles raides (*stiff* en anglais). Les méthodes BDF sont construites systématiquement à partir d'une formule générique qui permet d'exprimer la solution inconnue à partir des p solutions précédemment calculées (voir Figure 3.6 pour une représentation schématique).

Soit le problème aux valeurs initiales (problème de Cauchy) suivant :

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = f(t, \mathbf{u}(t)) \quad (3.15a)$$

$$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \quad (3.15b)$$

Si h est le pas d'intégration utilisé (le pas de temps dans notre cas), $t_n = nh + t_0$ est le temps à la n -ième étape et en notant $\mathbf{u}_n \approx \mathbf{u}(t_n)$ l'approximation numérique de la solution exacte à $t = t_n$ obtenue par le schéma d'intégration, alors la formule générique pour une méthode BDF à p étapes, qui permet d'obtenir l'approximation de la solution \mathbf{u}_{n+1} à $t = t_{n+1}$ est :

$$\mathbf{u}_{n+1} = \sum_{i=0}^{p-1} \alpha_i \mathbf{u}_{n-i} - h\beta f(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}) \quad (3.16)$$

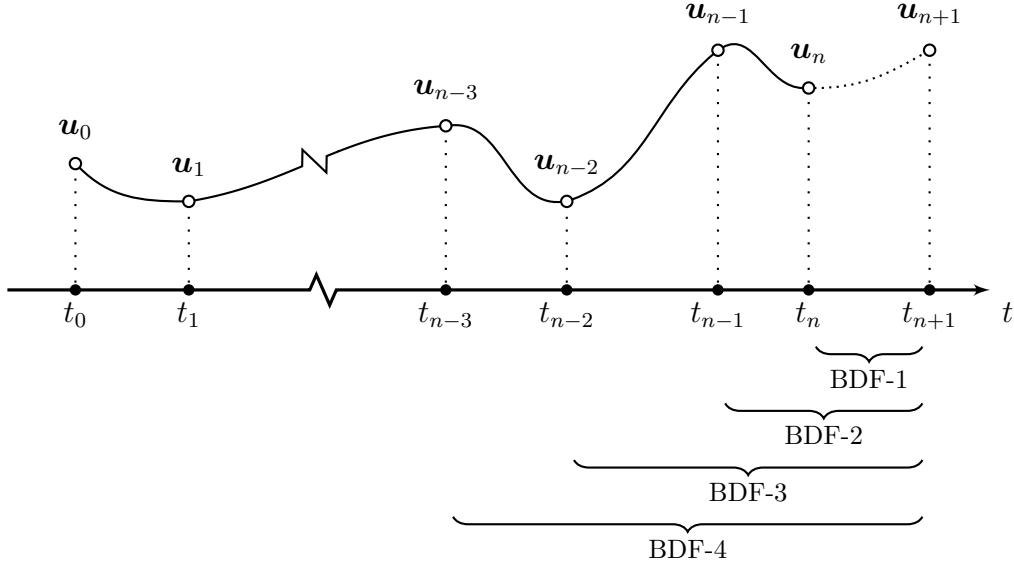


Figure 3.6 Représentation des approximations numériques de la solution utilisées par les différentes méthodes BDF

avec ici un pas d'intégration h constant. Les coefficients α_i et β sont obtenus de manière que l'ordre de précision du schéma numérique soit l'ordre maximum pouvant être atteint, c'est-à-dire p . Le caractère implicite de la méthode provient du fait que la fonction f est évaluée pour la solution inconnue \mathbf{u}_{n+1} . À titre d'exemple, les formules pour les méthodes BDF d'ordre 1 et 2 avec un pas de temps constant sont :

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + hf(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}) \quad \text{BDF-1 / Euler implicite} \quad (3.17a)$$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \frac{4}{3}\mathbf{u}_n - \frac{1}{3}\mathbf{u}_{n-1} + \frac{2}{3}hf(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}) \quad \text{BDF-2} \quad (3.17b)$$

Les coefficients de la méthode BDF d'ordre p peuvent être obtenus en cherchant le polynôme d'interpolation de Lagrange de degré p qui permet d'approximer localement la solution exacte à partir de p solutions obtenues numériquement et de la solution qui est présentement inconnue. On écrit ainsi :

$$\mathbf{u}(t) = \sum_{i=0}^p \mathbf{u}_{n+1-i} L_i(t) \quad \text{avec } L_i(t) = \prod_{\substack{0 \leq m \leq p \\ m \neq i}} \frac{t - t_{n+1-m}}{t_{n+1-i} - t_{n+1-m}} \quad (3.18)$$

où les $L_i(t)$ sont les polynômes d'interpolation de Lagrange. En substituant cette expression dans le problème de Cauchy d'origine (Équation (3.15)) à $t = t_{n+1}$, on obtient alors les coefficients recherchés.

De façon plus générale et automatisable, les coefficients des méthodes BDF sont obtenus grâce aux polynômes d'interpolation de Newton. Les polynômes d'interpolation de Newton sont simplement une réécriture des polynômes d'interpolation de Lagrange faisant apparaître les différences divisées de Newton. Cette réécriture permet, entre autres, d'augmenter le degré du polynôme et d'ajouter des points supplémentaires sans nécessiter de recalculer l'ensemble des coefficients, ce qui sera utile pour permettre d'augmenter ou de diminuer dynamiquement l'ordre de la méthode. On utilise au choix les différences divisées rétrogrades (*backward divided differences*) ou les différences divisées progrades (*forward divided differences*), respectivement si l'on ajoute un point après ou avant les autres.

L'Équation (3.18) est réécrite sous sa forme de Newton :

$$\mathbf{u}(t) = \underbrace{\sum_{i=0}^p \left(\prod_{j=0}^{i-1} (t - t_{n+1-j}) \right)}_{\text{Base polynomiale de Newton}} \underbrace{[\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_{n+1-i}]}_{\text{Différence divisée rétrograde}} \quad (3.19)$$

où l'on note par $[\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_{n+1-i}]$ les différences divisées rétrogrades. La construction des différences divisées est réalisée par récurrence selon les formules suivantes :

$$[\mathbf{u}_{n+1}] = \mathbf{u}_{n+1} \quad (3.20a)$$

$$[\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_{n+1-i}] = \frac{[\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_{n+2-i}] - [\mathbf{u}_n, \dots, \mathbf{u}_{n+1-i}]}{t_{n+1} - t_{n+1-i}} \quad (3.20b)$$

ce qui permet de les calculer au fur et à mesure à partir des valeurs déjà calculées, d'une façon qui évoque le calcul des coefficient binomiaux par la règle de Pascal. Par exemple, le calcul des coefficients pour la méthode BDF-2 (Équation (3.17b)) nécessite le calcul des différences divisées suivantes :

$$P_0(t) = 1 \quad [\mathbf{u}_{n+1}] = \mathbf{u}_{n+1} \quad (3.21a)$$

$$P_1(t) = t - t_{n+1} \quad [\mathbf{u}_{n+1}, \mathbf{u}_n] = \frac{[\mathbf{u}_{n+1}] - [\mathbf{u}_n]}{t_{n+1} - t_n} \quad (3.21b)$$

$$P_2(t) = (t - t_{n+1})(t - t_n) \quad [\mathbf{u}_{n+1}, \mathbf{u}_n, \mathbf{u}_{n-1}] = \frac{[\mathbf{u}_{n+1}, \mathbf{u}_n] - [\mathbf{u}_n, \mathbf{u}_{n-1}]}{t_{n+1} - t_{n-1}} \quad (3.21c)$$

où les $P_i(t)$ sont les polynômes de la base polynomiale de Newton associés à chaque différence divisée. Cet exemple illustre bien que la procédure de construction des différences divisées peut être implémentée de façon récursive : on commence par calculer les différences divisées qui contiennent deux termes puis on calcule celles qui en contiennent trois, et ainsi de suite.

En procédant de la même façon que pour les polynômes d'interpolation de Lagrange, on injecte l'Équation (3.19) dans le problème aux valeurs initiales à $t = t_{n+1}$ pour obtenir la forme générale utilisée dans notre implémentation des méthodes BDF :

$$\sum_{i=1}^p \left(\prod_{j=1}^{i-1} (t_{n+1} - t_{n+1-j}) \right) [\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_{n+1-i}] = f(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}) \quad (3.22)$$

que l'on réécrit sous la forme :

$$\sum_{i=0}^p \alpha_i \mathbf{u}_{n+1-i} = f(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}) \quad (3.23)$$

où les coefficients α_i dépendent des pas d'intégration h_i de chacune des étapes utilisées (avec $h_{n+1} = t_{n+1} - t_n$) et de l'ordre de la méthode. Ces coefficients sont obtenus récursivement et automatiquement en calculant les différences divisées rétrogrades selon l'algorithme suggéré par Hay *et al.* [105].

À l'inverse des méthodes employant des étapes de calcul intermédiaires, comme les méthodes de type Runge-Kutta, les méthodes BDF ne sont pas « autodémarrantes » (*self-starting*) : sans information sur les pas de temps qui précèdent l'instant initial, il est nécessaire d'utiliser une méthode BDF d'ordre 1 pour calculer la solution à la première étape. On peut par la suite augmenter l'ordre au fur et à mesure que le nombre de solutions disponibles augmente.

Le coût de calcul supplémentaire engendré par l'augmentation de l'ordre de la méthode BDF utilisée est quasi nul puisqu'il est uniquement nécessaire de stocker plus de solutions en mémoire. Ceci représente un avantage majeur des méthodes BDF par rapport aux méthodes de type Runge-Kutta implicites (IRK) pour lesquelles la taille du système matriciel à inverser, et donc le coût de calcul, augmente sensiblement lorsque l'ordre de la méthode augmente.

Stabilité des méthodes BDF

Il est en principe possible de construire des méthodes BDF d'ordre arbitraire par cette méthode. Toutefois, en pratique, les méthodes linéaires à étapes multiples d'ordre $p > 6$ ne peuvent pas être utilisées puisqu'elles ne sont pas zéro-stables : une perturbation ne reste pas bornée dans la limite où le pas d'intégration tend vers zéro. Les travaux de Dahlquist [11, 14] ont fourni des résultats importants concernant l'ordre de convergence et la stabilité des méthodes linéaires à étapes multiples couramment appelés « barrières de Dahlquist ». Notamment, la seconde barrière de Dahlquist indique que seules les méthodes implicites d'ordre inférieur ou égal à 2 peuvent être A-stables. Le théorème d'équivalence de Dahlquist, analogue au théorème de Lax

et Richtmyer [12] pour l'analyse des méthodes de différences finies, indique de plus que, pour une méthode linéaire à étapes multiples, la zéro-stabilité et la consistance sont des conditions nécessaires et suffisantes pour assurer la convergence. Pour le cas particulier des méthodes BDF, les méthodes d'ordre 1 et 2 sont inconditionnellement stables, les méthodes d'ordre 3 à 6 sont conditionnellement stables mais leur région de stabilité est relativement grande et les méthodes d'ordre 7 et supérieur sont inconditionnellement instables.

Bien qu'une implémentation des méthodes BDF d'ordre 1 à 5 soit disponible dans notre ensemble logiciel, nous nous limiterons en pratique pour la plupart des simulations qui seront réalisées à un ordre maximum de 2. Faire ce choix permet de s'assurer qu'aucun problème de stabilité numérique dû à l'utilisation de méthodes BDF d'ordre élevé ne sera rencontré mais se fait au détriment de l'efficacité numérique de la procédure d'intégration en temps dans certains cas. Les méthodes adaptatives permettant d'ajuster au cours de la simulation le pas de temps utilisé pour l'intégration ainsi que l'ordre de l'intégrateur sont décrites en détail dans la Section 3.3.

3.1.5 Résolution du système d'équations

Méthode de Newton-Raphson

Le problème couplé d'équations non linéaires est résolu par la méthode de Newton-Raphson, une méthode itérative permettant de trouver les racines (*i.e.* : les zéros) d'une fonction à valeurs réelles. Cette méthode fait plus généralement partie des méthodes de Householder qui, pour des fonctions de classe \mathcal{C}^n (dérivables n fois et dont la dérivée n -ième est continue), ont une convergence d'ordre $n + 1$. La méthode de Newton-Raphson correspond au cas où $n = 1$ et la méthode d'ordre 2 est connue sous le nom de méthode de Halley¹.

Soit $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe \mathcal{C}^1 (dérivable et dont la dérivée est continue) d'une seule variable à valeurs réelles. La méthode de Newton-Raphson fournit une suite x_k d'approximations d'une racine de f de plus en plus précises par la formule suivante :

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (3.24)$$

à partir d'une estimation initiale de la solution x_0 .

La méthode de Newton-Raphson possède l'intéressante propriété de converger asymptotiquement de façon quadratique vers la solution, ce qui signifie que, en notant \hat{x} la racine, la suite

1. De l'astronome britannique Edmond Halley, connu notamment pour avoir déterminé la période orbitale de la comète qui porte son nom à partir des lois de la gravitation que Newton avait publié peu de temps auparavant.

d'approximations vérifie :

$$\exists n \in \mathbb{N}, \forall k > n, \exists M \in \mathbb{R}^+, \|x_{k+1} - \hat{x}\| \leq M \|x_k - \hat{x}\|^2 \quad (3.25)$$

Il est malgré tout possible que la méthode ne converge pas de façon quadratique ou ne converge tout simplement pas dans certaines situations (dérivée localement nulle, mauvaise estimation initiale, hypothèses sur f non respectées, ...).

Extension aux systèmes d'équations non linéaires

La méthode de Newton-Raphson peut être étendue pour être appliquée à la résolution d'un système d'équations non linéaires. On note $\mathbf{F} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ une fonction de n variables représentant le système d'équations à résoudre. La méthode de Newton-Raphson écrite sous la forme dite de « résidu-correction » est alors :

$$\overline{\overline{\mathbf{J}}} \delta \mathbf{x}_{k+1} = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) \quad (3.26a)$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \delta \mathbf{x}_{k+1} \quad (3.26b)$$

où $\overline{\overline{\mathbf{J}}} = \nabla \mathbf{F}$ est la matrice jacobienne de \mathbf{F} , le terme $\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ correspond au résidu, $\delta \mathbf{x}_{k+1}$ est la correction de la solution et l'Équation (3.26b) est l'étape de mise à jour ou de correction de la solution.

Pour les applications qui nous intéressent, \mathbf{x} correspond aux degrés de liberté (les inconnues) tandis que la fonction \mathbf{F} correspond à la forme entièrement discrétisée du problème, obtenue en appliquant successivement la méthode des éléments finis pour semi-discrétiser le problème en espace, suivi de la méthode BDF. La formulation employée est dite monolithique et entièrement couplée puisque tous les systèmes d'équations qui constituent le problème sont résolus simultanément. Les principales difficultés ici sont (1) de calculer la matrice jacobienne $\overline{\overline{\mathbf{J}}}$, ce qui est très coûteux et peut être difficile, et (2) de résoudre le système matriciel linéarisé.

Résolution du système matriciel et factorisation adaptative

L'assemblage des équations du problème éléments finis est effectuée au niveau des éléments utilisés pour discrétiser le problème. On construit sur chaque élément une matrice et un membre de droite élémentaire que l'on somme ensuite pour obtenir une matrice jacobienne globale et un résidu global qui contiennent les contributions de tous les éléments. Les matrices élémentaires sont des matrices denses tandis que la matrice globale est creuse : elle contient une majorité d'éléments nuls qu'il n'est pas nécessaire de conserver en mémoire.

La résolution du système matriciel est effectuée par le solveur PARDISO (*PARallel DIrect Sparse solver*), un solveur direct, parallèle en mémoire partagée (*via* l'interface de programmation OpenMP), et adapté aux problèmes à matrices creuses. Le solveur est divisé en plusieurs étapes pour résoudre le problème type $\overline{\overline{\mathbf{A}}}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ dans le cas général où $\overline{\overline{\mathbf{A}}}$ est une matrice non symétrique à coefficients réels² :

1. Calcul du remplissage (*fill-in*) des matrices de la décomposition et factorisation symbolique
2. Factorisation numérique *via* une décomposition LU de la matrice ($\overline{\overline{\mathbf{A}}} = \overline{\overline{\mathbf{L}}}\overline{\overline{\mathbf{U}}}$ où $\overline{\overline{\mathbf{L}}}$ et $\overline{\overline{\mathbf{U}}}$ sont une matrice triangulaire inférieure et supérieure respectivement)
3. Résolution du problème par descente ($\overline{\overline{\mathbf{L}}}\mathbf{y} = \mathbf{b}$) puis remontée ($\overline{\overline{\mathbf{U}}}\mathbf{x} = \mathbf{y}$) (*forward and backward substitution*)

La première étape de l'algorithme du solveur n'est effectuée qu'une seule fois puisque le remplissage de la matrice ne change pas lors de la résolution du problème et la seconde étape (factorisation numérique) est la plus coûteuse.

La méthode de Newton-Raphson requiert en principe une mise à jour de la matrice jacobienne, et donc la résolution d'un nouveau système matriciel, à chaque itération pour recouvrer la propriété de convergence quadratique. Employer une méthode de Newton-Raphson classique peut donc engendrer un coût de calcul très élevé, notamment dans le cas des simulations instationnaires.

Afin de réduire le coût lié au calcul de la matrice jacobienne et à la décomposition LU, nous utilisons une méthode de factorisation adaptative de type « *frozen jacobian* ». Dans cette méthode de Newton-Raphson modifiée, la matrice jacobienne est conservée au cours des itérations (celles de la méthode de Newton-Raphson ainsi que celles de la méthode BDF) et n'est mise à jour que lorsque la matrice courante ne permet plus de faire suffisamment décroître la norme du résidu. Ainsi, si la matrice n'est pas mise à jour et a déjà été factorisée numériquement, seules les deux étapes de descente et de remontée (dont le coût est faible) sont nécessaires pour obtenir une nouvelle approximation. On fait ici donc un compromis entre le taux de convergence (qui devient linéaire) et le coût de calcul, qui baisse sensiblement grâce à cette méthode. En pratique, l'emploi de la méthode de factorisation adaptative permet dans la majeure partie des cas de réaliser des gains de performance très importants, sans compromettre la validité des résultats.

2. D'autres algorithmes spécialisés sont disponibles pour d'autres types de matrices (matrices symétriques, matrices symétriques définies positives, ...)

Méthode du jacobien numérique

La matrice jacobienne globale du problème est assemblée à partir des contributions des matrices jacobiennes élémentaires calculées sur chaque élément. En première approche, il suffit pour obtenir ces matrices d'exprimer analytiquement chacun de leurs termes puis d'utiliser ces expressions afin de les calculer. Cette façon de procéder demande un important travail au préalable et manque de flexibilité (si l'on veut implémenter un nouveau modèle par exemple) mais fournit la matrice jacobienne exacte et est efficace numériquement. À l'inverse, la méthode dite du « jacobien numérique » fournit de façon automatique une approximation de la matrice jacobienne linéarisée par une méthode de différences finies. Cette méthode ne requiert aucun travail *a priori* et s'adapte automatiquement aux équations du problème mais possède un coût de calcul plus élevé causé par le grand nombre d'évaluations du résidu élémentaire nécessaires.

La méthode du jacobien numérique approxime les termes de la matrice jacobienne élémentaire par la méthode de différences finies suivante :

$$\bar{\mathbf{J}}^{ij} = \frac{\partial F^i}{\partial x^j} \approx \frac{F^i(\dots, x^j + \delta x^j, \dots) - F^i(\dots, x^j, \dots)}{\delta x^j} \quad (3.27)$$

où les F^i et les x^j sont les composantes du résidu \mathbf{F} et du vecteur des inconnues respectivement et δx^j est une perturbation. Le calcul de la matrice jacobienne élémentaire requiert ainsi l'évaluation du résidu non perturbé $F^i(\dots, x^j, \dots)$ ainsi qu'une évaluation du résidu perturbé $F^i(\dots, x^j + \delta x^j, \dots)$ pour chacun des degrés de liberté élémentaires. À titre d'exemple, pour un écoulement bidimensionnel d'un fluide incompressible résolu avec des éléments de Taylor-Hood P_2-P_1 , seize³ évaluations du résidu élémentaire sont nécessaires pour calculer la matrice jacobienne élémentaire. Il est toutefois possible de se dispenser du calcul de certains termes de la matrice jacobienne, notamment lorsque les différents systèmes d'équations ne sont que partiellement couplés, comme c'est le cas entre le système d'équations de Navier-Stokes et le système d'équations issu de la méthode du pseudo-solide.

Le choix de la perturbation possède une importance non négligeable et celle-ci devrait être, en principe, la plus petite possible pour approximer au mieux les termes de la matrice jacobienne mais suffisamment grande pour être représentable et utilisable (en ne causant pas d'exceptions arithmétiques notamment). En pratique, la valeur de la perturbation est calculée au niveau élémentaire pour chaque variable à partir de sa norme L_1 (intégrale de la valeur absolue sur l'élément). Tous les degrés de liberté x^j qui correspondent à une variable dépendante notée u

3. 6 évaluations pour chacune des composantes de vitesse, 3 évaluations pour la pression et une évaluation du résidu non perturbé.

utiliseront ainsi la même perturbation calculée par la formule suivante :

$$\delta x^j = \sqrt{\varepsilon_{\text{float64}}} \max \left(1, \frac{\|u\|_{L_1}}{V_{\text{element}}} \right) \quad (3.28)$$

où $\varepsilon_{\text{float64}}$ est la précision de l'arithmétique en virgule flottante en double précision ($\varepsilon_{\text{float64}} \approx 10^{-16}$ pour une implémentation suivant la norme IEEE 754), $\|u\|_{L_1}$ est la norme L_1 de u et V_{element} est le volume de l'élément.

3.2 Estimation d'erreur spatiale et méthode d'adaptation de maillage

Le choix d'une discrétisation spatiale du domaine de calcul d'une simulation numérique est encore bien souvent laissé, au moins partiellement, à l'utilisateur. Bien qu'une discrétisation quelconque puisse en principe être utilisée, il est dans la majorité des cas nécessaire d'augmenter la densité d'éléments du maillage dans certaines régions du domaine afin notamment (1) d'améliorer la précision de la solution et de réduire l'erreur commise, (2) de résoudre plus précisément la géométrie du domaine (singularités géométriques, frontières ayant une forte courbure), (3) de capturer des phénomènes physiques ayant des petites échelles spatiales, et (4) de résoudre des problèmes de stabilité numérique. Au contraire, il est aussi possible et souhaitable de diminuer la densité d'éléments dans le reste du domaine si cela est possible pour, principalement, diminuer le coût de calcul engendré. On dit que l'on adapte le maillage au problème et on parle de maillage adapté puisque la densité d'éléments est locale et dépend du problème étudié et de sa solution.

Avec l'expérience, un utilisateur peut définir un maillage relativement bien adapté à de nombreux problèmes, en raffinant par exemple la discrétisation au niveau des couches limites et des jets en mécanique des fluides. Cependant, se reposer uniquement sur l'expertise de l'utilisateur a ses limites notamment puisque cela présuppose de connaître ou en tout cas d'avoir une bonne idée de la solution du problème *a priori*. Pour un problème stationnaire, il est possible de réaliser plusieurs simulations où le maillage est modifié itérativement pour tenir compte de la solution calculée précédemment mais on fait alors face à d'autres problématiques :

- Peut-on adapter le maillage en recourant à des méthodes ayant des fondations plus robustes (basées sur la physique du problème résolu et/ou sur des caractéristiques mathématiques) ?
- Est-il possible d'automatiser ce processus pour diminuer la charge de travail de l'utilisateur et le temps nécessaire à la réalisation d'une simulation ?
- Comment peut-on estimer la précision de la solution qui est obtenue si aucune solution exacte n'est disponible et sans réaliser d'étude de convergence en maillage ?

- Comment assurer que le maillage reste adapté tout au long d’une simulation instationnaire et à quel moment devient-il nécessaire de remailler le domaine ?

Afin de répondre à ces questions, de nombreuses méthodes d’adaptation de maillage ont été développées depuis le début de la démocratisation des méthodes de simulation numérique. Si des automatismes simples existent dans la plupart des maillages disponibles (notamment pour résoudre le problème de la représentation de la géométrie), certaines de ces méthodes permettent de réaliser une estimation de l’erreur commise sur la solution et se servent de cette information pour définir un maillage mieux adapté au problème étudié, le tout de façon (semi-)automatique. On parle d’estimation d’erreur *a posteriori* puisque l’erreur est calculée une fois que le problème a été résolu numériquement. Parmi toutes ces méthodes, nous nous servons de la méthode d’estimation d’erreur par reconstruction des gradients de Zienkiewicz et Zhu, dont l’idée générale a été présentée par Zienkiewicz et Zhu [33] et qui a notamment été améliorée dans des travaux subséquents [42, 43].

3.2.1 Estimateurs d’erreur *a posteriori* et normes d’erreur

L’erreur commise sur la solution obtenue par une simulation numérique e_q est simplement définie comme la différence entre la solution exacte q_{exa} et la solution calculée q_h :

$$e_q = q_{\text{exa}} - q_h \quad (3.29)$$

où q est une quantité extraite de la simulation (*e.g.* : le champ de vitesse, de température ou de pression, le flux de chaleur, le tenseur des contraintes visqueuses, ...) ici supposée scalaire mais qui peut être vectorielle ou tensorielle.

Si la solution exacte à un problème n’est pas connue, il est nécessaire de substituer à celle-ci une solution q^* plus précise que celle qui a été obtenue numériquement. Cette solution peut être obtenue, par exemple, par la méthode de reconstruction des gradients décrite dans la Section 3.2.2. On a alors accès à une estimation de l’erreur e_q^* :

$$e_q \approx e_q^* = q^* - q_h \quad (3.30)$$

qui permet de définir une mesure ou norme de l’erreur sur le domaine de calcul Ω . La norme d’erreur s’écrit de la façon suivante pour une quantité scalaire, vectorielle ou tensorielle

(d'ordre 2) respectivement :

$$\|e_q\|_{\Omega} = \left(\int_{\Omega} (q^* - q_h)^2 \, d\Omega \right)^{1/2} \quad (3.31a)$$

$$\|e_{\mathbf{q}}\|_{\Omega} = \left(\int_{\Omega} (\mathbf{q}^* - \mathbf{q}_h) \cdot (\mathbf{q}^* - \mathbf{q}_h) \, d\Omega \right)^{1/2} \quad (3.31b)$$

$$\|e_{\bar{\mathbf{q}}}\|_{\Omega} = \left(\int_{\Omega} (\bar{\mathbf{q}}^* - \bar{\mathbf{q}}_h) : (\bar{\mathbf{q}}^* - \bar{\mathbf{q}}_h) \, d\Omega \right)^{1/2} \quad (3.31c)$$

Ces normes d'erreur peuvent être calculées en se servant des principes de la méthode des éléments finis. Ainsi, les contributions aux intégrales de chaque élément (erreurs élémentaires) sont calculées en utilisant une quadrature de Gauss-Legendre et sont ensuite sommées pour obtenir l'erreur globale sur l'ensemble du domaine de calcul.

Tableau 3.1 Définition des normes d'erreur utilisées dans ces travaux. Des symboles † sont utilisés pour indiquer qu'une quantité associée à une norme d'erreur diffère d'un facteur multiplicatif de sa définition réelle.

Norme d'erreur et nom utilisé	Quantité associée et définition de q
$\ e_p\ _{\Omega}$ « Norme L^2 pression »	Champ de pression $q = p$
$\ e_T\ _{\Omega}$ « Norme thermique »	Flux de chaleur (†) $\mathbf{q} = \nabla T$
$\ e_{\mathbf{u}}\ _{\Omega}$ « Norme énergie »	Tenseur des contraintes visqueuses (†) $\bar{\mathbf{q}} = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \bar{\mathbf{I}}$
$\ e_{\boldsymbol{\chi}}\ _{\Omega}$ « Norme déformation »	Tenseur des déformations de Green-Lagrange $\bar{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} (\nabla \boldsymbol{\chi} + \nabla \boldsymbol{\chi}^T + \nabla \boldsymbol{\chi}^T \nabla \boldsymbol{\chi})$

Le choix de différentes quantités q donne accès à plusieurs normes d'erreur. On peut ainsi définir des normes d'erreur qui correspondent aux traditionnelles normes induites dans les espaces de Sobolev (normes L^2 et H^1 et semi-norme H^1 des inconnues du problème par exemple) mais aussi des normes liées à des quantités importantes pour le problème. Afin d'estimer l'erreur commise sur les différentes inconnues du problème (champ de vitesse \mathbf{u} , champs de pression et de température p et T et déplacements du pseudo-solide $\boldsymbol{\chi}$), nous utiliserons les normes d'erreur qui sont décrites dans le Tableau 3.1. On notera que les normes utilisées pour le champ de vitesse et le champ de température ne sont pas exactement le tenseur des contraintes visqueuses et le flux de chaleur mais que ces quantités ont été divisées par la viscosité et par la conductivité thermique respectivement. Ce choix a principalement été motivé par le fait que les problèmes polyphasiques font généralement intervenir des fluides

ayant des propriétés physiques très différentes.

L'erreur globale absolue qui est calculée est difficilement utilisable ainsi et on utilise plus généralement une mesure d'erreur relative η_q :

$$\eta_q = \frac{\|e_q\|_\Omega}{\|q\|_\Omega} \quad (3.32)$$

qui permet de quantifier le niveau d'erreur relativement à la norme de la quantité q utilisée. On peut ainsi donner une estimation de la précision globale de la simulation et donc quantifier l'incertitude sur les résultats. Cette estimation peut tout aussi bien être obtenue sur chaque élément Ω_i du maillage indépendamment si l'on souhaite obtenir une information locale.

3.2.2 Méthode de reconstruction des gradients

Présentation de la méthode

L'estimation q^* de la solution exacte est obtenue par la méthode de reconstruction des gradients de Zienkiewicz et Zhu. L'idée derrière cette méthode est relativement simple et se prête très bien à une utilisation dans le contexte de la simulation par la méthode des éléments finis. Elle possède de plus l'avantage d'être peu coûteuse puisqu'elle est appliquée localement et non globalement. Son développement part du constat suivant : l'approximation obtenue par la méthode des éléments finis est simplement continue dans le domaine (\mathcal{C}^0), ce qui constitue une limitation importante lorsque l'on s'intéresse à des quantités dérivées des gradients des variables dépendantes (*e.g.* : flux de chaleur, contraintes, ...). En effet, ces quantités sont (1) représentées par un polynôme d'un degré plus faible que les inconnues du problème, (2) continues sur chaque élément et discontinues aux bords des éléments, (3) peu précises là où l'on souhaite généralement connaître leurs valeurs (aux nœuds et sur le bord des éléments).

De nombreuses méthodes de reconstruction existent, toutes avec divers avantages et inconvénients. La méthode de Zienkiewicz et Zhu possède plusieurs atouts qui la rendent particulièrement intéressante :

- Elle est locale, ce qui rend son coût faible et son implémentation simple
- Elle est agnostique et générique, et peut donc être appliquée à n'importe quelle grandeur d'intérêt sans nécessiter de modification
- Elle converge asymptotiquement vers la solution exacte sous certaines conditions (voir notamment Ainsworth *et al.* [36])

Résumée simplement, la méthode de Zienkiewicz et Zhu consiste à créer, à chaque sommet

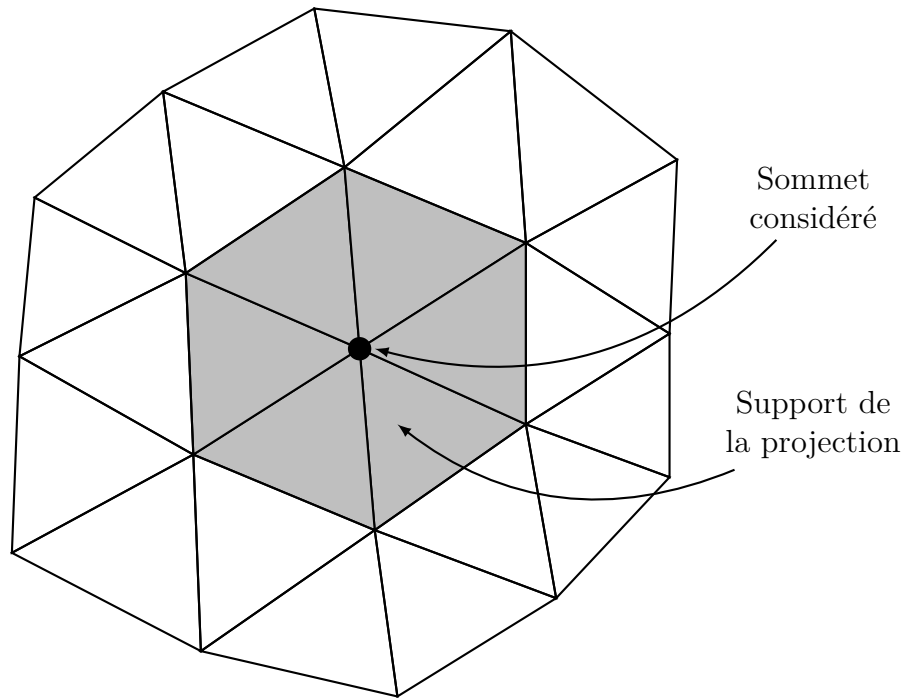


Figure 3.7 Illustration du support (*patch*) utilisé par la méthode de Zienkiewicz et Zhu pour un problème bidimensionnel

d'un élément du maillage, une reconstruction de la solution issue de la simulation (q_h) dans le but d'obtenir une solution globalement continue et plus précise q^* . Ces reconstructions sont effectuées sur un support ou « patch » constitué de l'ensemble des éléments connectés au sommet considéré et correspondent à une projection de la solution q_h sur une base polynômiale au sens des moindres carrés. La base polynômiale utilisée est généralement de degré supérieur ou égal à la base engendrée par les fonctions d'interpolation et nous utiliserons en pratique des bases polynômiales de degré trois pour ces travaux.

La Figure 3.7 présente à titre d'exemple le support utilisé pour un sommet d'un élément dans un problème bidimensionnel. De nombreuses variantes et modifications de ce processus ont été développées et on citera notamment la méthode de Wiberg et Li [47] dans laquelle les projections sont effectuées sur un support constitué de l'ensemble des éléments connectés à l'élément auquel on s'intéresse (et non plus un sommet).

La méthode de Zienkiewicz et Zhu est particulièrement bien adaptée à la reconstruction de quantités discontinues telles que les gradients des variables dépendantes mais ne permet pas de reconstruire de façon appropriée des quantités continues. Pour cette raison, la norme « L^2 pression » qui a été décrite dans le Tableau 3.1 ne sera pas utilisée en pratique pour adapter le maillage dans les simulations que nous effectuerons.

Formulation mathématique de la projection

La reconstruction de q_h sur le support employé pour un sommet d'un élément du maillage, q^* , est définie par l'expression suivante :

$$q^* = \mathbf{P} \mathbf{a}_q \quad (3.33)$$

où \mathbf{P} est la base polynômiale de degré p constituée de n termes indépendants qui est utilisée et $\mathbf{a}_q = (a_{q1}, \dots, a_{qn})^\top$ est un ensemble de n coefficients à déterminer. Pour des raisons de simplicité et d'efficacité, la base polynômiale employée correspond généralement aux différents monômes d'un polynôme de degré p à c variables (parmi x , y et z selon la dimension du problème). Ainsi, pour un problème unidimensionnel, la base polynômiale de degré p sera constituée des $p + 1$ termes suivants :

$$\mathbf{P} = (1, x, \dots, x^p) \quad (3.34)$$

tandis que les bases polynômiales de degrés un à trois pour un problème bidimensionnel utilisant des éléments triangulaires sont :

$$\mathbf{P} = (1, x, y) \quad (\text{Degré 1}) \quad (3.35a)$$

$$\mathbf{P} = (1, x, y, x^2, xy, y^2) \quad (\text{Degré 2}) \quad (3.35b)$$

$$\mathbf{P} = (1, x, y, x^2, xy, y^2, x^3, x^2y, xy^2, y^3) \quad (\text{Degré 3}) \quad (3.35c)$$

La détermination des inconnues \mathbf{a}_q est effectuée en cherchant à minimiser sur le support (noté Ω_s) l'écart entre q_h et q^* , calculé en norme L^2 (c'est-à-dire au sens des moindres carrés). On résout ainsi le problème de minimisation suivant, après avoir substitué q^* par sa définition (Équation (3.33)) :

$$\text{Minimiser } F(\mathbf{a}_q) = \int_{\Omega_s} (q_h(\mathbf{x}) - \mathbf{P}(\mathbf{x}) \mathbf{a}_q)^2 d\Omega \quad (3.36)$$

dont la résolution implique que \mathbf{a}_q est solution du problème de n équations à n inconnues :

$$\int_{\Omega_s} \mathbf{P}(\mathbf{x})^\top \mathbf{P}(\mathbf{x}) \mathbf{a}_q d\Omega = \int_{\Omega_s} \mathbf{P}(\mathbf{x})^\top q_h(\mathbf{x}) d\Omega \quad (3.37)$$

ou, sous forme matricielle $\overline{\overline{\mathbf{A}}} \mathbf{a}_q = \mathbf{b}$ avec

$$\overline{\overline{\mathbf{A}}} = \int_{\Omega_s} \mathbf{P}(\mathbf{x})^\top \mathbf{P}(\mathbf{x}) d\Omega \quad \mathbf{b} = \int_{\Omega_s} \mathbf{P}(\mathbf{x})^\top q_h(\mathbf{x}) d\Omega \quad (3.38)$$

La matrice $\overline{\mathbf{A}}$ est dense mais sa taille est généralement petite si la base polynômiale n'est pas d'un degré trop élevé. La détermination des inconnues est réalisée en utilisant une factorisation LU suivie d'une résolution du problème, de façon similaire à ce qui a été présenté dans la Section 3.1.5. On utilise cependant ici des algorithmes mieux adaptés à ce problème simple. La factorisation LU est l'étape la plus coûteuse du processus mais celle-ci est utilisée pour l'ensemble des projections à réaliser pour un sommet (seul le membre de droite est modifié lorsque la quantité d'intérêt q change).

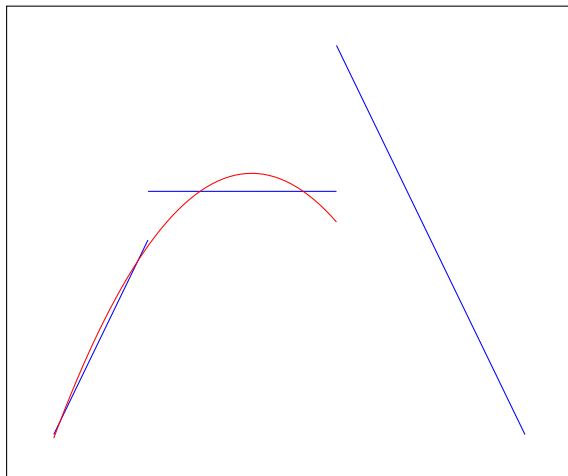
On procède finalement à l'extraction des valeurs nodales pour obtenir la reconstruction globale et continue q^* . Chaque projection locale est utilisée pour déterminer les valeurs de q^* aux nœuds qui sont situés à l'intérieur du support sur laquelle elle a été réalisée (les nœuds situés sur la frontière du support sont donc exclus). Pour le sommet autour duquel une projection a été réalisée, cette étape est très simple puisqu'il suffit de substituer ses coordonnées dans l'Équation (3.33). Les nœuds situés sur les arêtes ou à l'intérieur des éléments sont quant à eux généralement situés à l'intérieur des supports de plusieurs projections. Pour ces nœuds, on détermine les valeurs de q^* pour les différentes projections impliquées en procédant de la même façon que précédemment puis on calcule la moyenne de ces différentes valeurs.

La Figure 3.8 illustre la méthode de Zienkiewicz et Zhu sur un exemple simple unidimensionnel constitué d'éléments quadratiques (les dérivées sont donc linéaires sur chaque élément). La base polynômiale est ici de degré deux et les Figures 3.8a et 3.8b montrent les reconstructions locales de la solution pour deux sommets différents sur un support consisté des deux éléments respectivement connectés à chacun de ces sommets. Une fois toutes les projections réalisées, on extrait les valeurs nodales de la solution projetée, notamment en moyennant les contributions des différentes reconstructions aux nœuds qui ne sont pas des sommets des éléments (Figure 3.8c). La solution reconstruite, présentée sur la Figure 3.8d, est globalement continue et permet par la suite d'estimer l'erreur commise globalement et sur chaque élément.

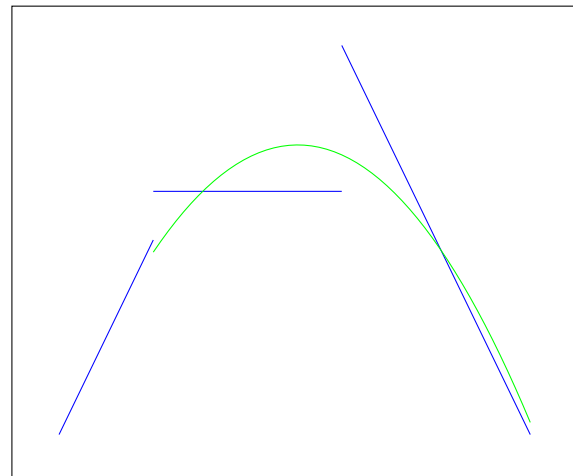
3.2.3 Stratégie d'adaptation de maillage

Objectifs de la stratégie d'adaptation

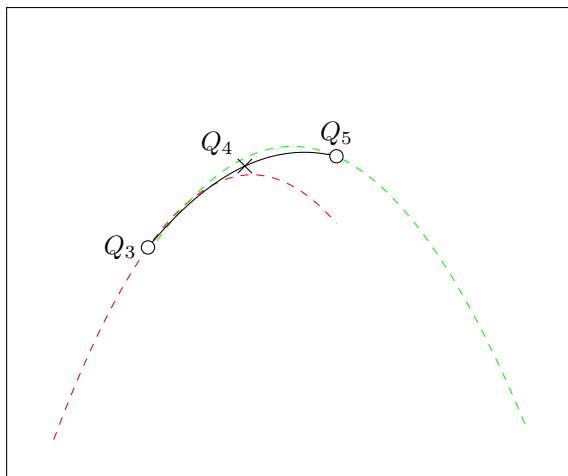
La stratégie d'adaptation de maillage mise en œuvre dans ces travaux repose sur deux principes clefs : (1) réduction du niveau global d'erreur commise sur la solution du problème, et (2) équidistribution de l'erreur dans les éléments du maillage. Ces deux principes traduisent respectivement le besoin que le nouveau maillage permette d'obtenir une solution plus précise que le maillage courant et la nécessité que tous les éléments du maillage contribuent de façon similaire à l'erreur commise. Le deuxième point est probablement le plus important



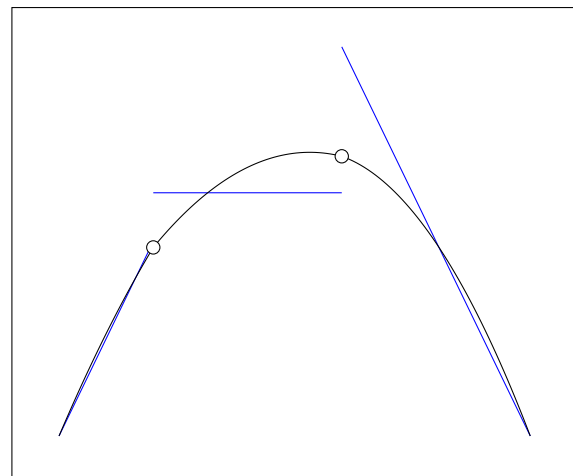
(a) Projection de la solution sur les éléments connectés à N_3 (E_1 et E_2)



(b) Projection de la solution sur les éléments connectés à N_5 (E_2 et E_3)



(c) Extraction des valeurs nodales de la solution projetée sur l'élément E_2



(d) Solution (continue) reconstruite à partir des projections nodales

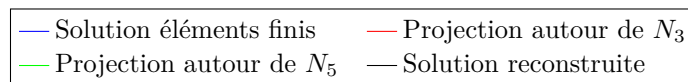
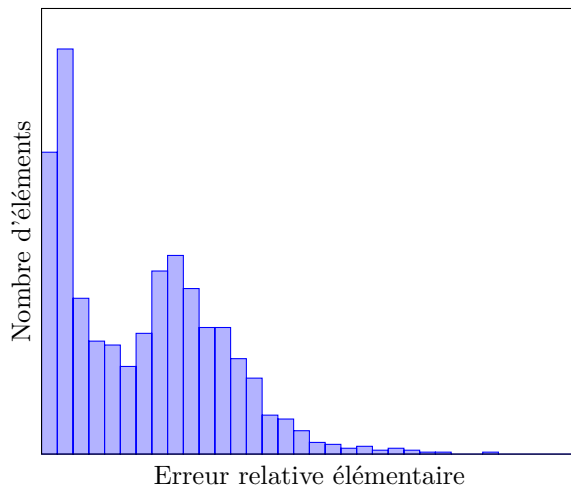


Figure 3.8 Reconstruction d'une solution à partir de projections nodales sur une base polynômiale de degré deux par la méthode de Zienkiewicz et Zhu illustrée sur un problème unidimensionnel

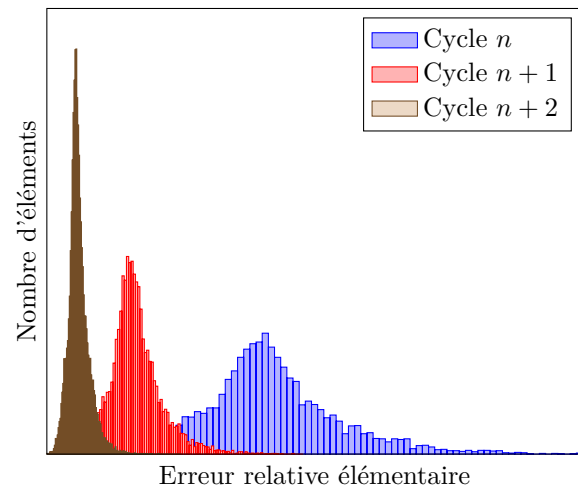
ici puisqu'il met en évidence un besoin d'adapter le maillage au problème et à sa solution, afin de réaliser des simulations précises tout en contrôlant le coût de calcul. Ainsi, la taille de chaque élément du maillage issu du processus d'adaptation n'est ni trop petite, ni trop grande, mais correspond à la taille optimale pour assurer un certain niveau d'erreur global équitablement réparti entre les éléments.

Cette stratégie d'adaptation possède une traduction en termes statistiques et on s'intéresse pour cela à la distribution d'erreur relative élémentaire dans le maillage. Le principe d'équidistribution de l'erreur signifie ainsi que l'on souhaite que celle-ci suive une loi normale d'espérance μ (correspondant au niveau moyen d'erreur relative) et d'écart-type σ faible (pour assurer que tous les éléments du maillage contribuent de manière similaire à l'erreur globale). La distribution réelle s'éloignera nécessairement de cette distribution idéale et il peut alors être intéressant d'étudier les paramètres de formes ou moments statistiques d'ordre trois et quatre : le coefficient d'asymétrie et le kurtosis. Le coefficient d'asymétrie est nul pour une loi normale et traduit de quel côté est décalée la distribution par rapport à la médiane (l'asymétrie est positive si la queue de la distribution est étalée vers la droite et négative si elle est étalée vers la gauche). Le kurtosis (du grec ancien signifiant courbure) quant à lui peut être utilisé pour mesurer indirectement l'aplatissement de la distribution, bien qu'il traduise en réalité la quantité de données aberrantes (*outliers*) dans le jeu de données.

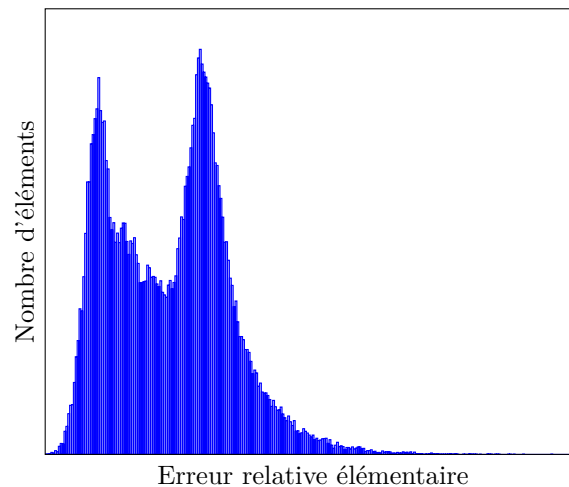
Des exemples d'histogrammes de l'erreur relative élémentaire calculée avec une norme quelconque sont présentés par la Figure 3.9. La Figure 3.9a montre la distribution d'erreur pour un maillage qui n'est pas encore adapté au problème. Ce maillage possède visiblement des éléments trop petits (générant très peu d'erreur), ce qui cause l'apparition d'un premier pic dans l'histogramme. Un exemple de l'effet du processus d'adaptation de maillage, réalisé en se servant de la même norme que celle utilisée pour calculer l'erreur, est illustré sur la Figure 3.9b pour trois cycles de calcul (le même problème est résolu sur des maillages générés successivement par adaptation). Les distributions d'erreur sont semblables à des lois normales ici et on observe une diminution de l'écart-type et du niveau d'erreur moyen au cours des cycles de raffinement comme attendu. Enfin, la Figure 3.9c présente la distribution d'erreur dans un maillage adapté selon deux normes d'erreur (dont celle utilisée pour calculer l'erreur). L'interaction des deux normes d'erreur fait apparaître un pic d'éléments sur lesquels l'erreur est faible, superposé à la loi normale attendue. La seconde norme d'erreur utilisée pour l'adaptation de maillage est responsable de ce pic. Ces éléments ont en effet une taille trop petite selon la première norme erreur mais ont une taille optimale selon la seconde. Le maillage ainsi généré est adapté de façon à bien représenter les différentes quantités d'intérêt pour le problème et la taille des éléments s'adapte aux besoins spécifiques de raffinement de chacune des mesures d'erreur employées. La distribution d'erreur calculée selon la seconde



(a) Distribution de l'erreur relative élémentaire pour un maillage qui n'est pas encore bien adapté au problème étudié



(b) Distributions de l'erreur relative élémentaire pour des maillages obtenus successivement par adaptation selon une seule norme d'erreur



(c) Distribution de l'erreur relative élémentaire pour un maillage adapté selon deux normes d'erreur

Figure 3.9 Histogrammes de l'erreur relative élémentaire calculée avec une norme d'erreur quelconque dans différents cas : (a) maillage non adapté, (b) cycles de raffinement successifs et (c) maillage adapté selon plusieurs normes d'erreur. Les échelles sont arbitraires et le nombre de classes utilisées est égal à la racine carrée du nombre d'éléments dans le maillage.

norme utilisée (non représentée) présente les mêmes caractéristiques.

Détermination de la taille des éléments

La taille optimale des éléments du nouveau maillage pour une norme d'erreur donnée est déterminée par le processus d'adaptation à partir de trois données :

- l'erreur commise globalement sur l'ensemble du domaine de calcul $\|e_q\|_\Omega$ (erreur globale)
- l'erreur commise localement sur chacun des éléments $\|e_q\|_{\Omega_i}$ (erreur locale ou élémentaire)
- le facteur de réduction d'erreur ξ , fourni par l'utilisateur

Le facteur de réduction d'erreur ξ permet de définir une valeur cible pour l'erreur globale, notée e_q^\otimes , qui correspond à une certaine fraction de l'erreur globale calculée :

$$e_q^\otimes = \xi \|e_q\|_\Omega \quad (3.39)$$

On définit alors une grandeur plus utile, la cible d'erreur moyenne $\overline{e_q^\otimes}$ afin de répondre au besoin d'équidistribution de l'erreur. La cible d'erreur moyenne correspond à l'erreur que l'on souhaite obtenir sur chacun des N_{elem} éléments du maillage et se déduit de la valeur cible de l'erreur globale :

$$\left(e_q^\otimes\right)^2 = \xi^2 \|e_q\|_\Omega^2 = N_{\text{elem}} \left(\frac{\xi^2}{N_{\text{elem}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{elem}}} \|e_q\|_{\Omega_i}^2 \right) = N_{\text{elem}} \left(\overline{e_q^\otimes}\right)^2 \quad (3.40)$$

ce qui nous permet d'exprimer la cible d'erreur moyenne en fonction de l'erreur globale et du facteur de réduction :

$$\overline{e_q^\otimes} = \frac{\xi \|e_q\|_\Omega}{\sqrt{N_{\text{elem}}}} \quad (3.41)$$

La taille optimale d'un élément i du maillage, δ_n^i , est obtenue à partir de la taille actuelle de cet élément, δ_0^i , et de l'erreur élémentaire sur cet élément par le biais de l'opérateur de transition θ :

$$\delta_n^i = \theta \left(\|e_q\|_{\Omega_i} \right) \delta_0^i \quad (3.42)$$

L'opérateur de transition détermine ainsi si la taille d'un élément doit diminuer ou augmenter. Sa définition est basée sur les propriétés théoriques de convergence des différentes normes d'erreur. Ainsi, si la norme employée possède un taux de convergence noté ϕ_q sur les éléments

qui constituent le maillage⁴, l'opérateur de transition est défini par l'expression :

$$\theta \left(\|e_q\|_{\Omega_i} \right) = \left(\frac{\overline{e_q^\otimes}}{\|e_q\|_{\Omega_i}} \right)^{\frac{1}{\phi_q}} = \left(\frac{\xi \|e_q\|_{\Omega}}{\sqrt{N_{\text{elem}}} \|e_q\|_{\Omega_i}} \right)^{\frac{1}{\phi_q}} \quad (3.43)$$

Chaque norme d'erreur utilisée pour l'adaptation de maillage fournit une taille optimale pour chacun des éléments du maillage. On affecte ensuite à chaque élément le minimum de ces différentes tailles optimales. On peut de plus imposer des valeurs minimales et maximales pour la taille des éléments afin d'éviter d'avoir des éléments trop grands ou trop petits dans le maillage. L'information de la taille des éléments est finalement transférée aux nœuds du maillage (en prenant la moyenne des tailles des éléments connectés à chaque nœud) afin de produire un champ continu représentant la taille d'élément requise dans le domaine, appelé maillage de fond. Ce maillage de fond peut alors être utilisé pour générer un nouveau maillage.

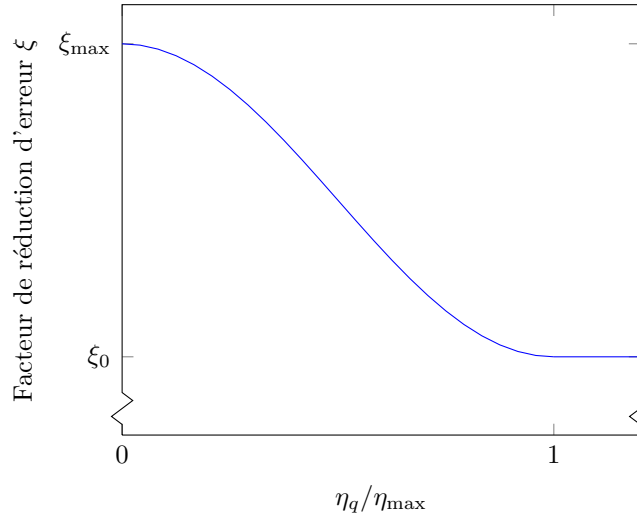


Figure 3.10 Valeurs prises par le facteur de réduction de l'erreur en fonction du rapport entre l'erreur relative η_q et la tolérance d'erreur relative η_{\max}

Sous cette forme, la stratégie d'adaptation de maillage fait systématiquement diminuer l'erreur moyenne et va donc raffiner de plus en plus le maillage. Il devient donc nécessaire de ne plus utiliser une valeur constante pour le facteur de réduction d'erreur mais une fonction. La valeur de ξ est une fonction du rapport de l'erreur relative η_q et d'une tolérance (valeur maximale) de l'erreur relative η_{\max} (on cherche à avoir $\eta_q < \eta_{\max}$). Si ce rapport est supérieur à un, il faut réduire l'erreur et on utilise alors la valeur fournie par l'utilisateur ξ_0 . Dans le cas contraire, ξ peut prendre des valeurs plus grandes, allant de ξ_0 à $\xi_{\max} = 1,1$. La définition

4. Le taux de convergence des normes est égal à deux sur les éléments finis employés pour l'ensemble des normes d'erreur qui seront utilisées dans ces travaux (voir Tableau 5.2).

du facteur de réduction d'erreur est la fonction continue et dérivable :

$$\xi(r) = \begin{cases} \xi_0 & \text{si } r \geq 1 \text{ ou si } \xi_0 \geq \xi_{\max} \\ \xi_{\max} - (\xi_{\max} - \xi_0) \sin^2 \frac{\pi}{2} r & \text{si } 0 < r < 1 \end{cases} \quad (3.44)$$

où $r = \eta_q / \eta_{\max}$. Une représentation graphique du facteur de réduction d'erreur en fonction de r est disponible sur la Figure 3.10. Cette formulation est particulièrement intéressante dans le cas où plusieurs normes d'erreur sont employées car le facteur de réduction d'erreur prend une valeur différente pour chaque norme d'erreur.

3.2.4 Adaptation de maillage pour les simulations instationnaires

L'adaptation de maillage est relativement simple à mettre en place pour des simulations stationnaires et permet de réaliser facilement et efficacement une étude de convergence en maillage. En revanche, il est plus difficile, voire impossible, d'avoir un maillage adapté tout au long d'une simulation instationnaire puisque les régions du domaine nécessitant d'être bien résolues sont rarement fixes dans le temps. Il est bien évidemment possible d'utiliser un maillage fixe dans lequel de grandes portions du domaine de calcul sont maillées finement mais ce choix induit un coût de calcul très élevé.

Cette problématique est bien illustrée par le développement d'une allée de tourbillons de Kármán dans le sillage d'un cylindre à faible nombre de Reynolds. Les tourbillons se détachant du cylindre présentent une forte vorticit  et nécessitent que le maillage soit localement raffiné afin de les représenter fidèlement. Ces tourbillons sont de plus transportés par l'écoulement moyen, ce qui impose soit d'utiliser un maillage très raffiné dans l'ensemble du sillage soit de les « suivre » d'une manière ou d'une autre.

Algorithme de la procédure de remaillage adaptatif pour les écoulements instationnaires

Afin de répondre à cette problématique, nous avons fait le choix de générer de nouveaux maillages au cours de la simulation en créant à chaque fois une nouvelle discrétisation de l'ensemble du domaine de calcul grâce à la méthode d'adaptation de maillage présentée précédemment. Chacun de ces maillages est adapté au problème au moment de la reprise du calcul puis pour un certain nombre d'itérations de la méthode d'intégration en temps. On réalise ainsi des cycles durant lesquels on enchaîne les étapes suivantes jusqu'à atteindre la fin de la simulation :

1. Génération d'un nouveau maillage à partir du maillage de fond \mathcal{M}_n ,

2. Transfert de la solution à t_{n-1} sur ce nouveau maillage,
3. Résolution du problème entre t_{n-1} et t_n , et
4. Estimation de l'erreur et génération du maillage de fond \mathcal{M}_{n+1}

En première approche, il est possible de simplement décider d'adapter régulièrement le maillage au problème étudié en déclenchant le processus de remaillage et de reprise à chaque fois que le temps simulé dépasse un multiple d'un intervalle fixe de temps ($t > n\Delta t_{\text{adapt}}$, avec $n \in \mathbb{N}^*$). L'approche que nous adoptons est légèrement plus complexe puisque l'estimation d'erreur est effectuée après chaque itération de la boucle d'intégration en temps. Cette information est alors utilisée par des critères d'arrêt afin de déterminer si et quand le maillage utilisé n'est plus adapté à la simulation et que continuer à l'utiliser conduirait à générer plus d'erreur que ce qui est admissible. Ces idées constituent les fondations sur lesquelles se base la procédure entièrement automatique de remaillage adaptatif pour les écoulements instationnaires présentée par Muller *et al.* [123] dont on se servira dans le cadre de ces travaux.

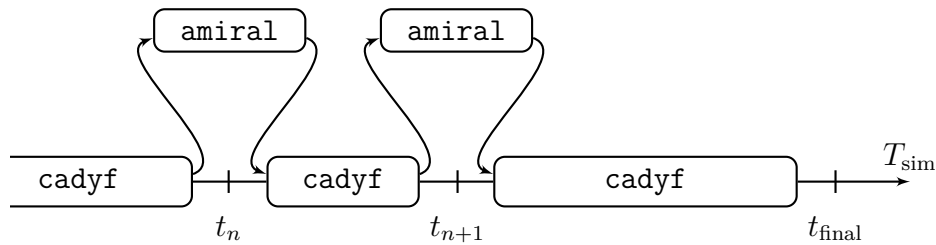


Figure 3.11 Illustration de l'enchaînement de l'exécution des programmes utilisés pour la procédure automatique de remaillage adaptatif pour les écoulements instationnaires

La procédure de remaillage adaptatif pour les écoulements instationnaires est implémentée dans notre cas dans deux programmes indépendants : `amiral` et `cadyf` (qui réalisent respectivement les Étapes 1 et 2 et les Étapes 3 et 4 présentées ci-dessus). La Figure 3.11 présente l'ordonnancement de l'exécution de ces programmes durant la simulation. Cet enchaînement est contrôlé par l'utilisateur et peut être automatisé par l'intermédiaire d'un script (script `shell` par exemple). Bien évidemment, rien n'empêcherait d'implémenter l'ensemble de cette procédure dans un unique programme qui combinerait alors les opérations faites par `amiral`, `cadyf` et le script utilisateur.

L'Algorithme 3.1 donne quelques détails supplémentaires concernant les opérations effectuées par les programmes `amiral` et `cadyf`. Les modifications apportées au programme `cadyf` afin de permettre d'utiliser les méthodes d'estimation d'erreur et de remaillage adaptatif dans le cadre des simulations instationnaires sont mises en évidence (en bleu).

Algorithme 3.1 : Présentation simplifiée en langage naturel structuré de l'intégration de la procédure de remaillage adaptatif pour les écoulements instationnaires dans l'architecture logicielle (ajouts et modifications en bleu)

```

// Boucle principale d'exécution décrite sur la Figure 3.11 (automatisable avec un
// script shell)
tant que simulation non terminée faire
  début amiral
    // Détaillé en pseudocode par l'Algorithme 3.3
    Lire les données d'entrée du problème
    Discrétiser le domaine de calcul
    Transférer la solution sur le nouveau maillage
    Écrire les données générées pour le cas de calcul
  fin
  début cadyf
    Lire les données générées pour le cas de calcul
    tant que temps final non atteint faire
      // Boucle d'intégration en temps (voir Algorithme 3.2)
      Résoudre le problème sur un pas de temps avec une méthode BDF
      Estimer l'erreur spatiale avec la méthode de Zienkiewicz et Zhu
      si critères d'arrêt non respectés alors
        // Adapter le maillage et sortir de la boucle d'intégration en temps
        Calculer la taille optimale des éléments et écrire le maillage de fond
        quitter boucle d'intégration en temps
      fin si
    fin tq
    Écrire la solution pour la reprise (état courant de l'intégrateur en temps)
  fin
fin tq

```

Critères d'arrêt utilisés pour déclencher le remaillage

Les estimateurs d'erreur *a posteriori* fournissent de nombreuses informations, locales (au niveau des éléments) et globales, sur l'erreur dont on se sert pour prendre la décision de stopper la simulation et générer un nouveau maillage avant de poursuivre. La prise de décision est implémentée sous la forme de critères d'arrêt qui prennent des formes variées et peuvent être utilisés en complément les uns des autres. On effectue une étape de remaillage si un au moins des critères d'arrêt n'est pas respecté.

La plupart des critères d'arrêt disponibles imposent des restrictions sur les valeurs que peuvent prendre les moments statistiques de la distribution d'erreur ou des grandeurs dérivées de celle-ci. Dans le cas où plusieurs normes d'erreur servent à piloter l'adaptation de maillage, ces critères doivent être vérifiés pour l'ensemble des distributions d'erreur disponibles. Bien entendu, d'autres critères indépendants de l'estimation d'erreur peuvent être utilisés (*e.g.* : un critère sur la déformation des éléments si la méthode du pseudo-solide est utilisée). Les critères disponibles dans notre formulation sont décrits en détails par Muller *et al.* [123].

Lorsque plusieurs normes d'erreur sont utilisées, comme cela sera le cas pour les études qui seront conduites par la suite, il devient impossible de se servir de certains des critères d'arrêts implémentés puisque la distribution d'erreur ne prend plus la forme d'une loi normale (voir Figure 3.9c). Ainsi, nous utiliserons pour ces travaux un unique critère d'arrêt qui permet d'assurer que l'erreur relative calculée pour chaque norme utilisée reste inférieure à une valeur maximale η_{\max} :

$$\eta_q < \eta_{\max} \quad (3.45)$$

Le choix de la tolérance d'erreur relative résulte d'un compromis entre la précision des résultats et le coût de calcul. Plus la tolérance est faible, plus les maillages générés comprendront d'éléments et (*a priori*) plus le nombre d'opérations de remaillage effectuées sera important. Au contraire, le choix d'une tolérance trop grande conduira à une accumulation d'erreur aggravée par l'intégration en temps qui peut conduire à l'obtention de résultats très éloignés de la réalité. Des valeurs de l'ordre de 1 % à 5 % sont généralement raisonnables pour η_{\max} .

3.3 Méthodes adaptatives pour l'intégration en temps

On présente ici les méthodes adaptatives employées conjointement avec les méthodes BDF pour effectuer l'intégration en temps du problème à résoudre. Ces méthodes adaptatives permettent de faire varier, de façon automatique, (1) le pas de temps (*h*-adaptativité) pour garantir que l'erreur commise par l'intégration en temps reste inférieure à un certain seuil

tout au long de la simulation, et (2) l'ordre de la méthode (p -adaptativité) afin d'assurer d'une part que la méthode d'intégration utilisée reste stable et d'autre part que la méthode la plus efficace numériquement pour atteindre la précision souhaitée est utilisée. On se sert pour cela respectivement d'une méthode d'estimation de l'erreur et d'un indicateur de stabilité. Ces méthodes et les aspects les plus importants de leur implémentation sont décrits ci-après. Quelques spécificités de l'implémentation, non mentionnées et/ou non utilisées par ces travaux, sont décrites avec de plus amples détails par Hay *et al.* [105] et Muller [113].

3.3.1 Algorithme adaptatif de la procédure d'intégration en temps

L'Algorithme 3.2 présente de manière simplifiée la procédure adaptative d'intégration en temps et décrit succinctement les différentes opérations effectuées au cours d'une itération de la boucle d'avancée en temps. On détermine, au début de chaque étape de la procédure, l'ordre de la méthode qui sera utilisée dans un premier temps puis la valeur du pas de temps à partir d'informations calculées lors de l'étape d'intégration précédente. Ces deux opérations sont indépendantes l'une de l'autre, ce qui permet de facilement contrôler quelles propriétés d'adaptativité de la procédure sont actives. Une fois que les caractéristiques de l'intégrateur temporel sont connues, on peut déterminer les coefficients de la méthode BDF utilisée puis effectuer la résolution du système couplé d'équations par la méthode de Newton-Raphson pour obtenir une nouvelle solution du problème. Cette solution sert alors à réaliser l'estimation *a posteriori* de l'erreur causée par l'intégration en temps ainsi que l'estimation de stabilité de la méthode BDF utilisée. Un mécanisme de rejet d'une étape permet ensuite de recommencer le calcul de l'étape courante avec une nouvelle valeur du pas de temps si l'erreur calculée est trop grande ou si la méthode de Newton-Raphson n'a pas pu converger. Si l'étape est au contraire acceptée, on effectue l'extraction des données demandées par l'utilisateur pour la visualisation des résultats de la simulation avant de commencer une nouvelle itération de la boucle d'intégration en temps.

3.3.2 Estimation de l'erreur due à l'intégration en temps

La méthode d'adaptation du pas de temps repose sur une estimation de l'erreur commise par le processus d'intégration en temps, laquelle est simplement définie comme la différence entre la solution exacte $\mathbf{u}(t_n)$ et la solution obtenue numériquement \mathbf{u}_n . Cette mesure de l'erreur permet de connaître l'erreur globale accumulée tout au long de l'intégration en temps mais son obtention est difficile voire impossible, pour diverses raisons (il serait notamment nécessaire de conserver en mémoire l'ensemble des informations concernant chaque étape d'intégration en temps effectuée). Les données qui sont conservées pour effectuer l'intégration

Algorithme 3.2 : Algorithme simplifié de la procédure adaptative d'intégration en temps (adapté de Hay *et al.* [105])

```

 $t_n \leftarrow t_{\text{initial}}$ 
tant que  $t_n < t_{\text{final}}$  faire
    // Calcul de l'ordre à utiliser grâce à l'indicateur de stabilité
     $p = \text{Selection\_Ordre\_BDF}(|\delta_{p-1}|, |\delta_p|, \dots, |\delta_{p+3}|)$ 
    // Calcul du pas de temps à utiliser grâce à l'estimation d'erreur
     $h_{n+1} = \text{Selection\_Pas\_BDF}(p, |e_{n+1}^*|)$ 
    // Mise à jour du temps de la prochaine solution
     $t_{n+1} \leftarrow t_n + h_{n+1}$ 

    label ResoudreProbleme

    // Calcul des coefficients de la méthode BDF (Équation (3.23))
     $\alpha_i = \text{Calcul\_Coeffs\_BDF}(p, h_{n+1}, h_n, \dots)$ 
    // Résolution du système matriciel par une méthode de Newton-Raphson
     $(\mathbf{u}_{n+1}, \text{conv}) = \text{Resoudre\_Ecoulement}()$ 

    // Estimation d'erreur et de stabilité
     $|e_{n+1}^*| = \text{Estimation\_Erreur\_BDF}(\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_{n-p})$ 
     $(|\delta_{p-1}|, |\delta_p|, \dots, |\delta_{p+3}|) = \text{Estimation\_Stabilite\_BDF}(\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_{n-p-2})$ 

    // Vérification que l'étape est acceptée avant de poursuivre l'intégration
    si  $\text{Rejeter\_Solution\_BDF}(|e_{n+1}^*|, \text{conv})$  alors
        // Si on a un problème de convergence, on tente d'abord de reprendre la
        // résolution du système puis on diminue progressivement le pas de temps en
        // cas d'échecs successifs.
        [...]
        // Si l'erreur est trop élevée, on calcule un nouveau pas de temps avec
        // l'estimation d'erreur (Selection_Pas_BDF).
        [...]
        // On refait la résolution du problème avec les nouveaux paramètres.
        aller à ResoudreProbleme
    fin si

    // Extraire la solution pour la visualisation
     $\text{Extraire\_Solution\_BDF}(t_{\text{extract}}, \mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_{n+1-p})$ 
fin tq

```

en temps permettent malgré tout d'estimer une erreur dite locale qui correspond à l'erreur générée par une itération de la méthode d'intégration en temps. On suppose pour cela que la solution exacte est connue à chacune des étapes d'intégration qui précèdent l'étape courante, ce qui signifie que l'erreur induite par ces étapes est nulle. Plusieurs estimateurs d'erreur locale existent (notamment la méthode de Milne) et nous nous servirons dans ces travaux de la méthode classique d'estimation de l'erreur de troncature locale.

L'estimation d'erreur joue dans l'algorithme adaptatif deux rôles complémentaires pour une itération de la boucle d'intégration en temps : (1) elle permet, au début de l'itération, de déterminer quelle valeur du pas de temps sera utilisée, et (2) elle guide, à la fin de l'itération, la décision d'accepter ou de rejeter la solution obtenue. Dans le cas où une solution est rejetée parce que l'erreur estimée est trop importante, l'intégration reprend avec un nouveau pas de temps, déterminé lui aussi grâce à l'estimation d'erreur.

Estimation d'erreur locale

L'erreur locale \mathbf{e}_{n+1} est définie comme la différence entre la solution exacte $\mathbf{u}(t_{n+1})$ et la solution obtenue numériquement \mathbf{u}_{n+1} :

$$\mathbf{e}_{n+1} = \mathbf{u}(t_{n+1}) - \mathbf{u}_{n+1} \quad (3.46)$$

On obtient une estimation de l'erreur locale en se servant de l'erreur de troncature locale, qui est définie comme l'erreur induite par le schéma numérique si la solution exacte y est substituée. La procédure que l'on suit est classiquement utilisée dans l'étude des propriétés numériques des schémas de discrétisation.

Notons par \mathcal{L} l'opérateur représentant le problème de Cauchy (Équation (3.15a)) :

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}(t)) = \frac{d\mathbf{u}}{dt} - f(t, \mathbf{u}(t)) \quad (3.47)$$

et par \mathcal{L}_h l'approximation de l'opérateur \mathcal{L} fournie par le schéma numérique, qui est obtenue en substituant aux termes \mathbf{u}_{n+1-i} la valeur de la fonction \mathbf{u} à $t = t_{n+1-i}$ (pour $i > 0$) dans l'Équation (3.23) :

$$\mathcal{L}_h(\mathbf{u}(t)) = \alpha_0 \mathbf{u}(t) + \sum_{i=1}^p \alpha_i \mathbf{u}(t_{n+1-i}) - f(t, \mathbf{u}(t)) \quad (3.48)$$

Soit \mathbf{u} une solution du problème de Cauchy. On a alors $\mathcal{L}(\mathbf{u}(t)) = 0$ et $\mathcal{L}_h(\mathbf{u}(t)) \neq 0$ puisque \mathcal{L}_h est une approximation de \mathcal{L} . Cet opérateur appliqué à $t = t_{n+1}$ correspond à l'erreur de

troncature locale \mathbf{d}_{n+1} (l'erreur créée par le schéma numérique appliqué à la solution exacte) :

$$\mathbf{d}_{n+1} = \mathcal{L}_h(\mathbf{u}(t_{n+1})) = \sum_{i=0}^p \alpha_i \mathbf{u}(t_{n+1} - H_i) - f(t_{n+1}, \mathbf{u}(t_{n+1})) \quad (3.49)$$

en notant $H_i = t_{n+1} - t_{n+1-i}$.

On exprime ensuite les différents termes $\mathbf{u}(t_{n+1} - H_i)$ sous la forme de séries de Taylor d'ordre quelconque q au point t_{n+1} :

$$\mathbf{u}(t_{n+1} - H_i) = \sum_{k=0}^q \frac{(-1)^k H_i^k}{k!} \mathbf{u}^{(k)}(t_{n+1}) + \mathcal{O}(H_i^{q+1}) \quad (3.50)$$

avec $\mathbf{u}^{(k)}$ la dérivée k -ième de \mathbf{u} . Ces expressions sont alors injectées dans l'Équation (3.49) :

$$\mathbf{d}_{n+1} = \sum_{i=0}^p \alpha_i \sum_{k=0}^q \frac{(-1)^k H_i^k}{k!} \mathbf{u}^{(k)}(t_{n+1}) - f(t_{n+1}, \mathbf{u}(t_{n+1})) \quad (+\mathcal{O}(H_i^{q+1})) \quad (3.51)$$

puis on réarrange ces termes et on utilise le fait que $f(t_{n+1}, \mathbf{u}(t_{n+1})) = \mathbf{u}^{(1)}(t_{n+1})$ si \mathbf{u} est une solution du problème (Équation (3.47)) pour obtenir une expression de l'erreur de troncature locale sous la forme :

$$\mathbf{d}_{n+1} = \sum_{k=0}^q C_k \mathbf{u}^{(k)}(t_{n+1}) \quad (+\mathcal{O}(H_i^{q+1})) \quad (3.52)$$

où les coefficients C_k sont définis par :

$$C_k = \frac{(-1)^k}{k!} \sum_{i=0}^p \alpha_i H_i^k - \delta_{1k} \quad (3.53)$$

avec δ_{1k} le symbole de Kronecker.

Une méthode BDF d'ordre p est construite de façon à être consistante et d'ordre p , ce qui signifie que les $p + 1$ premiers termes de l'approximation de l'erreur de troncature locale sont nuls (de C_0 à C_p). Le premier terme non nul de l'expression fournit alors une approximation de l'erreur de troncature :

$$\mathbf{d}_{n+1} \approx C_{p+1} \mathbf{u}^{(p+1)}(t_{n+1}) \quad (3.54)$$

En considérant que le pas de temps est constant et est noté h , il est possible de montrer que $C_{p+1} \propto h^p$, ce qui confirme que l'ordre de la méthode est bien égal à p .

L'erreur locale et l'erreur de troncature locale sont reliées en utilisant les Équations (3.23) et (3.49) et l'hypothèse que l'erreur locale est nulle pour les étapes qui précèdent l'étape courante, c'est-à-dire que $\mathbf{u}(t_{n+1-i}) = \mathbf{u}_{n+1-i}$ pour $i > 0$. En soustrayant ces deux équations,

on obtient alors la relation :

$$\alpha_0 (\mathbf{u}(t_{n+1}) - \mathbf{u}_{n+1}) = f(t_{n+1}, \mathbf{u}(t_{n+1})) - f(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}) + \mathbf{d}_{n+1} \quad (3.55)$$

On peut ensuite estimer la différence $f(t_{n+1}, \mathbf{u}(t_{n+1})) - f(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1})$ en utilisant le théorème des accroissements finis :

$$\exists \boldsymbol{\eta}_{n+1} \quad f(t_{n+1}, \mathbf{u}(t_{n+1})) - f(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}) = \frac{\partial f(t_{n+1}, \boldsymbol{\eta}_{n+1})}{\partial \mathbf{u}} (\mathbf{u}(t_{n+1}) - \mathbf{u}_{n+1}) \quad (3.56)$$

et l'expression de α_0 peut être obtenue à partir de l'Équation (3.22) :

$$\alpha_0 = \sum_{i=1}^p \frac{1}{t_{n+1} - t_{n+1-i}} = \frac{1}{h_{n+1}} \left(1 + \sum_{i=2}^p \frac{h_{n+1}}{H_i} \right) \quad (3.57)$$

ce qui mène, en multipliant de part et d'autre par h_{n+1} , à :

$$\left(\bar{\mathbf{I}} + h_{n+1} \left(\sum_{i=2}^p \frac{1}{H_i} \bar{\mathbf{I}} - \frac{\partial f(t_{n+1}, \boldsymbol{\eta}_{n+1})}{\partial \mathbf{u}} \right) \right) \mathbf{e}_{n+1} = h_{n+1} \mathbf{d}_{n+1} \quad (3.58)$$

Enfin, puisque f est nécessairement lipschitzienne pour la seconde variable, on peut majorer l'ensemble des termes en facteur de h_{n+1} dans le membre de gauche pour obtenir une relation entre l'erreur locale (Équation (3.46)) et l'erreur de troncature locale (Équation (3.49)) :

$$(1 + \mathcal{O}(h_{n+1})) |\mathbf{e}_{n+1}| = h_{n+1} |\mathbf{d}_{n+1}| \quad (3.59)$$

où la norme employée sera spécifiée par la suite. On notera que la constante de majoration induite par le terme $\mathcal{O}(h_{n+1})$ dans cette expression peut prendre des valeurs assez importantes, notamment pour les problèmes raides [53] et lorsque la méthode est utilisée hors de son domaine de stabilité [105].

De l'Équation (3.59) découle une estimation de l'erreur locale tendant asymptotiquement vers l'erreur locale exacte lorsque le pas de temps tend vers zéro. Cette erreur estimée est notée \mathbf{e}_{n+1}^* et s'exprime sous la forme suivante :

$$\mathbf{e}_{n+1} \approx \mathbf{e}_{n+1}^* = C_{p+1} h_{n+1} \mathbf{u}^{(p+1)}(t_{n+1}) \quad (3.60)$$

La dernière étape du processus consiste à évaluer la dérivée d'ordre $p+1$ de la fonction \mathbf{u} apparaissant dans l'expression de l'estimation de l'erreur locale en se servant des méthodes BDF. On utilise pour cela le fait que les différences divisées rétrogrades fournissent une

approximation des dérivées de \mathbf{u} , comme le fait Skelboe [23]. En effet, on peut remarquer que l'Équation (3.19) est une écriture en série de Taylor de $\mathbf{u}(t)$ et que les différences divisées tendent vers les dérivées successives de $\mathbf{u}(t)$ lorsque l'on fait tendre les pas de temps h_i vers zéro. Ainsi, on approxime la dérivée $\mathbf{u}^{(k)}(t_{n+1})$ en utilisant la différence divisée d'ordre k :

$$\mathbf{u}^{(k)}(t_{n+1}) \approx k! [\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_{n+1-k}] \quad (3.61)$$

Il est donc nécessaire de conserver en mémoire $p+2$ solutions (de \mathbf{u}_{n-p} à \mathbf{u}_{n+1}) afin d'estimer la dérivée d'ordre $p+1$ au premier ordre en h_{n+1} à partir de la formule BDF d'ordre $p+1$. L'estimation de l'erreur locale est alors exprimée sous la forme finale suivante :

$$\mathbf{e}_{n+1}^* = (-1)^{p+1} h_{n+1} \left(\sum_{i=0}^p \alpha_i H_i^{p+1} \right) [\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_{n-p}] \quad (3.62)$$

On notera qu'il est possible de calculer chacune des composantes de ce vecteur indépendamment des autres puisque les coefficients qui apparaissent dans cette expression ne dépendent pas de la solution. L'estimation d'erreur locale est donc peu coûteuse à réaliser et facilement parallélisable.

Calcul de la norme de l'erreur locale et tolérances d'erreur

Une mesure scalaire de l'erreur locale peut être obtenue en calculant une norme du vecteur \mathbf{e}_{n+1}^* qui sera notée $|e_{n+1}^*|_{\text{abs}}$ et appelée erreur locale absolue. On effectue pour cela le calcul de la moyenne quadratique de ses composantes (norme l^2 pondérée) :

$$|e_{n+1}^*|_{\text{abs}} = \left(\frac{1}{N_{\text{eq}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{eq}}} |(e_{n+1}^*)_i|^2 \right)^{1/2} \quad (3.63)$$

en notant N_{eq} la longueur du vecteur contenant l'estimation d'erreur locale et $(e_{n+1}^*)_i$ ses composantes. Il aurait bien sûr été possible d'employer une autre norme, telle que la norme l^∞ (maximum des valeurs absolues des composantes du vecteur).

On apporte à cette méthode deux modifications suggérées par Muller [113] qui permettent d'adresser des problèmes liés à l'homogénéité des variables et à leur ordre de grandeur. La première modification propose de calculer une valeur d'erreur absolue pour chacune des variables dépendantes q du problème dont la dérivée en temps $\frac{\partial q}{\partial t}$ apparaît dans les équations (dans notre cas : les composantes du vecteur vitesse u et v , la pression p si le fluide est compressible, la température T et les composantes des déplacements du pseudo-solide χ et η).

Le vecteur \mathbf{e}_{n+1}^* est pour cela réorganisé et séparé en plusieurs vecteurs $\mathbf{e}_{n+1,q}^*$ de longueur N_{eq}^q contenant uniquement les composantes correspondant aux degrés de liberté de la variable dépendante q (on a donc $N_{\text{eq}} = \sum N_{\text{eq}}^q$ et la concaténation des vecteurs $\mathbf{e}_{n+1,q}^*$ donne \mathbf{e}_{n+1}^* à une permutation de ses composantes près). L'erreur absolue pour chaque variable dépendante q , notée $|e_{n+1,q}^*|_{\text{abs}}$, est alors calculée avec l'Équation (3.63) appliquée au vecteur $\mathbf{e}_{n+1,q}^*$:

$$|e_{n+1,q}^*|_{\text{abs}} = \left(\frac{1}{N_{\text{eq}}^q} \sum_{i=1}^{N_{\text{eq}}^q} |(e_{n+1,q}^*)_i|^2 \right)^{1/2} \quad (3.64)$$

Avec cette modification, les opérations sont effectuées sur des grandeurs homogènes uniquement et il devient possible de contrôler indépendamment l'erreur en temps pour chacune des variables dépendantes du problème.

La seconde modification est nécessitée par le fait que les différentes variables dépendantes n'ont généralement pas le même ordre de grandeur. Il devient ainsi intéressant dans certains cas de considérer non plus une mesure absolue de l'erreur locale mais une mesure relative à la norme de la solution. On calcule la norme de la solution pour chaque variable dépendante q , notée $|u_{n+1,q}^*|$, en réalisant la même opération que pour le vecteur contenant l'estimation de l'erreur locale :

$$|u_{n+1,q}^*| = \left(\frac{1}{N_{\text{eq}}^q} \sum_{i=1}^{N_{\text{eq}}^q} |(u_{n+1,q}^*)_i|^2 \right)^{1/2} \quad (3.65)$$

ce qui permet par la suite de définir l'erreur relative ainsi :

$$|e_{n+1,q}^*|_{\text{rel}} = \frac{|e_{n+1,q}^*|_{\text{abs}}}{|u_{n+1,q}^*|} \quad (3.66)$$

Il est généralement plus pertinent d'utiliser l'erreur relative pour une méthode adaptative mais ce choix pose parfois des problèmes. Par exemple, une variable dont la valeur moyenne est petite peut avoir une erreur relative élevée tout en ayant une erreur absolue faible (ce qui indique qu'elle génère globalement peu d'erreur) et on préférera dans ce cas se servir de l'erreur absolue. Pour chaque variable dépendante q , on fait donc le choix de travailler avec l'erreur relative ou l'erreur absolue en fonction de la valeur de la norme de la solution $|u_{n+1,q}^*|$. En deçà d'un certain seuil noté $|u_{\text{seuil}}|$, fixé par défaut à 10^{-2} , l'erreur absolue est utilisée tandis que l'erreur relative est considérée dans le cas contraire.

3.3.3 Indicateur de stabilité pour les méthodes BDF

Les méthodes BDF ont l'avantage de posséder de très bonnes propriétés de stabilité mais les méthodes d'ordre supérieur ou égal à trois ne sont cependant que conditionnellement stables. Il est généralement possible de se placer dans la région de stabilité d'une méthode BDF (d'ordre strictement inférieur à sept) en réduisant tout simplement la taille du pas d'intégration. Si une grande précision est recherchée dans l'intégration en temps, on peut ainsi augmenter l'ordre de la méthode BDF utilisée, ce qui nécessitera de réduire (parfois fortement) la taille du pas de temps pour des raisons de stabilité uniquement. L'erreur commise sur la solution est alors réduite par le double effet de l'utilisation d'une méthode d'ordre élevée et de la réduction du pas de temps mais le coût de calcul augmente significativement en contrepartie.

En partant de ce constat, il devient nécessaire de définir des critères et une procédure qui permettent de choisir la méthode la mieux adaptée au problème à résoudre et à la précision recherchée sur la solution. L'idée ici est la suivante : on souhaite que (1) la méthode numérique choisie soit utilisée dans son domaine de stabilité, et que (2) la procédure d'intégration en temps ait le coût le plus faible possible. Pour résumer, et en simplifiant un peu les choses, l'adaptation d'ordre cherche à sélectionner une méthode stable qui permette d'utiliser le pas de temps le plus grand possible, tout en respectant les tolérances d'erreur spécifiées.

L'indicateur de stabilité doit, bien évidemment, détecter si la méthode utilisée est instable mais doit aussi indiquer le plus tôt possible que des instabilités numériques se développent. En effet, une méthode BDF instable aura tendance à générer beaucoup d'erreur, ce qui conduira l'algorithme à réduire la taille du pas de temps jusqu'à ce que l'intégrateur soit de nouveau utilisé dans son domaine de stabilité. Dans ces conditions, la taille du pas de temps contrôle alors la stabilité du schéma numérique et non plus sa précision, ce qui signifie que l'erreur est probablement très inférieure à la tolérance spécifiée par l'utilisateur. L'efficacité numérique de la procédure n'est alors potentiellement pas optimale puisqu'une méthode BDF d'ordre plus faible aurait peut-être permis d'utiliser des pas de temps plus grands tout en fournissant une solution ayant la précision demandée par l'utilisateur. Au contraire, il peut être intéressant d'utiliser une méthode d'ordre plus élevé (si celle-ci est stable) pour tirer profit de la réduction d'erreur et ainsi augmenter le pas de temps. Il est donc important de détecter rapidement le développement d'une instabilité et de pouvoir déterminer quelles méthodes sont stables.

Indicateur de stabilité

L'indicateur de stabilité qui a été développé pour notre algorithme adaptatif s'inspire d'une idée présentée par Shampine et Gordon [21]. Cette méthode tire profit du fait que les méthodes

BDF possèdent la propriété de « décroissance raide » (*stiff decay*), ce qui signifie qu'elles dissipent très rapidement les erreurs numériques lorsqu'elles sont utilisées dans leur domaine de stabilité. Les instabilités parasites générées par une méthode numérique instable prennent la forme d'oscillations rapides de la solution et ont donc une fréquence élevée, c'est pourquoi il est possible de les détecter en s'intéressant aux dérivées d'ordre élevé de la solution.

L'indicateur de stabilité utilise les termes d'ordre élevé présent dans l'expression de l'erreur de troncature locale (Équation (3.52)) pour déterminer si la méthode courante est stable. On forme pour cela une suite dont les termes notés $|\delta_k|$ sont obtenus en calculant une norme du vecteur $\boldsymbol{\delta}_k$ défini par :

$$\boldsymbol{\delta}_k = h_{n+1}^k \mathbf{u}^{(k)}(t_{n+1}) \approx h_{n+1}^k k! [\mathbf{u}_{n+1}, \dots, \mathbf{u}_{n+1-k}] \quad (3.67)$$

en utilisation l'approximation des dérivées de la fonction \mathbf{u} à partir des différences divisées (Équation (3.61)). Les termes de cette suite correspondent ainsi aux termes d'ordre élevé de la série de Taylor mis à la même échelle en faisant disparaître la constante d'erreur. Les termes $|\delta_k|$ sont par la suite obtenus en calculant la moyenne quadratique (voir Équation (3.63)) des vecteurs $\boldsymbol{\delta}_k$.

Pour une méthode stable, les termes $|\delta_k|$ forment une suite strictement décroissante tandis que certains termes d'ordre élevé deviennent plus grands que d'autres termes d'ordre plus faible lorsque l'on sort du domaine de stabilité. Dans la pratique, on considère qu'une méthode d'ordre p est stable si la condition suivante est respectée :

$$|\delta_{p-1}| > |\delta_p| > |\delta_{p+1}| > |\delta_{p+2}| > |\delta_{p+3}| \quad (3.68)$$

ce qui nécessite de conserver en mémoire trois solutions de plus que strictement nécessaire pour une méthode BDF d'ordre p afin de pouvoir estimer la dérivée d'ordre $p+3$ de la solution. En contrepartie, l'utilisation de termes d'ordre élevé permet de détecter très tôt les instabilités et évite donc que le pas de temps soit réduit afin de satisfaire la condition de stabilité.

L'implémentation que nous utilisons vérifie en réalité la condition de stabilité pour chacune des variables dépendantes q dont la dérivée en temps apparait dans les équations. On réalise pour cela le même travail que celui présenté dans la Section 3.3.2 en réorganisant et en séparant les composantes des vecteurs $\boldsymbol{\delta}_k$ pour former des vecteurs $\boldsymbol{\delta}_{k,q}$ dont la norme est notée $|\delta_{k,q}|$. En pratique donc, la condition de stabilité d'une méthode d'ordre p s'écrit :

$$\forall q \quad |\delta_{p-1,q}| > |\delta_{p,q}| > |\delta_{p+1,q}| > |\delta_{p+2,q}| > |\delta_{p+3,q}| \quad (3.69)$$

Variation maximale du pas de temps

L'emploi d'une méthode adaptative pour le pas d'intégration affecte de façon importante les propriétés de stabilité des schémas numériques et peut rendre une méthode numérique instable. De façon générale, une diminution de la taille du pas de temps aura pour effet de rendre la méthode plus stable qu'une méthode équivalente utilisant un pas de temps constant tandis qu'une augmentation de la taille du pas de temps aura l'effet inverse. Il est donc nécessaire pour des raisons de stabilité d'imposer des contraintes sur les valeurs prises par la variation du pas de temps ou *swing factor* s , défini par :

$$s = \frac{h_{n+1}}{h_n} \quad (3.70)$$

Tableau 3.2 Valeurs maximales admissibles pour la variation du pas de temps (*swing factor*) en fonction de l'ordre de la méthode BDF

Ordre p	2	3	4	5	6
Grigorieff [28]	2,414	1,127	1,019	1,003	1,000
Skelboe [23]	2,6	1,9	1,5	1,2	1,042

Le Tableau 3.2 contient les valeurs maximales admissibles données par deux publications pour la variation du pas de temps. Les valeurs fournies par Grigorieff [28] correspondent à des valeurs théoriques qui restent valides quel que soit le cas de figure, ce qui les rend particulièrement contraignantes. Skelboe [23] quant à lui propose des valeurs plus permissives qui favorisent tout de même la stabilité au détriment de l'efficacité numérique en faisant l'hypothèse que les cas les plus pathologiques ne seront pas rencontrés. La méthode d'adaptation du pas de temps doit pour cela être conçue de telle façon que les variations successives du pas de temps se fassent par petits incréments et ne soient pas brusques et erratiques. Bien que les valeurs de Skelboe [23] ne soient pas basées sur des arguments théoriques, ce choix a été retenu puisqu'il fonctionne très bien en pratique et permet de faire augmenter relativement rapidement le pas de temps (sauf pour la méthode d'ordre six, ce qui explique pourquoi cet ordre n'est pas disponible dans notre implémentation).

Bien qu'aucunes contraintes théoriques n'existent, nous imposons de plus, arbitrairement, une valeur maximale pour la variation du pas de temps égale à 5 pour la méthode BDF-1 et une valeur minimale égale à 0,2 pour tous les ordres.

3.3.4 Stratégie d'adaptation du pas de temps

La stratégie d'adaptation du pas de temps a pour objectif de rendre la procédure d'intégration en temps la plus efficace possible tout en fournissant des solutions précises. Pour atteindre ce double objectif, on tente de maintenir un niveau d'erreur constant au cours de la simulation, ce qui a pour effet d'équidistribuer l'erreur sur l'ensemble du domaine temporel. L'erreur due à l'intégration temporelle est ainsi contrôlée et quantifiée tout au long de la simulation et la discrétisation en temps est localement adaptée aux phénomènes qui se produisent. Résumée simplement, la méthode employée cherche à maximiser la taille du pas de temps utilisé pour chaque itération de la boucle d'intégration en temps (pour l'efficacité de la procédure) tout en maintenant l'erreur sous une certaine tolérance (pour la précision de la solution). L'erreur estimée pour chaque variable dépendante est utilisée par l'algorithme adaptatif à deux occasions : (1) à la fin de l'itération courante pour prendre la décision d'accepter ou de rejeter la solution obtenue, et (2) au début de l'itération suivante afin de déterminer la nouvelle valeur du pas de temps qui sera utilisée.

Le mécanisme d'acceptation ou de rejet d'une solution utilise l'erreur estimée à la fin d'une itération pour vérifier que la dernière solution obtenue est suffisamment précise. L'utilisateur peut définir deux tolérances d'erreur, ε_{abs} et ε_{rel} , correspondant respectivement à l'erreur absolue et à l'erreur relative, qui permettent de choisir d'accepter la solution ou non. Une étape de calcul est acceptée si et seulement si le critère prenant la forme générale $|e_{n+1,q}^*| < \varepsilon$ est vérifié pour chacune des variables dépendante q dont la dérivée en temps apparaît dans le problème. Plus précisément, le critère utilisé vérifie, en fonction de la valeur seuil $|u_{\text{seuil}}|$, que soit la tolérance d'erreur absolue soit la tolérance d'erreur relative est respectée :

$$\forall q \quad \begin{cases} |e_{n+1,q}^*|_{\text{abs}} < \varepsilon_{\text{abs}} & \text{si } |u_{n+1,q}^*| < |u_{\text{seuil}}| \\ |e_{n+1,q}^*|_{\text{rel}} < \varepsilon_{\text{rel}} & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.71)$$

Si la solution \mathbf{u}_{n+1} est acceptée, l'algorithme se poursuit en réalisant l'extraction des résultats pour la visualisation (voir les détails dans Hay *et al.* [105]) puis une nouvelle itération de la boucle d'intégration en temps débute. Si l'étape est au contraire rejetée, on effectue de nouveau le calcul de cette itération en utilisant une nouvelle valeur du pas de temps h_{n+1} afin de déterminer une nouvelle solution \mathbf{u}_{n+1} . La nouvelle valeur du pas de temps est déterminée par la même procédure que celle qui est utilisée au début d'une itération (voir ci-après) et on se sert dans ce cas de l'erreur estimée à la fin de l'étape rejetée pour guider la sélection du pas de temps. Si cela est nécessaire, on répète cette opération jusqu'à ce que l'étape soit acceptée. L'estimation d'erreur est par ailleurs utilisée dans un rôle prédictif au début d'une itération

de la boucle d'intégration en temps afin de déterminer *a priori* la nouvelle valeur du pas de temps h_{n+2} à utiliser (une fois que l'ordre p de la méthode à utiliser a été déterminé). On cherche pour cela la plus grande valeur du pas de temps qui permet d'assurer que tous les critères $|e_{n+2,q}^*| < \varepsilon$ sont vérifiés. Trouver la valeur optimale du pas de temps nécessite donc d'avoir accès à l'erreur estimée à la fin de la nouvelle étape mais celle-ci n'est cependant pas encore disponible. On fait l'hypothèse simplificatrice que l'erreur est constante au cours du temps, ce qui permet d'écrire que $|e_{n+2,q}^*| \approx |e_{n+1,q}^*|$ pour chaque variable dépendante q . En se servant des propriétés de convergence asymptotique de l'erreur pour une méthode d'ordre p ($|e_{n+1,q}^*| \approx Ch^{p+1}$), on sélectionne la valeur du nouveau pas de temps en utilisant l'expression suivante :

$$h_{n+2} = F_s h_{n+1} \min_q \left(\left(\frac{\varepsilon}{|e_{n+1,q}^*|} \right)^{\frac{1}{p+1}} \right) \quad (3.72)$$

où $F_s = 0,95$ est un facteur de sécurité qui permet d'augmenter la probabilité qu'une étape soit acceptée. La variable dépendante q qui produit le niveau d'erreur le plus important est celle qui détermine en fin de compte le pas de temps à utiliser. Cette valeur peut cependant être modifiée afin de respecter différentes contraintes imposées sur le pas de temps et sur le rapport entre les deux pas de temps h_{n+2}/h_{n+1} par l'utilisateur, pour des raisons de stabilité (voir Section 3.3.3) ou encore pour diminuer la probabilité qu'une étape soit rejetée plusieurs fois de suite.

3.3.5 Stratégie d'adaptation de l'ordre

L'algorithme d'adaptation de l'ordre de la méthode BDF utilisée est conçu de façon que les changements d'ordre se fassent progressivement et soient suffisamment espacés les uns des autres. Pour cela, l'implémentation permet de faire le choix, à chaque étape, entre (1) réduire l'ordre à $p - 1$, (2) conserver l'ordre courant p , et (3) augmenter l'ordre à $p + 1$. L'algorithme privilégie l'utilisation de méthodes d'ordre élevé lorsque cela est possible puisque celles-ci génèrent moins d'erreur et permettent donc d'utiliser des pas de temps plus grands que les méthodes d'ordre plus faible pour atteindre la précision recherchée.

Afin de déterminer si un changement d'ordre doit être effectué, on conserve en mémoire un historique des résultats de la condition de stabilité au cours des dix dernières étapes de calcul. Le choix d'augmenter, réduire ou conserver l'ordre courant est réalisé en fonction du pourcentage de tests positifs dans cet historique (noté ξ) et fait ainsi en sorte que la décision soit motivée par une quantité d'information suffisante, ce qui permet par ailleurs de ne pas faire varier trop brusquement l'ordre. En pratique deux tests sont effectués : un premier permettant de vérifier que la méthode courante d'ordre p est stable et un second qui

détermine si la méthode d'ordre supérieur $p + 1$ est stable. Trois cas de figure peuvent alors se présenter :

- Si $\xi \leq 50\%$, la méthode courante est instable et l'ordre est réduit de un
- Si $50\% < \xi < 100\%$, on conserve l'ordre courant
- Si $\xi = 100\%$, la méthode d'ordre $p + 1$ est stable et on augmente l'ordre de un

Les méthodes BDF-1 et BDF-2 ont la particularité d'être considérées comme incondi-
tionnellement stables dans notre algorithme et on utilise un seuil de 0% (au lieu de 50%) pour traduire cela.

Afin de ne pas prendre de décisions prématurées, l'ordre sélectionné ne peut pas diminuer (respectivement augmenter) pendant les vingt itérations de la boucle d'intégration en temps qui suivent une diminution (respectivement une augmentation) de l'ordre. Dans le cas d'une diminution de l'ordre causée par une méthode d'ordre p instable, cette temporisation permet d'avoir suffisamment de temps pour que la méthode d'ordre $p - 1$, qui est vraisemblablement stable pour la valeur du pas de temps sélectionnée, dissipe les oscillations à haute fréquence présentes dans la solution. En laissant de plus le temps à l'historique de stabilité d'être renouvelé, on évite de diminuer plusieurs fois de suite l'ordre utilisé sur la foi d'un indicateur de stabilité pour l'ordre $p - 1$ ayant pu être affecté par l'instabilité de la méthode d'ordre p . La temporisation est aussi nécessaire en cas d'augmentation de l'ordre puisque l'indicateur de stabilité ne permet pas de prédire si une méthode d'ordre supérieur est stable lorsque la méthode d'ordre courant est stable (il permet seulement de détecter que la méthode courante devient instable). Il est donc nécessaire d'observer le comportement de la méthode d'ordre $p + 1$ sur un temps suffisamment long pour s'assurer que celle-ci est stable avant de pouvoir prendre la décision d'augmenter à nouveau l'ordre. Rien n'empêche cependant de diminuer l'ordre quelques itérations après une augmentation si la méthode d'ordre $p + 1$ est instable.

Les toutes premières itérations d'une simulation sont traitées à l'aide de la méthode d'ordre un (puisque les méthodes BDF ne sont pas autodémarrantes) et en utilisant une valeur fournie par l'utilisateur pour le pas de temps tant que l'algorithme n'a pas accès à suffisamment d'information afin d'estimer l'erreur. Cette situation n'est pas idéale autant pour des raisons de précision (on ne peut ni estimer ni contrôler l'erreur) que d'efficacité numérique (à cause de l'utilisation d'une méthode d'ordre un). La procédure utilisée pour le démarrage d'une simulation a pour objectif de minimiser le nombre d'étapes de calcul réalisées en utilisant la méthode BDF-1 et de rendre disponible dès que possible l'estimation d'erreur. Pour la méthode d'ordre un, l'estimation d'erreur peut être effectuée à la fin de la deuxième itération (qui peut donc être rejetée pour des raisons de précision). L'estimation d'erreur pour l'intégrateur d'ordre deux est quant à elle disponible à la fin de la troisième itération. Puisque l'on considère

que cette méthode est inconditionnellement stable, on incrémente immédiatement l'ordre de la méthode utilisée et le pas de temps peut être déterminé de façon adaptative. La quatrième itération est donc la première à être effectuée avec une méthode BDF-2 et l'adaptation du pas de temps est disponible dès la seconde itération. L'intégration en temps est donc effectuée au moins à l'ordre deux tout au long de la simulation, sauf pour les trois premières itérations et possiblement lorsqu'une étape est rejetée à de multiples reprises.

3.4 Algorithme de remaillage par front mobile pour les problèmes instationnaires avec frontières déformables

La procédure d'adaptation de maillage pour les simulations instationnaires décrite dans la Section 3.2.4 nécessite qu'une nouvelle discrétisation du domaine de calcul soit générée à chaque fois que l'algorithme détecte que l'erreur spatiale estimée est trop élevée. On arrête à ce moment l'intégration en temps pour passer la main au programme `amiral` puis on reprend l'intégration en temps avec le nouveau maillage. `amiral` se charge de générer un nouveau maillage et doit aussi « transférer la solution », c'est-à-dire assurer la cohérence et la continuité des données entre le moment où l'intégration en temps est stoppée et celui où celle-ci reprend. S'il est évident que la solution du problème au moment où la simulation est arrêtée doit être transférée de l'ancien maillage vers le nouveau maillage de façon efficace et précise, il est également important de (1) sauvegarder les informations qui concernent l'état de l'intégrateur temporel, et (2) transférer l'ensemble des solutions utilisées par la méthode BDF sur le nouveau maillage afin de pouvoir reprendre l'intégration en temps en utilisant immédiatement les capacités adaptatives de l'algorithme. Notons toutefois qu'au moment de la reprise du calcul, l'utilisation d'un maillage différent et les erreurs de transfert font généralement chuter le pas de temps et peuvent conduire l'algorithme à diminuer l'ordre si des méthodes d'ordre supérieur ou égal à trois sont utilisées.

La procédure permettant de générer un cas de calcul complet est décrite de façon simplifiée par l'Algorithme 3.3. Le logiciel `amiral` utilise, lorsque le domaine est remaillé afin d'effectuer une reprise du calcul sur une nouvelle discrétisation, (1) un fichier d'entrée fourni par l'utilisateur qui décrit le problème, (2) un maillage de fond généré par la méthode d'adaptation de maillage qui donne la distribution de taille des éléments dans le domaine, et (3) l'ensemble des solutions du problème qui ont été conservées en mémoire pour réaliser l'intégration en temps. Le nouveau maillage est généré en réalisant dans un premier temps une discrétisation des frontières et des interfaces par une méthode d'échantillonnage adaptatif des courbes puis en discrétisant dans un second temps le domaine de calcul avec un algorithme de maillage par front mobile (*advancing-front method*). La solution est ensuite transférée d'un maillage à

Algorithme 3.3 : Algorithme simplifié décrivant les étapes qui permettent de générer un cas de calcul complet avec `amiral`

```

début amiral
  // Lire les données d'entrée
  defProb = Lire_Definition_Probleme ()
  backMsh = Lire_Maillage_Fond ()
  origSol = Lire_Solution ()

  // Discrétisation des frontières par échantillonnage adaptatif
  bndMsh = Discretiser_Frontieres (backMsh)
  // Discrétisation du domaine avec une méthode de maillage par front mobile
  frontMsh = Discretiser_Domaine (backMsh, bndMsh)

  // Transfert de la solution par interpolation quadratique
  interpSol = Interpoler_Solution (backMsh, frontMsh, origSol)

  // Écrire les données générées pour le cas de calcul
  Ecrire_Donnees_Probleme (defProb, frontMsh, interpSol)
fin

```

l'autre en interpolant la solution qui est connue sur l'ancien maillage aux nœuds du nouveau maillage. On écrit pour finir les fichiers permettant de reprendre la simulation là où on l'avait arrêtée.

Le remaillage complet d'un domaine dont les frontières sont immobiles et indéformables et qui ne contient pas d'interfaces est relativement trivial et ne nécessite aucune modification de l'algorithme de maillage existant. Pour ces cas, chaque génération d'un nouveau maillage utilise un maillage de fond différent mais la procédure qui a servi à générer le maillage initial et la définition d'origine de la géométrie restent quant à elles inchangées. La principale difficulté consiste à effectuer le transfert de la solution sur le nouveau maillage en minimisant l'erreur de transfert. Au contraire, dans le cas des simulations instationnaires qui contiennent des interfaces séparant des fluides non miscibles ou dans lesquelles les frontières se déforment ou se déplacent au cours du temps (*e.g.* : interactions fluide-structure, mécanisme mobile, ...), des modifications de l'algorithme sont requises afin d'automatiser le processus de remaillage. Une difficulté majeure est que les définitions géométriques des frontières du domaine et des interfaces doivent être modifiées afin de les faire coïncider avec leurs positions au moment où la simulation a été stoppée. L'algorithme développé a été conçu dans le but de minimiser les modifications apportées à la procédure d'origine.

3.4.1 Algorithme de maillage par front mobile

L'algorithme utilisé pour effectuer la génération de maillage de façon automatique est basé sur les travaux publiés par Peraire *et al.* [32]. Cette méthode est dédiée aux domaines bidimensionnels mais a été par la suite étendue afin de pouvoir générer des maillages pour les domaines tridimensionnels par Peraire *et al.* [40]. Son fonctionnement repose sur la discrétisation des différentes entités géométriques qui décrivent le domaine de calcul en simplexes, en traitant les entités par ordre croissant de dimension. Ainsi, on discrétise d'abord les courbes en segments puis les surfaces avec des triangles (et éventuellement les volumes avec des tétraèdres) pour obtenir un maillage du domaine. L'algorithme détermine quelle taille donner aux différents éléments en utilisant l'information contenue dans le maillage de fond. Dans notre implémentation, ce maillage de fond est soit fourni par l'utilisateur (pour démarrer la simulation par exemple), soit obtenu à l'aide de la méthode d'adaptation de maillage (voir Section 3.2.3).

Maillage de fond

Le maillage de fond contient une représentation, sur une discrétisation arbitraire couvrant tout le domaine de calcul, des informations nécessaires pour générer le maillage. En pratique, il contient une représentation discrète (1) d'un champ scalaire δ qui donne la taille des éléments, (2) d'un champ scalaire s qui précise l'étirement des éléments, et (3) d'un champ vectoriel α qui indique la direction dans laquelle l'élément est étiré. Ces paramètres permettent de construire des maillages anisotropes en contrôlant localement les caractéristiques des éléments générés. Un élément ainsi créé aura une taille caractéristique $s\delta$ dans la direction du vecteur α et δ dans la direction normale à α .

L'information contenue dans le maillage de fond est obtenue en tout point du domaine en interpolant linéairement les valeurs des paramètres au point d'intérêt. On utilise un algorithme de recherche par arbre quaternaire (*quadtree*) pour trouver rapidement dans quel élément du maillage de fond se trouvent les coordonnées du point recherché. Les valeurs des paramètres interpolées au point d'intérêt sont alors obtenues en utilisant les informations aux nœuds du maillage de fond, les coordonnées barycentriques du point dans l'élément et les fonctions d'interpolation de l'élément. L'interpolation est dite linéaire puisque les éléments du maillage de fond sont des éléments triangulaires de type P_1 , ce qui permet d'assurer que les valeurs interpolées de δ et s ne peuvent pas être négatives (si les valeurs nodales sont toutes positives).

Bien que l'algorithme de génération de maillage implémenté permette de créer des maillages dont les éléments sont étirés, la procédure d'adaptation de maillage ne permet pas, dans sa

version actuelle, de réaliser une adaptation anisotrope. En pratique donc, les maillages de fond qui seront générés dans ces travaux ne contiendront que la donnée de la taille des éléments fournie par le champ δ et les deux autres champs seront constants dans le domaine ($s = 1$ et α quelconque de norme unitaire).

Discrétisation des courbes

La première étape de l'algorithme de maillage consiste à discrétiser les entités géométriques de dimension un, c'est-à-dire les courbes. En deux dimensions, la frontière du domaine de calcul est représentée par un ou plusieurs ensembles fermés de courbes orientées (*e.g.* : un cercle, quatre segments qui forment un rectangle, un profil d'aile NACA, ...) qui définissent une région connexe (et bornée) de l'espace à discrétiser. L'orientation d'une courbe est choisie de façon que la région à mailler se trouve « à la gauche » de la courbe lorsque l'on parcourt celle-ci. Chacune des portions de ces ensembles de courbes est une entité géométrique de base⁵, dont la longueur L est connue analytiquement, qui peut être représentée sous une forme paramétrique où le paramètre t varie, de façon générale, entre deux entiers naturels t_{\min} et t_{\max} .

La discrétisation de chaque courbe est réalisée dans l'espace du paramètre t puis on détermine les coordonnées cartésiennes des points générés grâce à la représentation paramétrique de la courbe, donnée sous la forme de fonctions $x(t)$ et $y(t)$. L'algorithme de discrétisation appliqué à une courbe est divisé en deux étapes : on crée dans un premier temps un échantillonnage adaptatif de la courbe dont on se sert dans un second temps pour déterminer le nombre de points N_c à utiliser pour la discrétiser ainsi que leurs coordonnées paramétriques.

L'échantillonnage adaptatif crée tout simplement une première discrétisation d'une courbe contenant N_s points. Le nombre de points N_c à placer pour discrétiser la courbe est évalué en estimant l'intégrale suivante par la méthode des trapèzes :

$$N_c = \int_{t_{\min}}^{t_{\max}} \frac{1}{\delta(s)} ds \approx \sum_{i=1}^{N_s-1} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\delta_i} + \frac{1}{\delta_{i+1}} \right) (t_{i+1} - t_i) \quad (3.73)$$

où δ_i et t_i sont respectivement la taille de maille (déterminée avec les valeurs interpolées dans le maillage de fond) et la valeur du paramètre pour le point d'échantillonnage i . Les points d'échantillonnage sont placés en estimant puis en corrigeant de façon itérative la valeur de leur coordonnée t_i en fonction de la valeur de δ_i et de la longueur de la courbe L .

5. Parmi les possibilités suivantes : un arc linéaire (segment de droite), un arc quadratique (arc de parabole), un cercle, un arc de cercle, une spline naturelle, une spline périodique ou un profil NACA à quatre ou cinq chiffres.

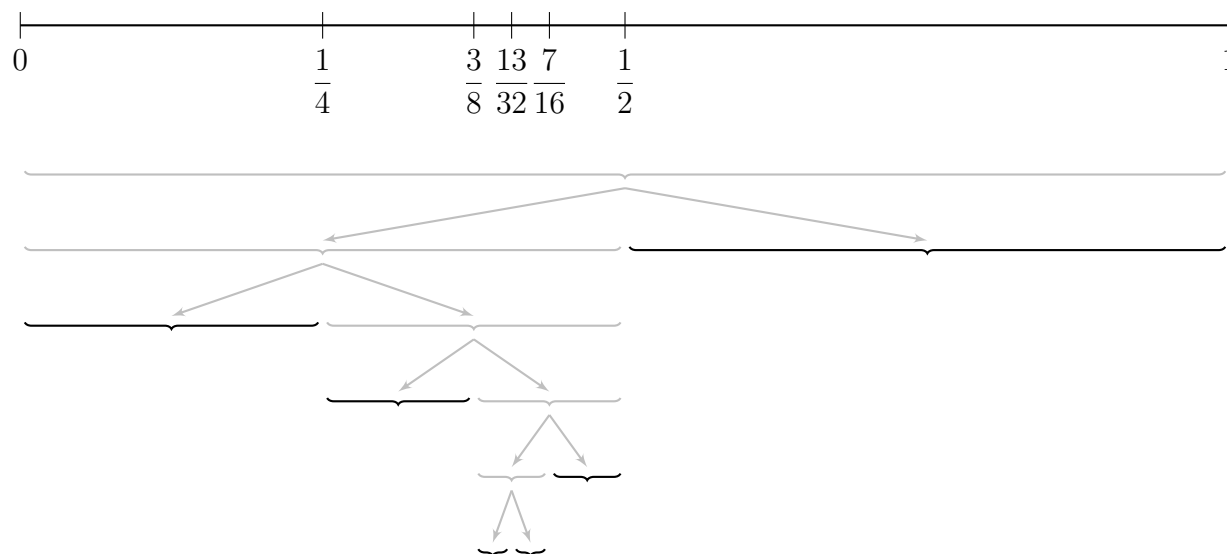


Figure 3.12 Illustration de la discrétisation générée par l’algorithme d’échantillonnage adaptatif dans l’espace du paramètre t pour une courbe et de l’arbre binaire représentant cette discrétisation. Les nœuds et les feuilles terminales de l’arbre sont respectivement colorés en gris clair et en noir.

L’algorithme est similaire à celui permettant de générer des maillages raffinés par subdivision successive de type *quadtree* ou *octree*, bien que l’implémentation ne soit pas réalisée sous cette forme. En adoptant ce point de vue, la courbe à discrétiser est représentée par un arbre binaire dont les feuilles correspondent à un segment de celle-ci. L’algorithme d’échantillonnage adaptatif génère cet arbre en effectuant la division de chaque feuille non traitée en deux nouveaux segments (feuilles) de même longueur de façon itérative jusqu’à ce que la précision recherchée sur le segment courant soit atteinte puis traite la feuille suivante, et ainsi de suite. Les coordonnées des points d’échantillonnage prennent ainsi toujours la forme $t_i = k/2^n$ avec k et n des entiers naturels (n représente la profondeur dans l’arbre, c’est-à-dire le nombre de subdivisions de la courbe pour le point considéré). La condition d’arrêt du raffinement vérifie que n est suffisamment grand pour que $2L/\delta_i \leq 2^n$. La Figure 3.12 illustre la discrétisation générée par l’algorithme d’échantillonnage adaptatif et présente l’arbre binaire qui équivaut à cette discrétisation.

La seconde étape se sert ensuite de l’échantillonnage réalisé pour calculer le nombre de points à générer N_c (en prenant la partie entière de la valeur obtenue avec l’Équation (3.73)) puis pour positionner les points dans l’espace du paramètre. Le point à générer N est placé à la

valeur du paramètre t_N qui vérifie :

$$N = \int_{t_{\min}}^{t_N} \frac{1}{\delta(s)} ds \quad (3.74)$$

En pratique, on estime ici aussi l'intégrale par la méthode des trapèzes en additionnant au fur et à mesure les termes de la somme jusqu'à ce que l'on trouve le segment M de l'échantillonnage qui contient le point N , ce qui revient à chercher M tel que :

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{M-1} \frac{C}{2} \left(\frac{1}{\delta_i} + \frac{1}{\delta_{i+1}} \right) (t_{i+1} - t_i)}_{\mathcal{I}_M} \leq N \leq \underbrace{\sum_{i=1}^M \frac{C}{2} \left(\frac{1}{\delta_i} + \frac{1}{\delta_{i+1}} \right) (t_{i+1} - t_i)}_{\mathcal{I}_{M+1}} \quad (3.75)$$

où $C = \lceil N_c \rceil / N_c$ est un facteur de correction dû au fait que N_c n'est pas une valeur entière. La valeur de t_N (comprise dans l'intervalle $[t_M, t_{M+1}]$) est enfin obtenue en réalisant une interpolation linéaire :

$$t_N = t_M + \frac{t_{M+1} - t_M}{\mathcal{I}_{M+1} - \mathcal{I}_M} (N - \mathcal{I}_M) \quad (3.76)$$

À ce stade, la position des points qui constituent la discrétisation de la courbe est connue dans l'espace du paramètre et il est alors simple d'obtenir les coordonnées des points dans l'espace cartésien ainsi qu'un maillage, constitué de segments, de la courbe. Une fois toutes les courbes discrétisées et leurs maillages générés, on passe à la discrétisation des surfaces.

Discrétisation des surfaces

La seconde étape de l'algorithme de maillage effectue la discrétisation des surfaces (entités géométriques de dimension deux). Dans notre cas où seules des simulations en deux dimensions sont considérées, les surfaces (planes) représentent les diverses portions du domaine de calcul et on associe à chacune des propriétés matérielles ainsi qu'un ensemble d'équations décrivant le comportement du matériau. La génération d'une discrétisation en éléments triangulaires est effectuée par une méthode de maillage par front mobile (*advancing-front method*) similaire à celle de Lo [30]. La méthode traite chaque surface du domaine de calcul séparément et indépendamment.

Le front mobile est initialement constitué des segments du maillage des courbes qui délimitent la surface considérée. Ces segments, générés lors de l'étape précédente de l'algorithme de maillage, forment des boucles fermées et orientées, comme les courbes qu'ils représentent. On génère alors le maillage d'une surface en répétant les opérations suivantes jusqu'à ce qu'il ne reste plus d'éléments dans le front :

1. Sélectionner le segment le plus court du front
2. Déterminer les paramètres δ , s et α pour le triangle à générer à l'aide des informations contenues dans le maillage de fond
3. Générer un triangle ayant comme base ce segment (soit en créant un nouveau nœud soit en utilisant un nœud déjà existant pour le troisième sommet)
4. Ajouter le nouvel élément au maillage et retirer le segment utilisé du front
5. Ajouter au front les arêtes du nouvel élément qui ne sont pas partagées avec un autre élément

La génération de maillage par front mobile consiste donc à générer des triangles à partir du bord du domaine non discrétisé jusqu'à complètement couvrir la surface à mailler. Il est possible de faire l'analogie entre cette méthode et un processus physique continu : la solidification d'un liquide. Le front de solidification est assimilable au front mobile et la partie du domaine contenant le liquide correspond à la portion du domaine qui n'est pas encore discrétisée. Lorsque le liquide se refroidit, le front de solidification se propage dans le domaine liquide jusqu'à ce que tout le matériau soit à l'état solide. Peraire *et al.* [32] contient plus de détails concernant l'implémentation de l'algorithme pour le lecteur intéressé.

Lissage du maillage et post-traitement des éléments

Les maillages générés par la méthode de maillage par front mobile contiennent parfois des éléments de faible qualité, notamment des éléments qui ont un étirement très important. On effectue alors trois traitements successifs pour améliorer la qualité générale du maillage et des éléments qui le composent :

1. On cherche les nœuds situés à l'intérieur du domaine de calcul et connectés à exactement trois triangles puis on fusionne ces triangles pour n'en former qu'un
2. On altère la connectivité de certains éléments situés près des frontières du domaine pour faire en sorte que les trois sommets d'un même élément ne se trouvent jamais tous à la fois sur des courbes
3. On effectue un ou plusieurs passages d'une méthode de lissage laplacien (*Laplacian smoothing*) qui remplace simultanément l'ensemble des points du maillage afin de le régulariser

Le maillage de triangles qui a été généré et traité est pour le moment constitué de triangles à trois nœuds (éléments linéaires ou P_1). Si des éléments quadratiques ou P_2 (triangles à six nœuds) sont souhaités, on ajoute par la suite des nœuds supplémentaires au milieu de toutes les arêtes des triangles et on modifie la connectivité des éléments du maillage en conséquence.

La position des nœuds ajoutés sur les segments qui discrétisent les courbes est ajustée grâce à la paramétrisation de celles-ci si l'on souhaite de plus que les éléments soient isoparamétriques. L'étape de création du maillage du domaine de calcul bidimensionnel est terminée une fois toutes ces opérations effectuées. La génération d'un maillage pour un domaine tridimensionnel aurait nécessité une étape supplémentaire dans laquelle un algorithme similaire à la méthode de maillage par front mobile aurait été utilisé pour générer des tétraèdres jusqu'à couvrir l'ensemble du volume du domaine de calcul.

3.4.2 Transfert de la solution vers le nouveau maillage par interpolation quadratique

Les données qui ont été sauvegardées au moment où l'intégration en temps a été stoppée doivent maintenant être transférées de l'ancien maillage vers le maillage que l'on vient de générer pour pouvoir reprendre la simulation. La plupart des données de l'intégrateur en temps sont trivialement transférables et ne nécessitent pas de traitements particuliers. Au contraire, les solutions aux instants précédents \mathbf{u}_i qui sont utilisées par la méthode BDF doivent être connues sur le nouveau maillage pour que l'on puisse reprendre le calcul.

On réalise le transfert de l'ensemble des solutions sauvegardées en interpolant quadratiquement les anciens résultats aux nœuds du nouveau maillage. La méthode employée est similaire à celle qui permet de déterminer les caractéristiques des éléments à partir des informations contenues dans le maillage de fond. On détermine les valeurs interpolées des variables dépendantes à chaque nœud du nouveau maillage en réalisant les étapes suivantes :

1. On cherche quel élément E de l'ancien maillage contient le nœud P que l'on traite à l'aide d'un algorithme de recherche par arbre quaternaire (*quadtree*)
2. On détermine la position du nœud P dans l'élément E puis on calcule les valeurs des fonctions d'interpolation de l'élément à ce point
3. On utilise les fonctions d'interpolation et les valeurs de la solution aux nœuds de l'élément E sur l'ancien maillage pour calculer les valeurs interpolées pour toutes les variables dépendantes et toutes les solutions \mathbf{u}_i au nœud du nouveau maillage P

L'interpolation que l'on réalise est nodalement exacte puisque les valeurs aux nœuds du nouveau maillage sont égales aux valeurs que prend la solution issue de la méthode des éléments finis sur l'ancien maillage en ces points. Les éléments des deux maillages sont, dans notre cas, des éléments triangulaires quadratiques (éléments de type P_2) dont les fonctions d'interpolation sont des polynômes de degré deux, d'où l'utilisation du terme « interpolation quadratique ». Il aurait bien évidemment été possible de réaliser une interpolation linéaire

mais la solution interpolée aurait été moins précise.

L'étape de transfert de la solution de l'ancien maillage vers le nouveau est probablement la plus importante et la plus délicate du processus de remaillage. Peu importe la méthode utilisée, le transfert de la solution introduit systématiquement de l'erreur que l'on peut difficilement contrôler. Ces erreurs de transfert ont un effet non négligeable sur les méthodes numériques employées au moment de la reprise du calcul. En règle générale, le pas de temps est divisé par un facteur dix au cours des premières itérations qui suivent une reprise de calcul puis se met à augmenter une fois que l'erreur introduite par l'interpolation a été dissipée et que de nouvelles solutions non interpolées deviennent disponibles. Les méthodes BDF qui ne sont que conditionnellement stables peuvent par ailleurs devenir instables (ou du moins, sembler instables) au moment de la reprise et l'ordre de la méthode BDF utilisée peut donc être réduit au cours des premières itérations du calcul sur le nouveau maillage.

Les travaux de Muller [122] et Muller *et al.* [123] qui ont récemment été incorporés dans notre implémentation apportent des fonctionnalités permettant de remailler et de lisser le maillage localement, d'autres méthodes de lissage du maillage et plusieurs méthodes de transfert par projection de Galerkin qui permettent de réduire l'erreur de transfert de la solution mais ces méthodes n'ont pas été utilisées dans les études présentées dans ce mémoire.

3.4.3 Algorithme de remaillage adaptatif modifié

La procédure de remaillage décrite par l'Algorithme 3.3 permet de réaliser de façon automatique des simulations instationnaires avec remaillage adaptatif à condition que la définition de la géométrie du domaine ne varie pas durant la simulation. Si au contraire les frontières et/ou les interfaces se déforment ou se déplacent au cours du temps, la géométrie réelle du domaine au moment où l'on réalise un remaillage suivi d'une reprise du calcul ne correspond vraisemblablement plus à sa définition d'origine. Il est donc nécessaire de modifier la procédure pour que le domaine à discrétiser corresponde au domaine de calcul réel.

Les courbes qui représentent les frontières du domaine et les interfaces peuvent en principe être redéfinies afin de les faire coïncider avec leurs positions au moment où la simulation a été stoppée en modifiant le fichier de définition du problème. Ce travail peut être effectué manuellement ou peut être automatisé en recourant à des scripts. Cependant, il est difficile d'implémenter une façon robuste et efficace d'apporter ces modifications au fichier de définition du problème et il serait en outre nécessaire d'assurer le suivi de ses différentes versions au cours de la simulation. L'autre possibilité consiste à modifier non pas la définition d'origine du domaine mais les algorithmes utilisés pour discrétiser le domaine et notamment ses frontières. Nous avons retenu ici cette solution puisque l'algorithme implémenté possède les

avantages d'être générique, automatique, compatible avec les méthodes numériques utilisées et relativement simple.

Algorithme 3.4 : Algorithme modifié pour permettre le remaillage des problèmes instationnaires avec frontières déformables et interfaces. Les modifications et étapes supplémentaires apportées à l'algorithme d'origine (Algorithme 3.3) sont en bleu.

```

début amiral
  // Lire les données d'entrée
  defProb = Lire_Definition_Probleme ()
  backMsh = Lire_Maillage_Fond ()
  origSol = Lire_Solution ()

  // Calcul de la dilation/contraction des courbes
  dilatCrbs = Calc_Dilatation_Courbes (backMsh, origSol)
  // Discrétisation des frontières par échantillonnage adaptatif
  bndMsh = Discretiser_Frontieres (backMsh, dilatCrbs)
  // Interpolation de la position des nœuds des frontières à partir d'une
  // représentation paramétrique des frontières de l'ancien maillage
  bndMsh = Deplacer_Frontieres (bndMsh, backMsh, origSol)
  // Discrétisation du domaine avec une méthode de maillage par front mobile
  frontMsh = Discretiser_Domaine (backMsh, bndMsh)

  // Transfert de la solution sur les frontières
  interpSol = Interpoler_Solution_Frontieres (bndMsh, backMsh, origSol)
  // Transfert de la solution par interpolation quadratique
  interpSol = Interpoler_Solution (backMsh, frontMsh, origSol)
  // Mise à zéro des déplacements en conservant les dérivées en temps
  Reinitialiser_Deplacements (interpSol)

  // Écrire les données générées pour le cas de calcul
  Ecrire_Donnees_Probleme (defProb, frontMsh, interpSol)
fin

```

La procédure modifiée pour permettre le remaillage des problèmes instationnaires avec frontières déformables et interfaces est présentée par l'Algorithme 3.4. Les modifications et étapes supplémentaires apportées à l'algorithme d'origine sont indiquées en bleu et sont réparties en trois groupes décrits ci-après.

Représentation paramétrique de la position des frontières

La majeure partie des modifications apportées à l'algorithme de remaillage concerne l'opération de discrétisation des frontières. L'idée est de faire en sorte que la nouvelle discrétisation des

courbes coïncide avec la position de celles-ci au moment où la simulation a été stoppée, ce qui permet ensuite de créer le maillage du domaine de calcul sans avoir à modifier l'algorithme de maillage par front mobile.

Lors d'une opération de remaillage du domaine, l'algorithme modifié n'utilise pas les représentations paramétriques des courbes qui ont été initialement fournies par l'utilisateur comme pour le premier maillage généré, mais crée pour chaque courbe une nouvelle représentation paramétrique $\mathbf{x}_h^{\text{prec}}(t)$ de celle-ci à partir d'une représentation par la méthode des éléments finis de sa discrétisation précédente. Pour chaque courbe délimitant le domaine de calcul, la nouvelle représentation paramétrique est entièrement déterminée à partir des trois données suivantes :

1. Le maillage composé d'éléments unidimensionnels (linéaires ou quadratiques) qui a été généré pour la courbe lors du cycle de calcul précédent (*i.e.* : son ancien maillage)
2. La position t_p dans l'espace paramétrique de chaque nœud p de l'ancien maillage de la courbe
3. Les coordonnées cartésiennes \mathbf{x}_p de chaque nœud p de l'ancien maillage de la courbe au moment où la simulation a été stoppée

Les deux premières données sont sauvegardées lors de la génération d'un maillage dans deux fichiers distincts en vue d'être utilisées lorsque l'on générera le maillage utilisé pour le cycle de calcul suivant tandis que la troisième information provient directement de la dernière solution calculée sur l'ancien maillage.

La représentation par la méthode des éléments finis que l'on construit pour chaque courbe est une représentation unidimensionnelle basée sur l'ancien maillage de celle-ci. On associe aux nœuds du maillage d'une courbe leurs valeurs respectives \mathbf{x}_p ainsi que leurs coordonnées paramétriques respectives t_p . La représentation paramétrique $\mathbf{x}_h^{\text{prec}}(t)$ est alors obtenue sur la base de l'Équation (3.3) à partir des fonctions de base $\Phi_i(t)$ du maillage de la courbe et des valeurs nodales \mathbf{x}_p .

Enfin, puisque les anciens maillages des courbes sont contenus dans le maillage de fond et dans le maillage utilisé lors du précédent cycle au moment où la simulation a été stoppée, on peut de plus associer aux nœuds de l'ancien maillage d'une courbe (1) les valeurs nodales des paramètres de maillage extraits du maillage de fond, ainsi que (2) les valeurs nodales de l'ensemble des solutions connues sur l'ancien maillage et ainsi construire des représentations de ces données sur chaque courbe dans l'espace du paramètre t . On utilisera directement ces représentations lorsqu'il sera nécessaire d'interpoler des données sur les frontières, ce qui assure une meilleure précision des données interpolées et permet d'éviter les cas où le point recherché est situé hors du maillage de fond. L'efficacité de la méthode de recherche par

dichotomie (équivalente à un arbre binaire) de l'élément de l'ancien maillage d'une courbe qui contient un point situé au paramètre t_i est en outre bien plus rapide qu'une recherche par arbre quaternaire dans un maillage comprenant plus d'éléments.

Modifications de l'algorithme de discrétisation des frontières

L'implémentation des modifications de l'algorithme a été réalisée en minimisant les changements apportés aux procédures d'origine. Ainsi, en pratique, les représentations paramétriques des courbes qui ont été initialement fournies par l'utilisateur sont toujours utilisées lors des différentes étapes de la procédure et on réalise des ajustements pour que les données dont se sert la méthode de discrétisation des frontières correspondent bien à celles fournies par les nouvelles représentations des courbes.

On détermine dans un premier temps l'information qui permettra de prendre en compte la dilatation ou la contraction locale $\xi(t)$ des points d'une courbe par rapport à sa définition d'origine. On calcule pour cela deux mesures de la longueur de chaque élément E faisant partie de l'ancien maillage d'une courbe à partir de deux représentations paramétriques de cette courbe. La première mesure est la longueur L_E^0 qu'aurait l'élément E si la représentation paramétrique d'origine était utilisée. La relation entre le paramètre et l'abscisse curviligne pour la représentation paramétrique d'origine est une simple homothétie, si bien que cette longueur s'exprime :

$$L_E^0 = \frac{t_{1,E} - t_{0,E}}{t_{\max} - t_{\min}} L \quad (3.77)$$

où L est la longueur totale de la courbe et $t_{0,E}$ et $t_{1,E}$ sont les valeurs du paramètre t aux deux extrémités de l'élément E . La seconde mesure correspond à la longueur réelle de l'élément au moment où la simulation a été stoppée. On l'obtient en intégrant simplement la constante 1 sur l'élément par quadrature de Gauss :

$$L_E = \int_E 1 dl \quad (3.78)$$

La dilatation ou la contraction d'un segment est alors obtenue en calculant le rapport entre les deux longueurs calculées auparavant $\xi_E = L_E/L_E^0$. Les valeurs nodales ξ_i sont ensuite obtenues en transférant l'information que l'on vient de déterminer sur les éléments aux nœuds du maillage afin d'obtenir la représentation discrète $\xi_h(t)$ de ξ .

L'algorithme qui effectue l'échantillonnage adaptatif des courbes se sert, dans sa version d'origine, des paramètres de maillage interpolés dans le maillage de fond ainsi que de la longueur des courbes pour déterminer les coordonnées des points d'échantillonnage. On effectue des changements qui affectent seulement la manière de déterminer les valeurs δ_i qui

fournissent la taille des éléments à générer aux points d'échantillonnage. Lors d'un remaillage, toutes les informations dont nous avons besoin sont connues sur l'ancienne discrétisation des courbes et on réalise donc une interpolation linéaire des paramètres de maillage extraits du maillage de fond aux nœuds de l'ancien maillage d'une courbe pour déterminer la taille des éléments à générer (au lieu d'interpoler dans le maillage de fond entier). La taille d'éléments qui est déterminée est ensuite ajustée en la multipliant par la valeur interpolée de ξ au point d'échantillonnage, ce qui permet de bien prendre en compte la dilatation ou la contraction locale des courbes lors de la création de l'échantillonnage de la courbe.

La génération du nouveau maillage d'une courbe est réalisée de la même façon que dans l'algorithme d'origine à partir de son échantillonnage (voir Section 3.4.1). On détermine ensuite la position dans l'espace bidimensionnel de chaque nœud du nouveau maillage des courbes à partir de leurs représentations paramétriques $\mathbf{x}_h^{\text{prec}}(t)$. Il suffit pour cela de déterminer les valeurs prises par ces représentations des frontières pour les valeurs du paramètre t_i auxquelles ont été générées des points. Cette opération correspond à une interpolation quadratique si les éléments utilisés sont des éléments quadratiques isoparamétriques. Une fois leurs coordonnées ajustées, les nœuds du nouveau maillage sont situés exactement sur la représentation par la méthode des éléments finis des courbes extraites de l'ancien maillage (l'interpolation est donc dite nodalement exacte). Le domaine de calcul peut par la suite être maillé sans que l'on ait à modifier l'algorithme.

Modifications de la méthode de transfert de la solution

Le transfert de la solution est d'abord effectué sur les frontières puis dans le reste du domaine dans l'algorithme modifié. La représentation de la solution sur les frontières de l'ancien maillage est utilisée dans un premier temps pour déterminer, ici aussi par interpolation quadratique nodalement exacte, les valeurs de la solution sur les frontières du nouveau maillage puis on effectue le transfert de la solution aux points situés à l'intérieur du domaine de calcul de la même façon que dans l'algorithme d'origine.

Remise à zéro des déplacements du pseudo-solide

On effectue la troisième et dernière modification de l'algorithme de remaillage adaptatif une fois que l'ensemble des données ont été transférées sur le nouveau maillage. La procédure de remaillage a permis de générer une discrétisation du domaine de calcul dans sa configuration réelle au moment où la simulation a été stoppée, ce qui signifie que les déplacements du pseudo-solide χ ont déjà été pris en compte dans ce nouveau maillage (pour les déformations et déplacements des frontières du domaine). Il est donc nécessaire de modifier soit la position

des nœuds du nouveau maillage soit les déplacements du pseudo-solide pour que les données avant et après le remaillage restent compatibles (sans cela, les déplacements seront pris en compte deux fois).

On peut choisir d'adopter une approche comparable soit à une formulation lagrangienne totale soit à une formulation lagrangienne actualisée. Dans le premier cas, les différents maillages employés correspondent tous à une discrétisation de la géométrie d'origine du problème et les déplacements du pseudo-solide sont égaux à l'accumulation des déplacements des points du domaine de calcul depuis le début de la simulation. Il faudrait pour utiliser cette approche modifier les coordonnées des nœuds du nouveau maillage en leur retirant la valeur (interpolée) de χ de la dernière solution obtenue avant le remaillage et ne pas modifier les déplacements du pseudo-solide. En pratique, cette approche peut poser des problèmes numériques lors de la résolution des équations du pseudo-solide puisque la qualité des éléments du maillage dans sa configuration non déformé peut être très mauvaise.

Dans la seconde approche, qui est celle qui a été retenue, on considère que le nouveau maillage correspond au domaine de calcul non déformé (*i.e.* : on met à jour la définition de la configuration non déformée). On remet alors à zéro les déplacements du pseudo-solide χ tout en préservant les dérivées en temps successives de cette variable dépendante. Il est en effet très important de conserver cette information puisque la vitesse de déplacement des points du domaine de calcul \mathbf{u}_{ALE} est utilisée dans les équations qui modélisent le problème. Cette opération est réalisée en soustrayant simplement les valeurs de χ de la dernière solution obtenue avant le remaillage aux autres solutions qui ont été conservées et transférées pour permettre de reprendre l'intégration en temps.

CHAPITRE 4 MODÉLISATION DE LA PHYSIQUE DES ÉCOULEMENTS POLYPHASIQUES

Ce chapitre contient les détails des développements qui ont été conduits afin d'améliorer la représentation de la physique des écoulements polyphasiques dans le cadre de ce projet. Ce travail s'est porté d'une part sur la modélisation des écoulements compressibles et les équations d'états qui y sont associées et d'autre part sur la modélisation des conditions à l'interface entre deux fluides, notamment dans le cas où une force de tension superficielle existe. Les équations résolues par le code de simulation ainsi que les détails de leur implémentation dans le cadre de la méthode des éléments finis et les spécificités des approches qui ont été retenues sont présentés ici.

4.1 Équations d'état pour les fluides compressibles

Une équation d'état permet de relier les paramètres physiques, ou variables d'état, d'un système à l'équilibre thermodynamique. Parmi ces variables d'état, on trouve notamment la pression p , la masse volumique ρ , la température T ou encore l'énergie interne e , l'enthalpie h et l'entropie s . Une équation d'état s'écrit généralement sous l'une des formes générales suivantes :

$$\rho = \rho(p, e) \quad \text{ou} \quad \rho = \rho(p, T) \quad (4.1)$$

mais il est parfois plus pratique de se servir d'une forme implicite ($F(\rho, p, e) = 0$) de l'équation d'état ou d'utiliser d'autres variables d'état. L'équation d'état est un concept particulièrement important lorsque l'on considère des fluides compressibles puisqu'elle permet de fermer le système d'équations des lois de conservation qui font apparaître les différentes variables d'état.

4.1.1 Caractérisation de la compressibilité d'un fluide

On peut tirer de l'équation d'état écrite sous forme générique deux variables thermodynamiques qui caractérisent la compressibilité d'un fluide vis-à-vis de la pression et de la température : le coefficient de compressibilité isotherme α et le coefficient de dilatation thermique isobare β ,

qui sont définis ainsi à partir du volume V ou de la masse volumique ρ :

$$\alpha = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_{T,n} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T \quad [\text{Pa}^{-1}] \quad (4.2a)$$

$$\beta = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{p,n} = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \quad [\text{K}^{-1}] \quad (4.2b)$$

où n est la quantité de matière exprimée en moles.

Ces deux variables, ainsi que le produit βT , apparaîtront dans les équations de Navier-Stokes compressibles comme détaillé dans la Section 4.2.1. Dans la formulation en variables primitives que nous employons, l'implémentation d'une équation d'état nécessite de connaître :

- l'équation d'état sous la forme $\rho = \rho(p, T)$ (pour calculer la masse volumique)
- l'expression de α et de β en fonction de p et T (pour l'équation de continuité)
- l'expression du produit βT en fonction de p et T (pour l'équation de conservation de l'énergie)

Dans le cas où l'équation d'état n'a pas une forme explicite (*e.g.* : équation d'état tabulée) ou si sa forme ne permet pas d'être facilement exploitée, les coefficients de compressibilité peuvent être déterminés par différences finies, par exemple.

4.1.2 Décomposition de la pression et de la température

La pression et la température peuvent être écrites sous la forme d'une décomposition entre une valeur dite « thermodynamique » ou de référence (indice r) et une valeur dite « mécanique » (indice m) :

$$p = p_m + p_r \quad T = T_m + T_r \quad (4.3)$$

La pression et la température thermodynamique sont liées à un état thermodynamique de référence et permettent de connaître l'état du fluide en l'absence d'écoulement *via* l'équation d'état tandis que les grandeurs mécaniques correspondent à des variations de pression et de température induites par l'écoulement du fluide autour de l'état de référence.

Cette décomposition prend du sens si l'on examine les équations de Navier-Stokes (Équations (4.18a) à (4.18c)) sans l'équation d'état. La pression et la température apparaissent dans des termes qui prennent la forme de dérivées en temps ou de gradients et peuvent par conséquent être définies à une valeur constante près (p_r et T_r). Il est ainsi possible de substituer la pression et la température mécanique à p et T dans ces équations et de résoudre le problème relativement à l'état de référence. Cette approche est particulièrement intéressante

pour la résolution numérique des équations de Navier-Stokes compte tenu des limitations de représentation des nombres réels en double précision (notamment pour la pression) mais n'est pas essentielle.

4.1.3 Équation d'état des gaz parfaits

Bien que simple en apparence, l'équation d'état des gaz parfaits permet de modéliser correctement un grand nombre de gaz sous une large gamme de conditions. Cette équation est notamment un excellent choix pour modéliser l'air et les gaz qui composent l'atmosphère terrestre et peut être utilisée dans la majeure partie des études s'intéressant aux activités terrestres et humaines. L'équation d'état des gaz parfaits s'écrit :

$$p = \rho r T \quad (4.4)$$

où r est la constante spécifique du gaz (la constante des gaz parfaits \mathcal{R} divisée par la masse molaire du gaz). Les coefficients de compressibilité pour un gaz parfait s'expriment donc :

$$\alpha = \frac{1}{p} \quad \beta = \frac{1}{T} \quad \beta T = 1 \quad (4.5)$$

En substituant p et T par la décomposition suggérée dans l'Équation (4.3), on peut alors faire apparaître les coefficients de compressibilité de référence $\alpha_r = 1/p_r$ et $\beta_r = 1/T_r$ dans ces expressions :

$$\alpha = \frac{\alpha_r}{\alpha_r p_m + 1} \quad \beta = \frac{\beta_r}{\beta_r T_m + 1} \quad \beta T = 1 \quad (4.6)$$

et réécrire l'équation d'état :

$$\rho = \rho_r \frac{\alpha_r p_m + 1}{\beta_r T_m + 1} \quad (4.7)$$

avec $\rho_r = p_r / (r T_r)$.

L'utilisation de l'équation d'état des gaz parfaits dans cette formulation nécessite ainsi que l'utilisateur fournisse l'état thermodynamique de référence en donnant des valeurs pour α_r , β_r et ρ_r . À titre d'exemple, pour de l'air à pression atmosphérique et à température égale à 15 °C, les données d'entrée seraient : $\alpha_r^{-1} = 101\,325$ Pa, $\beta_r^{-1} = 288,15$ K et $\rho_r = 1,225$ kg/m³.

La vitesse du son a_{son} pour un gaz parfait est donnée par :

$$a_{\text{son}} = \sqrt{krT} \quad (4.8)$$

où $k = c_p/c_V$ est l'indice adiabatique du gaz, qui peut être déterminé simplement en se servant de la relation de Mayer $r = c_p - c_V$ si l'on connaît la capacité thermique spécifique à pression constante c_p du gaz et l'état de référence (pour calculer r).

4.1.4 Équation d'état des gaz raidis (*stiffened gas law*)

L'équation des gaz raidis (*stiffened gas law* en anglais) permet de modéliser les fluides faiblement compressibles comme les liquides, dont la compressibilité n'apparaît que sous de très fortes pressions. Cette équation d'état est couramment utilisée pour modéliser l'eau dans les études d'explosions sous-marines et de propagation d'ondes de choc dans l'eau (dans le cadre de la lithotritie extracorporelle¹ par exemple). L'équation des gaz raidis s'écrit sous la forme suivante [88] :

$$p = \rho(k - 1) c_V T - p_\infty \quad (4.9)$$

où k et p_∞ sont des constantes spécifiques au fluide qui sont généralement déterminées expérimentalement. Le paramètre p_∞ est à l'origine du caractère « raidi » de cette équation puisqu'il suggère que le fluide est sous une pression supplémentaire p_∞ par rapport à un gaz parfait. La vitesse du son d'un gaz raidi est donnée par :

$$a_{\text{son}} = \sqrt{k \frac{p + p_\infty}{\rho}} = \sqrt{(k - 1) c_p T} \quad (4.10)$$

Pour cette équation d'état, les coefficients de compressibilité sont :

$$\alpha = \frac{1}{p + p_\infty} \quad \beta = \frac{1}{T} \quad \beta T = 1 \quad (4.11)$$

En prenant cette fois-ci $\alpha_r = 1/(p_r + p_\infty)$ et $\beta_r = 1/T_r$, on retrouve alors les mêmes expressions que celles données pour un gaz parfait dans les Équations (4.6) et (4.7) avec l'expression suivante pour la masse volumique de référence : $\rho_r = (p_r + p_\infty)/[(k - 1) c_V T_r]$. L'implémentation de cette équation d'état est par conséquent identique à celle de l'équation d'état des gaz parfaits : seules les expressions de l'état thermodynamique de référence changent.

Les constantes k et p_∞ fournissent deux degrés de liberté qui peuvent être choisis pour reproduire différentes propriétés du fluide, à condition de respecter *a minima* $c_V > 0$ et $k > 1$ ². Les valeurs que l'on trouve dans la littérature pour l'eau, $k = 6,1$ et $p_\infty = 2$ GPa, ne

1. Technique de fragmentation des calculs rénaux ou biliaires par ondes de choc ultrasonores.

2. Flåtten *et al.* [88] fournit par exemple des conditions nécessaires et suffisantes pour des mélanges de fluides en équilibre mécanique qui permettent d'assurer que le modèle reproduit un comportement thermodynamique physiquement valide.

permettent cependant d'obtenir ni la bonne vitesse du son ni la bonne capacité thermique spécifique à pression constante c_p . Il est malgré tout possible de choisir ces constantes afin de retrouver les valeurs classiquement utilisées $c_p = 1 \text{ kcal/kg/K}$ et $a_{\text{son}} = 1500 \text{ m/s}$ si l'on souhaite reproduire ces propriétés au détriment de la modélisation d'autres caractéristiques du fluide.

4.1.5 Équation d'état de Van der Waals

L'équation d'état de Van der Waals modifie l'équation d'état des gaz parfaits pour prendre en compte deux effets qui expliquent qu'un gaz réel diffère d'un gaz parfait :

- les molécules de gaz occupent un volume non nul et peuvent interagir entre elles (traduit par l'introduction du covolume molaire b exprimé en $\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$)
- les molécules de gaz sont soumises à des forces intermoléculaires attractives (traduit par l'introduction du terme de cohésion a exprimé en $\text{Pa} \cdot \text{m}^6 \cdot \text{mol}^{-2}$)

Ces deux termes peuvent être calculés à partir des valeurs de pression et de température qui définissent le point critique au-delà duquel il n'est pas possible d'observer de changement d'état liquide-gaz. La forme classique de l'équation d'état de Van der Waals est :

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2}\right)(V_m - b) = \mathcal{R}T \quad (4.12)$$

où $V_m = V/n$ est le volume molaire. Le volume molaire peut également être exprimé en fonction de la masse volumique et de la masse molaire du fluide $V_m = \mathcal{M}/\rho$, ce qui donne une autre forme pour l'équation :

$$(p + a^* \rho^2)(1 - \rho b^*) = \rho r T \quad (4.13)$$

avec $a^* = a/\mathcal{M}^2$ et $b^* = b/\mathcal{M}$.

L'équation d'état de Van der Waals est une équation d'état dite « cubique » puisqu'elle peut s'écrire sous la forme d'un polynôme de degré 3 en ρ (ou en V_m). Cette forme complique son utilisation puisqu'il peut exister de une à trois racines réelles, dont certaines sont parfois doubles ou triples. La solution d'un tel problème peut être trouvée numériquement *via* par exemple la méthode de Newton-Raphson ou en se servant des formules explicites donnant les racines d'une équation cubique.

Les manipulations réalisées précédemment pour les autres équations d'état sont plus complexes à réaliser pour l'équation d'état de Van der Waals mais la détermination explicite des

coefficients α et β reste possible, par exemple sous la forme suivante :

$$\alpha = \frac{1 - \rho b^*}{p - a^* \rho^2 + 2a^* b^* \rho^3} \quad \beta = \frac{r(1 - \rho b^*)}{rT - 2a^* \rho + 4a^* b^* \rho^2 - 2a^* b^* \rho^3} \quad (4.14)$$

L'équation d'état de Van der Waals n'a pas été implémentée ou utilisée dans le cadre de ce travail mais elle permet de mettre en évidence que, bien que des résultats très simples aient pu être obtenus pour certains modèles, l'implémentation d'équations d'état pour les fluides réels dans la formulation que nous avons choisie peut être compliquée à mettre en œuvre, sans toutefois être impossible.

4.2 Équations de Navier-Stokes pour les écoulements polyphasiques

On considère, dans le cadre de ces travaux, des écoulements de fluides visqueux newtoniens, compressibles ou incompressibles. Les gaz, modélisés comme des fluides compressibles, suivent l'équation d'état des gaz parfaits tandis que les liquides seront principalement considérés comme incompressibles.

Les équations de Navier-Stokes sont utilisées pour modéliser chacune des phases fluides indépendamment. Ces équations seront ici exprimées en variables primitives p , \mathbf{u} et T et dans la formulation ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*). Des conditions imposées sur les interfaces permettent de fermer le système en modélisant le couplage entre les différents fluides.

4.2.1 Équations de Navier-Stokes pour les écoulements compressibles et incompressibles

On note ρ la masse volumique du fluide, c_p sa capacité thermique massique à pression constante, λ sa conductivité thermique, μ sa viscosité et α et β les coefficients de compressibilité définis dans la Section 4.1.1. On notera par la suite $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = -p\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\tau}}$ le tenseur des contraintes, où $\bar{\boldsymbol{\tau}}$ est le tenseur des contraintes visqueuses. Le flux de chaleur, issu de la loi de Fourier, est donné par $\mathbf{q} = -\lambda \nabla T$.

Nous considérerons dans cette étude que l'hypothèse de Stokes³ est valide et que la viscosité, la conductivité thermique et la capacité thermique massique à pression constante sont des

3. L'hypothèse de Stokes consiste à supposer que les deux coefficients de viscosité μ et λ (qui sont analogues aux coefficients de Lamé en élasticité) apparaissant dans la relation contrainte visqueuse-vitesse de déformation $\bar{\boldsymbol{\tau}} = \lambda \text{Tr}(\dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}) \bar{\mathbf{I}} + 2\mu \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}$ où $\dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} = 1/2(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ sont liés par la relation $\lambda = -2/3\mu$. Cette hypothèse est couramment utilisée (souvent sans en avoir conscience) bien qu'elle ne soit pas valide pour de nombreux fluides.

propriétés constantes des fluides qui ne dépendent donc ni de la température ni de la pression, entre autres. La loi de de Sutherland [7] aurait par exemple pu être utilisée pour prendre en compte l'influence de la température sur la viscosité dans le cas d'un gaz idéal⁴.

La formulation ALE introduit une modification des termes de convection des équations afin de prendre en compte le déplacement des points du domaine de calcul. On notera par la suite $\mathbf{u}_{\text{conv}} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{ALE}}$ la vitesse de convection dans la formulation ALE, où \mathbf{u} est la vitesse du fluide et \mathbf{u}_{ALE} est la vitesse de déformation du domaine. Avec la méthode du pseudo-solide, cette vitesse est simplement obtenue à partir des déplacements du pseudo-solide :

$$\mathbf{u}_{\text{ALE}} = \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial t} \quad (4.15)$$

Équations de Navier-Stokes pour un fluide incompressible

Les équations qui décrivent le comportement d'un fluide modélisé comme un fluide incompressible sont :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.16a)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{conv}} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}} + \rho \mathbf{g} \quad (4.16b)$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{conv}} \cdot \nabla) T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}} : \nabla \mathbf{u} \quad (4.16c)$$

avec, pour un fluide newtonien, le tenseur des contraintes visqueuses $\bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}}$:

$$\bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}} = \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (4.17)$$

En principe, la résolution de l'équation de conservation de l'énergie (Équation (4.16c)) n'est pas nécessaire pour résoudre les équations de Navier-Stokes sous forme incompressible puisque le champ de température se comporte comme un scalaire passif (simplement convecté par l'écoulement) dans ce cas. L'équation de conservation de l'énergie peut par ailleurs être résolue séparément des autres équations dans une approche découplée.

4. La viscosité s'exprime pour cette loi $\mu = \mu_{\text{ref}} (T/T_{\text{ref}})^{3/2} (T_{\text{ref}} + S) / (T + S)$ où T_{ref} et μ_{ref} sont des valeurs de référence et S est une constante qui dépend du gaz considéré. Pour de l'air, on utilise généralement $T_{\text{ref}} = 273,15 \text{ K}$, $\mu_{\text{ref}} = 1,715 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ et $S = 110,4 \text{ K}$.

Équations de Navier-Stokes pour un fluide compressible

Dans le cas d'un fluide compressible, l'équation de continuité écrite sous forme conservative est manipulée afin de substituer la pression, la température et les deux variables de compressibilité à la masse volumique. Les équations de Navier-Stokes pour un fluide compressible sont alors :

$$-\nabla \cdot \mathbf{u} = \alpha \left(\frac{\partial p}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{conv}} \cdot \nabla) p \right) - \beta \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{conv}} \cdot \nabla) T \right) \quad (4.18a)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{conv}} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} + \rho \mathbf{g} \quad (4.18b)$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{conv}} \cdot \nabla) T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \beta T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{conv}} \cdot \nabla) p \right) + \bar{\boldsymbol{\tau}} : \nabla \mathbf{u} \quad (4.18c)$$

où le tenseur des contraintes visqueuses $\bar{\boldsymbol{\tau}}$ vaut, pour un fluide newtonien :

$$\bar{\boldsymbol{\tau}} = \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\top) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \bar{\mathbf{I}} \quad (4.19)$$

Une équation d'état (Équation (4.1)) permet de fermer ce système d'équations.

4.2.2 Phénomène de tension superficielle et mouillage

Au sein de tout fluide, des forces d'attraction et de répulsion, comme la force électrostatique (attractive ou répulsive selon les charges électriques des molécules) et la force de van der Waals (attractive), sont en compétition. Dans un fluide à l'état gazeux, la distance entre les molécules est supposée suffisamment grande pour que ces forces d'attraction intermoléculaire soient négligeables. En revanche, dans un fluide à l'état liquide, ces forces ne peuvent plus être négligées et ont une manifestation macroscopique, notamment par la tension superficielle.

À une interface entre un liquide et un gaz ou à l'interface entre deux liquides non miscibles, les propriétés différentes d'attraction des molécules de chacun des fluides (voir Figure 4.1) font apparaître un gradient de pression qui conduit à l'apparition d'une force normale à la surface : la force de tension superficielle. Cette force a naturellement pour effet de faire tendre un système vers sa configuration d'énergie la plus basse, en diminuant la surface de l'interface où elle s'applique. Par exemple, en l'absence de gravité et de forces externes, un volume initialement quelconque de liquide prendra ainsi la forme d'une sphère de même volume puisqu'une sphère possède la plus petite surface possible pour un volume donné. Cet effet est illustré pour plusieurs fluides par la Figure 4.2.

Les manifestations de la tension superficielle sont facilement visibles dans la nature ainsi que

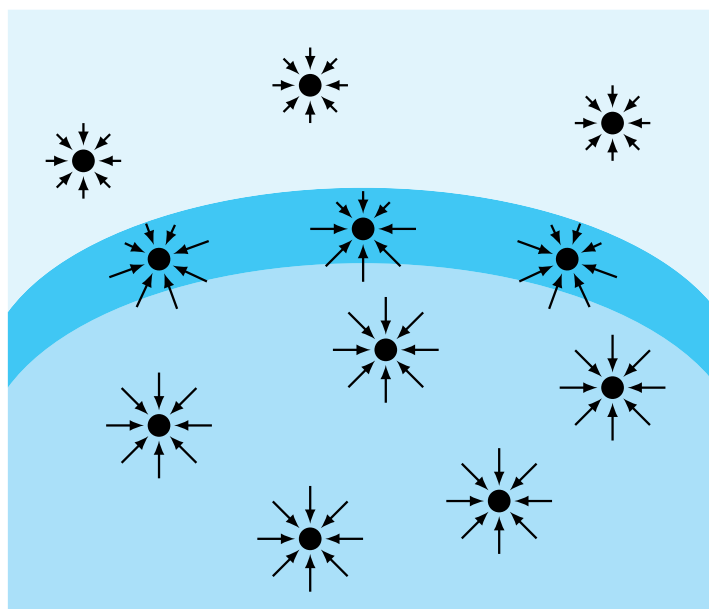


Figure 4.1 Représentation des forces attractives s'exerçant sur les molécules d'un fluide. Les molécules dans les deux phases fluides (zones claires) sont attirées de façon identique dans toutes les directions (résultante nulle) tandis que celles à l'interface (zone foncée) sont attirées différemment par les molécules de chaque fluide.



Figure 4.2 Goutte d'eau contenant une bulle d'air et plusieurs gouttes d'huile piquante en micro-gravité (Source : NASA/ISS Expedition 34 / NASA ID iss034e042358)

dans la vie de tous les jours. Les insectes de la famille des gerridés (« araignées d'eau » ou « patineuses ») s'en servent par exemple pour se déplacer sur l'eau et une expérience simple à réaliser consiste à faire flotter une pièce de monnaie sur un verre d'eau.

Le coefficient de tension superficielle γ est une propriété matérielle du système constitué des deux fluides considérés. Sa valeur est ainsi différente pour une interface air-eau (71,97 mN/m) et pour une interface air-mercure (487 mN/m). Le coefficient de tension superficielle est généralement considéré constant et invariant au cours du temps. Dans la réalité, il peut être affecté par la température du fluide, la présence et la concentration d'agents tensioactifs (*surfactants* en anglais) ou encore la salinité, par exemple. Dans le cas où le coefficient de tension superficielle n'est pas constant, un phénomène appelé effet Marangoni se produit. Ce phénomène est notamment la cause des « larmes de vin » qui résultent d'un gradient de tension superficielle lui-même causé par un gradient de concentration de l'éthanol sur les parois d'un verre.

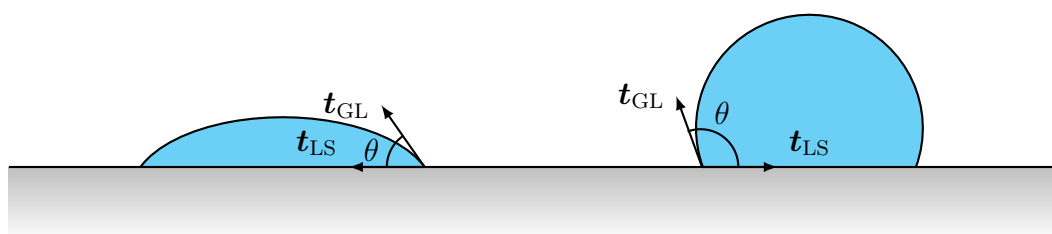


Figure 4.3 Représentation de deux gouttes liquides sur une surface solide. L'angle de mouillage θ est mesuré au niveau de la ligne de contact. Le mouillage du fluide de gauche est relativement élevé ($\theta < 90^\circ$, le fluide est très étalé) tandis que le mouillage du fluide de droite est plutôt faible ($\theta > 90^\circ$, le fluide est peu étalé).

Si l'on considère maintenant un système constitué d'un liquide et d'un gaz en contact avec une paroi solide, une interface additionnelle entre les trois milieux, appelée ligne de contact, apparaît. L'interface entre les deux fluides est alors ouverte et est délimitée par cette ligne de contact. L'angle de contact θ , défini comme l'angle entre le vecteur tangent à l'interface liquide-solide et le vecteur tangent à l'interface gaz-liquide au niveau de la ligne de contact (voir Figure 4.3), permet de caractériser de façon macroscopique le mouillage du liquide sur la paroi solide et dépend des interactions moléculaires entre les trois milieux.

4.2.3 Conditions à l'interface entre deux fluides immiscibles

Les conditions aux limites à l'interface entre deux fluides immiscibles découlent de l'application des principes de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sur un

volume infinitésimal autour de l'interface. Ces conditions, dont le développement est donné en Annexe B, permettent de coupler les équations pour les deux fluides de part et d'autre de l'interface et sont données sous la forme de sauts au passage de l'interface. Mathématiquement, une condition de saut sur une variable V , notée $[[V]]$, au passage d'une interface peut être vue comme la différence entre les valeurs de V de part et d'autre de l'interface lorsque l'on se rapproche de l'interface dans la direction normale [89] :

$$[[V]] = \lim_{h \rightarrow 0} V(\mathbf{x} - h\mathbf{n}(\mathbf{x})) - V(\mathbf{x} + h\mathbf{n}(\mathbf{x})) \quad (4.20)$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal à l'interface.

Conditions de saut pour les variables physiques

En l'absence de changement d'état à l'interface, les conditions de saut pour le champ de vitesse \mathbf{u} et le champ de température sont des conditions de continuité traduites par :

$$[[\mathbf{u}]] = \mathbf{0} \quad (4.21)$$

$$[[T]] = 0 \quad (4.22)$$

S'il existe une force de tension superficielle à l'interface, la condition de saut sur le tenseur des contraintes $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$ dans la direction normale est donnée par :

$$[[\overline{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{n}]] = -\gamma(\underline{\nabla} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + \underline{\nabla}\gamma \quad (4.23)$$

où γ est le coefficient de tension superficielle, $\underline{\nabla}$ est l'opérateur de gradient surfacique et $\underline{\nabla} \cdot \mathbf{n} = \kappa$ est la courbure moyenne de l'interface. Le premier terme apparaît dans l'équation de Young-Laplace et est la source principale des effets de tension superficielle tandis que le second terme est la source de l'effet Marangoni.

Enfin, le flux de chaleur normal à travers l'interface est continu :

$$[[\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}]] = 0 \quad (4.24)$$

La loi d'évolution de l'interface peut être obtenue à partir des mêmes principes de conservation. L'interface se comporte comme une surface matérielle dans la direction normale, ce qui signifie que sa composante de vitesse normale est égale à celle des deux fluides :

$$\mathbf{u}_\Gamma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n} \quad (4.25)$$

Conditions de saut pour le pseudo-solide

Des conditions de saut doivent aussi être obtenues pour les déplacements du pseudo-solide χ . La continuité des déplacements à travers l'interface est bien évidemment imposée :

$$[[\chi]] = \mathbf{0} \quad (4.26)$$

et la loi d'évolution (Équation (4.25)) permet par ailleurs de coupler les déplacements du pseudo-solide et les déplacements de l'interface. La vitesse de l'interface \mathbf{u}_Γ étant la dérivée temporelle des déplacements du pseudo-solide, on a alors la relation :

$$\mathbf{u}_\Gamma \cdot \mathbf{n} = \frac{\partial \chi}{\partial t} \cdot \mathbf{n} \quad (4.27)$$

Aucune condition n'est *a priori* requise dans la direction tangentielle. Il est cependant nécessaire d'imposer une condition pour pouvoir résoudre numériquement le problème. Le choix le plus simple est de considérer que l'interface se comporte de façon purement lagrangienne et d'écrire que sa vitesse est égale à celle des deux autres fluides $\mathbf{u}_\Gamma = \mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2$. Cette méthode peut toutefois poser des problèmes numériques puisqu'elle aura tendance à concentrer une partie des nœuds du maillage à certaines positions le long de l'interface.

Dans le cadre de ces travaux, nous avons choisi d'employer une approche qui conserve le rapport des longueurs des segments de l'interface comme celle développée par Hay *et al.* [104] puisque cette méthode s'applique bien aux problèmes bidimensionnels avec des interfaces ouvertes. Cette approche impose que le rapport entre les longueurs initiales (indice 0) et les longueurs actuelles des segments (indice t) de part et d'autre d'un nœud de l'interface soient égales :

$$\frac{L_t^+}{L_0^+} = \frac{L_t^-}{L_0^-} \quad (4.28)$$

où les deux côtés sont dénotés par un exposant + et – respectivement.

Une autre approche envisageable aurait été celle employée par Fortin [121] qui est applicable notamment aux interfaces fermées et aux cas bidimensionnels et tridimensionnels. Cette méthode impose que la vitesse tangentielle d'un nœud soit égale à une moyenne de la vitesse tangentielle des nœuds auquel il est connecté par des éléments d'interface.

4.3 Implémentation des équations pour la méthode des éléments finis

Soit Ω , de bord $\partial\Omega$, un domaine de \mathbb{R}^n (avec n compris entre 1 et 3). Soit $\Gamma \subset \partial\Omega$, de bord $\partial\Gamma$ (la ligne de contact), un domaine du bord de Ω sur lequel s'appliquent les conditions de saut

à l'interface. Soient $\phi_{\mathbf{u}} \in V$, $\phi_p \in Q$ et $\phi_T \in \Theta$ des fonction tests admissibles provenant des espaces fonctionnels V , Q et Θ pour la vitesse, la pression et la température respectivement. Un exemple classique d'espaces fonctionnels utilisés conjointement pour les équations de Navier-Stokes est $(V, Q, \Theta) = (H^1(\Omega)^n, L^2(\Omega), H^1(\Omega))$.

Afin de garder les équations écrites en formulation variationnelle concises, les expressions qui suivent emploient la notation utilisant la dérivée convective :

$$\frac{DA}{Dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\text{conv}} \cdot \nabla) A \quad (4.29)$$

4.3.1 Formulation variationnelle des équations de Navier-Stokes

La forme variationnelle des équations de Navier-Stokes retenue pour ces travaux, ici écrite en régime compressible, est :

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(\nabla \cdot \mathbf{u} + \alpha \frac{Dp}{Dt} - \beta \frac{DT}{Dt} \right) \phi_p \right\} dV = 0 \quad (4.30a)$$

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho \mathbf{g} \right) \cdot \phi_{\mathbf{u}} + \bar{\bar{\boldsymbol{\sigma}}} : \nabla \phi_{\mathbf{u}} \right\} dV = \int_{\partial\Omega} \{ (\bar{\bar{\boldsymbol{\sigma}}}\mathbf{n}) \cdot \phi_{\mathbf{u}} \} dS \quad (4.30b)$$

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(\rho c_p \frac{DT}{Dt} - \beta T \frac{Dp}{Dt} - \bar{\bar{\boldsymbol{\tau}}} : \nabla \mathbf{u} \right) \phi_T + (\lambda \nabla T) \cdot \nabla \phi_T \right\} dV = \int_{\partial\Omega} \{ ((\lambda \nabla T) \cdot \mathbf{n}) \phi_T \} dS \quad (4.30c)$$

La forme variationnelle des équations en régime incompressible s'obtient aisément à partir de ces équations, en annulant simplement les variables qui caractérisent la compressibilité α et β et en utilisant la forme incompressible du tenseur des contraintes visqueuses (Équation (4.17)).

Les intégrales sur le bord du domaine, dans les membres de droite des équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie, correspondent à des conditions aux limites dites naturelles ou de Neumann. Elles traduisent les flux qui entrent et sortent du domaine : la force normale s'appliquant sur le bord du domaine dans le premier cas et le flux de chaleur normal entrant ou sortant du domaine dans le second cas.

4.3.2 Formulation variationnelle de la tension superficielle

La condition de saut sur le tenseur des contraintes $\bar{\bar{\boldsymbol{\sigma}}}$ dans la direction normale (Équation (4.23)) nécessite un traitement particulier pour pouvoir être implémentée de façon compatible avec la méthode des éléments finis. Le premier terme du membre de droite requiert en effet l'évaluation de la courbure moyenne κ , qui est obtenue en utilisant les dérivées secondes de la géométrie de

l'interface et est donc sous cette forme incompatible avec l'utilisation d'éléments finis capables de représenter une solution continue (\mathcal{C}^0).

Une façon classique de procéder [37] est de substituer au terme $\kappa \mathbf{n}$ une expression utilisant le Laplacien surfacique ou opérateur de Laplace-Beltrami appliqué à la fonction identité. L'opérateur de Laplace-Beltrami, $\underline{\Delta}$ est défini de façon similaire à l'opérateur Laplacien classique, en utilisant l'opérateur de gradient surfacique :

$$\underline{\Delta}a = \underline{\nabla} \cdot \underline{\nabla}a \quad (4.31)$$

La caractérisation de Laplace-Beltrami de la courbure moyenne est une égalité classique de géométrie différentielle qui fait apparaître l'opérateur de Laplace-Beltrami dans l'expression de la tension superficielle :

$$\underline{\Delta} \text{Id}_\Gamma = -\kappa \mathbf{n} \quad (4.32)$$

avec Id_Γ la fonction identité restreinte à l'interface Γ . Il est ensuite possible d'effectuer une intégration par parties pour obtenir la forme variationnelle de la condition de saut, ce qui a pour effet d'abaisser le degré de régularité nécessaire pour pouvoir calculer la courbure moyenne.

En reprenant les mêmes notations que précédemment, la forme variationnelle de la condition de saut est alors (voir, par exemple, Ganesan et Tobiska [81] et Groß et Reusken [89] pour plus de détails) :

$$\int_\Gamma \{(\llbracket \bar{\sigma} \mathbf{n} \rrbracket - \underline{\nabla} \gamma) \cdot \boldsymbol{\phi}_u + \gamma \underline{\nabla} \text{Id}_\Gamma : \underline{\nabla} \boldsymbol{\phi}_u\} \, dS = \int_{\partial\Gamma} \{(\gamma \cos(\theta) \mathbf{t}_{\text{LS}}) \cdot \boldsymbol{\phi}_u\} \, dl \quad (4.33)$$

où \mathbf{t}_{LS} est vecteur unitaire tangent à l'interface liquide-solide au niveau de la ligne de contact et θ est l'angle de contact (voir les notations de la Figure 4.3). L'intégrale apparaissant dans le membre de droite est ici de nouveau une condition de Neumann qui permet de modéliser le comportement dynamique de la ligne de contact. La formulation que nous avons retenue pour modéliser ce terme est une simple relaxation vers l'équilibre dans laquelle l'angle imposé est constant et est égal à la valeur que l'on souhaite obtenir à l'équilibre.

La difficulté principale pour l'implémentation de la tension superficielle provient des termes contenant l'opérateur de gradient surfacique. L'intégration des équations de saut à l'interface est effectuée sur des éléments de frontière de codimension un qui existent dans l'espace physique de dimension n . Une transformation entre l'espace de dimension $n - 1$ de l'élément de référence utilisé pour l'intégration des équations et le système de n coordonnées est ainsi nécessaire, notamment pour pouvoir calculer les gradients surfaciques de la fonction identité,

des fonctions test et du coefficient de tension superficielle. La formulation mathématique disponible en Annexe A fournit une façon générique de calculer ces gradients pour des transformations d'un espace de dimension m dans un espace de dimension n ($m \leq n$).

4.3.3 Implémentation des conditions de saut à l'interface

L'implémentation des conditions de saut pour les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie se base sur le principe de la méthode dite des réactions. Dans cette formulation, des équations supplémentaires sont résolues pour calculer la force ou le flux de chaleur qui sont équivalents à l'application de conditions de Dirichlet aux frontières. Cette méthode possède l'inconvénient d'ajouter quelques inconnues supplémentaires au problème mais permet d'éviter d'écrire l'expression explicite des conditions de Neumann à l'interface.

L'implémentation que nous avons réalisée est une extension de l'approche présentée par Étienne *et al.* [68] pour les simulations d'interactions fluide-structure. On introduit pour cela deux degrés de liberté supplémentaires (inconnues du problème), λ_u et λ_T , qui correspondent aux réactions imposées par l'un des fluides sur l'autre au niveau des interfaces. Ces degrés de liberté ont ainsi pour définition :

$$\lambda_u = \int_{\Gamma} \{(\bar{\sigma}\mathbf{n}) \cdot \phi_u\} dS \quad (4.34a)$$

$$\lambda_T = \int_{\Gamma} \{((\lambda\nabla T) \cdot \mathbf{n}) \phi_T\} dS \quad (4.34b)$$

bien que ces égalités ne soient pas écrites explicitement en pratique. L'expression des réactions est donc implicite, ce qui rend ces variables indépendantes du type d'élément fini utilisé notamment.

Les conditions de Neumann qui apparaissent dans les Équations (4.30b) et (4.30c) sont ensuite décomposées en deux intégrales sur Γ et son complément relatif à $\partial\Omega$, Σ ($\Sigma = \partial\Omega \setminus \Gamma$). On substitue alors les degrés de liberté λ_u et λ_T aux conditions de Neumann sur Γ dans ces expressions et dans l'Équation (4.33) pour obtenir les équations qui, avec l'Équation (4.30a), sont résolues en pratique dans chacune des phases fluides :

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho\mathbf{g} \right) \cdot \phi_u + \bar{\sigma} : \nabla \phi_u \right\} dV = \lambda_u + \int_{\Sigma} \{(\bar{\sigma}\mathbf{n}) \cdot \phi_u\} dS \quad (4.35a)$$

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(\rho c_p \frac{DT}{Dt} - \beta T \frac{Dp}{Dt} - \bar{\tau} : \nabla \mathbf{u} \right) \phi_T + (\lambda\nabla T) \cdot \nabla \phi_T \right\} dV = \lambda_T + \int_{\Sigma} \{((\lambda\nabla T) \cdot \mathbf{n}) \phi_T\} dS \quad (4.35b)$$

ainsi que les conditions de saut à l'interface qui correspondent à la formulation variationnelle des Équations (4.23) et (4.24) :

$$\llbracket \boldsymbol{\lambda}_u \rrbracket = \int_{\Gamma} \{(\nabla \gamma) \cdot \boldsymbol{\phi}_u - \gamma \nabla \text{Id}_{\Gamma} : \nabla \boldsymbol{\phi}_u\} dS + \int_{\partial \Gamma} \{(\gamma \cos(\theta) \mathbf{t}_{\text{LS}}) \cdot \boldsymbol{\phi}_u\} dl \quad (4.36a)$$

$$\llbracket \lambda_T \rrbracket = 0 \quad (4.36b)$$

Enfin, les cinq dernières équations à l'interface restantes sont implémentées en imposant de manière forte des contraintes sur les inconnues de part et d'autre de l'interface :

$$\llbracket \mathbf{u} \rrbracket = 0 \quad (4.37a)$$

$$\llbracket T \rrbracket = 0 \quad (4.37b)$$

$$\llbracket \boldsymbol{\chi} \rrbracket = 0 \quad (4.37c)$$

$$\left(\mathbf{u} - \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial t} \right) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (4.37d)$$

$$F(\boldsymbol{\chi}) = 0 \quad (4.37e)$$

pour, respectivement, les Équations (4.21), (4.22) et (4.26), les Équations (4.25) et (4.27) et l'Équation (4.28) qui traduit la condition supplémentaire pour les déplacements des nœuds de l'interface dans la direction tangentielle.

L'implémentation sous forme forte de ces conditions assure que les inconnues de part et d'autre de l'interface sont exactement égales. Le principal défaut de ce choix cependant est que la condition de comptabilité des vitesses du fluide et du pseudo-solide à l'interface nécessite que les degrés de liberté de \mathbf{u} et de $\boldsymbol{\chi}$ aient la même définition, ce qui se traduit par l'obligation d'utiliser des éléments finis isoparamétriques dans notre cas. Une alternative possible consisterait à implémenter ces conditions de saut sous forme faible.

CHAPITRE 5 VÉRIFICATION ET VALIDATION DES MODÈLES IMPLÉMENTÉS ET UTILISÉS

Ce chapitre présente la méthode de vérification et de validation des développements qui a été suivie. Les notions de vérification et validation sont définies en termes génériques par la norme ISO/IEC/IEEE 15288:2015 [107] (voir aussi [106]) :

*The purpose of the Verification process is to provide objective evidence that a system or system element fulfills its specified requirements and characteristics.*¹

*The purpose of the Validation process is to provide objective evidence that the system, when in use, fulfills its business or mission objectives and stakeholder requirements, achieving its intended use in its intended operational environment.*²

*The Verification process determines that the “product is built right”. The Validation process determines that the “right product is built”.*³

Pour notre application, les processus de vérification et de validation permettent de s’assurer respectivement que les modèles sont correctement implémentés et qu’ils sont capables de représenter la réalité physique sur les cas d’application que l’on souhaite être capables de simuler numériquement. La procédure de vérification se base sur la méthode des solutions manufacturées tandis que des cas tests dont une solution approximative peut être obtenue analytiquement ont été utilisés lors de la procédure de validation.

5.1 Vérification de l’implémentation

La vérification d’un code est l’étape où l’on s’assure que les modèles, équations et méthodes numériques ont bien été implémentés. Cette étape du développement d’un code de simulation permet de confirmer que ce qui a été implémenté correspond à ce que l’on souhaitait implémenter.

La méthode des solutions manufacturées [63], ou MMS (*Method of Manufactured Solution*), est une méthode systématique qui est couramment utilisée pour les besoins de vérification. Elle repose sur le choix par l’utilisateur d’une solution analytique arbitraire mais suffisamment

1. Le but du processus de Vérification est de fournir des preuves objectives qu’un système ou qu’un élément d’un système répond aux exigences et aux caractéristiques spécifiées.

2. L’objectif du processus de Validation est de fournir des preuves objectives que le système, lorsqu’il est utilisé, répond aux objectifs d’affaires ou de sa mission ainsi qu’aux exigences des parties prenantes, en réalisant l’usage prévu dans l’environnement opérationnel prévu.

3. Le processus de Vérification détermine que le « produit est bien construit ». Le processus de Validation détermine que le « bon produit est construit ».

complexe pour que tous les termes des équations que l'on souhaite résoudre soient des fonctions non identiquement nulles de l'espace et du temps. Des termes sources dans les équations permettent d'assurer que la solution manufacturée ainsi choisie est bien une solution exacte du problème modifié.

Le processus de vérification requiert ensuite la simulation de plusieurs cas utilisant différentes valeurs pour la taille des éléments et/ou pour le pas de temps. On peut ici procéder de façon systématique en divisant les valeurs d'origine par un facteur r puis par r^2 et ainsi de suite, par exemple. La connaissance de la solution exacte du problème modifié permet alors de calculer l'erreur exacte commise sur la solution et de comparer son évolution, en fonction de la taille des éléments ou du pas du temps, aux ordres théoriques de convergence des méthodes numériques utilisées.

La vérification pour les problèmes instationnaires est compliquée par l'interaction entre les méthodes numériques en temps et en espace puisque l'accumulation d'erreurs spatiales cause une augmentation de l'erreur temporelle et vice-versa. Diverses approches sont possibles pour résoudre ce problème, comme discuté par Étienne *et al.* [79].

5.1.1 Solution manufacturée sur un domaine annulaire

Présentation du cas de calcul

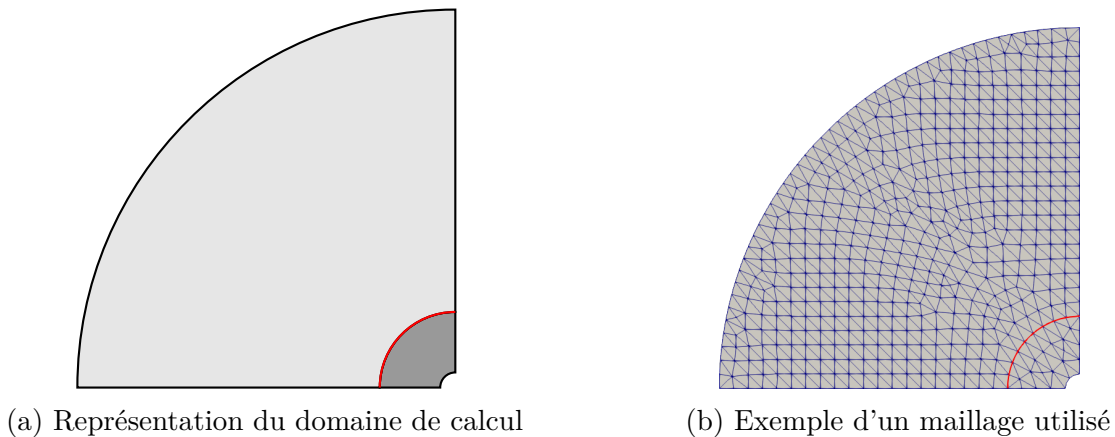


Figure 5.1 Représentation du domaine de calcul utilisé pour la procédure de vérification. Les deux fluides compressibles et immiscibles (en gris clair et gris foncé) sont séparés par une interface (en rouge) qui se dilate et se contracte au cours du temps.

La procédure de vérification est effectuée sur un domaine prenant la forme du quart d'une couronne de rayon intérieur $r_{\text{int}} = 0,2$ et de rayon extérieur $r_{\text{ext}} = 5$. Pour ce problème, deux fluides compressibles et immiscibles sont séparés par une interface circulaire de rayon initial

unitaire ($r_{\Gamma}(t = 0) = 1$), comme représenté sur la Figure 5.1. Les propriétés physiques des fluides, disponibles dans le Tableau 5.1, sont choisies arbitrairement afin de définir deux fluides suffisamment différents. Les propriétés thermodynamiques de référence pour ce problème sont disponibles elles aussi dans ce tableau et doivent être identiques pour les deux fluides. Les dimensions sont ici arbitraires et on considèrera donc que le problème est adimensionnel.

Tableau 5.1 Propriétés physiques des fluides et propriétés thermodynamiques de référence utilisées pour la procédure de vérification

	Fluide 1 (gris clair)	Fluide 2 (gris foncé)
Équation d'état	Gaz parfait	
Pression de référence p_r	100	
Température de référence T_r	10	
Masse volumique de référence ρ_r	1	10
Viscosité dynamique μ	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-2}$
Capacité thermique c_p	100	5
Conductivité thermique λ	0,1	1
Champ de pesanteur \mathbf{g}	(1, 1)	(-1, -1)
Coefficient de tension superficielle γ	0,1	

La solution manufacturée retenue pour ce cas possède une expression très simple en coordonnées polaires puisqu'elle est uniquement dépendante de la coordonnée radiale. Sa seule dépendance est ainsi selon r et la seule composante non nulle des vecteurs est leur composante radiale. Son expression en coordonnées cartésiennes assure cependant que tous les termes apparaissant dans les équations de Navier-Stokes ne sont pas identiquement nuls. De plus, les expressions des variables dépendantes ne sont pas des fonctions polynômiales dans les coordonnées cartésiennes x et y , ce qui assure que la solution manufacturée n'est pas comprise dans l'espace de discrétisation des éléments finis utilisés et l'erreur de discrétisation ne peut donc pas être nulle (à la précision des calculs en virgule flottante près). De même, la dépendance en temps de la solution apparaît sous la forme d'une fonction sinusoïdale qui ne peut pas être représentée exactement à l'aide de l'intégrateur en temps utilisé.

Les conditions aux limites sont obtenues à partir de la solution manufacturée. Pour ce cas, des conditions aux limites essentielles (conditions de Dirichlet) sont appliquées sur les plans de symétrie de la couronne et des conditions aux limites naturelles (conditions de Neumann) sont appliquées aux quarts de cercle intérieur et extérieur respectivement.

La même solution manufacturée est utilisée comme point de départ pour vérifier l'implémen-

tation des équations différentielles résolues (intégration spatiale) et l'intégrateur temporel (méthodes BDF). Nous avons ici choisi d'adopter une approche découplée pour la vérification afin de réduire les interactions entre les erreurs en temps et en espace sur la solution. Les deux approches utilisées seront détaillées dans leurs parties respectives (Sections 5.1.2 et 5.1.3).

Expression générale de la solution manufacturée

La solution manufacturée utilisée est donnée ici en coordonnées polaires (r, θ) par simplicité. Son expression en coordonnées cartésiennes peut être facilement obtenue par la matrice de changement de base en prenant le soin de substituer $\cos \theta$, $\sin \theta$ et r par des expressions contenant uniquement les coordonnées cartésiennes x et y ($\frac{x}{r}$, $\frac{y}{r}$ et $\sqrt{x^2 + y^2}$ respectivement).

Le champ de vitesse est continu et vaut en coordonnées cylindriques :

$$u_r(r, \theta, t) = \sin(2\pi t) \quad (5.1a)$$

$$u_\theta(r, \theta, t) = 0 \quad (5.1b)$$

ce qui fait que l'interface entre les deux fluides garde au cours du temps la forme d'un quart de cercle de rayon R_Γ dont l'expression est obtenue en intégrant l'expression de u_r :

$$R_\Gamma(r, \theta, t) = 1 + \frac{1 - \cos(2\pi t)}{2\pi} \quad (5.2)$$

Le champ de température est également continu et dépend linéairement de la coordonnée radiale :

$$T(r, \theta, t) = r \sin(2\pi t) \quad (5.3)$$

tandis que le champ de pression est discontinu au passage de l'interface pour simuler l'effet d'une force interfaciale comme la tension superficielle :

$$p(r, \theta, t) = \begin{cases} r \sin(2\pi t) & \text{si } r < R_\Gamma \\ \sin(2\pi t)/r & \text{si } r > R_\Gamma \end{cases} \quad (5.4)$$

Enfin, les équations de Saint Venant-Kirchhoff utilisées par la méthode du pseudo-solide peuvent être intégrées pour obtenir une expression exacte des déplacements des points du domaine dans la direction radiale :

$$\chi_r(r, \theta, t) = \frac{r_i^2 (R_\Gamma - 1)}{r_i^2 - 1} \frac{1}{r} + \frac{1 - R_\Gamma}{r_i^2 - 1} r \quad \text{avec} \quad \begin{cases} r_i = r_{\text{int}} & \text{si } r < R_\Gamma \\ r_i = r_{\text{ext}} & \text{si } r > R_\Gamma \end{cases} \quad (5.5)$$

en supposant que les coefficients de Lamé du pseudo-solide sont constants et égaux tous les deux à un.

5.1.2 Vérification de l'implémentation des équations

La première étape de la procédure de vérification consiste à étudier le taux de convergence de l'erreur entre la solution calculée et la solution exacte lorsque le maillage est raffiné afin de vérifier que les équations sont correctement implémentées par la méthode des éléments finis. On effectue ici un découplage de l'espace et du temps aussi fort que possible dans la solution manufacturée afin d'éviter de trop fortes interactions entre l'erreur spatiale et l'erreur temporelle.

Découplage de l'espace et du temps dans la solution manufacturée

La solution manufacturée présentée dans la Section 5.1.1 est modifiée en remplaçant la partie instationnaire des expressions, $\sin(2\pi t)$, par 1. On utilise ainsi la solution manufacturée, exprimée en coordonnées polaires, qui suit pour cette première partie de la procédure de vérification :

$$u_r(r, \theta, t) = 1 \quad (5.6a)$$

$$u_\theta(r, \theta, t) = 0 \quad (5.6b)$$

$$T(r, \theta, t) = r \quad (5.6c)$$

$$p(r, \theta, t) = \begin{cases} r & \text{si } r < R_\Gamma \\ 1/r & \text{si } r > R_\Gamma \end{cases} \quad (5.6d)$$

ce qui donne la loi suivante pour l'évolution de la position de l'interface au cours du temps :

$$R_\Gamma(r, \theta, t) = 1 + t \quad (5.7)$$

On effectue de plus la résolution d'un seul pas de temps, calculé avec un petit pas d'intégration $\Delta t = 1 \cdot 10^{-6}$. L'intégration en temps est réalisée avec une méthode BDF d'ordre élevé (BDF-5) puisque l'erreur due à la discrétisation temporelle pour une même valeur du pas de temps diminue, en principe, lorsque l'ordre augmente. Afin d'utiliser une méthode d'ordre 5 dès la première itération, on fournit à l'implémentation, à partir de la solution manufacturée, les solutions à des pas de temps fictifs qui précèdent l'instant auquel on démarre l'intégration.

Étude de convergence en espace

L'étude de convergence spatiale est conduite en utilisant des maillages générés par la procédure adaptative en espace à partir des résultats obtenus sur les cas précédents. La taille moyenne des éléments h , qui est inversement proportionnelle à la racine carrée du nombre de nœuds du maillage ($h \propto 1/\sqrt{N_{\text{nœud}}}$), diminue ainsi à chaque étape, ce qui permet d'étudier le comportement de l'erreur entre la solution calculée et la solution exacte en fonction de h .

Tableau 5.2 Ordres de convergence théoriques de l'erreur pour un élément de Taylor-Hood P_2 - P_1 isoparamétrique en fonction de la taille moyenne des éléments dans les normes L^2 et H^1 pour les différentes variables dépendantes

Variable	Norme utilisée	
	L^2	H^1
$\mathbf{u}, T, \boldsymbol{\chi}$	3	2
p	2	1

Le maillage utilisé est constitué d'éléments de Taylor-Hood P_2 - P_1 isoparamétriques. Les ordres de convergence théoriques de l'erreur de discrétisation de ces éléments sont rapportés dans le Tableau 5.2, pour toutes les variables dépendantes résolues, dans les normes L^2 et H^1 . Pour toutes les variables à l'exclusion de la pression, on étudie l'erreur dans les normes équivalentes à la semi-norme H^1 qui sont adaptées à chaque variable (les normes dites « énergie », « thermique » et « déformation » respectivement), tandis que l'on utilise la norme L^2 pour la pression. Les ordres de convergence théoriques de l'erreur attendus sont ainsi tous égaux à 2 lorsque l'erreur est représentée en fonction de la taille moyenne des éléments.

La Figure 5.2 présente l'erreur exacte (*i.e.* : la différence entre la solution calculée et la solution exacte) et l'erreur estimée *a posteriori* par la technique de Zienkiewicz et Zhu sur les quatre variables dépendantes du problème : p , \mathbf{u} , T et $\boldsymbol{\chi}$. Les résultats obtenus permettent de confirmer que les quatre courbes d'erreurs exactes tendent vers zéro avec des pentes égales aux taux de convergence théoriques, une fois dans la zone de convergence asymptotique. L'implémentation de la force de tension superficielle et la formulation compressible sont ainsi vérifiées et correspondent donc à ce que l'on souhaitait implémenter dans le code.

Cette étude montre aussi que l'estimation d'erreur *a posteriori* est très bien corrélée avec l'erreur exacte et fournit des résultats qui ont tendance à se rapprocher de cette dernière à mesure que la taille moyenne des éléments diminue. Ce résultat prouve que les estimateurs d'erreur sont une bonne alternative pour calculer l'erreur commise sur la solution lorsque la solution exacte n'est pas connue.

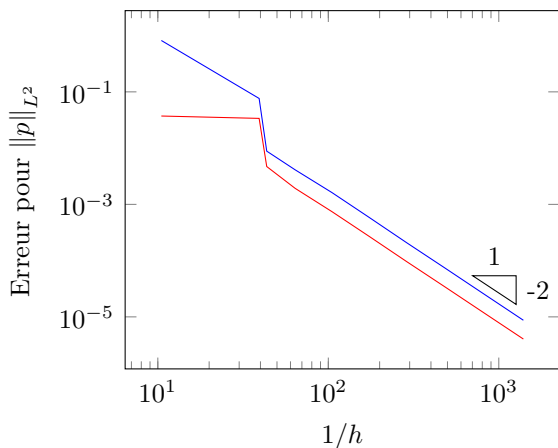
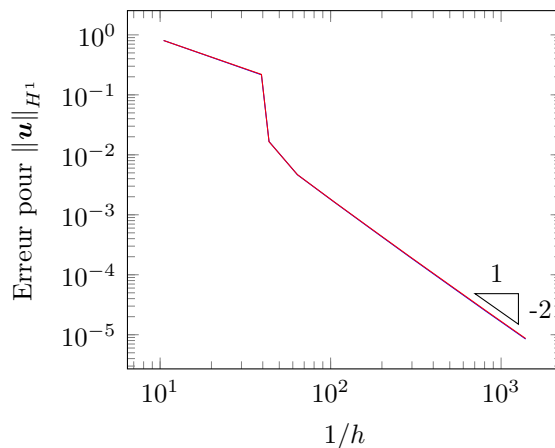
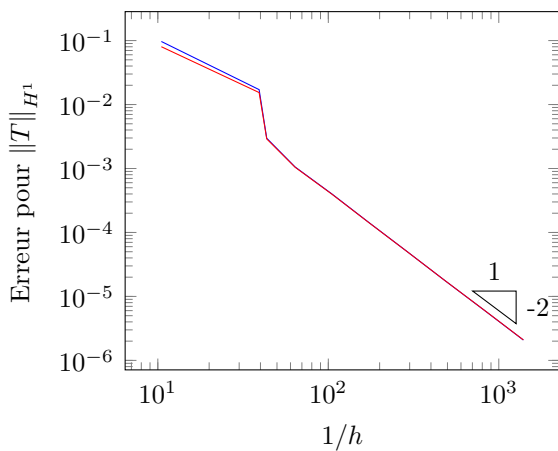
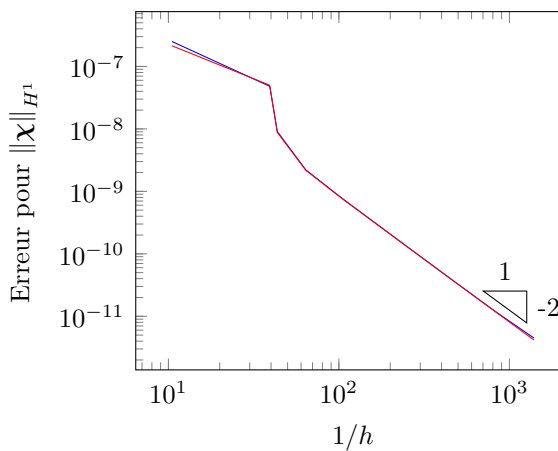
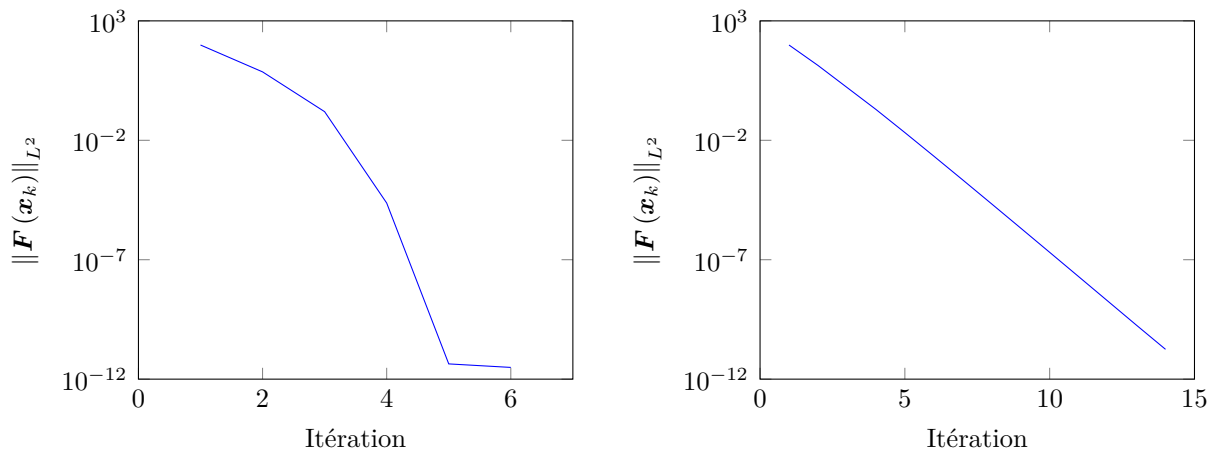
(a) Étude de convergence pour $\|p\|_{L^2}$ (b) Étude de convergence pour $\|u\|_{H^1}$ (c) Étude de convergence pour $\|T\|_{H^1}$ (d) Étude de convergence pour $\|\chi\|_{H^1}$ 

Figure 5.2 Évolution avec le raffinement de maillage de l'erreur exacte et de l'erreur estimée pour les variables p , u , T et χ , en fonction de l'inverse de la taille moyenne des éléments du maillage

Étude de convergence de la méthode de Newton-Raphson



(a) Méthode de Newton-Raphson (convergence quadratique) (b) Méthode des itérations successives de Picard (convergence linéaire)

Figure 5.3 Étude de convergence des méthodes de Newton-Raphson et de Picard. La norme L^2 du résidu global est tracée en fonction du nombre d'itérations de chaque méthode.

La Figure 5.3 compare les taux de convergences des méthodes de Newton-Raphson et de Picard. On trace pour cela l'évolution de la norme du résidu au cours des itérations de chaque méthode. La méthode de Picard possède bien une pente unitaire, ce qui indique un taux de convergence linéaire. Dans le cas de la méthode de Newton-Raphson, la norme du résidu semble suivre une parabole, ce qui suggère donc un taux de convergence quadratique.

L'ordre de convergence q d'une méthode itérative est calculé en se servant de la formule suivante :

$$q = \frac{\log \left| \frac{R_{k+1} - R_k}{R_k - R_{k-1}} \right|}{\log \left| \frac{R_k - R_{k-1}}{R_{k-1} - R_{k-2}} \right|} \quad (5.8)$$

où R_i est la norme L^2 du résidu à l'itération i .

L'ordre calculé q doit tendre vers deux pour la méthode de Newton-Raphson, ce que l'on vérifie bien dans ce cas. Ce résultat fournit une preuve supplémentaire que le travail d'implémentation de la force de tension superficielle a été effectué correctement avec la méthode du jacobien numérique.

5.1.3 Vérification de l'intégrateur en temps

La seconde étape de la procédure de vérification consiste à vérifier que les méthodes d'intégration en temps sont correctement implémentées. Le découplage de l'erreur temporelle et de

l'erreur spatiale sera ici réalisé en choisissant un maillage obtenu lors de la première étape de la procédure de vérification.

Procédure de vérification des méthodes BDF

On réalise dans cette étape une suite de simulations de la solution manufacturée présentée dans la Section 5.1.1, sur le même intervalle de temps $[0, t_{\max}]$ et en utilisant le même maillage. Pour ces simulations, on fait varier (1) l'ordre p de la méthode d'intégration utilisée, et (2) le nombre de pas de temps $n_{\delta t}$ utilisés pour discrétiser l'intervalle de temps. La taille du pas de temps $\delta t = t_{\max}/n_{\delta t}$ est donc ici constante pour chaque simulation.

Le découplage de l'erreur en temps et de l'erreur en espace est réalisé en utilisant un maillage relativement bien raffiné contenant environ 100 000 éléments et 200 000 nœuds, pour effectuer toutes les simulations. Ce maillage possède un nombre de nœuds qui ne rend pas le coût de calcul prohibitif tout en étant suffisamment raffiné pour que l'erreur due à la discrétisation spatiale n'interagisse pas trop avec l'erreur en temps. Le découplage réalisé ici est cependant beaucoup moins fort que celui qui avait été réalisé dans la première partie de la procédure de vérification.

Étude de convergence en temps

On étudie le taux de convergence de l'erreur commise sur la solution calculée par rapport à la solution exacte pour chacune des méthodes d'intégration utilisées. Les normes d'erreur sont les mêmes que celles qui ont été utilisées à la Section 5.1.2. L'ordre de convergence de l'erreur est ici uniquement une fonction de l'ordre de la méthode d'intégration en temps et il aurait été possible d'obtenir des résultats similaires avec d'autres normes d'erreur.

Les résultats présentés par la Figure 5.4 comparent les courbes de l'erreur exacte en fonction du nombre de pas de temps pour les méthodes BDF-1 à BDF-5. Pour ne pas surcharger les figures, seules les pentes théoriques de convergence pour les méthodes BDF-1 à BDF-3 ont été représentées. Les ordres de convergence théoriques des méthodes BDF-1 à BDF-3 sont bel et bien atteints de façon très satisfaisante pour toutes les variables.

Il est plus difficile d'obtenir des résultats conclusifs pour les méthodes BDF-4 et BDF-5 à partir des résultats de ce cas. L'erreur due à la discrétisation spatiale fait en effet saturer les courbes d'erreur à un niveau constant trop rapidement pour que le comportement asymptotique puisse être observé. Les ordres de convergence théoriques sont malgré tout relativement bien atteints pour p et χ aux ordres 4 et 5 et pour \mathbf{u} et T à l'ordre 4.

La complexité de cette solution manufacturée, le fort couplage entre les différentes variables

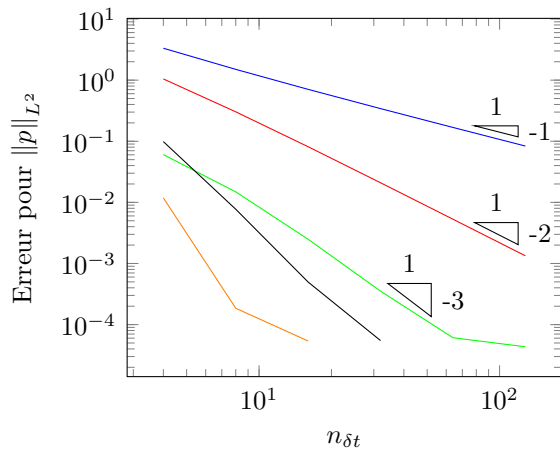
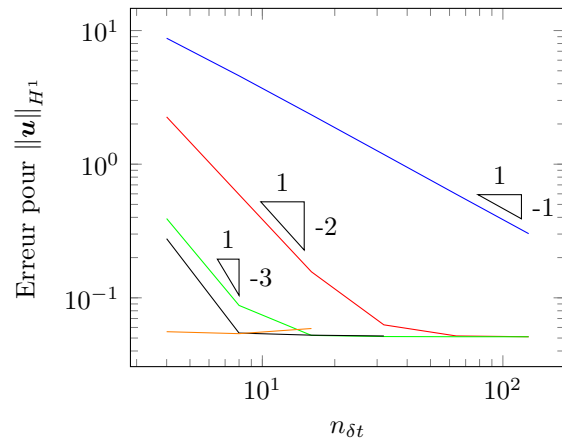
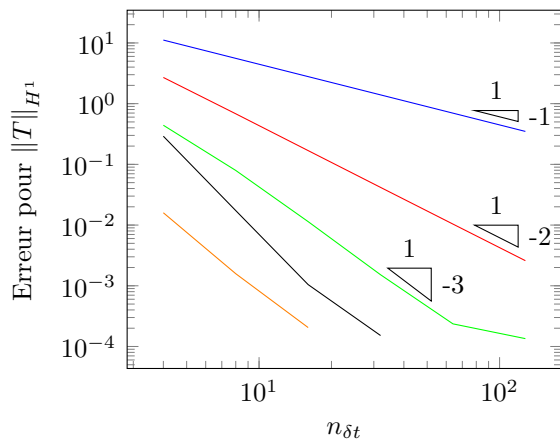
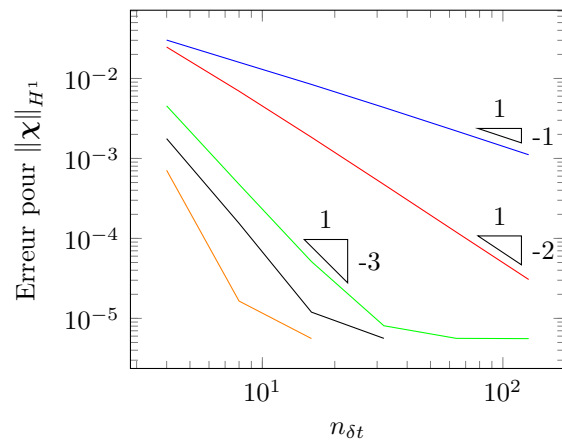
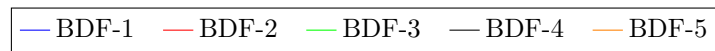
(a) Étude de convergence pour $\|p\|_{L^2}$ (b) Étude de convergence pour $\|u\|_{H^1}$ (c) Étude de convergence pour $\|T\|_{H^1}$ (d) Étude de convergence pour $\|\chi\|_{H^1}$ 

Figure 5.4 Évolution de l'erreur exacte en fonction du nombre de pas de temps pour les variables p , u , T et χ . Les résultats sont présentés pour chaque méthode BDF pouvant être utilisée avec l'implémentation disponible (BDF-1 à BDF-5).

dépendantes, la nécessité d’avoir un maillage adapté tout au long de l’intervalle de temps ainsi que l’interaction entre l’intégration en temps et l’intégration en espace rendent cette étude compliquée. Malgré tout, les résultats obtenus permettent de conclure que l’implémentation des méthodes BDF pour l’intégration en temps a été correctement effectuée. Cette conclusion est confortée par le fait que les méthodes BDF sont implémentées de façon récursive et générique et qu’il est donc très improbable qu’une erreur d’implémentation puisse affecter une méthode d’un certain ordre mais pas les autres.

5.2 Validation de l’implémentation

On présente maintenant des cas de validation qui permettent de confirmer que les modèles et les méthodes numériques que l’on utilise permettent de reproduire convenablement la physique sur des cas représentatifs de ce que l’on souhaite être capable de simuler numériquement. On utilise pour cela, dans la plupart des cas, des modèles simplifiés obtenus analytiquement, des données expérimentales auxquelles on compare les résultats obtenus numériquement ou encore d’autres résultats numériques disponibles dans la littérature. Combinée à la procédure de vérification, cette étape du processus de développement permet de confirmer que le code de simulation possède les capacités nécessaires pour répondre aux besoins émis.

5.2.1 Propagation d’une discontinuité dans un liquide

Ce premier cas permet de valider l’implémentation de l’équation d’état des gaz raidis dans le code de simulation sur cas simplifié unidimensionnel représentatif de l’impact direct d’un volume de liquide sur une paroi solide (ELP1 de la classification de Lafeber *et al.* [92], voir Section 1.1 et Figure 1.2a).

Les effets de l’impact direct peuvent être modélisés sous la forme d’une discontinuité de vitesse (la vitesse passe soudainement d’une valeur u_0 non nulle à une vitesse nulle à la paroi) qui va se propager dans le fluide. Le modèle théorique utilisé, présenté par Couty et Brosset [59], est dérivé des relations de Rankine-Hugoniot [3, 5, 6] qui fournissent les expressions des sauts à travers une discontinuité.

Au travers d’une discontinuité se déplaçant à la vitesse U , si le fluide passe d’un état noté avec un indice 0 vers un état noté avec un indice 1, alors les relations de passage de Rankine-Hugoniot traduisant la conservation de la masse et de la quantité de mouvement sont :

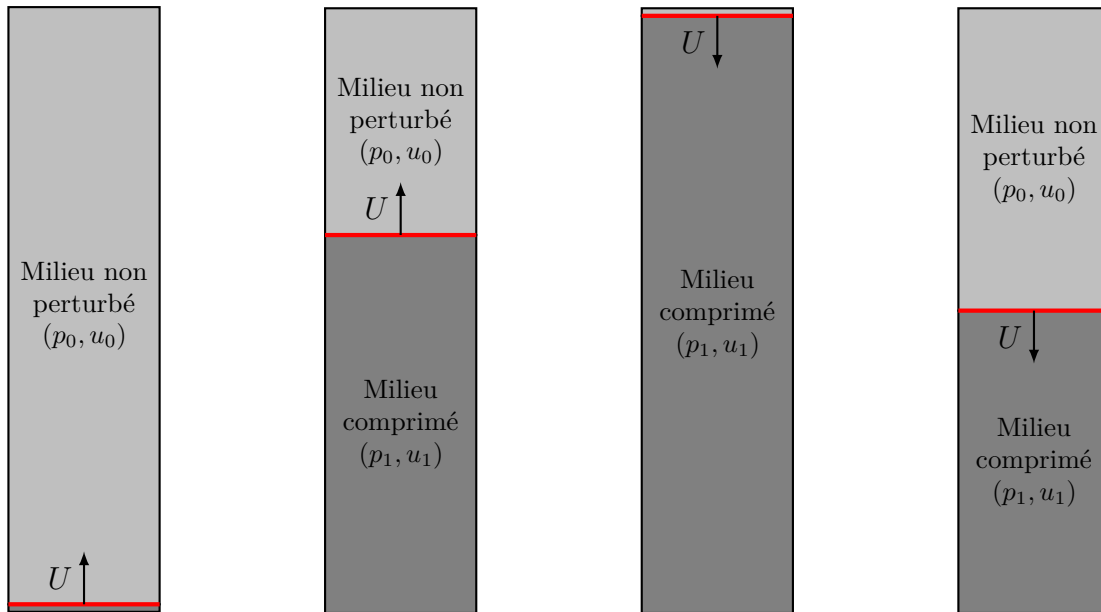
$$\rho_0 (U - u_0) = \rho_1 (U - u_1) \quad (5.9a)$$

$$p_0 + \rho_0 u_0 (u_0 - U) = p_1 + \rho_1 u_1 (u_1 - U) \quad (5.9b)$$

Ces relations permettent de faire une analyse théorique du cas et fournissent ainsi des résultats analytiques simples auxquels on pourra comparer les résultats obtenus numériquement.

Présentation du cas

On considère une colonne unidimensionnelle de longueur initiale $L_0 = 1$ m (représentée sur la Figure 5.5) remplie d'un fluide compressible suivant l'équation d'état des gaz raidis afin de modéliser un liquide faiblement compressible.



(a) État initial au moment de l'impact sur la paroi inférieure
 (b) Propagation de la discontinuité dans le domaine
 (c) Réflexion de la discontinuité sur la paroi supérieure
 (d) Propagation de la discontinuité dans le sens inverse

Figure 5.5 Représentation du comportement théorique du cas de la propagation d'une discontinuité dans un liquide au cours du temps

À l'état initial (Figure 5.5a), la vitesse du fluide est constante et égale à $u_0 \neq 0$ dans l'ensemble du domaine, sauf sur la paroi inférieure où elle est nulle, ce qui introduit initialement la discontinuité de vitesse. Cette discontinuité se propage dans le domaine (Figure 5.5b) jusqu'à atteindre la paroi supérieure où elle se reflète parfaitement (Figure 5.5c) et se propage à

nouveau dans le sens inverse (Figure 5.5d) jusqu'à atteindre la paroi inférieure, et ainsi de suite. Toutes les autres variables sont nulles à l'état initial.

Analyse théorique du problème

L'analyse théorique de ce cas est effectuée sans tenir compte des dimensions du problème puisque celles-ci peuvent ici être arbitraires. Les résultats théoriques permettront d'obtenir des échelles de temps, de vitesse et de pression qui permettront par la suite d'adimensionnaliser les résultats issus des simulations.

On considère que les milieux de part et d'autre de la discontinuité sont uniformes. Dans le milieu non perturbé, la pression (relative) est nulle ($p_0 = 0$) alors que dans le milieu comprimé, la vitesse du fluide est nulle ($u_1 = 0$) et la pression p_1 est maximale et égale à la pression d'impact. Dans ces conditions, les relations de Rankine-Hugoniot s'écrivent :

$$U = \frac{\rho_0}{\rho_0 - \rho_1} u_0 \quad (5.10a)$$

$$p_1 = \rho_0 u_0 (u_0 - U) \quad (5.10b)$$

De façon similaire à la méthodologie présentée par Dias et Ghidaglia [115], on peut ensuite approximer l'équation d'état des gaz raidis pour les liquides faiblement compressibles par la formule :

$$\rho = \rho_0 + \frac{p - p_0}{a_{\text{son},0}^2} \quad (5.11)$$

où $a_{\text{son},0}$ est la vitesse du son dans le milieu non perturbé. On obtient alors une équation du second degré pour U :

$$U(u_0 - U) = -a_{\text{son},0}^2 \quad (5.12)$$

que l'on résout, en choisissant la bonne racine, pour obtenir enfin :

$$U = -a_{\text{son},0} \left(\sqrt{1 + \frac{\text{Ma}_0^2}{4}} - \frac{\text{Ma}_0}{2} \right) \quad (5.13a)$$

$$p_1 = \rho_0 u_0 a_{\text{son},0} \left(\sqrt{1 + \frac{\text{Ma}_0^2}{4}} + \frac{\text{Ma}_0}{2} \right) \quad (5.13b)$$

où $\text{Ma}_0 = u_0/a_{\text{son},0}$ est le nombre de Mach dans le milieu non perturbé. Cette expression se simplifie dans la limite où la vitesse initiale dans le milieu non perturbé est faible devant la

vitesse du son ($Ma_0 \ll 1$), ce qui correspond aux cas qui nous intéressent :

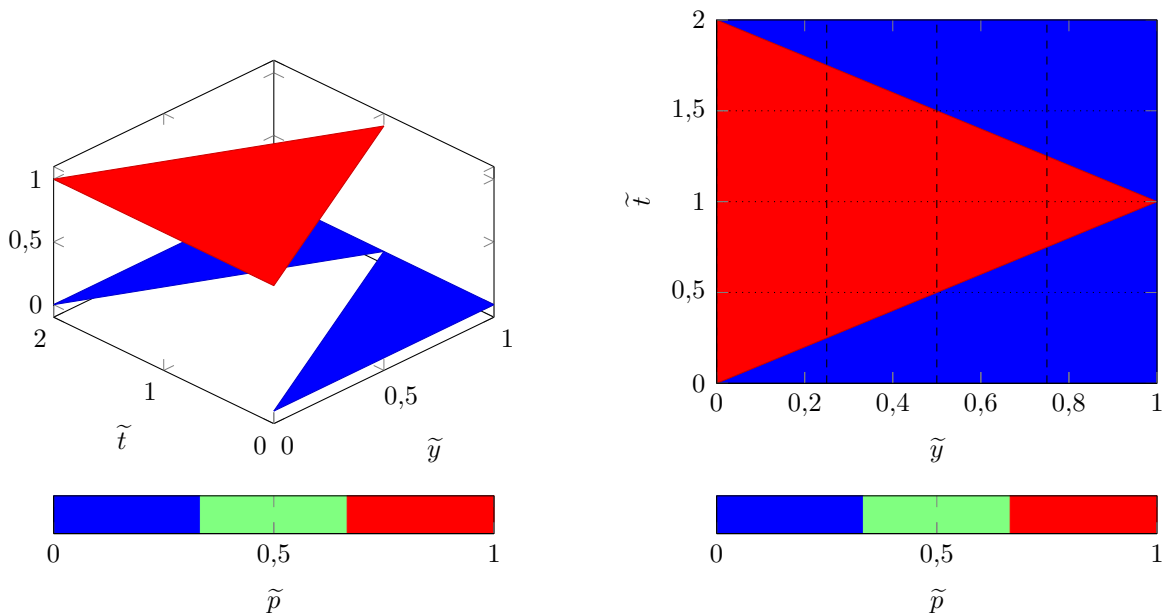
$$U = -a_{\text{son},0} \tag{5.14a}$$

$$p_1 = \rho_0 u_0 a_{\text{son},0} \tag{5.14b}$$

Dans ce cas, la discontinuité se propage à la vitesse du son dans le milieu non perturbé et on retrouve la formule de la « pression acoustique » (*acoustic pressure*) pour la pression d'impact dans le milieu comprimé.

Adimensionnalisation et résultats théoriques

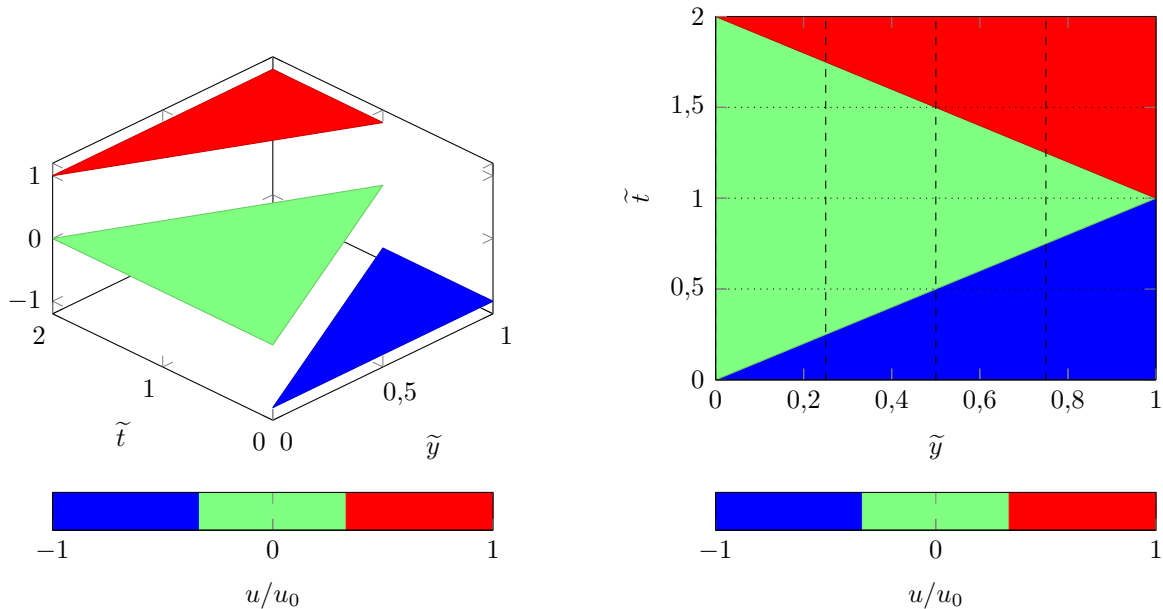
Les échelles de pression et de vitesse utilisées pour adimensionnaliser les résultats sont respectivement égales à la pression acoustique et à la vitesse du son dans le milieu non perturbé (Équations (5.14a) et (5.14b)). L'échelle de temps est simplement déduite de l'échelle de vitesse et de l'échelle de longueur L_0 . Les grandeurs adimensionnalisées sont notées par la suite avec des tildes.



(a) Vue en perspective isométrique mettant en évidence la discontinuité (b) Vue de haut indiquant les résultats numériques qui seront présentés (tirets et pointillés)

Figure 5.6 Évolution théorique de la pression au cours du temps et en espace pour l'étude de la propagation d'une discontinuité dans un liquide

Les Figures 5.6 et 5.7 présentent de façon adimensionnelle l'évolution théorique au cours du temps et en espace de la pression et de la vitesse dans le domaine. La discontinuité



(a) Vue en perspective isométrique mettant en évidence la discontinuité (b) Vue de haut indiquant les résultats numériques qui seront présentés (tirets et pointillés)

Figure 5.7 Évolution théorique de la vitesse au cours du temps et en espace pour l'étude de la propagation d'une discontinuité dans un liquide

de pression et de vitesse et sa propagation sont clairement visibles. Les résultats obtenus numériquement seront présentés en fonction du temps en cinq points également espacés dans le domaine ($\tilde{x} = \{0, 0,25, 0,5, 0,75, 1\}$) et dans tout le domaine à cinq instants différents ($\tilde{t} = \{0, 0,2, 1, 1,5, 2\}$).

Modélisation numérique du problème

Le domaine de calcul est un domaine bidimensionnel de hauteur unitaire L_0 et de largeur $h_0 \ll L_0$ qui, en complément de la discrétisation utilisée et de conditions aux limites bien choisies, permet de représenter le domaine unidimensionnel de l'étude théorique. On utilise pour cette simulation un maillage uniforme contenant 2000 éléments dans la hauteur et un seul élément dans la largeur du domaine. Les conditions aux limites sur les parois latérales sont des conditions de symétrie pour reproduire un cas unidimensionnel. La paroi inférieure est fixe et la paroi supérieure peut se déplacer verticalement pour satisfaire le changement de volume dû à la compression du fluide.

Le fluide utilisé représente de l'eau faiblement compressible dans les conditions standard de pression et de température (1 atm et 15 °C). On modélise l'eau en se servant de l'équation

Tableau 5.3 Propriétés physiques du fluide et propriétés thermodynamiques de référence pour les simulations de l'étude de la propagation d'une discontinuité dans un liquide

		Liquide (eau)
Équation d'état		Gaz raidi
Masse volumique de référence	ρ_r (kg/m ³)	1000
Pression de référence	p_r (Pa)	101 325
Température de référence	T_r (K)	288,15
Viscosité dynamique	μ (Pa · s)	$1,1080 \cdot 10^{-3}$
Capacité thermique	c_p (J/kg/K)	4184
Conductivité thermique	λ (W/m/K)	$5,9678 \cdot 10^{-1}$

d'état des gaz raidis. Les valeurs des constantes de modélisation k et p_∞ sont choisies de sorte que la capacité thermique massique à pression constante soit égale à $c_p = 1$ kcal/kg/K et que la vitesse du son dans le fluide soit égale à $a_{\text{son},0} = 1500$ m/s⁴. Les autres propriétés physiques du fluide utilisé sont rapportées dans le Tableau 5.3.

On effectue deux simulations dans la limite où le nombre de Mach dans le milieu non perturbé est faible avec respectivement $u_0 = 1$ m/s et $u_0 = 10$ m/s. Les résultats extraits des simulations réalisées sont adimensionnalisés pour pouvoir les comparer aux résultats théoriques.

Étude dans le cas où $u_0 = 1$ m/s

Les Figures 5.8 à 5.11 présentent les résultats du premier cas considéré, avec $u_0 = 1$ m/s. Les résultats issus de la simulation sont très bien corrélés aux résultats théoriques. La discontinuité se déplace à la bonne vitesse dans le domaine, se reflète bien parfaitement sur la paroi supérieure et se propage dans l'autre sens dans le domaine encore une fois à la vitesse attendue. La pression dans le domaine comprimé est constante et bel et bien égale à la pression acoustique.

Des oscillations parasites sont visibles sur les résultats obtenus numériquement. Celles-ci proviennent de la discrétisation de l'espace et du fait que la discontinuité ne peut être représentée exactement par les éléments finis utilisés. Le maillage agit ici comme un filtre passe-bas, ce qui conduit à des dépassements (*overshoots*) de part et d'autre de la discontinuité. Ce phénomène, connu sous le nom de phénomène de Gibbs, apparaît plus généralement lorsque l'on tente d'approximer des signaux discontinus (*e.g.* : fonction de Heaviside ou signal carré) à l'aide d'une somme finie d'harmoniques (série de Fourier tronquée). Pour ces cas,

4. Dans ce cas, $k = 2,866 26$ et $p_\infty = 784 893 672,7$ Pa.

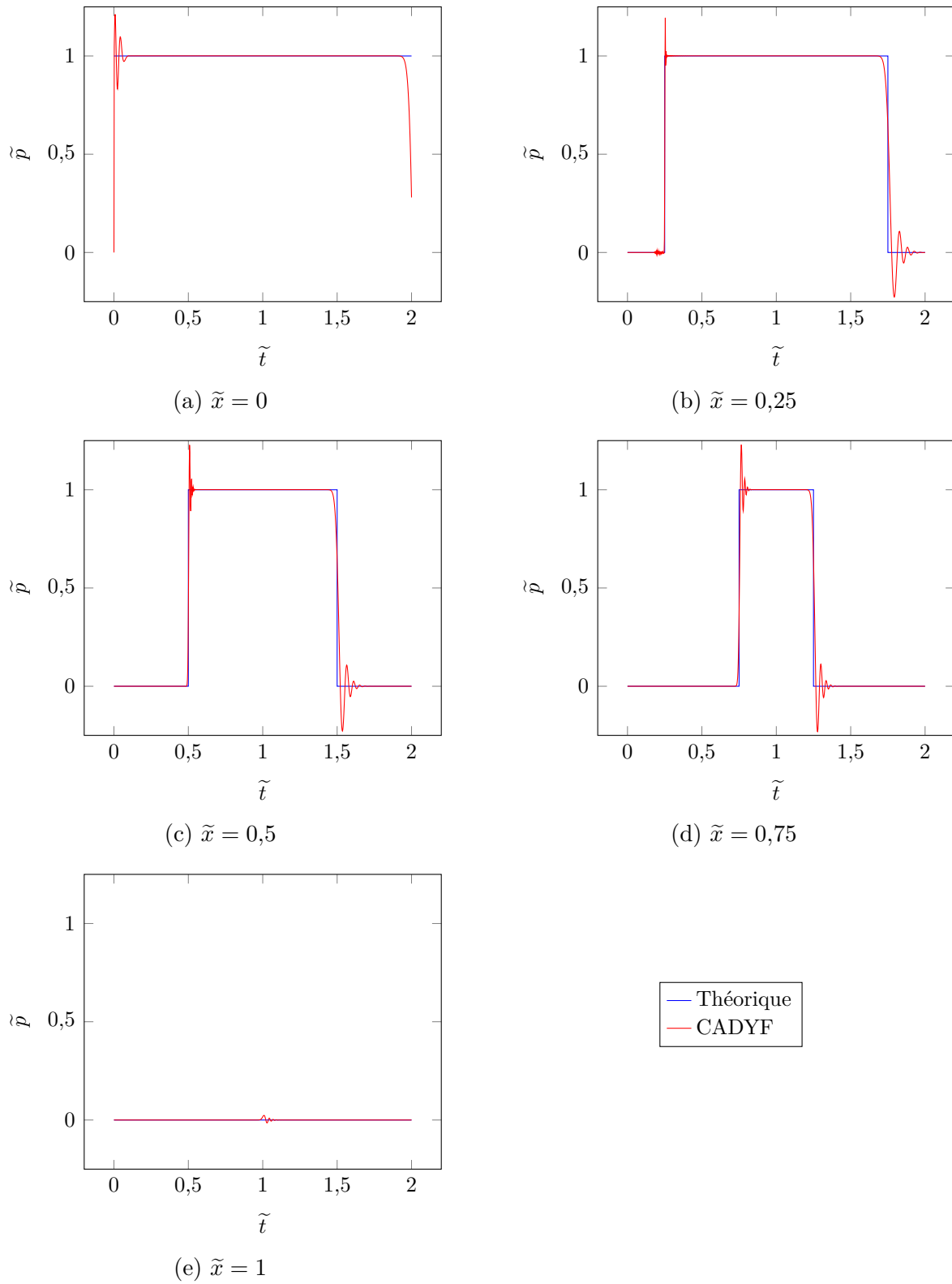


Figure 5.8 Évolution de la pression au cours du temps pour plusieurs points de la colonne dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 1$ m/s

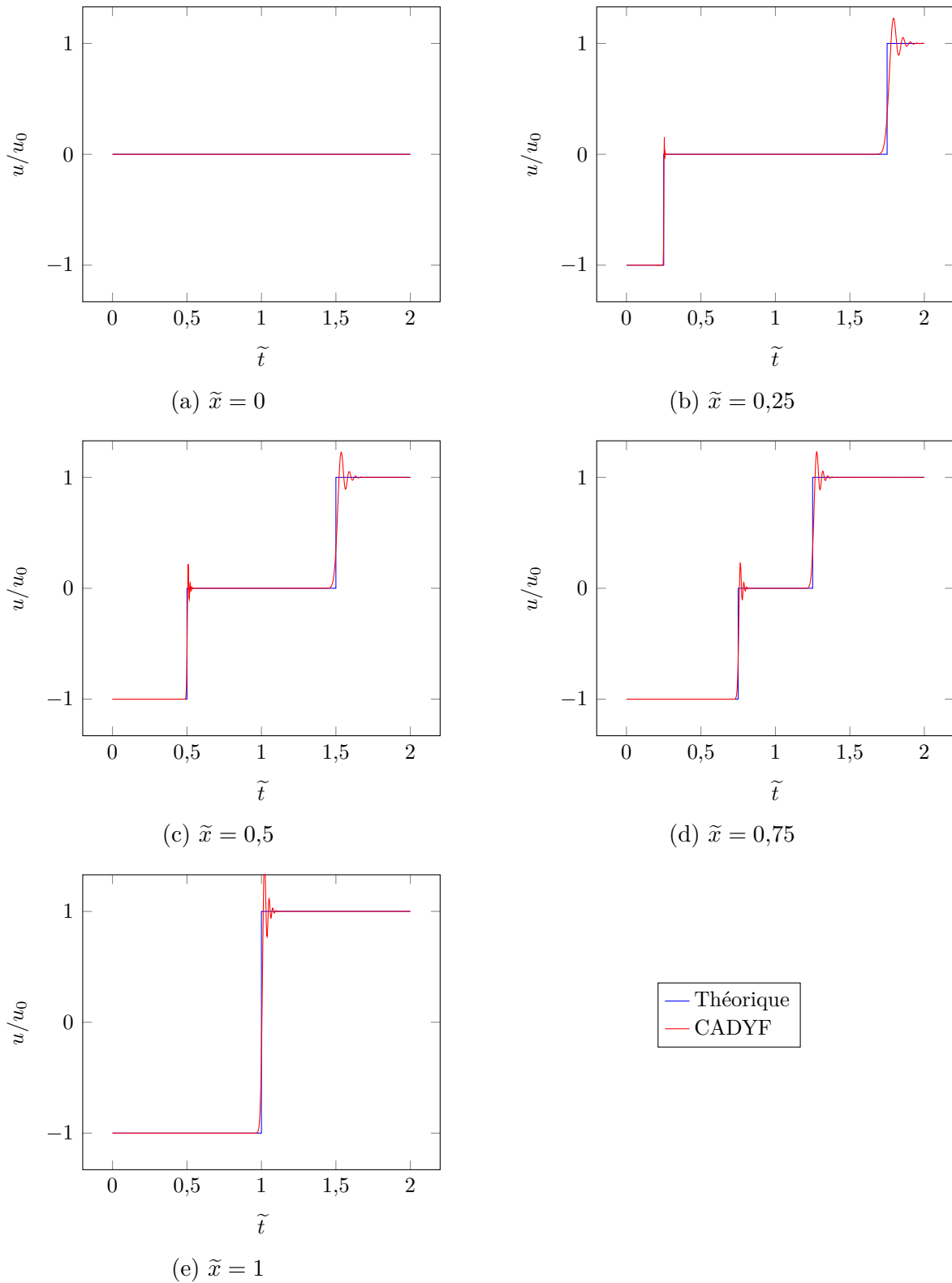


Figure 5.9 Évolution de la vitesse au cours du temps pour plusieurs points de la colonne dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 1$ m/s

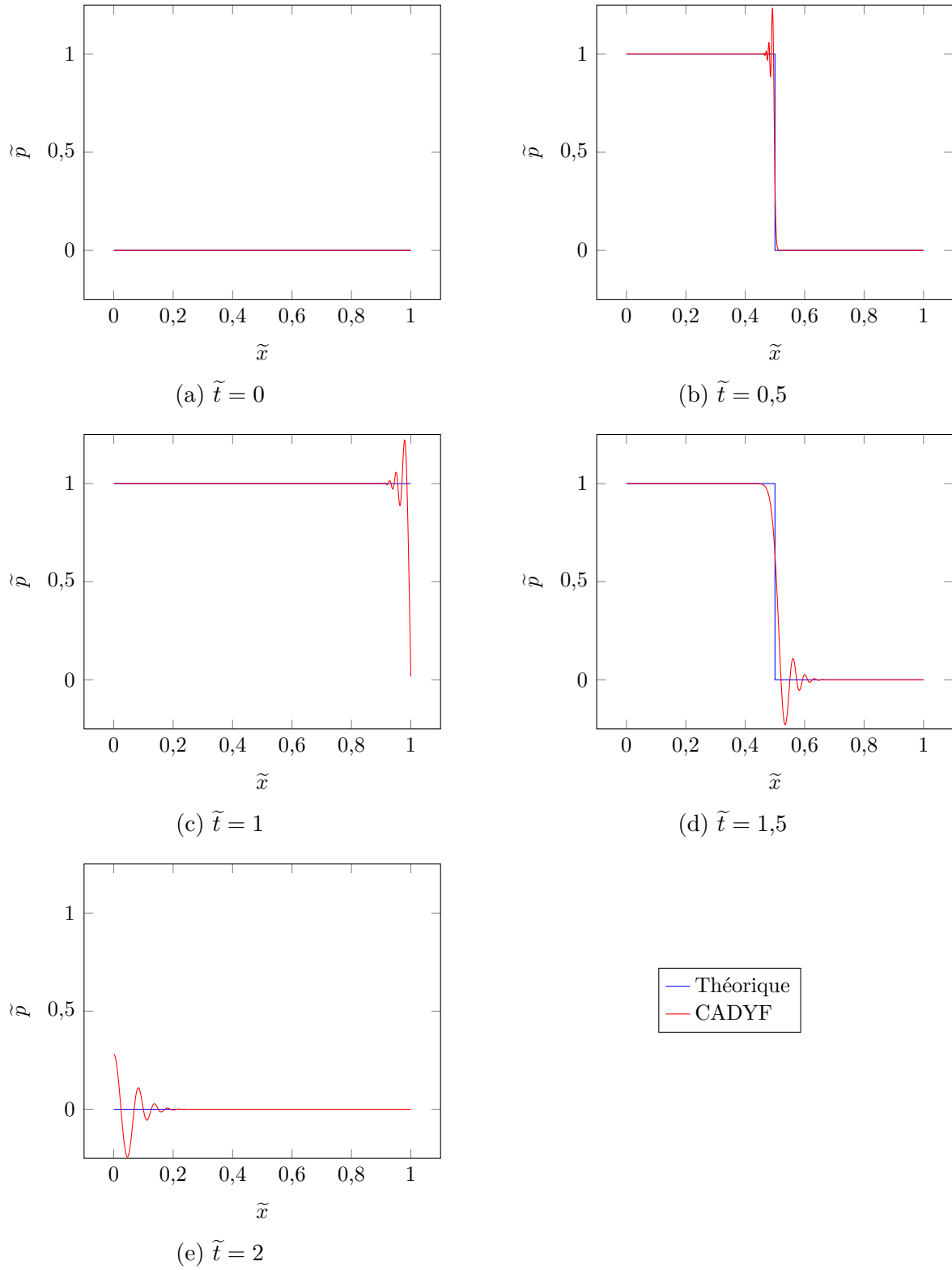


Figure 5.10 Évolution de la pression dans la colonne à plusieurs instants dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 1$ m/s

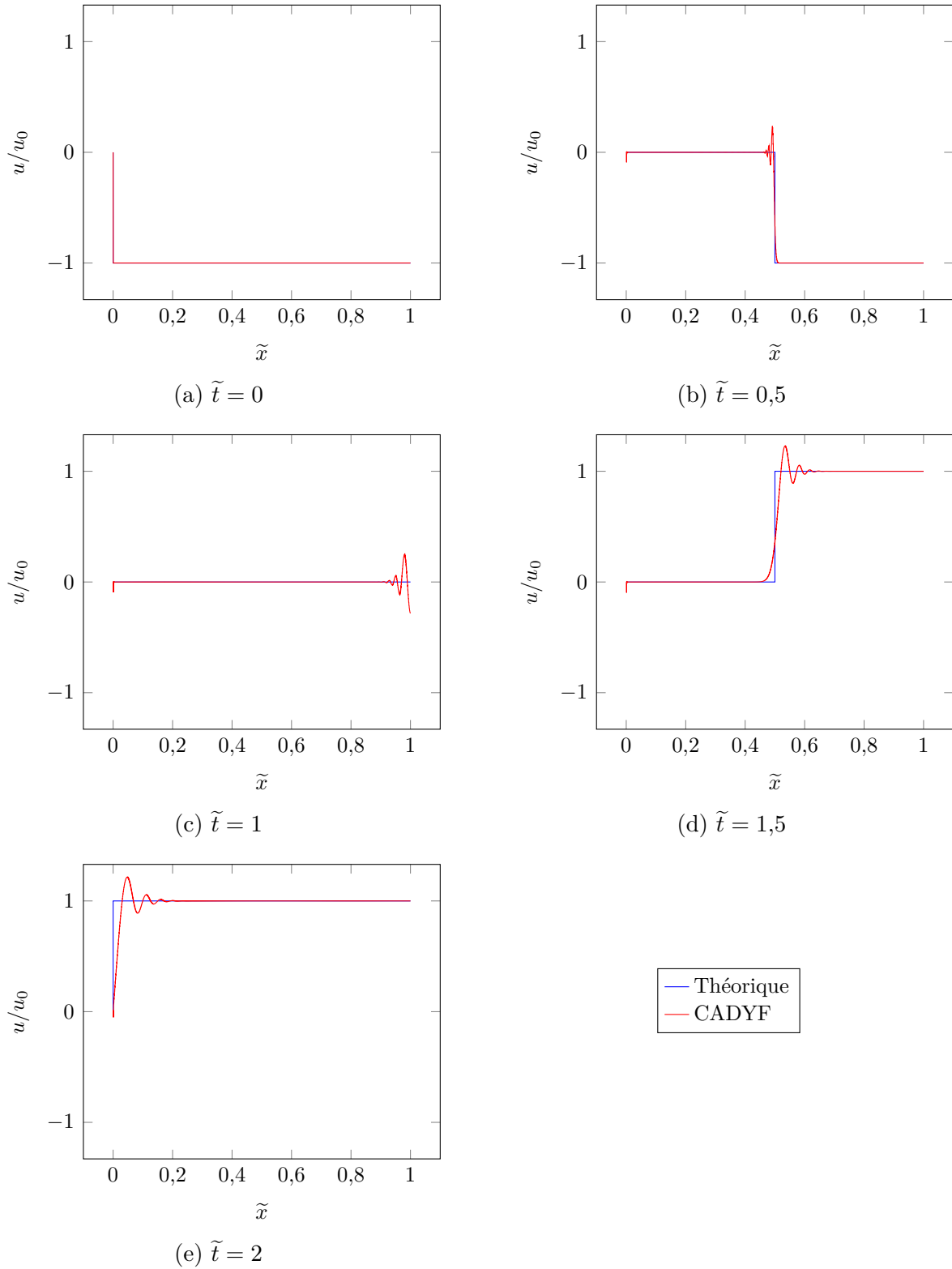


Figure 5.11 Évolution de la vitesse dans la colonne à plusieurs instants dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 1 \text{ m/s}$

l'augmentation du nombre d'harmoniques utilisées permet d'améliorer l'approximation de la fonction sauf au niveau des discontinuités où l'amplitude et la fréquence des oscillations augmentent toutes les deux. Ici, l'utilisation d'un maillage plus raffiné est équivalente à l'augmentation du nombre d'harmoniques et aurait les mêmes conséquences sur la solution calculée.

La fréquence des oscillations parasites tend à diminuer au cours de la simulation, ce qui suggère qu'une autre méthode numérique filtre le signal. L'intégrateur en temps agit ici comme un filtre passe-bas dont la fréquence varie avec le pas de temps utilisé (plus le pas de temps est grand, plus la fréquence de coupure est faible). Les oscillations parasites sont filtrées par des filtres ayant une largeur de bande de plus en plus faible étant donné que les valeurs du pas de temps augmentent au cours de la résolution du problème. Ce résultat est cohérent avec le théorème de Nyquist-Shannon (théorème d'échantillonnage) : les oscillations ayant une fréquence supérieure à la fréquence d'échantillonnage (fréquence de Nyquist) ne peuvent pas être représentées par le signal discret et sont filtrées.

Étude dans le cas où $u_0 = 10$ m/s

Les Figures 5.12 à 5.15 présentent les résultats du deuxième cas où $u_0 = 10$ m/s. On observe un comportement similaire à celui observé dans le premier cas : les résultats sont en excellent accord avec la théorie et des oscillations parasites (de plus grande amplitude que celles observées dans le premier cas) sont présentes. Le filtrage opéré par l'intégrateur en temps a moins d'effet sur les oscillations ici puisque le pas de temps n'atteint pas des valeurs aussi grandes (la largeur de bande est plus élevée tout au long de la simulation).

Remarques et conclusions

Les résultats de la simulation du cas de la propagation d'une discontinuité dans un liquide sont en parfait accord avec les résultats analytiques issus du modèle théorique employé. La formulation ainsi que les méthodes numériques employées sont robustes et très précises (pas de dissipation ou de dispersion numérique perceptible).

Les oscillations parasites nécessiteraient de réaliser un traitement qui prend généralement la forme d'une méthode de stabilisation ou de capture de discontinuité. Parmi les méthodes existantes, on citera notamment la famille de méthodes introduisant un terme de diffusion « latéral » (*crosswind*) comme la méthode proposée par Codina [44]. Ces méthodes sont philosophiquement analogues aux méthodes de stabilisation par décentrage (*upwinding*) comme les méthodes SUPG (*Streamline Upwind Petrov-Galerkin*) et GLS (*Galerkin Least*

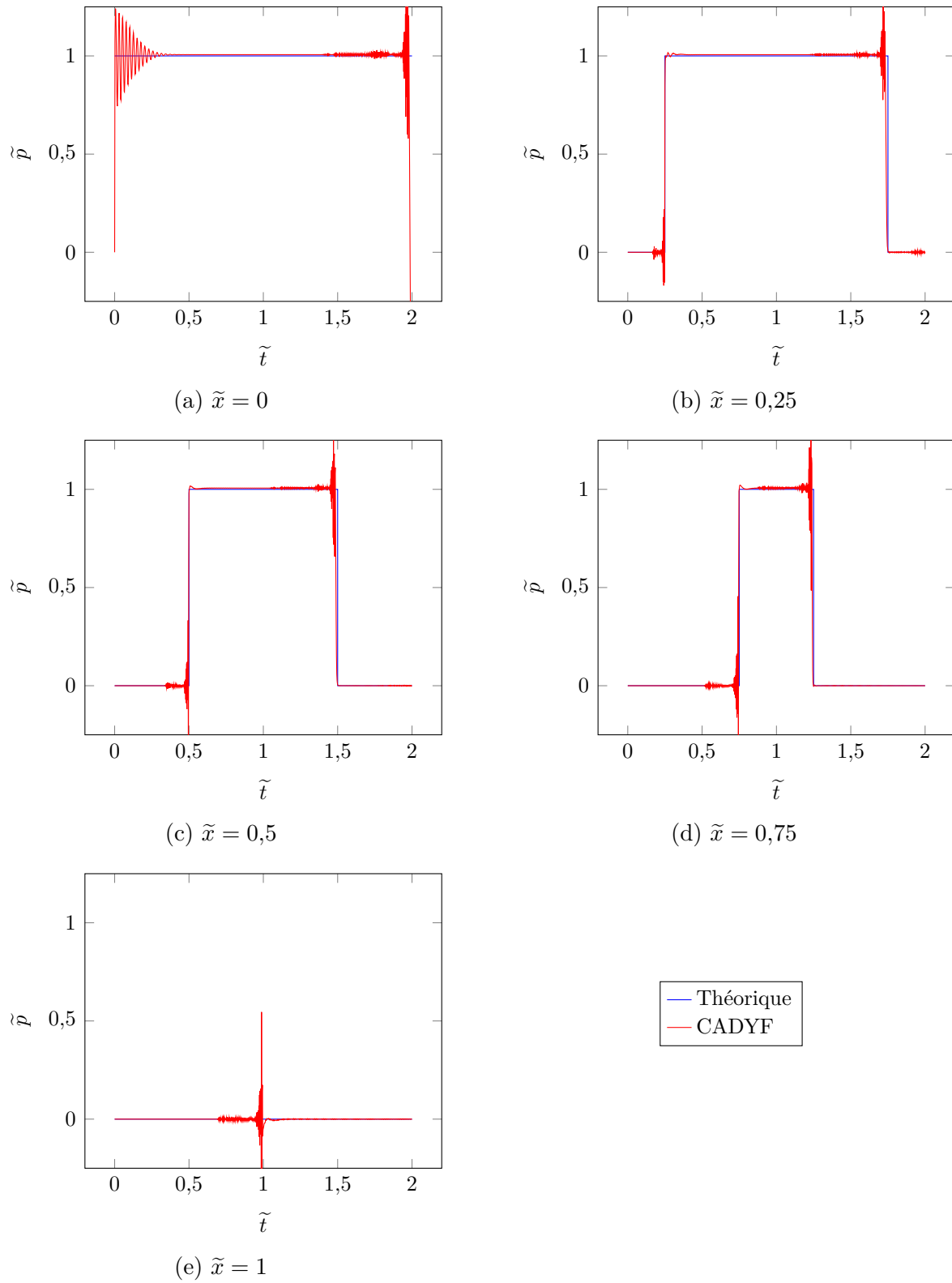


Figure 5.12 Évolution de la pression au cours du temps pour plusieurs points de la colonne dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 10$ m/s

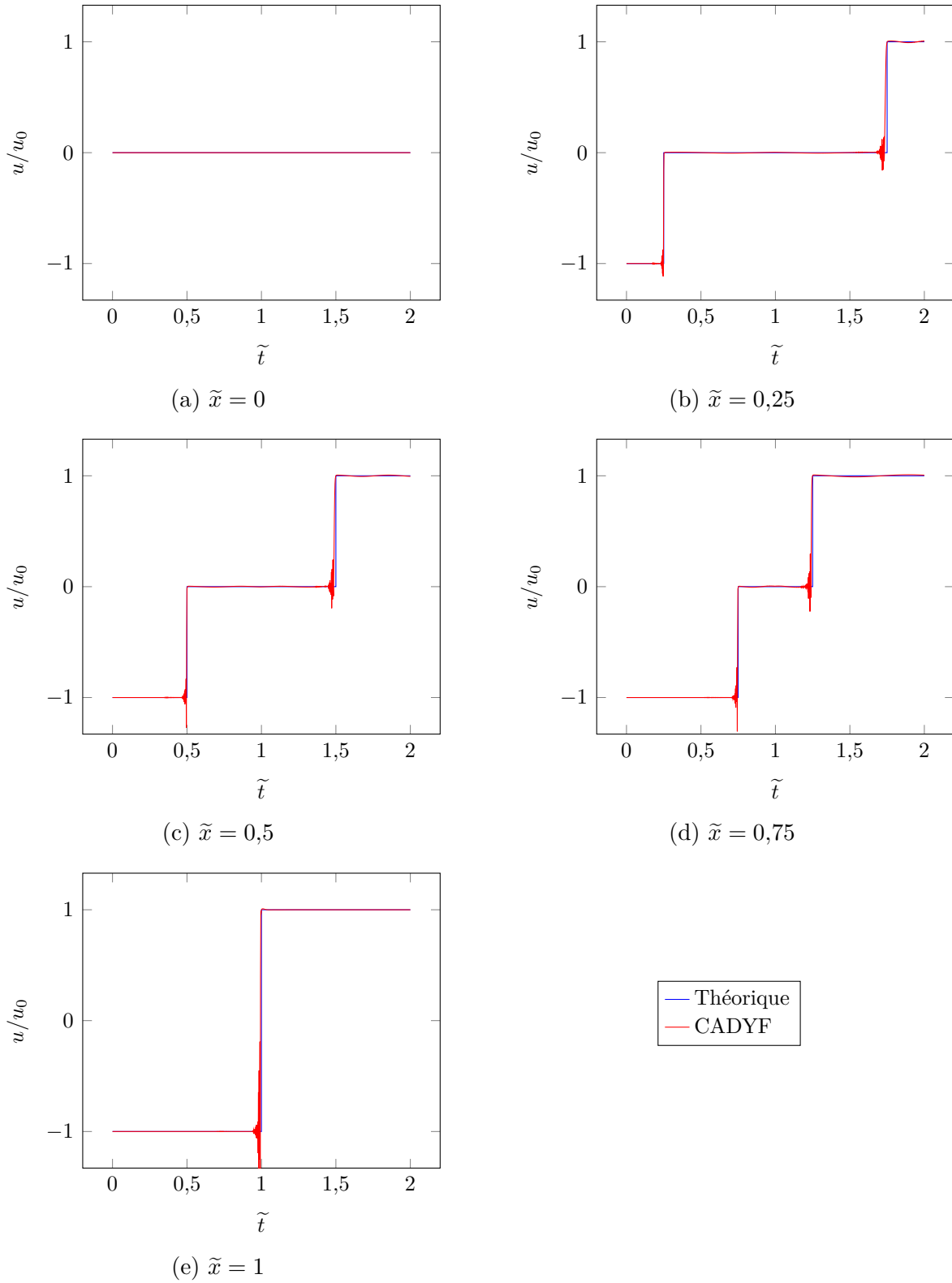


Figure 5.13 Évolution de la vitesse au cours du temps pour plusieurs points de la colonne dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 10$ m/s

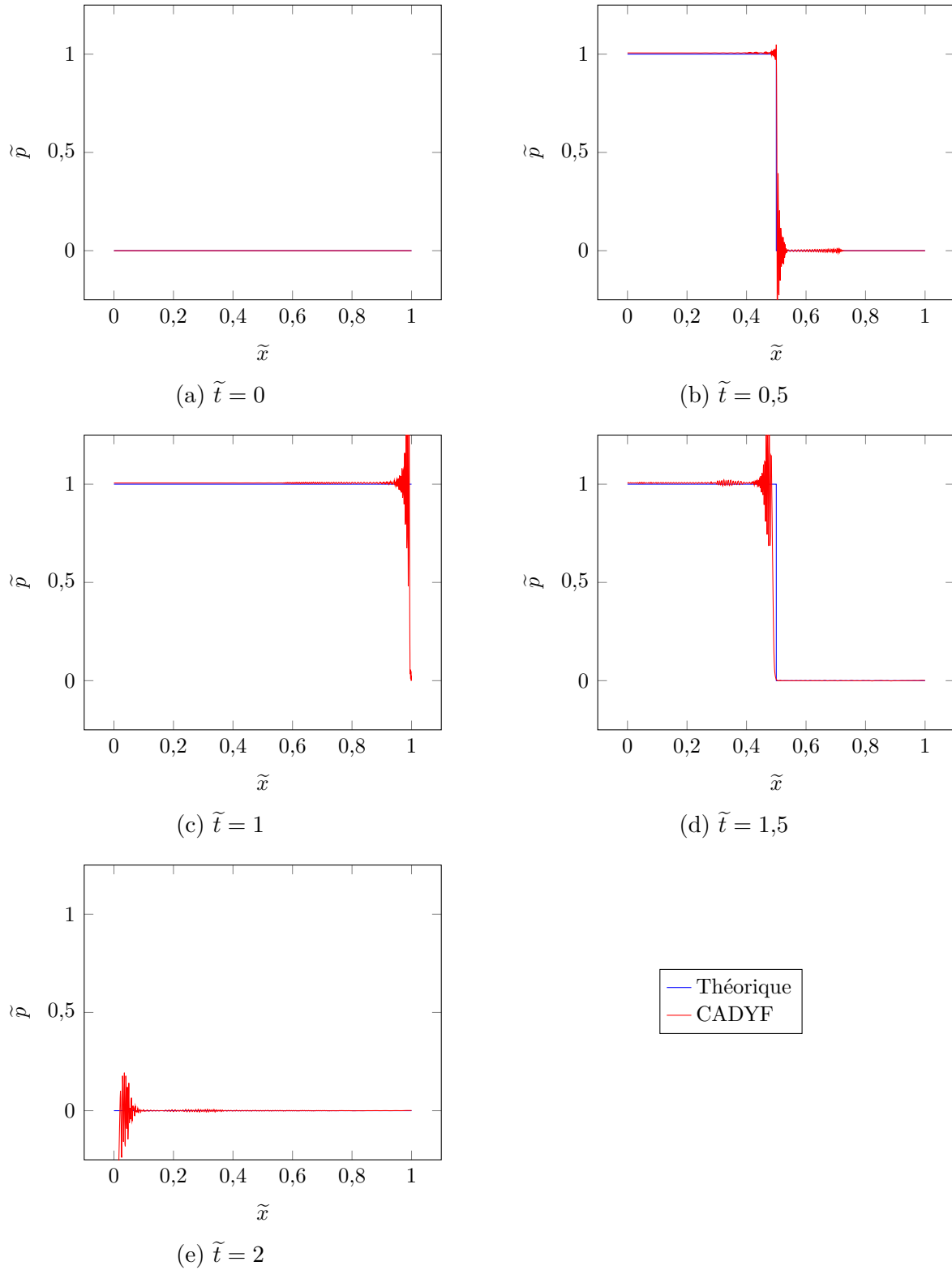


Figure 5.14 Évolution de la pression dans la colonne à plusieurs instants dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 10 \text{ m/s}$

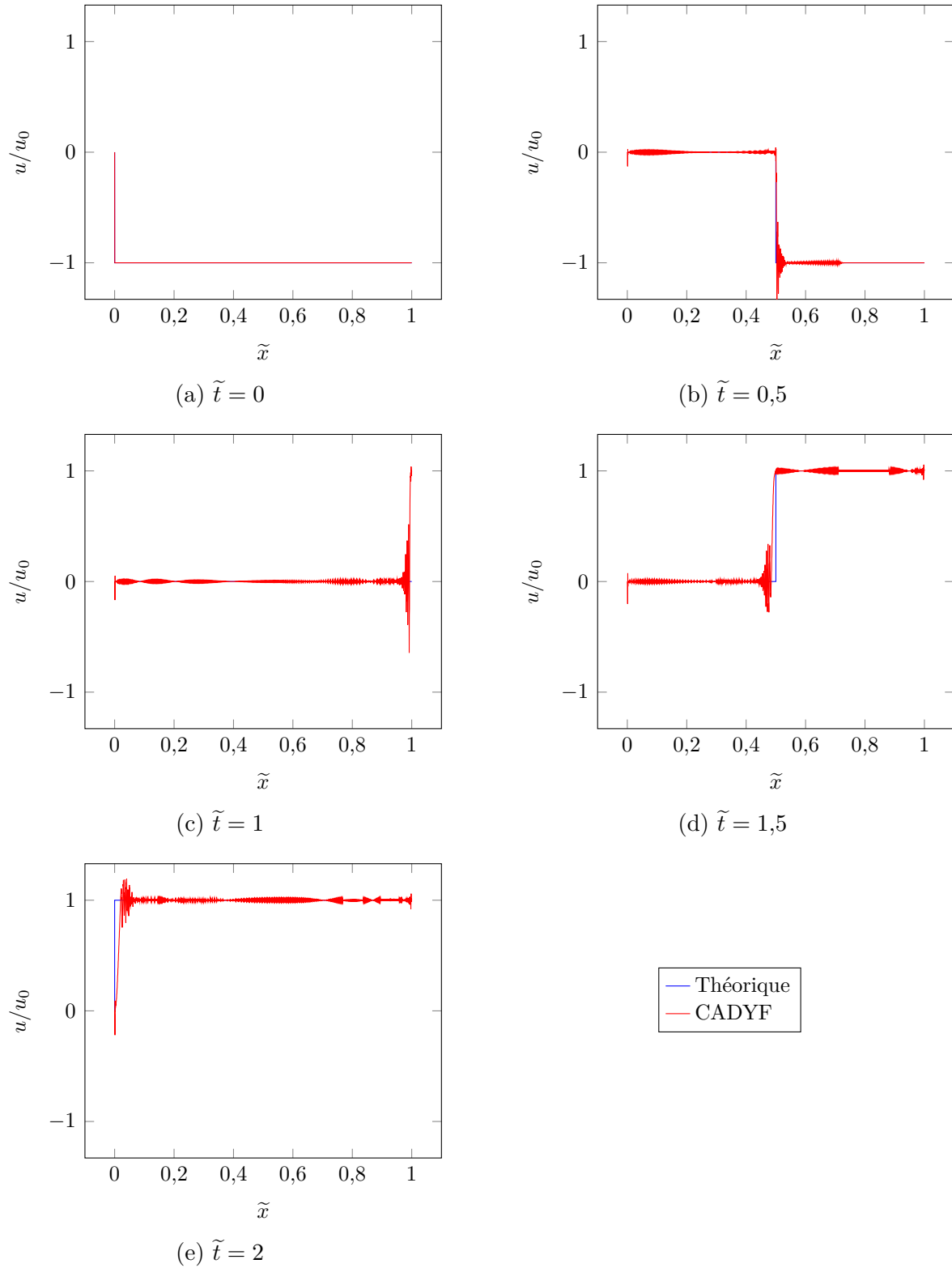


Figure 5.15 Évolution de la vitesse dans la colonne à plusieurs instants dans le cas de la propagation d'une discontinuité avec $u_0 = 10 \text{ m/s}$

Squares) que l'on utilise pour traiter un phénomène similaire se produisant dans les écoulements dominés par la convection. L'implémentation d'une méthode de capture de discontinuité permettrait d'atténuer ces oscillations non physiques mais n'est pas absolument nécessaire pour les cas qui nous intéressent.

5.2.2 Modèle généralisé de Bagnold

On étudie maintenant un cas unidimensionnel représentatif de la compression d'une poche de gaz par une vague déferlante (ELP3 de la classification de Lafeber *et al.* [92], voir Section 1.1 et Figure 1.2c). Deux études distinctes seront ici conduites. La première permet de valider l'utilisation de l'équation d'état des gaz parfaits pour modéliser les gaz tandis la seconde sert à valider l'utilisation d'équations d'état différentes dans chacun des fluides considérés pour une simulation diphasique (équation des gaz parfaits et équation des gaz raidis ici).

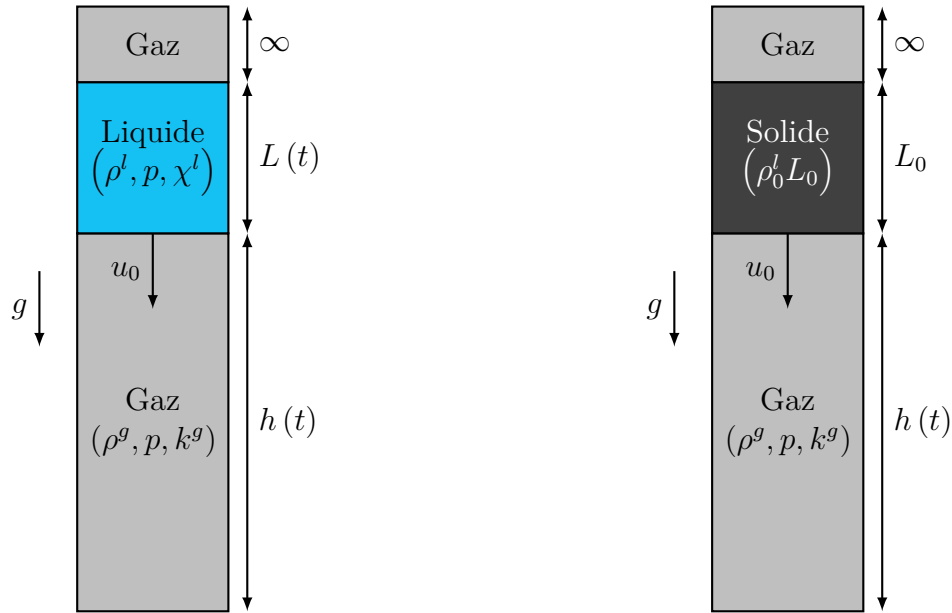
Brosset *et al.* [93] a proposé le modèle dit « modèle généralisé de Bagnold » en étendant les travaux publiés par Bagnold [9]. Ce modèle analytique unidimensionnel prend la forme d'une équation intégro-différentielle ou d'une équation différentielle ordinaire non-linéaire sous certaines hypothèses. Il permet d'obtenir une estimation de la pression maximale atteinte dans un gaz comprimé par l'impact d'un liquide faiblement compressible ou incompressible.

Présentation du cas

On considère une colonne unidimensionnelle divisée en trois segments contenant des fluides différents séparés par des interfaces, comme représenté sur la Figure 5.16. Les couches supérieure et inférieure contiennent toutes les deux des gaz (possiblement différents), modélisés en utilisant l'équation d'état des gaz parfaits, tandis que la couche du milieu contient un liquide qui peut être (1) incompressible, auquel cas on peut l'assimiler à un solide indéformable de masse constante (*i.e.* : un piston, voir Figure 5.16b), ou (2) compressible et modélisé avec l'équation d'état des gaz raidis (Figure 5.16a). La couche de gaz supérieure est, dans le cadre de cette étude, de dimension infinie. Dans ce cas particulier, sa présence ou son absence n'ont aucune influence sur les résultats. Elle ne sera par conséquent prise en compte ni dans l'étude théorique ni dans l'étude numérique.

On notera par la suite par un indice 0 les valeurs des différentes variables à $t = 0$ et par un exposant l ou g les quantités liées respectivement au liquide et au gaz. L'étude théorique et la comparaison entre les résultats théoriques et numériques utilisent des variables adimensionnelles, qui sont dénotées par un tilde dans la suite de cette étude.

Le système est soumis en permanence à une accélération inertielle constante g qui est



(a) Cas où le liquide est compressible (équation d'état des gaz raidis) (b) Cas où le liquide est incompressible (assimilé à un solide)

Figure 5.16 Représentations schématiques des différents cas considérés pour l'étude du modèle généralisé de Bagnold

assimilable au champ de pesanteur dans les équations (bien que cette accélération soit plus générique). À l'état initial, toutes les variables sauf le champ de vitesse u sont nulles ou constantes dans chacun des fluides. Le champ de vitesse a une valeur constante égale à u_0 dans la couche de liquide et varie linéairement dans la couche inférieure de gaz de zéro en bas du domaine à u_0 à l'interface avec la couche de liquide, de façon à éviter d'avoir une discontinuité de vitesse. Le mouvement de la couche de liquide et la compression de la couche inférieure de gaz sont causés conjointement par l'accélération inertielle constante et le champ de vitesse initial.

Analyse adimensionnelle du problème

Une analyse dimensionnelle du modèle généralisé de Bagnold conduite avec le théorème de Vaschy-Buckingham (ou théorème π) fait apparaître les paramètres adimensionnels représentatifs du problème. Parmi tous ces paramètres, nous nous servons d'un sous-ensemble, contenu dans le Tableau 5.4, pour cette étude. On considèrera par ailleurs que les autres paramètres ont une influence négligeable.

Les cinq premiers nombres adimensionnels caractérisent la force de l'impact du liquide et sont liés à l'accélération inertielle et à la vitesse initiale. Les deux nombres adimensionnels

Tableau 5.4 Nombres adimensionnels utilisés pour l'analyse des résultats théoriques et numériques du modèle généralisé de Bagnold

Nombre adimensionnel	Notation	Définition
Pression relative adimensionnelle maximale	\tilde{p}_{\max}	$p_{\max}/p_0 - 1$
Nombre d'impact	S	$S_g + S_b/2$
Nombre de Froude	Fr	$\frac{u_0}{\sqrt{gh_0}}$
Nombre d'impact de gravité	S_g	$\frac{\rho_0^l L_0 g}{p_0} = \frac{2}{2 + \text{Fr}^2} S$
Nombre d'impact de Bagnold	S_b	$\frac{\rho_0^l L_0 u_0^2}{p_0 h_0} = \frac{2 \text{Fr}^2}{2 + \text{Fr}^2} S$
Coefficient adiabatique du gaz	k^g	
Indice de compressibilité du liquide	χ^l	$\frac{p_0}{\rho_0^l (a_{\text{son},0}^l)^2}$
Facteur de forme	A	$\frac{L_0}{h_0}$

qui suivent caractérisent chacun la compressibilité d'un des deux fluides et le dernier nombre adimensionnel caractérise le rapport des tailles entre la couche de liquide et la couche de gaz.

Les résultats qui sont présentés par la suite comparent l'évolution de la pression relative adimensionnelle maximale $\tilde{p}_{\max} = p_{\max}/p_0 - 1$ qui est atteinte dans la couche de gaz en fonction du nombre d'impact S, dans diverses situations où les conditions initiales, la valeur de l'accélération inertielle et/ou les propriétés des fluides varient.

Analyse théorique dans le cas où le liquide est incompressible

L'équation intégró-différentielle qui permet de modéliser ce problème (voir Brosset *et al.* [93]) prend la forme simple d'une équation différentielle ordinaire non-linéaire lorsque la couche de liquide est modélisée avec un fluide incompressible. Cette équation et les conditions initiales du problème, mises sous forme adimensionnelle, fournissent l'évolution de la hauteur de la couche de gaz inférieure au cours du temps. En substituant les nombres d'impact de gravité et de Bagnold qui apparaissent naturellement par leurs expressions respectives en fonction du

nombre de Froude et du nombre d'impact, l'équation différentielle prend la forme :

$$\ddot{\tilde{h}}(t) = \left(\tilde{h}(t)\right)^{-k^g} - \frac{2}{2 + \text{Fr}^2} S - 1 \quad (5.15a)$$

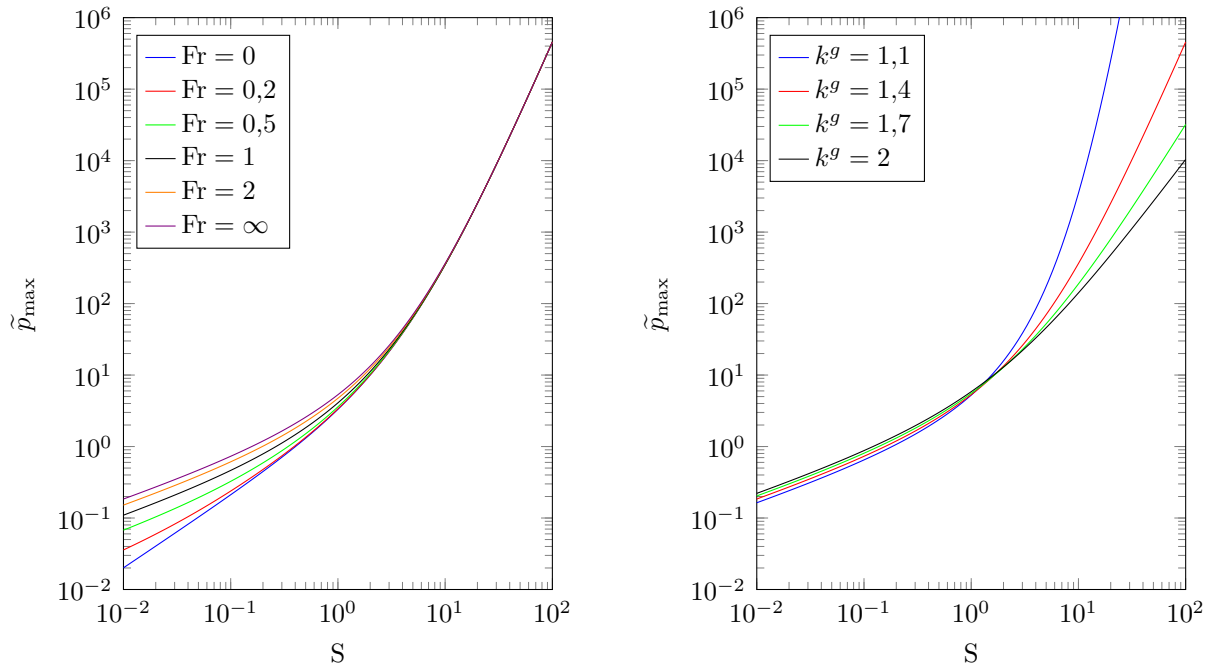
$$\tilde{h}(t_0) = 1 \quad (5.15b)$$

$$\dot{\tilde{h}}(t_0) = \text{sign}(u_0) \sqrt{\frac{2 \text{Fr}^2}{2 + \text{Fr}^2} S} \quad (5.15c)$$

Ce problème aux valeurs initiales peut être résolu numériquement à l'aide de plusieurs outils numériques, tels que ceux fournis par MATLAB ou encore la bibliothèque Python SciPy (choix retenu). La pression relative adimensionnelle est obtenue simplement à partir de la solution :

$$\tilde{p} = \left(\tilde{h}(t)\right)^{-k^g} - 1 \quad (5.16)$$

et son maximum, qui correspond au minimum de \tilde{h} est déduit de la solution numérique.



(a) Résultats théoriques pour différentes valeurs du nombre de Froude avec $k^g = 1,4$

(b) Résultats théoriques pour différentes valeurs de k^g avec $\text{Fr} = 0$

Figure 5.17 Résultats théoriques obtenus à partir du modèle généralisé de Bagnold dans le cas où le liquide est incompressible pour différentes valeurs du nombre de Froude et du coefficient adiabatique du gaz

La résolution numérique de ce problème permet d'obtenir des résultats représentés sous la

forme $\tilde{p}_{\max} = f(S)$, avec $S \in [10^{-2}, 10^2]$ dans l'étude présente. L'équation différentielle indique que la solution du problème et ainsi la pression maximale dépendent uniquement du nombre de Froude, du nombre d'impact et du coefficient adiabatique du gaz dans le cas où le liquide est incompressible.

On obtient plusieurs faisceaux de courbes en parcourant le plan d'expériences dans lequel le nombre de Froude et le coefficient adiabatique du gaz varient. On donne deux exemples de tels faisceaux de courbes obtenus analytiquement sur la Figure 5.17a (coefficient adiabatique du gaz constant et nombre de Froude variable) et la Figure 5.17b (nombre de Froude constant et coefficient adiabatique du gaz variable).

Modélisation numérique du problème

Le domaine de calcul est similaire à celui utilisé pour la simulation du cas de la propagation d'une discontinuité dans un liquide (Section 5.2.1). On utilise un domaine bidimensionnel tout en s'assurant de se ramener au cas unidimensionnel que l'on souhaite reproduire. On utilise ainsi un seul élément dans la largeur du domaine et des conditions aux limites de symétrie sur les frontières latérales.

Dans le premier cas, où le liquide est modélisé comme un fluide incompressible, on simplifie le problème en supposant que le liquide se comporte comme un piston rigide. On remplace ainsi la couche de fluide par un solide ponctuel de même masse placé sur la couche de gaz. L'équation du mouvement de ce solide est obtenue simplement en écrivant le principe fondamental de la dynamique (seconde loi de Newton).

Les simulations sont réalisées avec la forme dimensionnelle des équations de Navier-Stokes et les résultats obtenus sont par la suite adimensionnalisés. Le gaz et le liquide sont respectivement de l'air et de l'eau dans les conditions standard de pression et de température (1 atm et 15 °C), afin d'assurer que ces simulations soient représentatives des cas que l'on souhaite être capable de simuler par la suite. On suppose que l'air se comporte comme un gaz parfait tandis que l'eau est soit un fluide incompressible soit modélisée avec l'équation d'état des gaz raidis. Les propriétés des deux fluides sont rapportées dans le Tableau 5.5.

Nous avons fait le choix d'utiliser la capacité thermique massique à pression constante c_p des deux fluides pour modifier les valeurs des nombres adimensionnels qui caractérisent leur compressibilité k^g et χ^l . Par exemple, pour l'air dans le cas où $k^g = 1,4$, nous aurons $c_p = 1004,11 \text{ J/kg/K}$. Les valeurs des constantes de modélisation k et p_∞ de l'eau faiblement compressible sont choisies pour un cas de référence dans lequel la capacité thermique massique à pression constante est égale à $c_p = 1 \text{ kcal/kg/K}$ et l'indice de compressibilité du liquide est

Tableau 5.5 Propriétés physiques des fluides et propriétés thermodynamiques de référence pour les simulations du modèle généralisé de Bagnold

	Gaz (air)		Liquide (eau)	
	Gaz parfait	Incompressible	Gaz raidi	
Équation d'état				
Masse volumique de référence ρ_r (kg/m ³)	1,2257		1000	
Pression de référence p_r (Pa)	101 325	n/a	101 325	
Température de référence T_r (K)	288,15	n/a	288,15	
Viscosité dynamique μ (Pa · s)	$1,7965 \cdot 10^{-5}$		$1,1080 \cdot 10^{-3}$	
Capacité thermique c_p (J/kg/K)		variable		
Conductivité thermique λ (W/m/K)	$2,5219 \cdot 10^{-2}$		$5,9678 \cdot 10^{-1}$	

égal à $\chi_0^l = 1/22\ 500$. Ces valeurs sont identiques pour tous les cas afin de ne pas modifier les valeurs des coefficients de compressibilité de référence α_r et β_r ⁵. On utilise par ailleurs les valeurs du champ de vitesse initial u_0 et du champ de pesanteur g pour modifier les valeurs du nombre d'impact S et du nombre de Froude Fr (*via* les nombres d'impact de Bagnold S_b et de gravité S_g). Ces deux paramètres ne nécessitent pas que les propriétés des fluides soient modifiées. Enfin, le facteur de forme A du domaine est constant et unitaire dans toutes les simulations.

Études paramétriques dans le cas où le liquide est incompressible

Les résultats obtenus théoriquement et numériquement dans le cas où le liquide est incompressible sont comparés sur les Figures 5.18 et 5.19 pour différentes valeurs du nombre de Froude et du coefficient adiabatique du gaz respectivement. Les résultats numériques sont en excellent accord avec les résultats théoriques pour tous les cas considérés.

La résolution numérique de certains des cas considérés peut être difficile puisqu'il arrive que les méthodes numériques divergent ou soient incapables de converger, ce qui stoppe les simulations. Les difficultés à obtenir une solution numérique se produisent plus souvent à fort nombre d'impact lorsque le nombre de Froude est proche de zéro, ou lorsque le coefficient

5. Ici, $k = 2,890\ 99$ et $p_\infty = 788\ 491\ 467,9$ Pa.

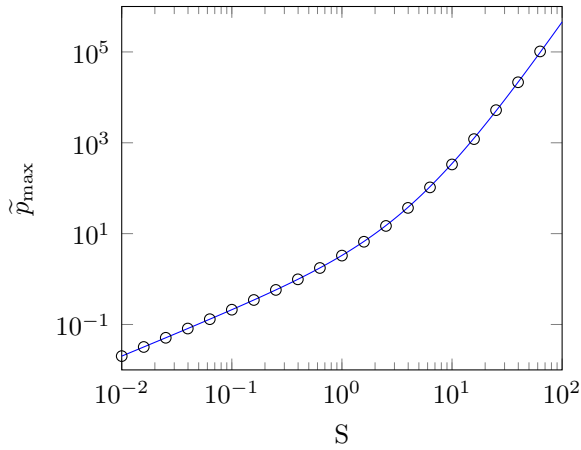
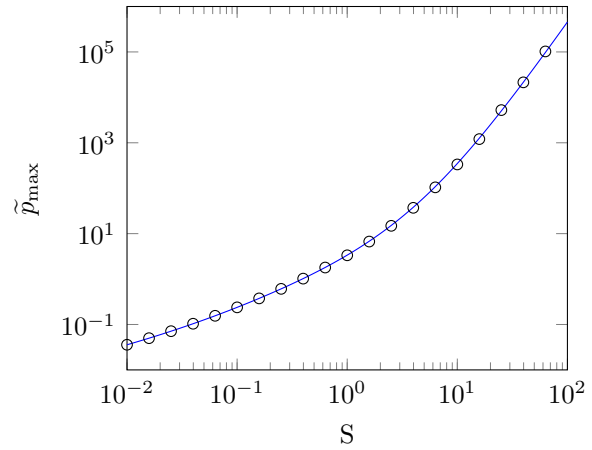
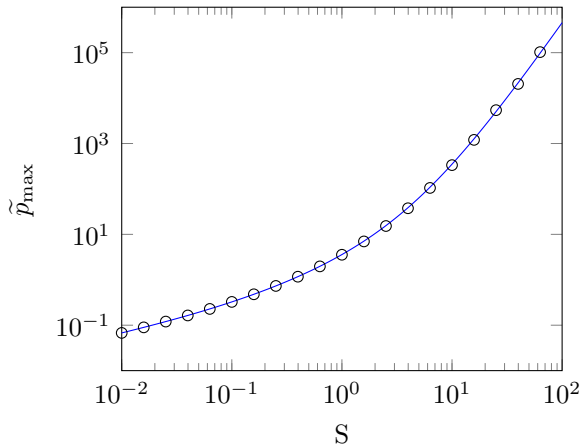
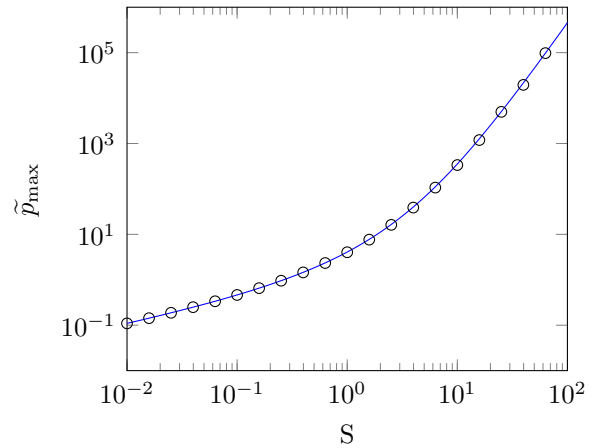
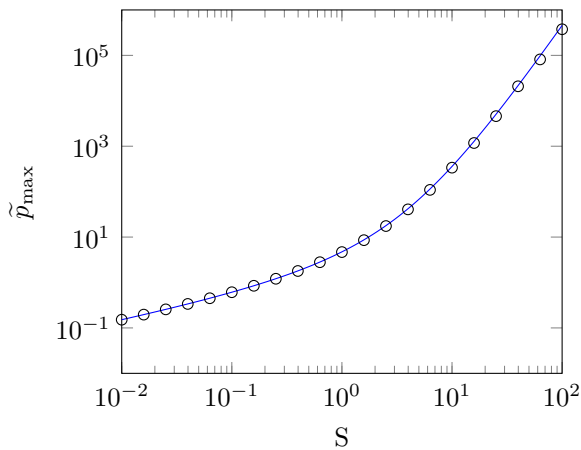
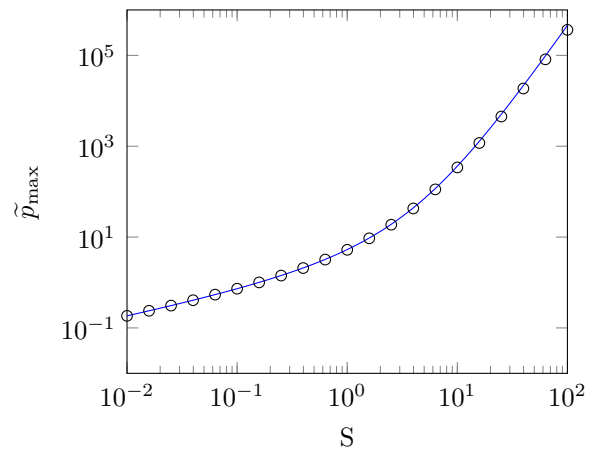
(a) $Fr = 0$ (b) $Fr = 0,2$ (c) $Fr = 0,5$ (d) $Fr = 1$ (e) $Fr = 2$ (f) $Fr = \infty$

Figure 5.18 Comparaison des résultats numériques (\circ) et théoriques ($—$) pour le modèle généralisé de Bagnold dans le cas où le liquide est incompressible (nombre de Froude variable)

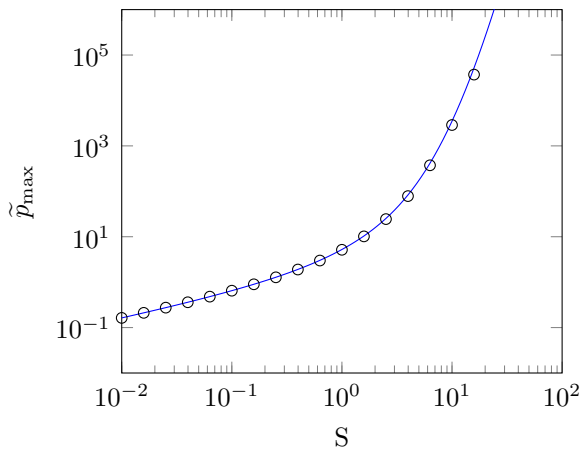
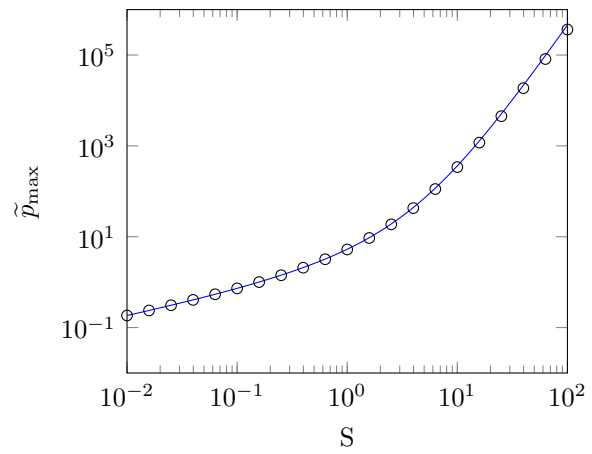
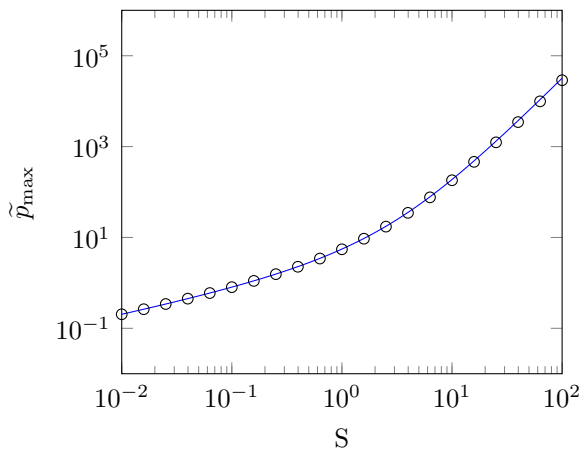
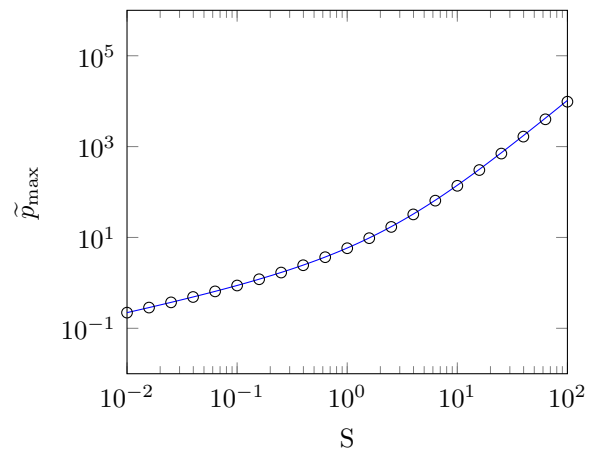
(a) $k^g = 1,1$ (b) $k^g = 1,4$ (c) $k^g = 1,7$ (d) $k^g = 2$

Figure 5.19 Comparaison des résultats numériques (\circ) et théoriques ($—$) pour le modèle généralisé de Bagnold dans le cas où le liquide est incompressible (coefficient adiabatique du gaz variable)

adiabatique du gaz est proche de un. Il aurait été possible d'obtenir des résultats pour ces cas en générant un maillage plus raffiné et en autorisant le pas de temps à prendre des valeurs plus petites, ce qui aurait représenté un coût de calcul très important. Ces cas n'auraient pas apporté d'informations additionnelles et leur étude n'a donc pas été poursuivie.

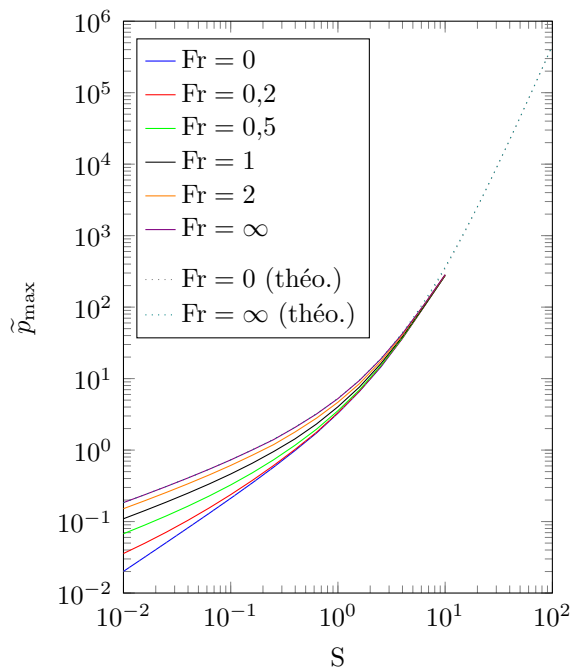
Les cas de calcul pour lesquels nous avons rencontré des difficultés numériques correspondent, pour les valeurs des paramètres qui sont utilisées dans cette étude, à des situations irréalistes qui ne se produiraient pas dans les applications auxquelles on s'intéresse. Les valeurs atteintes par la pression et la température notamment sont hors de la plage de validité de l'équation d'état des gaz parfaits et d'autres phénomènes physiques non modélisés (changement d'état et compressibilité du liquide notamment) se produiraient en pratique dans ces conditions. On notera par exemple que la pression maximale théorique atteint une valeur de $3,15 \cdot 10^{11}$ atm pour le cas où $S = 10^2$, $Fr = \infty$ et $k^g = 1,1$. À titre de comparaison, cette valeur est très proche de la valeur fournie par certaines sources pour la pression au cœur d'une étoile comparable au soleil.

Études paramétriques dans le cas où le liquide est compressible

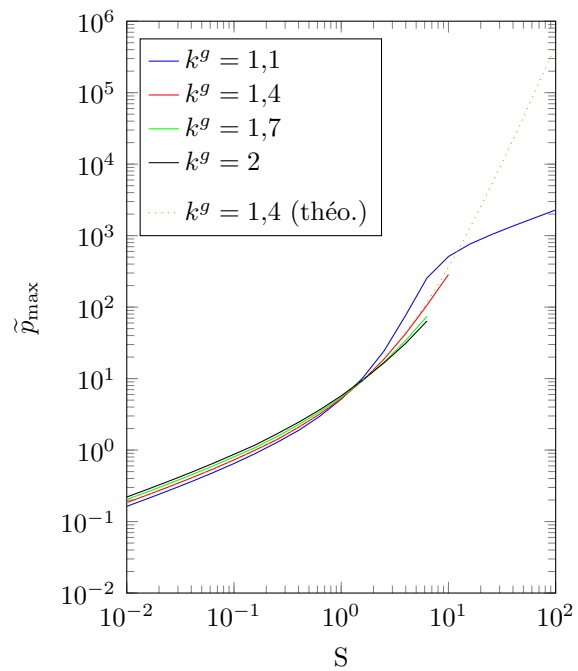
Les résultats obtenus pour les simulations où le liquide est faiblement compressible sont présentés sur la Figure 5.20. Ces résultats sont comparables à ceux obtenus par Brosset *et al.* [93], ce qui suggère que les équations implémentées représentent correctement les phénomènes physiques qui nous intéressent. Nous avons par ailleurs mis en évidence que notre formulation permet bel et bien de modéliser les différents fluides d'une même simulation polyphasique avec des équations d'état différentes.

Le caractère compressible du liquide modifie significativement les résultats à fort nombre d'impact ($S > 4$) en comparaison aux cas incompressibles. À plus faible nombre d'impact, le liquide peut donc être considéré comme incompressible sans que cela affecte trop les résultats. Les valeurs obtenues pour la pression maximale dans le domaine paraissent plus réalistes pour les impacts violents, même si encore une fois tous les phénomènes physiques ne sont pas modélisés.

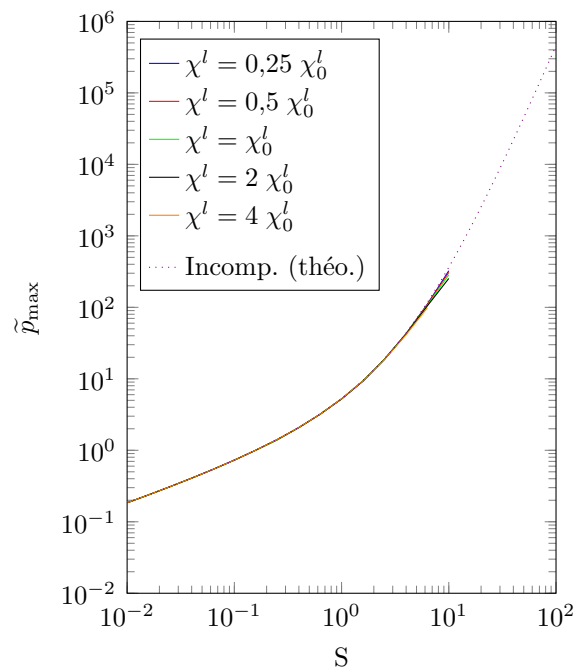
Les simulations à fort nombre d'impact se sont avérées être plus difficiles à réaliser avec cette modélisation et la quasi-totalité des cas de calcul échouent pour un nombre d'impact supérieur à 10 à cause de problèmes numériques causés par l'apparition d'instabilités. De nombreux changements ont été apportés aux options de résolution et des maillages de plus en plus raffinés ont aussi été utilisés sans que cela nous permette de parvenir à réaliser l'ensemble des simulations prévues. Les situations où le nombre d'impact est aussi important devraient rarement se produire dans les cas qui nous intéressent cependant.



(a) Résultats numériques pour différentes valeurs de Fr avec $k^g = 1,4$, $A = 1$ et $\chi^l = \chi_0^l$



(b) Résultats numériques pour différentes valeurs de k^g avec $Fr = \infty$, $A = 1$ et $\chi^l = \chi_0^l$



(c) Résultats numériques pour différentes valeurs de χ^l avec $Fr = \infty$, $k^g = 1,4$ et $A = 1$

Figure 5.20 Résultats numériques obtenus pour le modèle généralisé de Bagnold dans le cas où le liquide est compressible

Remarques et conclusions

L'étude paramétrique qui a été conduite en utilisant le modèle généralisé de Bagnold couvre un grand nombre de cas qui peuvent être rencontrés dans la simulation de vagues déferlantes emprisonnant une poche de gaz compressible. Les résultats obtenus sont en excellent accord avec le modèle théorique et avec des résultats obtenus numériquement grâce à d'autres codes de simulation numérique.

Bien que certains des cas étudiés donnent des résultats physiquement irréalistes, cette étude a poussé les méthodes numériques utilisées dans leurs retranchements et a permis de prouver leur robustesse, leur précision ainsi que leur efficacité. Les résultats obtenus indiquent de plus que l'ensemble des modèles et des méthodes numériques utilisés permettent vraisemblablement d'effectuer précisément et correctement la simulation de vagues déferlantes bidimensionnelles.

5.2.3 Équation de Young-Laplace

Au repos et en l'absence de forces extérieures, un volume quelconque de fluide sur lequel s'applique une force de tension superficielle prend la forme qui minimise la surface de l'interface qui le sépare d'un autre fluide, afin de minimiser l'énergie due à la tension superficielle. En deux dimensions, cette forme sera ainsi celle d'un disque et en trois dimensions celle d'une boule de volume égal au volume de fluide initial. Cet effet est illustré par exemple sur la Figure 4.2 pour des gouttes en microgravité.

L'équation de Young-Laplace, obtenue à partir l'Équation (4.23) lorsque les fluides sont au repos, fournit une expression de la condition d'équilibre des forces normales qui se traduit ici comme une condition de saut de pression à travers l'interface :

$$\llbracket p \rrbracket = \gamma (\nabla \cdot \mathbf{n}) = \gamma \kappa \quad (5.17)$$

dans le cas où le coefficient de tension superficielle γ est constant et en notant κ la courbure moyenne de l'interface. La différence de pression $\llbracket p \rrbracket$ est parfois appelée « pression de Laplace ».

La courbure moyenne peut être exprimée comme la somme de l'inverse des rayons de courbure principaux R_i de l'interface : $\kappa = \sum_i 1/R_i$. Pour une surface sphérique de rayon R , les rayons de courbure principaux sont tous les deux égaux à R , tandis qu'ils sont égaux à R et ∞ pour un cercle (un cercle en deux dimensions est similaire à un cylindre en trois dimensions).

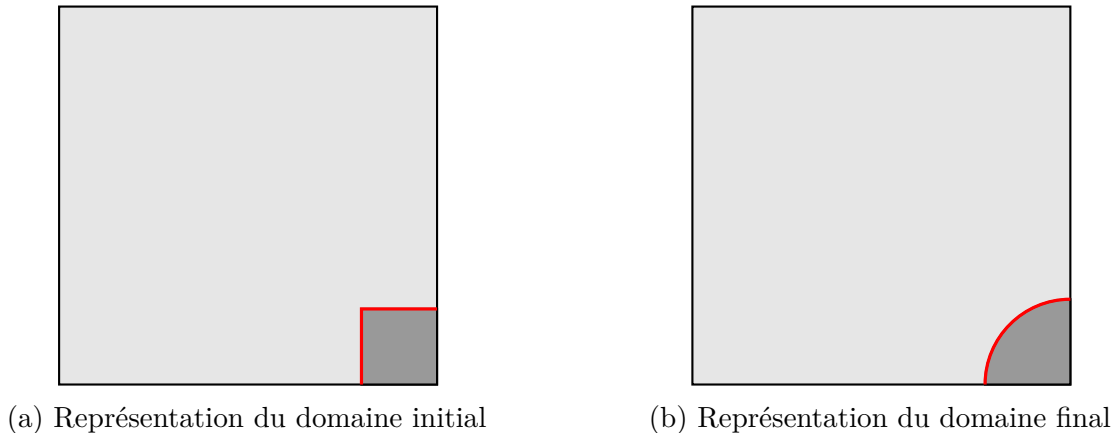


Figure 5.21 Représentation du domaine utilisé pour le cas de validation utilisant l'équation de Young-Laplace

Présentation du cas

L'équation de Young-Laplace est ici utilisée pour confirmer que la modélisation de la force de tension superficielle utilisée permet de représenter fidèlement les caractéristiques physiques d'une goutte sessile (immobile). Dans cette étude adimensionnelle, un volume de fluide de forme initiale arbitraire (un carré ici, comme représenté sur la Figure 5.21a) est libre de se déformer sous l'effet de la tension superficielle jusqu'à l'atteinte d'un état stationnaire pour lequel ce fluide prend la forme d'un disque de même volume (Figure 5.21b). L'équation de Young-Laplace permet alors de calculer la différence de pression à travers l'interface.

Modélisation numérique du problème

On effectue la simulation de ce cas de validation sur le domaine représenté sur la Figure 5.21a, qui tire parti des symétries du problème. Le quart de carré de volume unitaire représenté en gris foncé se transforme en un quart de disque de volume lui aussi unitaire sous l'effet de la force de tension superficielle. Le rayon de ce disque sera donc égal à $R = \sqrt{4/\pi}$. Des conditions de symétrie sont appliquées sur les frontières situées à droite et en bas du domaine, des conditions de Neumann nulles sont utilisées pour les frontières à gauche et en haut du domaine et des angles de contact de 90° sont imposés pour que l'interface respecte la condition de symétrie.

Les propriétés physiques des deux fluides, contenues dans le Tableau 5.6 sont similaires à celles de l'eau et de l'air pour le fluide occupant le domaine gris foncé et le domaine gris clair respectivement. La valeur de la viscosité du premier fluide est plus importante que celle qui devrait être utilisée, ce qui permet de dissiper plus rapidement l'énergie cinétique du système

Tableau 5.6 Propriétés physiques des fluides utilisés pour le cas de validation utilisant l'équation de Young-Laplace

	Fluide 1 (gris foncé)	Fluide 2 (gris clair)
Masse volumique de référence ρ_r	1000	1
Viscosité dynamique μ	1	$1 \cdot 10^{-5}$
Coefficient de tension superficielle γ		0,2

afin que l'état stationnaire soit atteint relativement rapidement.

Résultats numériques et conclusions

Les résultats numériques issus de la simulation lorsque l'état stationnaire est atteint sont comparés aux résultats théoriques obtenus grâce à l'équation de Young-Laplace. On compare ainsi (1) la pression moyenne à l'intérieur de la goutte, (2) son volume, et (3) sa circularité. La pression moyenne et la circularité permettront de vérifier que l'équation de Young-Laplace est bien respectée tandis que le volume permettra de quantifier l'erreur causée par le déplacement des nœuds du maillage par la méthode ALE.

La circularité, comme définie par Wadell [8], compare le périmètre P_{goutte} de la goutte au périmètre d'un cercle P_{equiv} contenant un volume équivalent. Cette mesure, notée \mathcal{C} , varie entre un (pour une goutte parfaitement circulaire) et zéro et est définie par :

$$\mathcal{C} = \frac{P_{\text{equiv}}}{P_{\text{goutte}}} = \frac{\pi d_{\text{equiv}}}{P_{\text{goutte}}} \quad (5.18)$$

Tableau 5.7 Comparaison des résultats numériques et théoriques pour le cas de validation utilisant l'équation de Young-Laplace

	Théorique	Simulation	Erreur relative
Volume	1	1,000 109	$1,09 \cdot 10^{-2} \%$
Circularité	1	0,999 981	$1,86 \cdot 10^{-5} \%$
Pression moyenne	0,177 245	0,177 213	$1,80 \cdot 10^{-2} \%$

Le maillage utilisé pour la simulation est généré en se servant d'une simulation initiale et des capacités d'adaptation de maillage et d'estimation d'erreur du code. Il contient au total 1300 éléments et 25 éléments seulement servent à représenter l'interface. La faible différence entre

les résultats obtenus sur le maillage initial et le maillage adapté indique *a priori* qu'une étude complète de convergence de maillage n'est pas nécessaire pour ce cas. Cette observation a été confirmée en effectuant plusieurs cycles d'adaptation et de raffinement du maillage qui n'ont pas conduit à une amélioration sensible des résultats.

Les résultats obtenus numériquement et les résultats théoriques sont comparés dans le Tableau 5.7. L'accord entre les deux ensembles de valeurs est excellent et les erreurs relatives sont très faibles. Ces résultats confirment que le modèle utilisé pour la tension superficielle est bel et bien capable de représenter le comportement physique attendu à l'état stationnaire pour une goutte.

La loi de Young-Laplace permet d'étudier des cas plus compliqués que celui qui a été considéré ici. En effet, elle permet par exemple d'obtenir une équation différentielle donnant la forme prise par une goutte axisymétrique sous l'effet de la gravité. Dans le cas où la courbure de l'interface est connue (extraite d'une simulation par exemple), il est aussi possible de calculer la différence de pression tout au long de l'interface en exprimant simplement κ en coordonnées cartésiennes. Enfin, le comportement dynamique de la bulle pourrait être validé en simulant des oscillations forcées et en se servant des travaux de Rayleigh [4]. Dans le cadre des travaux réalisés dans cette thèse, ces études supplémentaires ont été jugées non essentielles puisque l'implémentation de la tension superficielle sera validée plus en détails grâce aux études présentées dans le Chapitre 6.

CHAPITRE 6 VALIDATION DES DÉVELOPPEMENTS ET APPLICATIONS

On présente dans cette dernière partie des cas applicatifs réalistes et représentatifs de ce que l'on souhaite être capable de simuler numériquement en mettant en œuvre l'ensemble des développements effectués au cours de ce projet. Les simulations effectuées permettent, d'une part, de poursuivre le travail de validation qui a été amorcé dans le Chapitre 5 avec des cas plus complexes et, d'autre part, de tester l'utilisation conjointe des méthodes numériques et des modèles qui ont été développés et implémentés. L'ensemble de ce travail permet de fournir une idée générale des capacités, de l'efficacité et de la précision de la chaîne de calcul pour la simulation des écoulements polyphasiques à phases séparées.

Les deux premiers cas présentés sont des simulations d'instabilités de Rayleigh-Taylor et de Kelvin-Helmholtz qui sont susceptibles de se produire au niveau d'une interface séparant deux fluides, notamment sur la crête d'une vague. Ces simulations permettront principalement d'étudier le comportement de l'algorithme de remaillage et des méthodes d'estimation d'erreur. Les résultats obtenus seront confrontés qualitativement et quantitativement à ceux fournis par d'autres études numériques et par une étude expérimentale pour le second cas.

Le troisième cas étudié concerne l'étude de l'ascension d'une bulle de gaz incompressible dans un liquide dans deux cas de référence issus d'un *benchmark*. Ce *benchmark* a été développé pour pallier le manque de données quantitatives disponibles pour effectuer la validation de codes dans le cadre d'écoulements avec interfaces pour lesquels la tension superficielle a un effet important sur les résultats. Des quantités extraites de simulations réalisées avec trois codes ayant des formulations différentes sont disponibles à des fins de comparaison et une estimation du coût de calcul requis pour atteindre une certaine précision est disponible pour chacun des codes.

Le dernier cas présenté parachève la démonstration des capacités de la chaîne de calcul par l'étude d'une vague impactante représentative d'un phénomène de ballotement d'un liquide dans une enceinte confinée. Le cas ici étudié présente l'emprisonnement d'une poche de gaz par une vague déferlante, c'est-à-dire un phénomène de type ELP3 (voir Figure 1.2). Le caractère compressible des fluides est pris en compte pour ce cas, ce qui permet de mettre en œuvre conjointement l'ensemble des travaux effectués dans ce projet.

6.1 Instabilité de Rayleigh-Taylor

L'instabilité de Rayleigh-Taylor est une instabilité se produisant à l'interface entre deux fluides non miscibles lorsqu'un fluide « pousse » un autre fluide. Généralement, ce comportement se produit lorsqu'un fluide dense est placé au-dessus d'un fluide plus léger dans un champ de gravité et peut être reproduit simplement en plaçant de l'eau au-dessus d'une couche d'huile végétale, ce qui conduira à une inversion des deux couches de fluides avec apparition d'une instabilité de Rayleigh-Taylor. De nombreux autres exemples faisant apparaître cette instabilité abondent et on citera notamment les nuages en champignons (pyrocumulus) causés par les explosions et les panaches volcaniques causés par les éruptions explosives de volcans, mais aussi des manifestations à plus grande échelle comme dans la nébuleuse du Crabe (M1, NGC 1952).

L'instabilité de Rayleigh-Taylor est caractérisée par la forme prise par l'interface lors de la phase d'amplification non-linéaire qui suit une première étape de développement linéaire d'une perturbation initiale de l'interface. Dans cette seconde phase, on assiste au développement de « polypes » verticaux qui s'étirent puis à la formation de « chapeaux de champignon » à l'extrémité de ces polypes. Il est également possible que des instabilités de Kelvin-Helmholtz se développent le long de l'interface en fonction des conditions.

L'instabilité de Rayleigh-Taylor est généralement caractérisée par le nombre de Atwood :

$$At = \left| \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_1 + \rho_2} \right| \quad (6.1)$$

qui donne donc une information sur le rapport des masses volumiques des deux fluides et apparaît dans l'expression du taux de croissance de l'instabilité dans la phase linéaire. Sharp [29] présente une analyse plus détaillée de l'instabilité de Rayleigh-Taylor pour le lecteur intéressé.

6.1.1 Description du cas de calcul

La simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor est réalisée en reprenant le cas utilisé notamment par Puckett *et al.* [51] et Popinet et Zaleski [56] dans lequel deux fluides incompressibles ayant les masses volumiques de l'air et de l'hélium dans les conditions standards et la même viscosité sont utilisés. Ce choix conduit à un nombre de Atwood proche de l'unité ($At = 0,757$).

Le domaine de calcul utilisé est un rectangle de largeur 1 m et de hauteur 4 m divisé en deux volumes égaux contenant chacun l'un des deux fluides (de l'air pour la couche supérieure et de l'hélium pour la couche inférieure), séparés par une interface. Des conditions de glissement

sont employées sur toutes les frontières et des angles de contact de 90° sont imposés aux extrémités de l'interface.

Une perturbation initiale sinusoïdale d'amplitude 5 cm est superposée à l'interface initialement plane afin que l'instabilité puisse se développer. Ce choix impose la longueur d'onde de l'instabilité et on ne verra donc qu'un unique polype se développer. La configuration initiale pour les deux cas de calcul qui sont étudiés est présentée sur la Figure 6.1a.

Tableau 6.1 Propriétés physiques des fluides pour les simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor

	Air (couche supérieure)	Hélium (couche inférieure)
Masse volumique de référence ρ_r (kg/m ³)	1,225	0,1694
Viscosité dynamique μ (Pa · s)	3,13 · 10 ⁻³	
Coefficient de tension superficielle γ (N/m)	0 ou 72,8 · 10 ⁻³	
Champ de pesanteur g (m/s ²)	9,81	

Deux simulations sont réalisées en prenant différentes valeurs pour le coefficient de tension superficielle. La force de tension superficielle est nulle dans le premier cas ($\gamma = 0$ N/m), ce qui permet de se placer dans la même situation que celle utilisée dans les références citées précédemment. Le second cas de calcul utilise une valeur arbitraire pour le coefficient de tension superficielle, égale à la valeur qui serait utilisée pour une interface séparant de l'air et de l'eau ($\gamma = 72,8 \cdot 10^{-3}$ N/m), afin de comparer le comportement des algorithmes dans ces deux situations. Le Tableau 6.1 résume l'ensemble des propriétés physiques des fluides utilisés.

6.1.2 Analyse des résultats numériques

Les Figures 6.1a à 6.1l et les Figures 6.2a à 6.2l montrent l'évolution de l'interface à plusieurs instants pour les simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor dans le premier cas, sans force de tension superficielle, et dans le deuxième cas, avec force de tension superficielle, respectivement. Les différentes étapes du développement de l'instabilité de Rayleigh-Taylor peuvent être observées.

La procédure d'intégration en temps est restreinte à l'utilisation des méthodes inconditionnellement stables BDF-1 et BDF-2 uniquement. Les simulations sont poursuivies jusqu'à ce

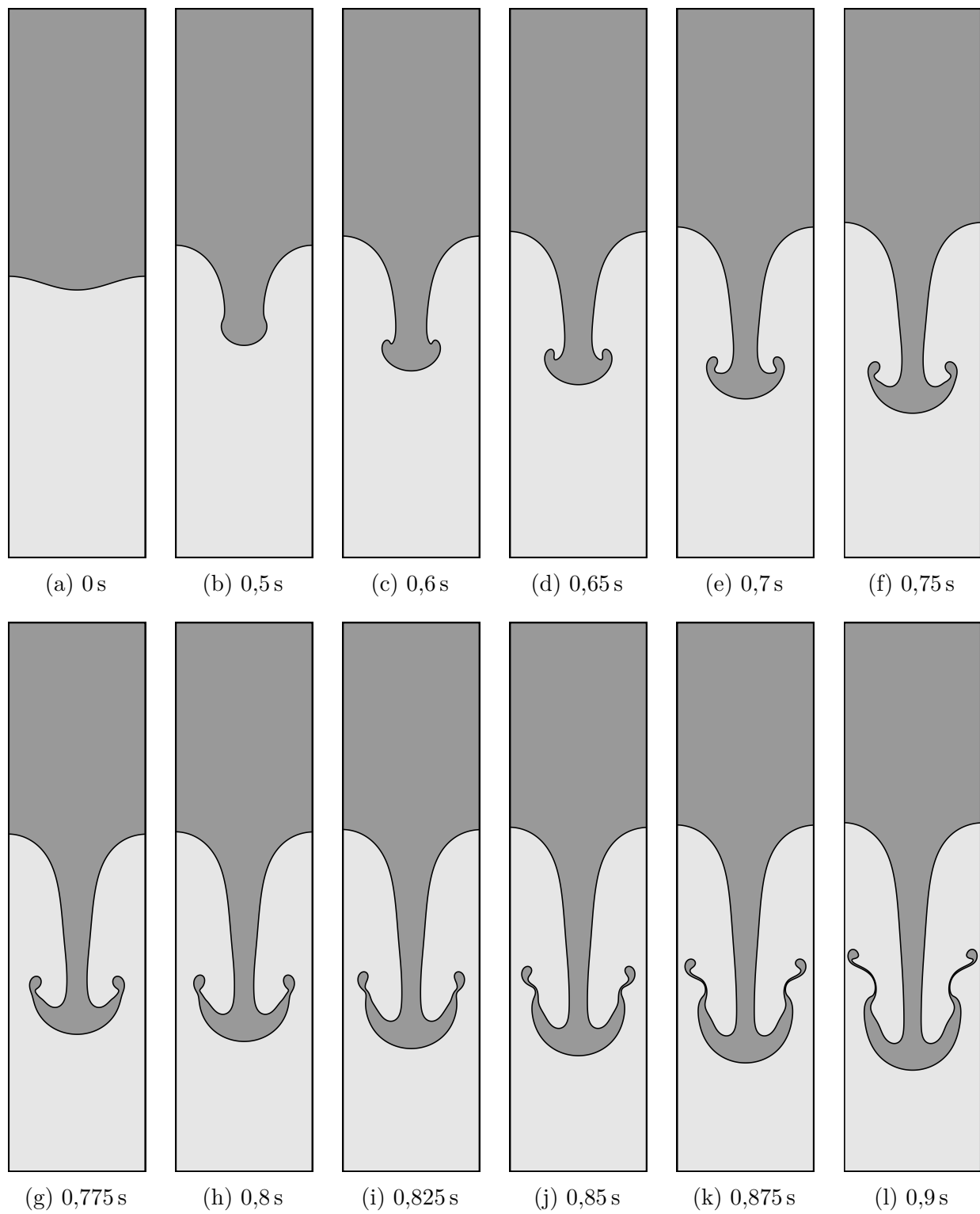


Figure 6.1 Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor sans force de tension superficielle

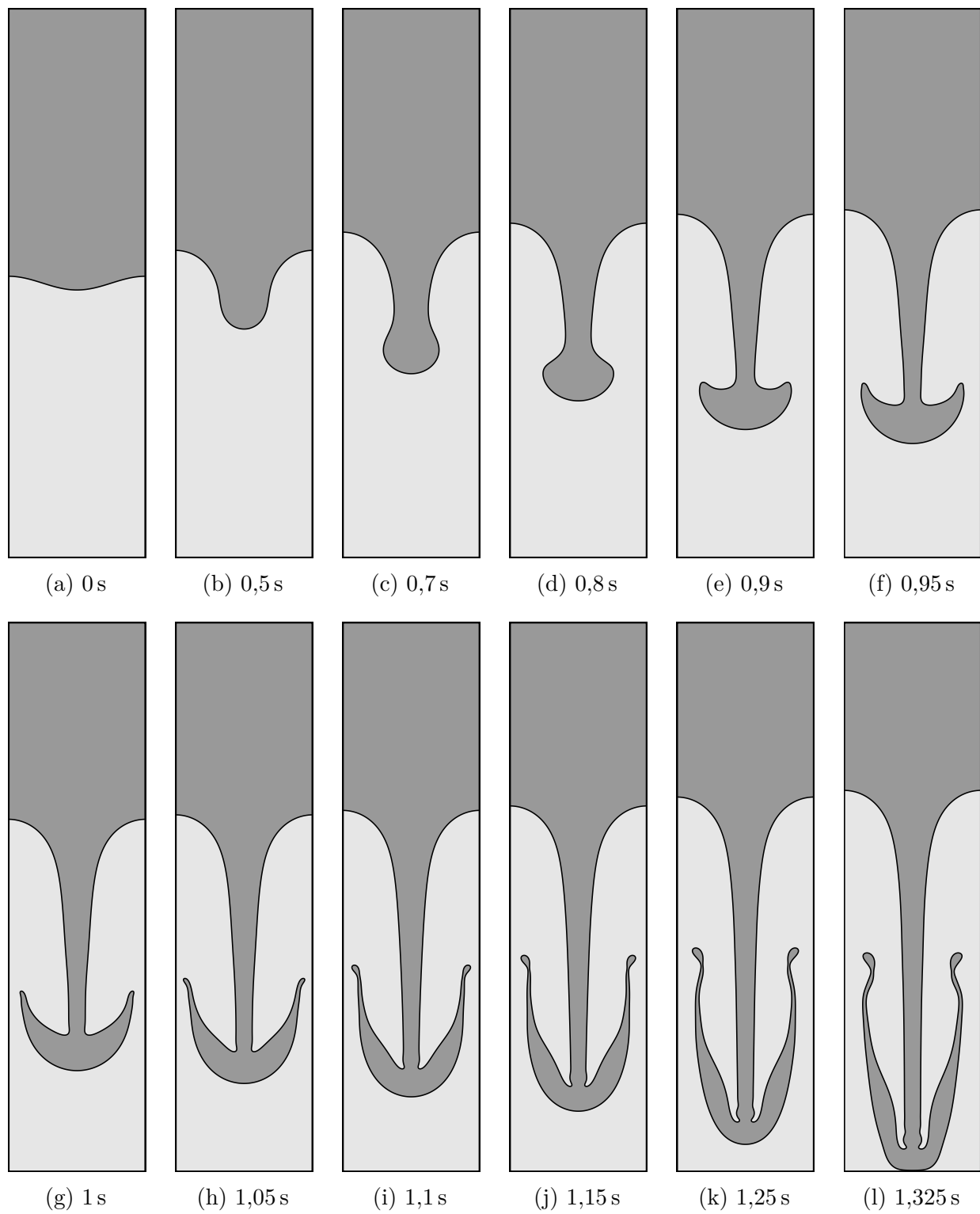


Figure 6.2 Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor avec force de tension superficielle

que l'interface se rapproche trop des frontières du domaine de calcul. Elles se terminent alors sans action de l'utilisateur juste avant que l'interface impacte l'une des parois (aux alentours de $t = 0,9$ s et $t = 1,325$ s respectivement). Afin de poursuivre la simulation, il faudrait alors effectuer un traitement spécial pour prendre en compte les changements dans la topologie du domaine de calcul et de l'interface. On met ici en évidence une lacune majeure de la formulation qui a été développée en comparaison avec les méthodes de capture d'interface, qui sont naturellement capables de traiter ces cas. Dans la première situation étudiée, l'interface se rapproche et impacte les parois de gauche et de droite tandis que la paroi inférieure est impactée dans le second cas.

L'évolution de l'interface au cours du temps dans le premier cas est visuellement très proche des résultats de Popinet et Zaleski [56] aux instants 0,7 s, 0,8 s et 0,9 s (Figures 6.1e, 6.1h et 6.1l). La force de tension superficielle a un impact majeur sur la dynamique de l'écoulement et sur la forme prise par l'interface. On remarque notamment que la formation initiale du polype et du chapeau de champignon est plus lente dans le second cas et que les filaments du fluide le plus dense à l'extrémité du chapeau de champignon sont plus fins dans le premier cas. Le second cas semble de plus présenter le commencement d'une instabilité de Plateau-Rayleigh¹, visible par l'apparition de deux pincements entourant un élargissement de la section du « pied » de champignon dans la région où celui-ci rejoint le chapeau à partir de 1 s. On observe des grandes déformations et d'importants changements dans la courbure de l'interface dans les deux cas étudiés. L'interface est notamment très étirée à la fin des simulations, respectivement par un facteur 8 et 12 par rapport à sa longueur d'origine.

6.1.3 Comportement de la procédure de remaillage

La Figure 6.3 présente un exemple d'un maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour la première situation étudiée pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor à $t = 0,9$ s. On peut clairement observer que le maillage est localement très raffiné dans les régions ayant une grande influence sur les résultats, là où la courbure de l'interface est importante et là où les filaments de fluide sont très fins. Dans les régions où la courbure de l'interface est plus faible et loin de l'interface, le maillage est beaucoup plus grossier. Ce comportement est celui qui était attendu : le maillage est raffiné là où il le faut afin de contrôler l'erreur et est plus grossier là où peu d'erreur est commise afin de réduire le coût de calcul.

L'adaptation de maillage est pilotée par deux estimateurs d'erreur : l'un portant sur le

1. L'instabilité de Plateau-Rayleigh est à l'origine de la fragmentation d'écoulements continus en gouttes. Elle est illustrée simplement à l'aide d'un robinet laissant couler de l'eau : l'écoulement est d'abord continu puis se fragmente en gouttes si le débit est suffisamment faible et que la hauteur de chute est suffisante.

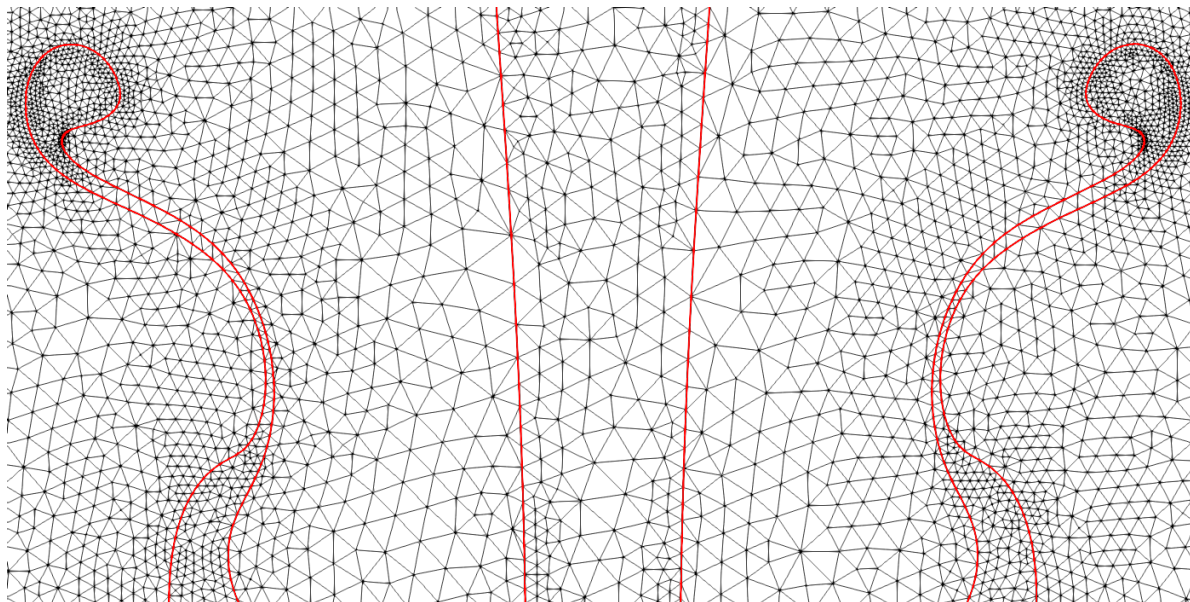
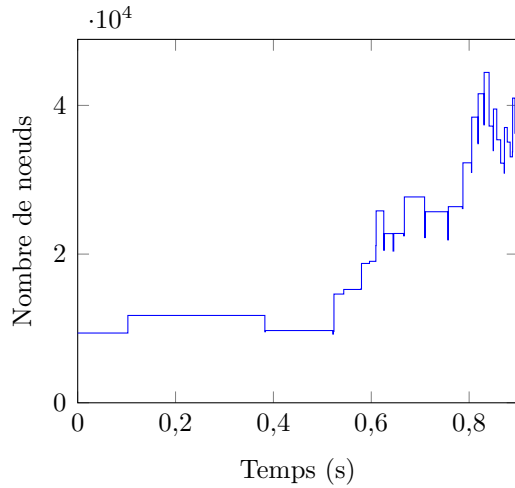


Figure 6.3 Maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor sans force de tension superficielle à $t = 0,9$ s. L'interface est représentée en rouge.

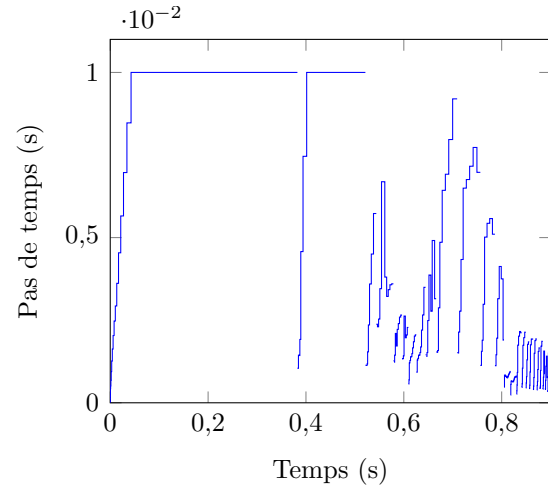
champ de vitesse (norme « énergie ») et l'autre sur les déformations du pseudo-solide (norme « déformation »). Une tolérance de 1% d'erreur relative est utilisée pour chacun des deux estimateurs d'erreur, dans les deux cas, afin de stopper les simulations et déclencher le remaillage du domaine. Le facteur de réduction d'erreur vaut 0,7 et les éléments peuvent prendre des tailles comprises entre 10^{-4} m et 10^{-1} m. Pour ces deux cas de calcul, la procédure de remaillage est déclenchée respectivement 43 et 46 fois.

La Figure 6.4 présente l'évolution du nombre de nœuds dans le maillage et de la taille du pas de temps pour les deux simulations. L'effet du développement de l'instabilité de Rayleigh-Taylor au cours du temps est bien visible sur ces graphes. Dès lors que l'instabilité commence à se développer rapidement, on observe une augmentation de la fréquence à laquelle le domaine est remaillé, une diminution de la taille du pas de temps ainsi qu'une augmentation du nombre de nœuds dans le maillage.

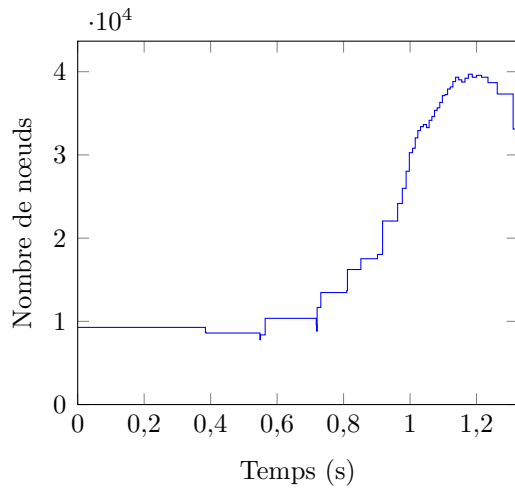
Le nombre de nœuds dans le maillage croît au cours du développement de l'instabilité de Rayleigh-Taylor et est globalement du même ordre de grandeur à la fin du temps physique simulé pour les deux cas étudiés, bien qu'un peu plus élevé dans le premier cas. La forme prise par l'interface au niveau des extrémités des filaments du fluide le plus lourd (plus grande courbure et épaisseur moins importante) explique probablement que plus d'éléments soient nécessaires pour représenter la solution correctement dans le premier cas. Le nombre de nœuds



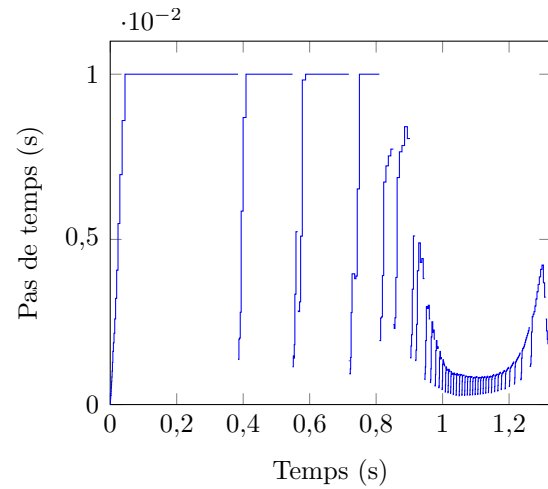
(a) Nombre de nœuds (premier cas)



(b) Taille du pas de temps (premier cas)



(c) Nombre de nœuds (second cas)



(d) Taille du pas de temps (second cas)

Figure 6.4 Évolution du nombre de nœuds dans le maillage et de la taille du pas de temps au cours du temps pour les simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, sans tension superficielle ((a)-(b)) et avec tension superficielle ((c)-(d)). Les discontinuités sur les graphes de la taille du pas de temps et les sauts dans la valeur du nombre de nœuds indiquent les instants où le domaine est remaillé.

atteint un maximum dans la seconde simulation, avant de diminuer à partir du moment où l'interface est simplement étirée verticalement et ne change plus significativement de forme et de courbure, jusqu'à ce que la paroi inférieure du domaine soit atteinte.

On observe des phénomènes similaires sur l'évolution de la taille du pas de temps. Dans le second cas, pour $t > 0,9$ s, la taille maximale du pas de temps diminue lors de la phase de développement rapide de l'instabilité puis augmente par la suite. Le comportement semble plus erratique dans le premier cas et pourrait être expliqué par l'absence de la force de tension superficielle qui a tendance à « stabiliser » la dynamique de l'écoulement en coupant les oscillations ayant une fréquence spatiale élevée, mais on retrouve une évolution comparable pour $t > 0,75$ s. La taille du pas de temps est réduite d'environ un ordre de grandeur par la procédure adaptative en temps après chaque remaillage, principalement à cause de l'introduction d'erreur d'interpolation dans la solution. Cette diminution est généralement compensée rapidement par cette même procédure, en quelques itérations, au fur et à mesure que de nouvelles solutions deviennent disponibles et sont utilisées par les méthodes BDF.

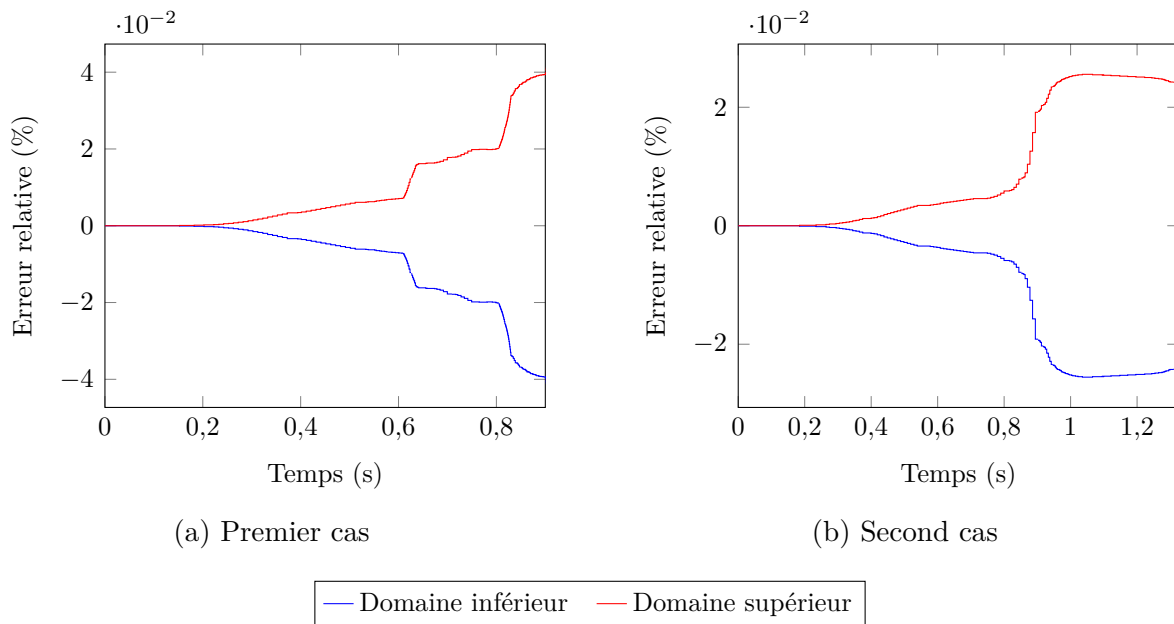


Figure 6.5 Évolution de l'erreur relative commise sur le volume des deux domaines au cours du temps pour les simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor, (a) sans tension superficielle et (b) avec tension superficielle. Les discontinuités sur les graphes indiquent les instants où le domaine est remaillé.

Enfin, la Figure 6.5 présente l'erreur commise sur la masse (ou le volume ici, puisque les fluides sont incompressibles) au cours du calcul. Les discontinuités présentes sur les graphes aux instants où le domaine de calcul est remaillé ne permettent pas d'observer de gain ou

de perte de masse significatifs qui auraient été causés par l'interpolation de la solution et la procédure de remaillage. Au contraire, les erreurs sur le volume sont causées principalement par le processus de résolution des équations (méthode du pseudo-solide et formulation ALE). Quand bien même, la valeur maximale atteinte par l'erreur relative reste très faible (inférieure à $4 \cdot 10^{-2} \%$) dans les deux cas, ce qui indique que la formulation utilisée respecte très bien la conservation de la masse.

6.2 Instabilité de Kelvin-Helmholtz



Figure 6.6 Instabilités de Kelvin-Helmholtz se produisant à la séparation entre les bandes (courants-jets foncés) et les zones (courants-jets clairs) constituant la haute atmosphère de Jupiter capturées par la sonde Juno (Source : NASA/JPL-Caltech/SwRI/MSSS/Gerald Eichstädt/Seán Doran / Référence PIA21393)

Les instabilités de Kelvin-Helmholtz sont causées par un phénomène de cisaillement pouvant se produire dans un seul fluide (à cause d'un gradient de vitesse dans la direction normale à celle de l'écoulement) ou à l'interface entre deux fluides superposés se déplaçant à des vitesses différentes. Ces instabilités prennent la forme de tourbillons s'enroulant sur eux-mêmes et peuvent (sous des conditions se produisant relativement rarement) être observées au sommet de certains nuages sur Terre (on parle de nuages de type *fluctus*). Les instabilités de Kelvin-Helmholtz se produisent également dans la haute atmosphère des géantes gazeuses (notamment sur Jupiter comme illustré par la Figure 6.6) où elles sont causées par la différence de vitesse entre les courants-jets qui forment des bandes parallèles à l'équateur de ces planètes. Considérons un problème où deux couches de hauteurs identiques h qui contiennent des

fluides non miscibles sont superposées et séparées par une interface, en présence de tension superficielle et dans un champ de gravité. L'étude théorique de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz est conduite en réalisant une analyse de stabilité linéaire du problème qui permet de déterminer une relation de dispersion. Cette relation de dispersion permet ensuite d'obtenir la condition qui doit être vérifiée pour qu'un nombre d'onde k soit instable :

$$(u_1 - u_2)^2 > \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \left(\gamma k + (\rho_2 - \rho_1) \frac{g}{k} \right) \tanh(kh) \quad (6.2)$$

en utilisant les indices 1 et 2 pour la couche supérieure et la couche inférieure respectivement et en notant γ le coefficient de tension superficielle et k le nombre d'onde (angulaire), défini à partir de la longueur d'onde λ par $k = 2\pi/\lambda$.

Le cas de l'instabilité de Rayleigh-Taylor est retrouvé en l'absence de tension superficielle si $\rho_1 > \rho_2$. Tous les nombres d'onde sont alors inconditionnellement instables (la condition est vérifiée quelle que soit la valeur de k puisque le membre de gauche est positif ou nul et le membre de droite est strictement négatif).

La fonction du nombre d'onde k située dans le membre de droite de l'Équation (6.2) atteint un minimum pour le nombre d'onde critique k_c qui permet de déterminer la valeur critique de la différence de vitesse Δu_c au-delà de laquelle l'instabilité de Kelvin-Helmholtz peut se développer. Si la différence de vitesse est inférieure à cette valeur critique, tous les nombres d'ondes sont stables. Dans le cas contraire, tout un intervalle de valeurs de k sont instables et des instabilités de Kelvin-Helmholtz se développent d'abord de façon linéaire puis très rapidement de façon non-linéaire à l'interface. Le nombre d'onde critique et la différence de vitesse critique sont donnés par :

$$k_c = \sqrt{\frac{g(\rho_2 - \rho_1)}{\gamma}} \quad (6.3)$$

$$\Delta u_c = \left(2 \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1 \rho_2} \sqrt{g(\rho_2 - \rho_1) \gamma} \right)^{1/2} \quad (6.4)$$

dans la limite où l'épaisseur h des deux couches est très grande, ce qui permet de faire l'approximation $\tanh(kh) \approx 1$.

On réfère le lecteur intéressé à Chandrasekhar [13] pour plus de détails théoriques concernant les instabilités de Kelvin-Helmholtz (ainsi que d'autres instabilités hydrodynamiques).

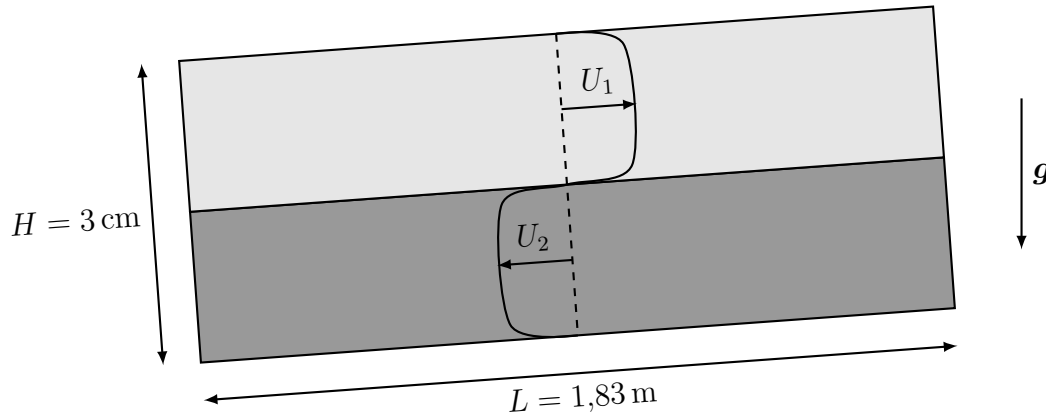


Figure 6.7 Représentation de l'expérience de Thorpe (le schéma n'est pas à l'échelle)

6.2.1 Expérience de Thorpe

Le montage expérimental utilisé par Thorpe [15], représenté schématiquement sur la Figure 6.7, fournit un très bon cas pour l'étude du développement d'instabilités de Kelvin-Helmholtz se produisant dans un écoulement cisailé à l'interface entre deux fluides non miscibles. Plusieurs études numériques ont d'ailleurs été réalisées pour tenter de reproduire les résultats expérimentaux *via* la simulation (notamment les études de Bartosiewicz *et al.* [77], Štrubelj et Tiselj [90] et Fortin *et al.* [117]).

Dans la série d'expériences réalisées par Thorpe, un réservoir parallélépipédique de 1,83 m de longueur et de 3 cm de hauteur rempli à moitié par de l'eau (couche inférieure) et à moitié par un mélange de tétrachlorométhane (CCl_4 ou Halon-104) et de kérosène (couche supérieure) est soudainement incliné par rapport à l'horizontale. L'écoulement est alors uniformément accéléré par la gravité et on assiste à la formation d'une couche cisailée présentant un fort gradient de vitesse à l'interface entre les deux fluides. Dans un repère lié au réservoir, les couches de fluide supérieure et inférieure vont sembler se déplacer vers la droite et vers la gauche respectivement. La différence de vitesse entre les deux fluides augmente au cours du temps jusqu'à dépasser la valeur critique qui permet à l'instabilité de Kelvin-Helmholtz de se développer à partir des perturbations initiales de l'interface.

Les deux fluides sont modélisés comme des fluides incompressibles et leurs propriétés physiques sont rapportées dans le Tableau 6.2. L'étude numérique qui suit est réalisée en utilisant le cas où le réservoir est incliné d'un angle de $4,13^\circ$ par rapport à l'horizontale ($\sin \alpha = 0.072$).

Tableau 6.2 Propriétés physiques des fluides utilisés pour la simulation de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz

	Eau (couche inférieure)	CCl ₄ + kérosène (couche supérieure)
Masse volumique de référence ρ_r (kg/m ³)	1000	780
Viscosité dynamique μ (Pa · s)	$1 \cdot 10^{-3}$	$1,5 \cdot 10^{-3}$
Coefficient de tension superficielle γ (N/m)		0,04
Champ de pesanteur g (m/s ²)		9,81

6.2.2 Mise en place de la simulation et comportement numérique

L'instabilité de Kelvin-Helmholtz se développe de façon bidimensionnelle dans un premier temps pour ce problème, ce qui nous permet de conduire une étude en deux dimensions. Les lignes de contact aux extrémités de l'interface peuvent rapidement atteindre la paroi supérieure et la paroi inférieure du domaine de calcul dans la configuration utilisée pour l'étude expérimentale. L'implémentation actuelle ne nous permettrait alors pas de poursuivre la simulation puisque celle-ci n'est, à l'heure actuelle, pas capable de traiter les changements dans la topologie du domaine. La hauteur du domaine utilisé pour la simulation est doublée à $H = 6$ cm pour pallier ce problème, ce qui (théoriquement) n'aura qu'un effet mineur sur le développement des instabilités de Kelvin-Helmholtz.

On applique des conditions aux limites de glissement sur les quatre frontières du domaine et l'interface entre les deux fluides est initialement plane. Afin de favoriser le développement de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz, on superpose à l'interface une perturbation initiale d'amplitude 0,1 mm obtenue à partir d'un générateur de nombres aléatoires suivant une loi normale, c'est-à-dire un bruit blanc gaussien. La perturbation initiale utilisée a l'avantage de perturber uniformément l'ensemble des modes pouvant devenir instables et ne privilégie donc pas une longueur d'onde spécifique. En pratique, les instabilités de Kelvin-Helmholtz ne se développent pas si ce bruit blanc n'est pas introduit initialement.

Le développement des instabilités crée des zones où la taille des éléments varie rapidement le long de l'interface, potentiellement par un ou plusieurs ordres de grandeur en l'espace de quelques éléments. L'algorithme de maillage par front mobile dont nous nous servons possède parfois des difficultés à faire face à de tels cas de figure et le problème est exacerbé là où

la courbure de l'interface est importante. La simulation est conduite de façon autonome en utilisant l'algorithme de remaillage adaptatif jusqu'à environ $t = 2,16$ s. Il devient ensuite nécessaire d'intervenir en modifiant manuellement les paramètres du mailleur afin de poursuivre la simulation. On modifie ici le facteur de réduction d'erreur et/ou la taille minimale des éléments par essai-erreur jusqu'à ce que le maillage généré soit valide et puisse être utilisé pour reprendre le calcul.

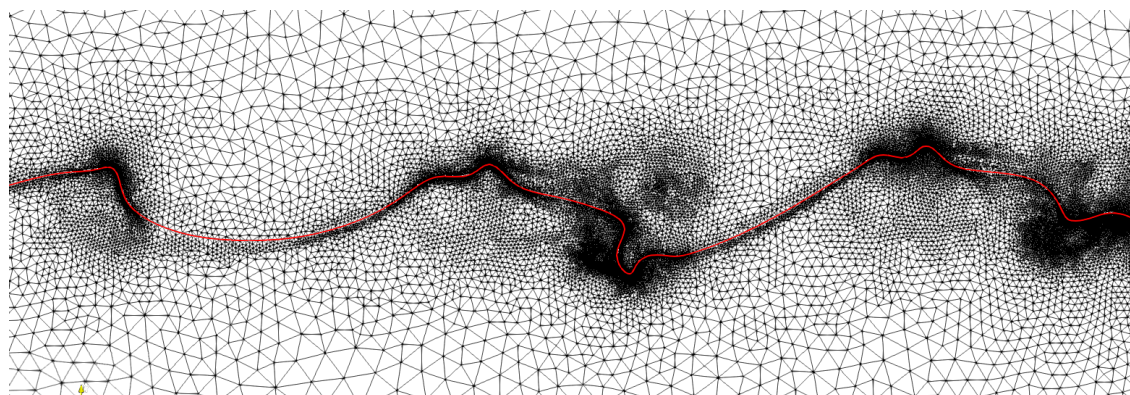
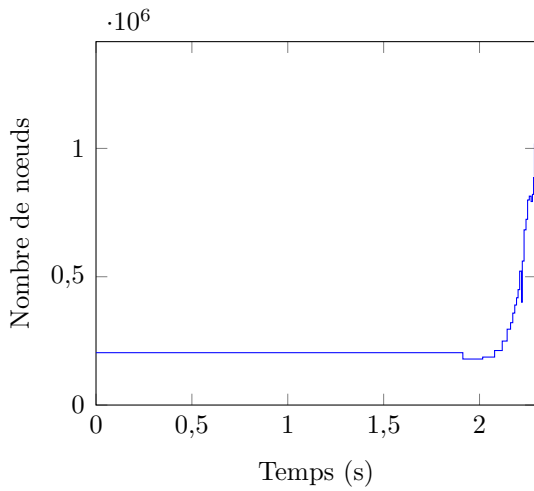


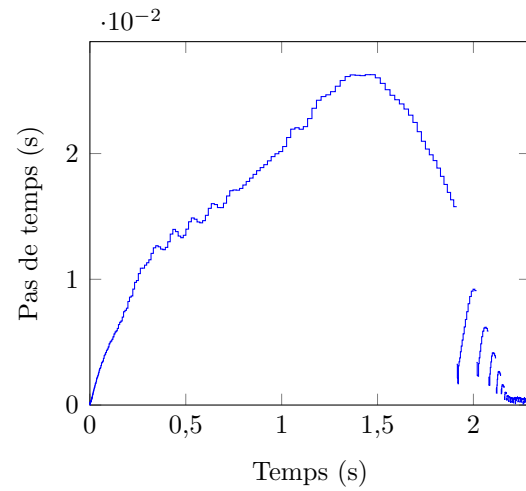
Figure 6.8 Maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour la simulation de l'expérience de Thorpe à $t = 2,296$ s. L'interface est représentée en rouge.

La Figure 6.8 présente à titre d'exemple le dernier maillage généré pour cette simulation dans une région située à proximité du centre du domaine de calcul. Les éléments du maillage sont principalement concentrés autour de l'interface dans la région de fort cisaillement et là où la courbure de l'interface est importante. On peut aussi remarquer que les zones tourbillonnaires situées dans les creux des vagues formées par les instabilités sont elles aussi maillées plus finement. Les maillages générés par la procédure d'adaptation de maillage permettent donc de capturer les différentes structures caractéristiques de cet écoulement de façon précise.

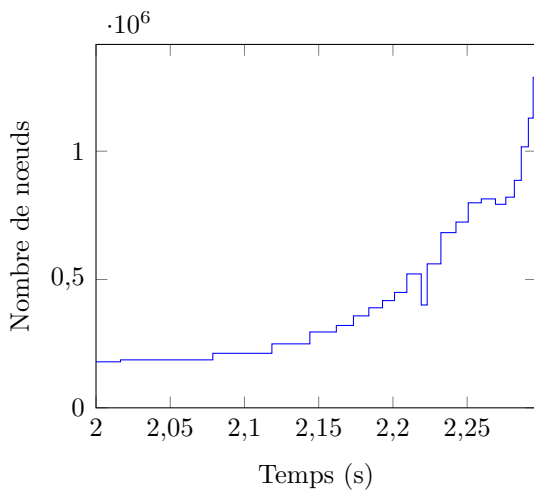
L'estimation d'erreur spatiale et l'adaptation de maillage sont réalisées en utilisant les mêmes estimateurs d'erreur que pour les simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor : la norme « énergie » et la norme « déformation ». On impose pour cette simulation une tolérance de 3 % d'erreur relative pour les deux estimateurs d'erreur afin d'éviter de déclencher l'algorithme de remaillage trop souvent et pour que le nombre d'éléments dans le domaine ne devienne pas trop important. Le facteur de réduction d'erreur vaut initialement 0,65 et les éléments du maillage sont autorisés à prendre des tailles comprises entre 10^{-6} m et 10^{-1} m lors des premiers cycles de calcul. Au cours de la simulation, les valeurs prises par le facteur de réduction d'erreur varient entre 0,55 et 0,85 tandis que la taille minimale qu'un élément peut prendre est rehaussée progressivement à $2 \cdot 10^{-5}$ m par les interventions manuelles sur les paramètres du mailleur. La procédure de remaillage est déclenchée au total 23 fois pour l'intervalle de



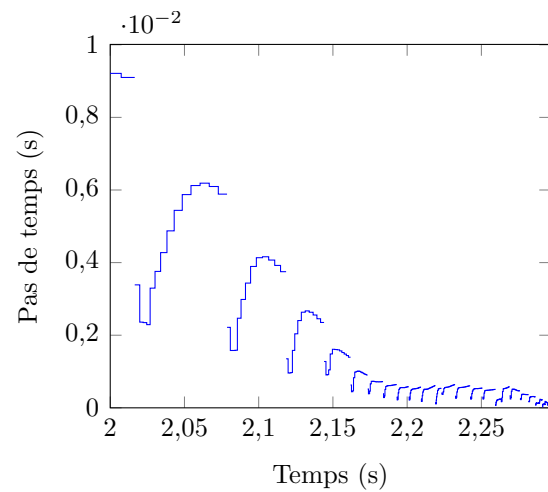
(a) Nombre de nœuds



(b) Taille du pas de temps



(c) Nombre de nœuds (zoom)



(d) Taille du pas de temps (zoom)

Figure 6.9 Évolution du nombre de nœuds dans le maillage et de la taille du pas de temps au cours du temps pour la simulation de l'expérience de Thorpe. Les discontinuités sur les graphes de la taille du pas de temps et les sauts dans la valeur du nombre de nœuds indiquent les instants où le domaine est remaillé.

temps de 2,296 s simulé.

Le premier remaillage se produit relativement tardivement et le nombre de nœuds dans le maillage reste presque constant tant que l'amplitude des instabilités n'augmente pas de façon significative. Par la suite, la fréquence à laquelle on réalise des cycles de remaillage augmente rapidement et le nombre de nœuds dans le maillage croît fortement, comme cela est visible sur les graphes présentés par les Figures 6.9a et 6.9c. Les interventions manuelles sur les paramètres du mailleur ont très certainement affecté ces résultats mais la tendance générale d'augmentation du nombre de nœuds dans le maillage n'a rien de surprenant. Le maillage utilisé doit en effet être de plus en plus raffiné dans la région interfaciale afin de capturer précisément la solution du problème et pour représenter fidèlement la forme de l'interface. L'erreur commise sur le volume de chacun des deux domaines de calculs atteint au maximum une valeur de $3,5 \cdot 10^{-5} \%$ de leur volume initial, aux alentours de $t = 2,12$ s, ce qui indique que les méthodes numériques employées causent pour cette simulation peu de pertes ou de gains de masse.

Le pas de temps utilisé par les méthodes BDF (Figures 6.9b et 6.9d) est lui aussi clairement affecté par le développement de l'instabilité. Après une première phase de croissance rapide au début de la simulation, le pas d'intégration diminue à partir de $t = 1,5$ s, indiquant ainsi le début du développement des instabilités de Kelvin-Helmholtz. La décroissance se poursuit ensuite pendant plusieurs cycles de remaillage jusqu'à ce que la valeur maximale prise par le pas de temps atteigne un plateau puis se remette à diminuer pour atteindre au maximum des valeurs proches de 10^{-4} s à la fin de l'intervalle de temps simulé.

Le dernier maillage généré pour cette simulation comprend environ 1,3 millions de nœuds et 630 000 éléments, ce qui, combiné avec les faibles valeurs prises par le pas de temps et les difficultés rencontrées pour le remaillage du domaine, rend la simulation très coûteuse en temps de calcul et en ressources informatiques et demande des interventions très régulières de l'utilisateur. La taille du problème à résoudre approche par ailleurs des limites que les ressources dont nous disposons sont capables de supporter. Le code de calcul ne permet pas, à l'heure actuelle, d'effectuer des simulations parallèles en mémoire distribuée et nous sommes donc limités par la puissance des machines les plus performantes auxquelles nous avons accès. La simulation est ainsi stoppée à $t_{\text{final}} \approx 2,296$ s.

6.2.3 Étude de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz

Les Figures 6.10 et 6.11 présentent l'évolution de la forme prise par l'interface à différents instants au cours de la simulation. Les instabilités de Kelvin-Helmholtz prennent la forme de vagues qui commencent à se développer à partir des perturbations initiales de l'interface

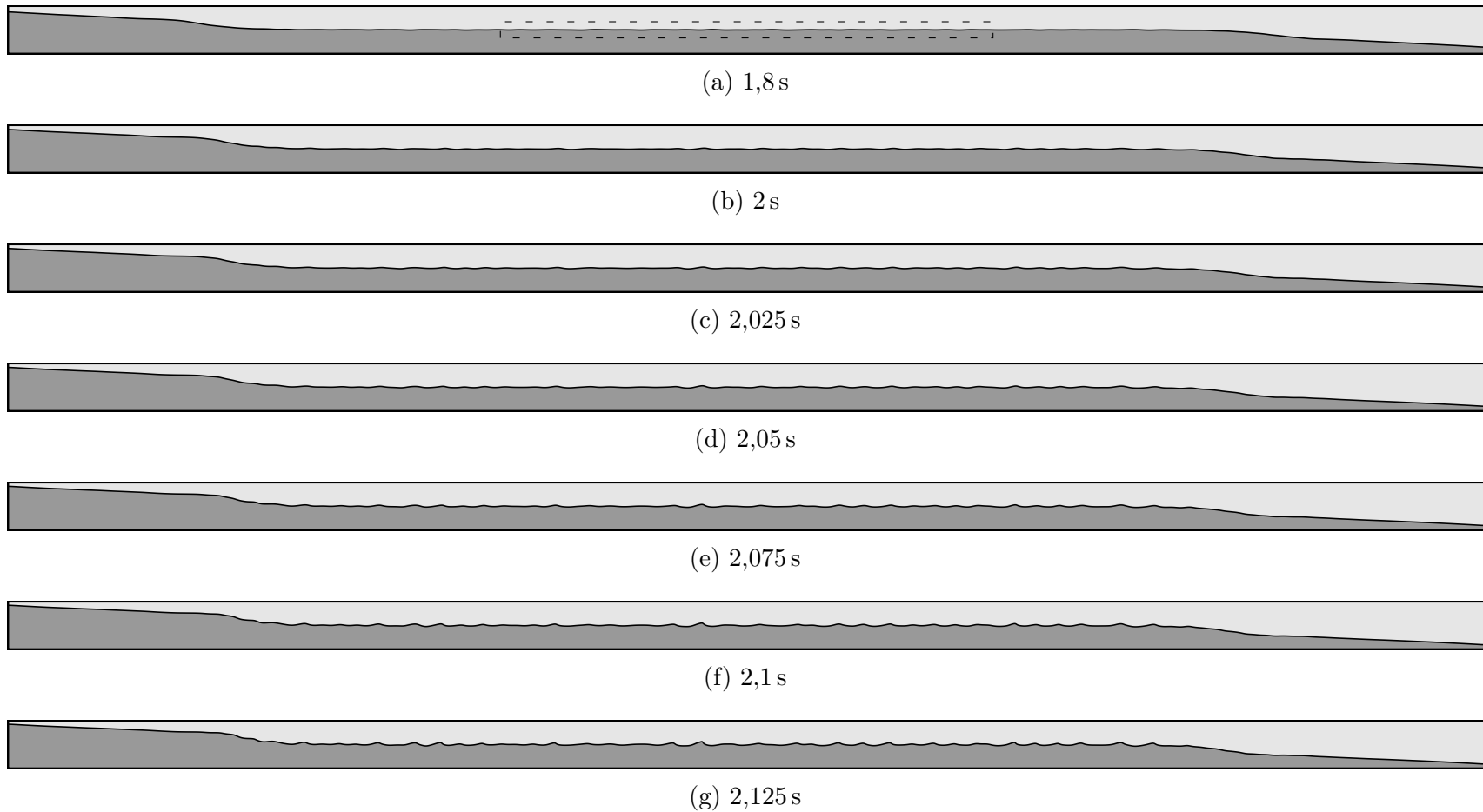


Figure 6.10 Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation de l'expérience de Thorpe montrant le développement d'instabilités de Kelvin-Helmholtz (domaine de calcul complet). La zone identifiée par les tirets sur la Figure 6.10a est celle qui est représentée sur les Figures 6.11a à 6.11n.

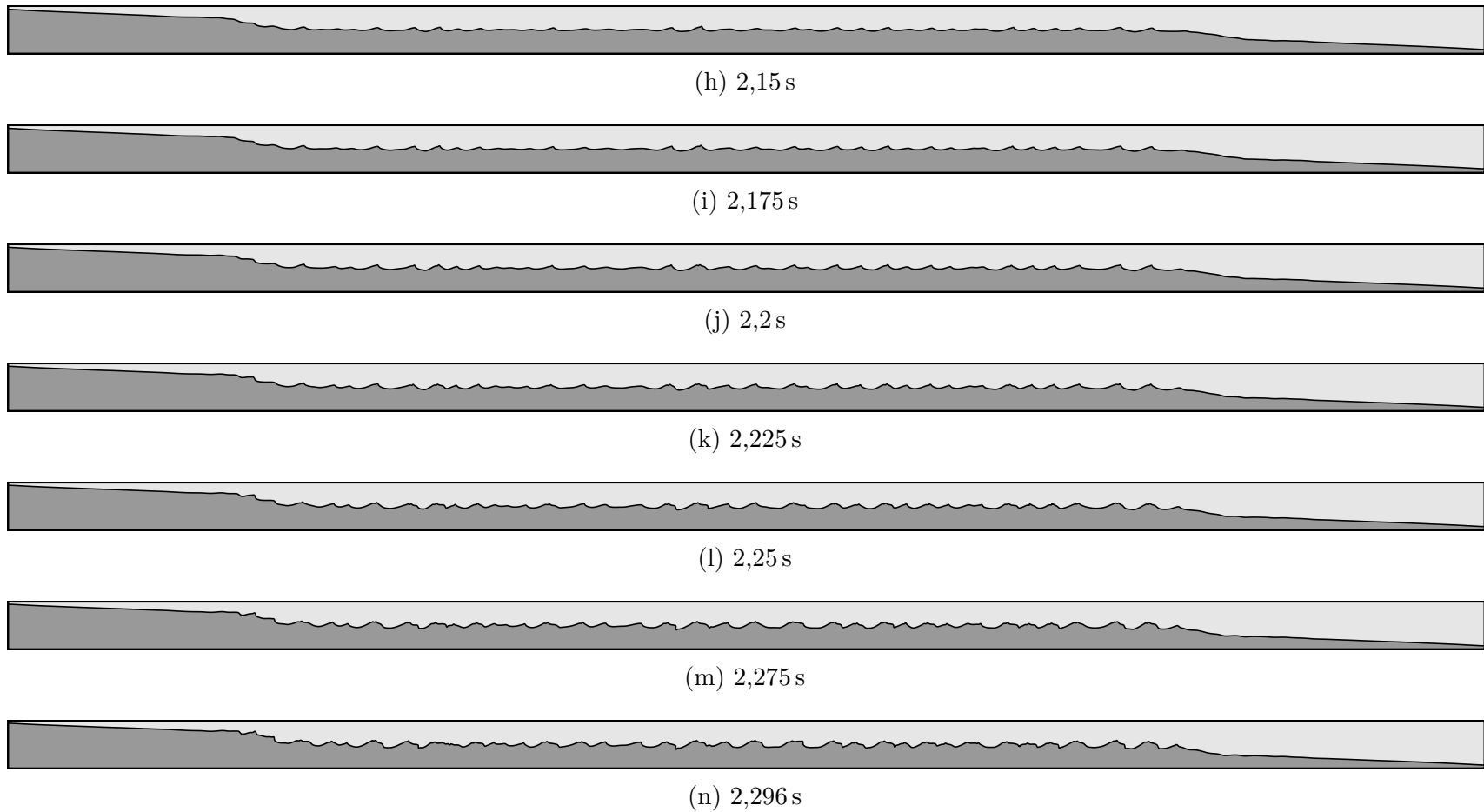


Figure 6.10 (suite) Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation de l'expérience de Thorpe montrant le développement d'instabilités de Kelvin-Helmholtz (domaine de calcul complet). La zone identifiée par les tirets sur la Figure 6.10a est celle qui est représentée sur les Figures 6.11a à 6.11n.

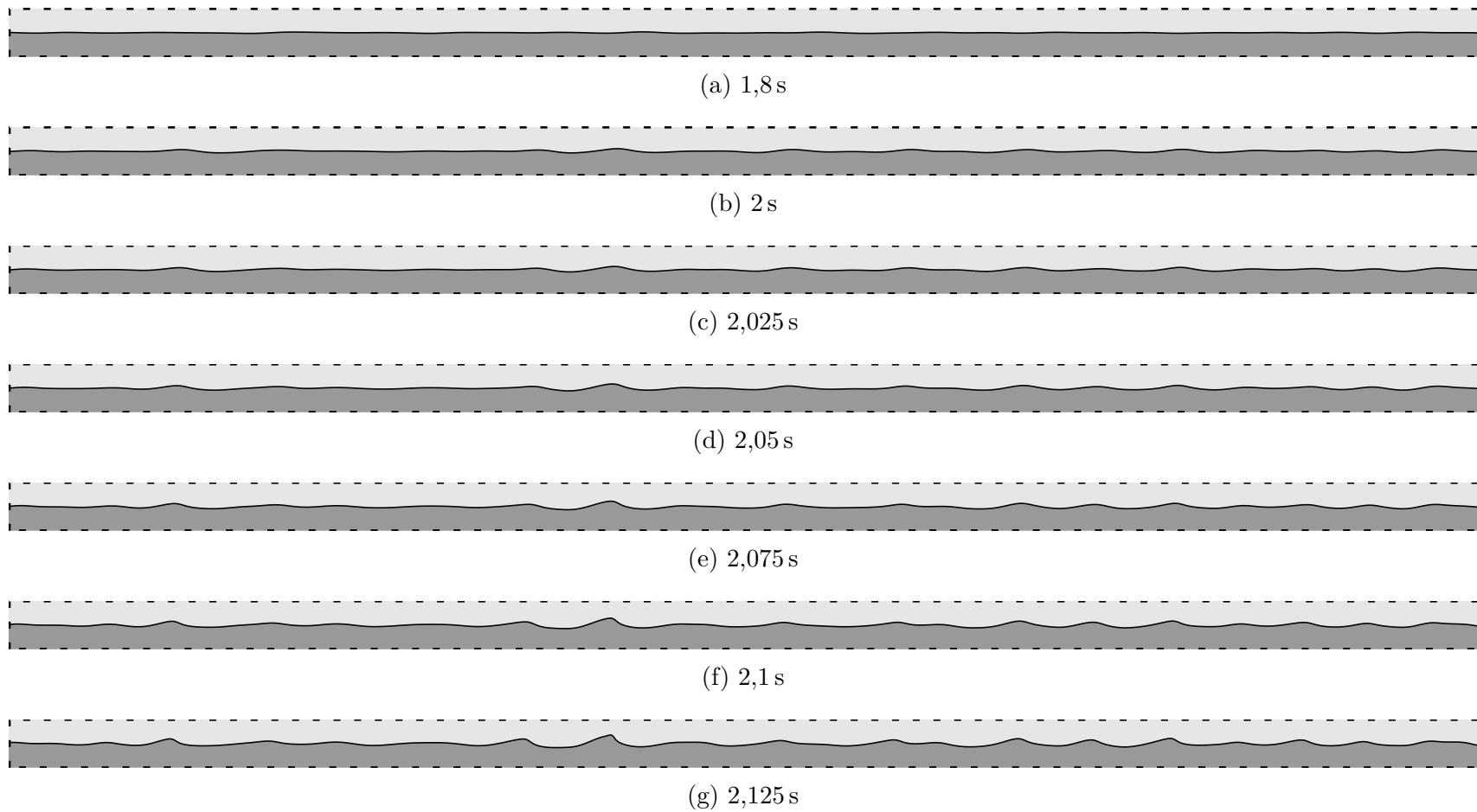


Figure 6.11 Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation de l'expérience de Thorpe montrant le développement d'instabilités de Kelvin-Helmholtz (tiers central du domaine de calcul identifié par les tirets sur la Figure 6.10a)

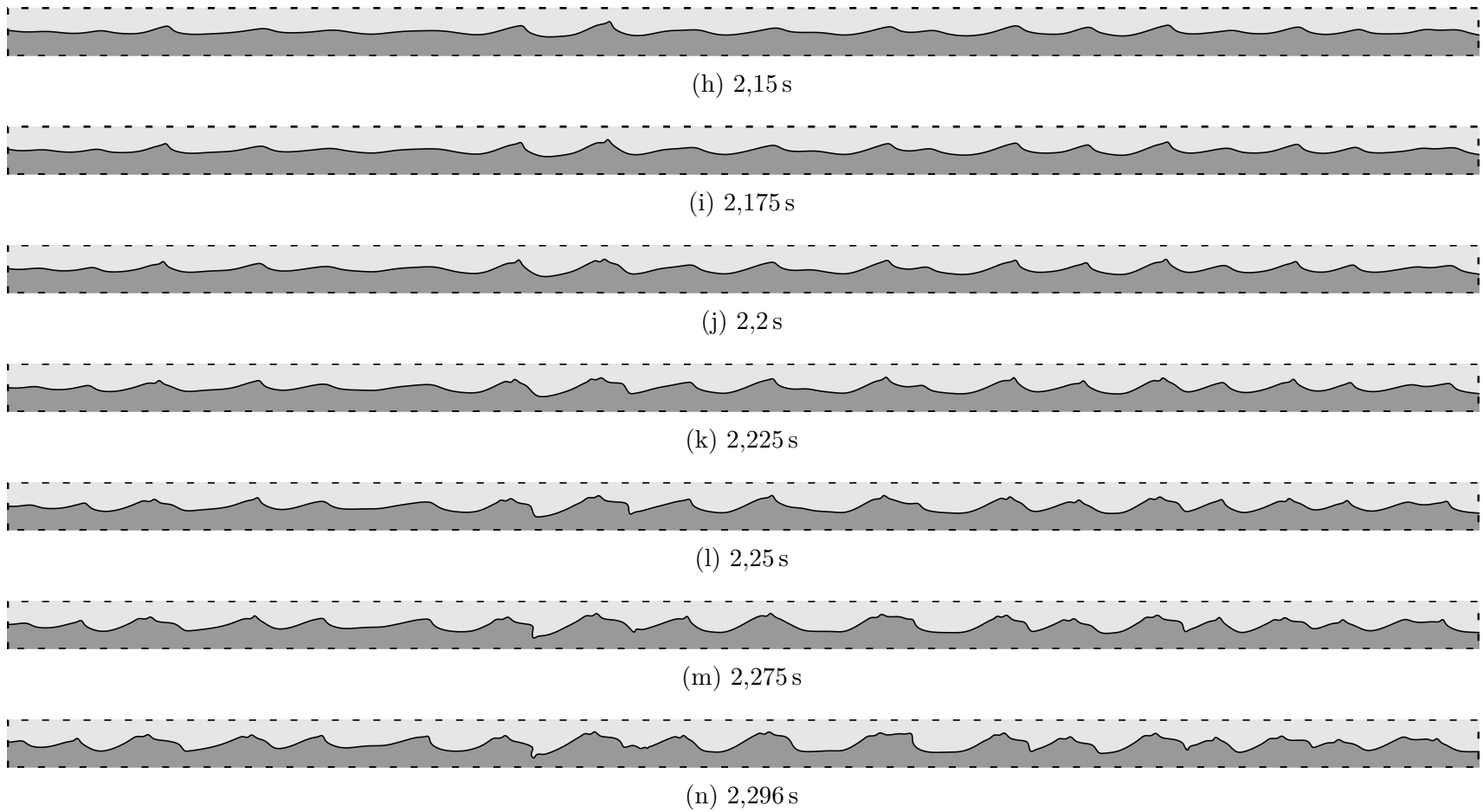


Figure 6.11 (suite) Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation de l'expérience de Thorpe montrant le développement d'instabilités de Kelvin-Helmholtz (tiers central du domaine de calcul identifié par les tirets sur la Figure 6.10a)

séparant les deux fluides dans l'intervalle de temps compris entre 1,8 s et 2 s. Ces vagues, dont l'amplitude augmente rapidement à partir de $t = 2$ s, se déplacent vers la gauche du domaine de calcul.

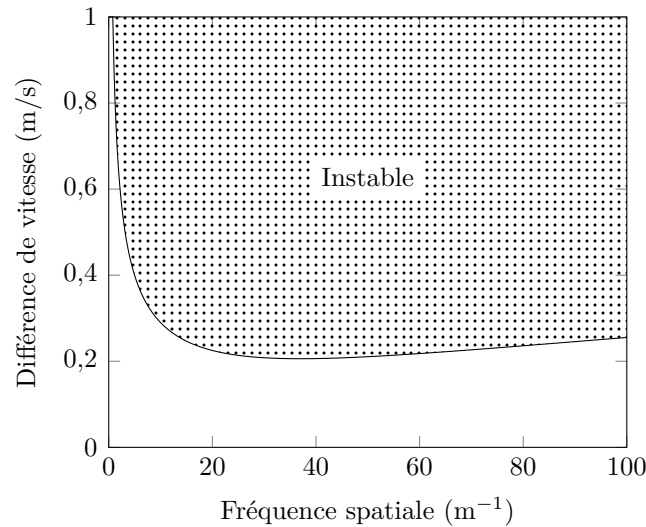


Figure 6.12 Représentation graphique de la condition de stabilité théorique pour l'instabilité de Kelvin-Helmholtz. La courbe indique la valeur de la différence de vitesse au-delà de laquelle chaque composante spatiale devient instable.

Les résultats théoriques de stabilité obtenus à partir de l'Équation (6.2) dans la limite où $\tanh(kh) \rightarrow 1$ sont présentés par la Figure 6.12 pour les conditions de l'expérience de Thorpe. La branche asymptotique correspondant aux fréquences spatiales élevées met en évidence le rôle stabilisateur de la tension superficielle pour l'instabilité de Kelvin-Helmholtz aux petites échelles spatiales. La fréquence spatiale et la différence de vitesse critiques, obtenues à partir des Équations (6.3) et (6.4), valent respectivement $1/\lambda_c = 36,97 \text{ m}^{-1}$ ($\lambda_c = 27,05 \text{ mm}$) et $\Delta u_c = 0,206 \text{ m/s}$. Lorsque la différence de vitesse dépasse cette valeur critique, un large intervalle de longueurs d'ondes devient instable. Les instabilités de Kelvin-Helmholtz qui se développent seront donc une superposition des différents modes instables.

L'analyse du développement de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz est réalisée sur le tiers central du domaine de calcul, là où l'interface reste alignée avec la ligne médiane du réservoir tout au long du temps simulé. Les éléments qui constituent l'interface sont extraits des résultats de la simulation et permettent d'obtenir une représentation de l'interface sous la forme d'un nuage de points également espacés le long de l'axe des abscisses en réalisant un échantillonnage. L'interface échantillonnée est ensuite traitée à l'aide d'une transformée de Fourier discrète (aussi connue sous le nom *Fast Fourier Transform* ou FFT) afin d'obtenir les caractéristiques spatiales de l'instabilité. Les transformées de Fourier discrètes calculées aux différents instants

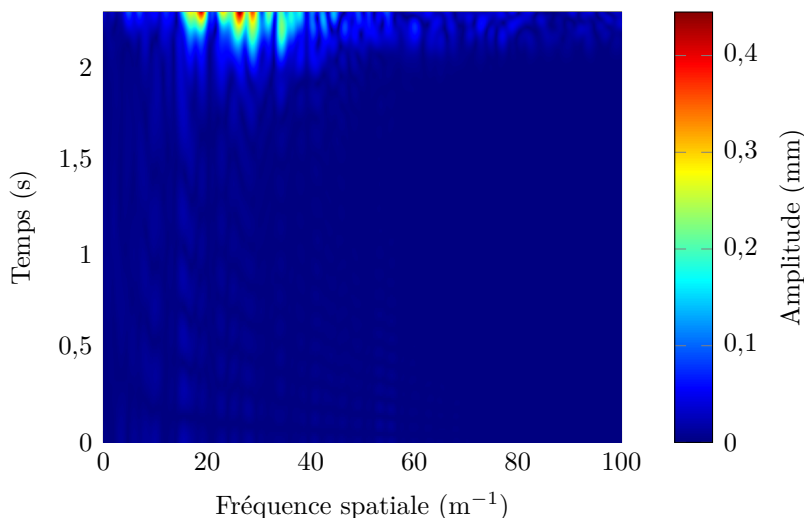
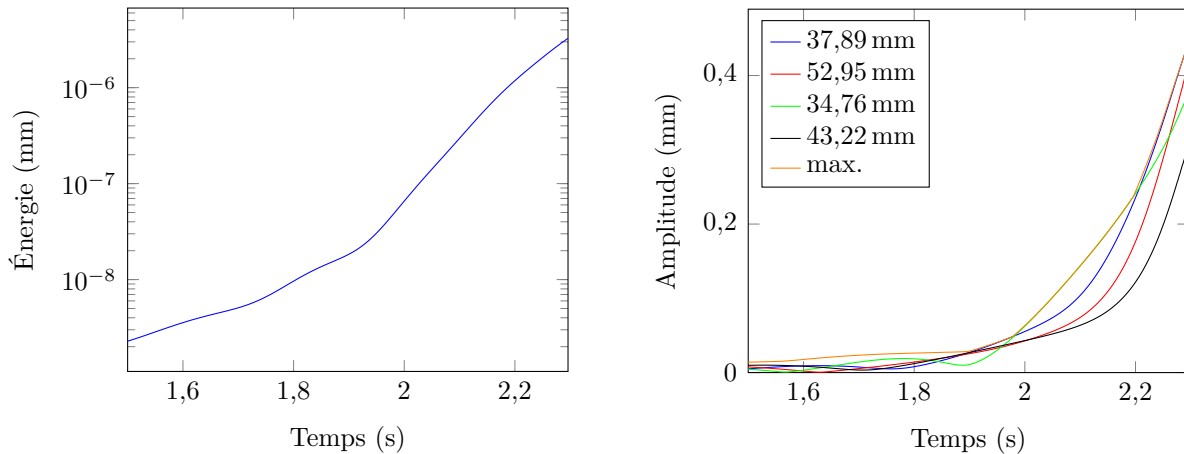


Figure 6.13 Spectrogramme de la simulation de l'expérience de Thorpe montrant l'évolution temporelle de l'amplitude des composantes spatiales de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz

auxquels la solution du problème a été extraite sont normalisées de façon que l'égalité de Parseval soit vérifiée. Le traitement qui est ici utilisé est valide tant que l'interface peut être représentée sous la forme d'une fonction $y = f(x)$. Cette propriété n'est plus vérifiée lorsque les vagues forment des rouleaux le long de l'interface (voir par exemple la Figure 6.11n) et on devrait en principe traiter les résultats en utilisant une autre méthode (*e.g.* : transformée de Fourier bidimensionnelle, *Proper Orthogonal Decomposition*, *Dynamic Mode Decomposition*, ...). En pratique cependant, ce cas ne se produit que vers la fin de l'intervalle de temps simulé et ne concerne qu'une seule vague, ce qui nous permet de supposer que l'erreur introduite peut être négligée.

Les données obtenues à partir des transformées de Fourier discrètes sont utilisées pour générer un spectrogramme, présenté sur la Figure 6.13, qui permet de visualiser l'évolution au cours du temps de l'amplitude des composantes spatiales de l'instabilité (repérées par leur fréquence spatiale). Il est possible d'identifier visuellement que les composantes spatiales ayant la plus grande amplitude durant l'intervalle de temps simulé ont des longueurs d'ondes comprises entre 20 mm et 50 mm. Les données expérimentales fournies par Thorpe [15] indiquent quant à elles que, pour le cas étudié, la longueur d'onde de la composante dominante de l'instabilité a une valeur moyenne proche de 30 mm avec un intervalle de confiance à un écart-type de la moyenne (intervalle de confiance à 1-sigma ou 68 %) compris entre 25 mm et 45 mm.

On présente sur la Figure 6.14 l'évolution au cours du temps de données extraites du spectrogramme. L'énergie du signal (Figure 6.14a) est obtenue en calculant soit l'intégrale de la densité spectrale de puissance (carré du module de la transformée de Fourier) soit



(a) Énergie du signal (intégrale de la densité spectrale de puissance) (b) Longueurs d'ondes ayant la plus grande amplitude à $t = 2,296$ s

Figure 6.14 Évolution au cours du temps de données extraites du spectrogramme de la simulation de l'expérience de Thorpe mettant en évidence la croissance exponentielle des instabilités

l'intégrale du carré du signal d'origine si la normalisation de la transformée de Fourier a été effectuée correctement. La Figure 6.14b présente quant à elle l'évolution de la valeur maximale de l'amplitude de la transformée de Fourier et de l'amplitude de quatre longueurs d'ondes instables au cours du temps. Ces modes correspondent aux maximums locaux de la transformée de Fourier du signal à $t = 2,296$ s ayant la plus grande amplitude et ont des longueurs d'ondes presque toutes comprises dans l'intervalle de confiance expérimental. Le mode le plus énergétique dans l'instabilité varie au cours du temps en fonction des taux de croissance de chaque mode et de leur amplitude initiale. Une fois le développement de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz bien amorcé ($t > 1,9$ s), le mode le plus énergétique alterne entre les longueurs d'onde valant 34,76 mm et 37,89 mm. Les changements dans la pente du graphe de l'énergie du signal tracé en échelle semi-logarithmique semblent correspondre aux instants où se produit un changement dans le mode le plus énergétique.

La caractérisation de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz réalisée par Thorpe est effectuée à partir de clichés du montage expérimental utilisé. Pour le cas qui nous intéresse, l'instabilité apparaît à partir de $t = 1,87 \pm 0,07$ s et se développe avec un taux de croissance constant estimé à $5,1 \text{ s}^{-1}$ pendant environ 0,5 s entre $t = 2,24$ s et $t = 2,7$ s. L'amplitude des instabilités de Kelvin-Helmholtz est déterminée en suivant la méthode proposée par Štrubelj et Tiselj [90] qui consiste à calculer l'écart-type des points créés lors de l'échantillonnage de l'interface². La

2. Cela revient à déterminer la valeur efficace ou valeur RMS (*Root Mean Square*) pour un signal ayant une moyenne nulle. L'amplitude et la valeur RMS sont liées par une constante multiplicative que l'on suppose

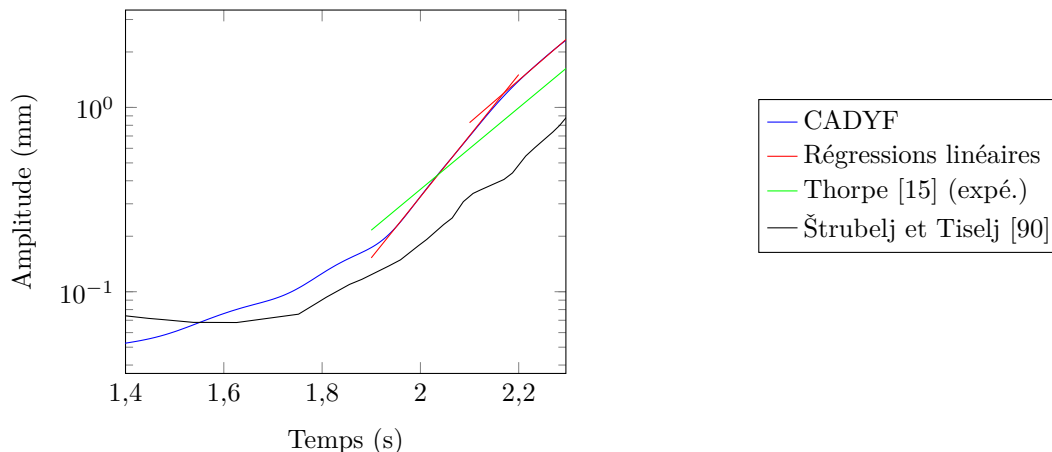


Figure 6.15 Évolution au cours du temps de l'amplitude de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz apparaissant dans la simulation de l'expérience de Thorpe

Figure 6.15 compare les différents résultats disponibles de l'évolution au cours du temps de l'amplitude de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz. Les résultats obtenus par la présente étude permettent d'identifier deux intervalles de temps où l'instabilité se développe avec un taux de croissance constant : un premier intervalle pour $1,95 \text{ s} < t < 2,1 \text{ s}$ et un second pour $t > 2,2 \text{ s}$. Les taux de croissance de l'instabilité durant ces intervalles sont respectivement de $7,63 \text{ s}^{-1}$ et $5,30 \text{ s}^{-1}$. Les différentes études donnent des résultats comparables du point de vue du taux de croissance de l'instabilité pour $t > 2,2 \text{ s}$, les différences s'expliquant par un décalage en temps probablement dû à l'amplitude de la perturbation initiale.

6.3 Ascension d'une bulle de gaz dans un liquide

On étudie dans cette partie l'ascension de bulles de gaz bidimensionnelles dans un liquide sous l'influence de la poussée d'Archimède. Dans le problème simplifié auquel nous nous intéressons, une bulle de gaz initialement circulaire et au repos est placée dans une colonne de liquide. Sous l'effet de la poussée d'Archimède due à la différence de masse volumique entre les deux fluides et au champ de gravité, la bulle se met en mouvement, remonte la colonne de fluide et se déforme sous l'influence des différences forces en jeu. La forme prise par la bulle dépend de quatre paramètres adimensionnels : le rapport des masses volumiques et le rapport des viscosités des deux fluides, le nombre de Reynolds Re et le nombre de Eötvös Eo (ou nombre de Bond). Les principaux régimes sont bien documentés expérimentalement pour les bulles tridimensionnelles et on réfère à Clift *et al.* [24], par exemple, pour plus de détails.

constante.

Le *benchmark* proposé par Hysing *et al.* [82, 83] fournit des données de comparaison et de validation pour les simulations numériques de bulles bidimensionnelles. Deux cas distincts donnant des bulles ayant des formes très différentes sont proposés (seul le nombre de Reynolds est gardé constant pour les deux cas). La première bulle prend la forme d'un ellipsoïde aplati tandis que la seconde est dans un régime où des filaments de fluide se développent, ce qui peut conduire à la fragmentation de la bulle.

Des données extraites de simulations réalisées avec trois codes différents permettent d'analyser de façon quantitative l'évolution de la circularité et de la position du centre de masse de la bulle ainsi que sa vitesse d'ascension moyenne. Les formes prises par l'interface séparant les deux fluides permettent de plus de comparer visuellement les différentes solutions obtenues. Enfin, les auteurs fournissent une estimation du coût de calcul requis pour atteindre une certaine précision pour chacun des codes afin de comparer l'efficacité des différentes formulations. Deux des codes utilisés pour le *benchmark* utilisent une formulation de capture d'interface basée sur la méthode des lignes de niveaux ou *level set method* (TP2D et FreeLIFE) tandis que le troisième (MoonMD) implémente une formulation de suivi d'interface similaire à la nôtre.

6.3.1 Description des cas du *benchmark*

Présentation des configurations utilisées

La configuration initiale du domaine de calcul utilisé pour les différents cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle de gaz dans un liquide est représentée sur la Figure 6.16. Le domaine de calcul est un rectangle de 2 m de hauteur et de 1 m de largeur contenant un fluide lourd dans lequel est placée une bulle d'un fluide plus léger (dénotés par la suite par les indices 1 et 2 respectivement, avec donc $\rho_1 > \rho_2$). Les deux fluides sont séparés par une interface que l'on note Γ et sont modélisés comme des fluides incompressibles. La bulle est initialement circulaire de rayon $r_0 = 0,25$ m et son centre est situé à un diamètre de distance des frontières de gauche, de droite et de la frontière inférieure.

Des conditions de glissement sont appliquées sur les frontières de gauche et de droite et des conditions d'adhérence sont imposées sur les frontières inférieures et supérieures. Les simulations qui ont été effectuées dans la présente étude tirent profit de la symétrie de la géométrie puisqu'aucun mouvement du centroïde des bulles dans la direction transverse n'a été rapporté. On impose ainsi des conditions de symétrie sur l'axe de symétrie vertical et des angles de contact de 90° pour les extrémités de l'interface.

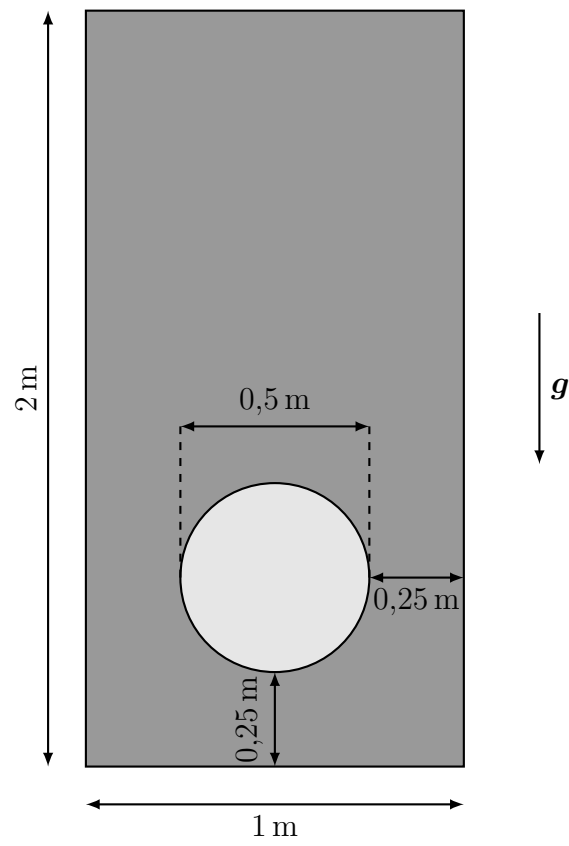


Figure 6.16 Représentation du domaine utilisé pour les simulations de l'ascension d'une bulle de gaz dans un liquide

Classification et quantités de comparaison

Comme cela a déjà été mentionné, on peut classer les simulations de ce problème grâce à quatre nombres adimensionnels : le rapport des masses volumiques ρ_1/ρ_2 et le rapport des viscosités des deux fluides μ_1/μ_2 , le nombre de Reynolds Re et le nombre de Eötvös Eo . Ces deux derniers nombres adimensionnels sont ici définis à partir d'une échelle de longueur basée sur le diamètre de la bulle $L = 2r_0$ et sur une échelle de vitesse liée à l'attraction gravitationnelle $U_g = \sqrt{2gr_0}$:

$$Re = \frac{\rho_1 U_g L}{\mu_1} \quad (6.5a)$$

$$Eo = \frac{\rho_1 U_g^2 L}{\gamma} \quad (6.5b)$$

Ces définitions des nombres adimensionnels ont l'avantage de ne pas utiliser la vitesse d'ascension terminale dans la définition du nombre de Reynolds, comme cela est couramment fait pour les études d'ascension de bulles. Le nombre de Reynolds peut donc être déterminé *a priori* et non *a posteriori*.

En plus de comparer visuellement la forme prise par les bulles à la fin du temps physique simulé ($t_{\max} = 3$ s), on utilise l'évolution au cours du temps de trois quantités afin pour confronter les résultats issus du *benchmark* et ceux obtenus dans cette étude : (1) la position du centroïde de la bulle \mathbf{x}_c (confondu avec son centre de masse dans ce cas), (2) la vitesse d'ascension moyenne de la bulle \mathbf{u}_c , et (3) la circularité de la bulle \mathcal{C} (dont on s'était déjà servi dans la Section 5.2.3).

Les deux premières quantités correspondent simplement aux moyennes des coordonnées des points appartenant à la bulle et de la vitesse du fluide dans la bulle tandis que la circularité compare le périmètre de la bulle à l'instant initial à son périmètre (longueur de l'interface) au cours du temps. En notant Ω_2 le domaine occupé par la bulle, ces quantités sont respectivement définies ainsi :

$$\mathbf{x}_c = \frac{\int_{\Omega_2} \mathbf{x} \, d\Omega}{\int_{\Omega_2} 1 \, d\Omega} \quad (6.6a)$$

$$\mathbf{u}_c = \frac{\int_{\Omega_2} \mathbf{u} \, d\Omega}{\int_{\Omega_2} 1 \, d\Omega} \quad (6.6b)$$

$$\mathcal{C} = \frac{2\pi r_0}{\int_{\Gamma} 1 \, d\Gamma} \quad (6.6c)$$

6.3.2 Étude du premier cas du *benchmark*

Présentation de l'étude

Tableau 6.3 Propriétés physiques des fluides et nombres adimensionnels pour le premier cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle

	Liquide (gris foncé)	Gaz (gris clair)
Masse volumique de référence ρ_r (kg/m ³)	1000	100
Viscosité dynamique μ (Pa · s)	10	1
Champ de pesanteur \mathbf{g} (m/s ²)		0,98
Coefficient de tension superficielle γ (N/m)		24,5
Rapport des masses volumiques		10
Rapport des viscosités		10
Nombre de Reynolds		35
Nombre de Eötvös		10

Le premier cas considéré est une bulle présentant des déformations assez modestes. Les propriétés des fluides ainsi que les nombres adimensionnels qui le caractérisent sont consignés dans le Tableau 6.3. Les rapports des masses volumiques et des viscosités sont relativement faibles pour ce cas et, étant donné les valeurs des nombres de Reynolds et de Eötvös, la bulle devrait être dans le régime ellipsoïdal (si les résultats tridimensionnels sont extensibles aux bulles bidimensionnelles).

On effectue pour ce cas deux simulations différentes où l'on modifie uniquement la valeur de la tolérance d'erreur relative qui sert à déclencher le processus de remaillage et à déterminer la taille des éléments du nouveau maillage. On impose respectivement des tolérances de 1 % et 0,1 % sur tous les estimateurs d'erreur utilisés afin d'évaluer l'impact de ce paramètre sur le coût de calcul et sur la précision des résultats. Dans les deux cas, le facteur de réduction d'erreur vaut 0,7 et les éléments peuvent prendre des tailles comprises entre $5 \cdot 10^{-6}$ m et $2 \cdot 10^{-1}$ m.

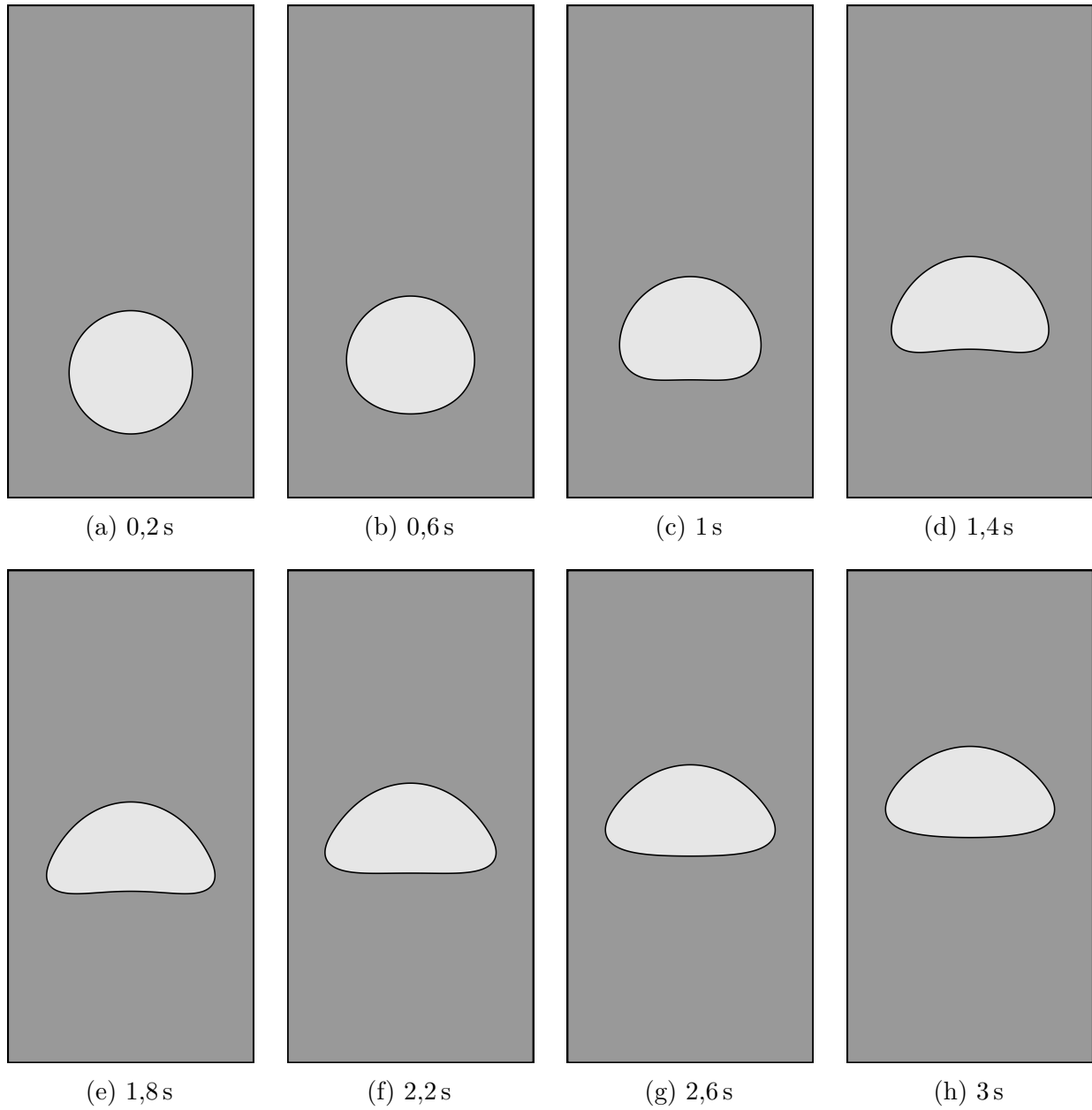


Figure 6.17 Évolution de l'interface au cours du temps pour le premier cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle

Évolution de la forme de la bulle au cours du temps

L'évolution au cours du temps de la forme de la bulle est présentée dans la Figure 6.17. La bulle s'aplatit dans un premier temps et une petite « fossette » (*dimple*) apparaît sur sa partie inférieure. Cette dépression se résorbe par la suite et la bulle prend à terme une forme ellipsoïdale comme attendu.

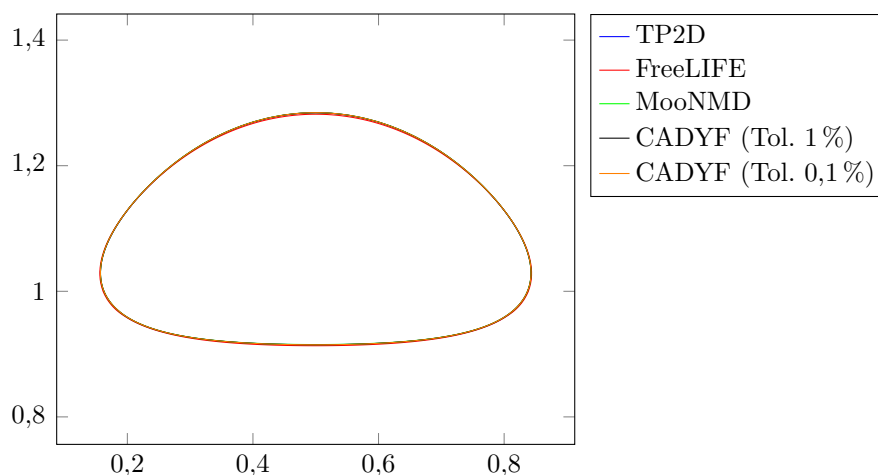


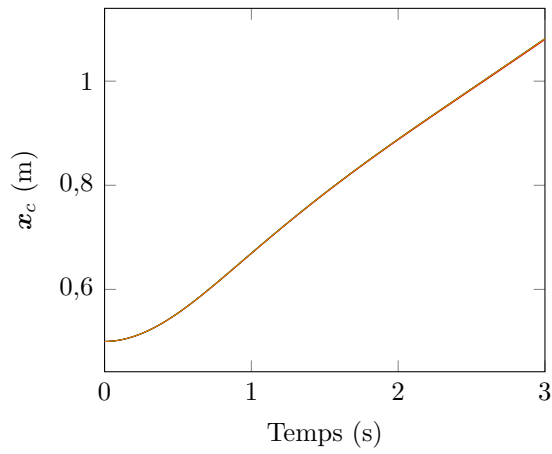
Figure 6.18 Forme prise par la bulle à $t = 3$ s pour le premier cas du *benchmark*

Une comparaison des résultats obtenus par les différents codes concernant la forme prise par la bulle à $t = 3$ s est présentée dans la Figure 6.18. Les résultats sont extrêmement semblables et aucune différence notable ne peut être distinguée visuellement : la forme de la bulle et sa position à la fin du temps de calcul sont prédites de façon similaire par l'ensemble des codes.

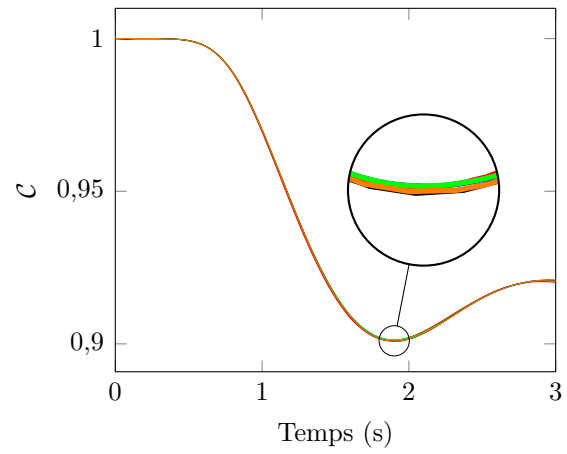
Évolution des quantités de comparaison au cours du temps

Les Figures 6.19a à 6.19c présentent l'évolution au cours du temps des trois quantités auxquelles on s'intéresse pour cette étude. Il est ici aussi difficile de distinguer des différences notables entre les différentes études. Les résultats sont très proches les uns des autres et seuls de très légers écarts peuvent être observés sur ces graphiques.

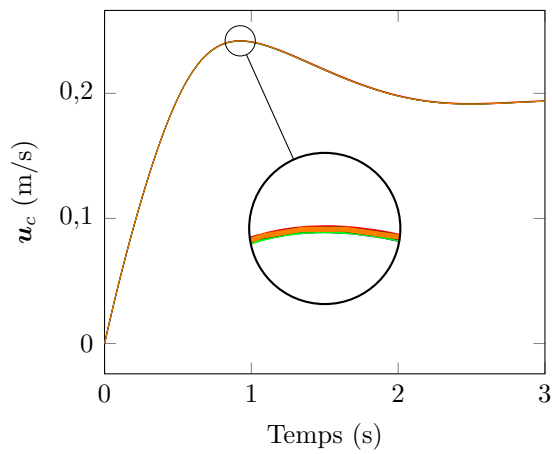
La position du centroïde de la bulle au cours du temps suit asymptotiquement une fonction linéaire, ce qui indique que la vitesse d'ascension du centroïde de la bulle atteint une valeur constante. La vitesse d'ascension moyenne quant à elle passe par un maximum autour de 0,92 s puis diminue pour atteindre une valeur qui semble être constante (vitesse terminale). Enfin, la circularité passe par un minimum autour de 1,9 s, au moment où la dépression sur la partie inférieure de la bulle est la plus prononcée, puis augmente jusqu'à atteindre elle aussi



(a) Position du centroïde de la bulle



(b) Circularité de la bulle



(c) Vitesse d'ascension moyenne

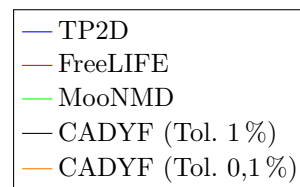


Figure 6.19 Évolution au cours du temps des quantités étudiées pour le premier cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle

une valeur constante. L'état obtenu à la fin de la simulation est vraisemblablement l'état terminal de la bulle : la vitesse d'ascension terminale constante est atteinte et la forme de la bulle ne change plus au cours du temps.

Tableau 6.4 Comparaison des valeurs extrêmes des quantités étudiées dans le premier cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle

Code utilisé	CADYF		TP2D	FreeLIFE	MoonMD
	Tol. 1 %	Tol. 0,1 %			
Circularité minimale \mathcal{C}_{\min}	0,9008	0,9009	0,9013	0,9011	0,9013
Instant où $\mathcal{C} = \mathcal{C}_{\min}$ $t_{\mathcal{C}=\mathcal{C}_{\min}}$ (s)	1,8991	1,8998	1,9041	1,8750	1,9000
Vitesse d'ascension max. $v_{c,\max}$ (m/s)	0,2420	0,2420	0,2417	0,2421	0,2417
Instant où $v_c = v_{c,\max}$ $t_{v_c=v_{c,\max}}$ (s)	0,9225	0,9224	0,9213	0,9313	0,9239
Position finale du centroïde $y_c(t = 3\text{ s})$ (m)	1,0815	1,0815	1,0813	1,0799	1,0817

On présente dans le Tableau 6.4 les valeurs extrêmes prises par les quantités étudiées ainsi que les instants auxquels sont atteints ces extrémums. Plus spécifiquement, on compare ici les résultats obtenus par les différents codes concernant : (1) la valeur minimale atteinte par la circularité, (2) la vitesse d'ascension moyenne maximale, (3) et (4) les instants auxquels se produisent ces deux évènements, et (5) la position du centroïde à la fin du temps simulé.

Les valeurs importantes prises par le pas de temps au cours des deux simulations réalisées ont nécessité que les résultats ayant été extraits des simulations soient interpolés (interpolation par splines cubiques de `scipy.interpolate.interp1d`) afin de produire les données qui sont comparées. Ce traitement a notamment permis d'améliorer significativement la précision des valeurs des instants auxquels les extrémums de la circularité et de la vitesse d'ascension moyenne sont atteints.

Les résultats que l'on obtient pour les deux simulations réalisées sont encore une fois similaires aux résultats obtenus par les équipes ayant pris part au *benchmark* et sont tous compris dans les intervalles de confiance fournis, mis à part la valeur minimale de la circularité qui est légèrement inférieure dans notre cas.

La valeur de la tolérance d'erreur relative semble avoir très peu d'influence sur les résultats, ce qui suggère qu'une tolérance de 1 % suffit à obtenir une solution précise pour ce premier

cas. On note tout de même que la simulation utilisant une tolérance de 0,1 % d'erreur relative fournit des résultats qui sont légèrement plus proches du centre des intervalles de confiance.

Comportement de la procédure de remaillage

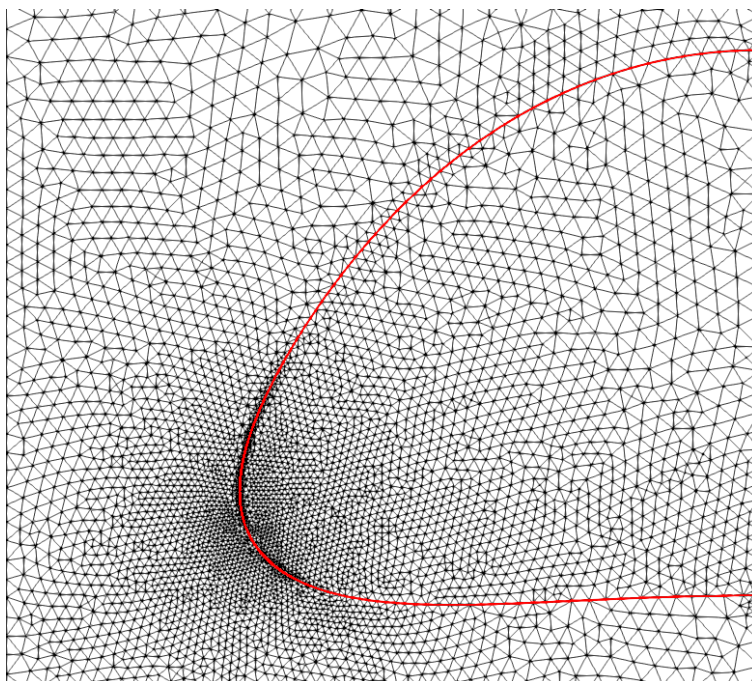
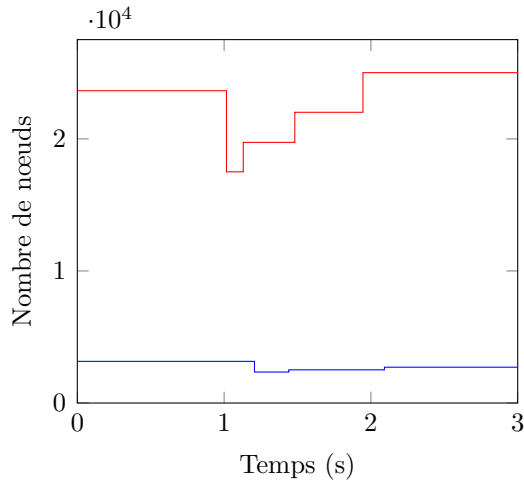


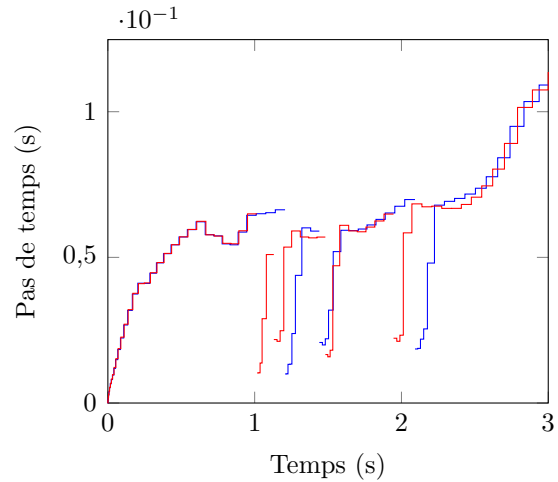
Figure 6.20 Maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour le premier cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle à $t = 3$ s. L'interface est représentée en rouge.

L'adaptation de maillage est pour ce cas encore pilotée par les mêmes estimateurs d'erreur : la norme « énergie » (portant sur le champ de vitesse) et la norme « déformation » (portant sur les déformations du pseudo-solide). La procédure de remaillage est déclenchée 3 fois pour le cas utilisant une tolérance de 1 % sur l'erreur relative calculée par chacun des deux estimateurs et 4 fois pour le cas utilisant une tolérance de 0,1 %. Peu de remaillages sont requis pour cette première configuration puisque la bulle se déforme très peu et le fait relativement lentement. La Figure 6.20 présente un exemple de maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour ce cas.

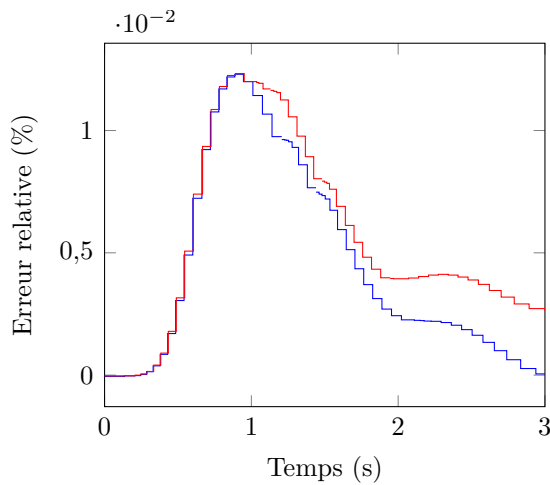
Les trois graphes de la Figure 6.21 montrent que les méthodes numériques utilisées se comportent de façon similaire pour les deux simulations. Le nombre de nœuds dans le maillage, présenté sur la Figure 6.21a, reste quasiment constant au cours des simulations et diffère entre les deux cas d'un facteur restant constant et valant approximativement 10. La Figure 6.21b permet de bien mettre en évidence que la taille du pas de temps est réduite



(a) Nombre de nœuds



(b) Taille du pas de temps



(c) Erreur relative sur le volume

Figure 6.21 Évolution du nombre de nœuds dans le maillage, de la taille du pas de temps et de l'erreur relative sur le volume au cours du temps pour les simulations du premier cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle. Les discontinuités sur les graphes de la taille du pas de temps et de l'erreur relative sur le volume et les sauts dans la valeur du nombre de nœuds indiquent les instants où le domaine est remaillé.

d'environ un ordre de grandeur après chaque remaillage et qu'elle revient rapidement à des valeurs comparables à celles précédant la reprise du calcul. Enfin, l'erreur commise sur le volume de la bulle au cours du temps (Figure 6.21c) permet d'identifier (par les discontinuités) des pertes et des gains de masse très légers lors des remaillages, ce qui indique ici aussi que le processus de remaillage n'est pas la principale source d'erreur sur le volume. On remarque que la valeur de la tolérance d'erreur relative ne semble pas affecter significativement l'erreur commise sur le volume.

Les deux simulations ont été réalisées sur un ordinateur de bureau muni d'un processeur Intel® Core™ i7-6700K cadencé à 4,00 GHz. Elles ont nécessité au total 81 s et 619 s de temps de calcul équivalent sur un cœur, respectivement pour une tolérance de 1 % et de 0,1 %. Même s'il est difficile de comparer ces résultats à ceux du *benchmark* de 2009, les méthodes adaptatives en espace et en temps semblent avoir une influence très bénéfique sur le coût de calcul et permettent ainsi de fournir, à précision équivalente, des résultats beaucoup plus rapidement et plus efficacement. L'erreur commise lors de la résolution du problème est quantifiée et maîtrisée tout au long de la simulation et les discrétisations en espace et en temps s'adaptent rapidement et localement à l'évolution de la solution afin de fournir la meilleure efficacité possible, pour une précision donnée.

6.3.3 Étude du second cas du *benchmark*

Présentation de l'étude

La seconde bulle qui est ici étudiée présente des déformations beaucoup plus conséquentes et représente donc un défi plus important que la première configuration. Les propriétés des fluides et les nombres adimensionnels qui caractérisent ce cas (voir Tableau 6.5) se rapprochent plus de valeurs que l'on pourrait retrouver pour une bulle d'air dans une colonne d'eau (en termes de rapport de viscosité et de masse volumique). Les valeurs des nombres de Reynolds et de Eötvös placent en principe cette bulle dans une région où plusieurs régimes sont possibles. Si les résultats tridimensionnels sont extensibles aux bulles bidimensionnelles ici aussi, la forme finale prise par la bulle sera vraisemblablement la forme d'une demi-sphère avec une légère dépression sur la partie inférieure. Des filaments du fluide léger donnant l'impression que la bulle est ceinte d'une jupe (*skirted*) peuvent potentiellement être visibles au bord de la demi-sphère, s'ils ne se fragmentent toutefois pas au cours du temps. On réalise ici encore deux simulations avec des tolérances d'erreur relative de 1 % et 0,1 % en utilisant les mêmes paramètres pour l'adaptation de maillage et le maillage que dans le premier cas.

Tableau 6.5 Propriétés physiques des fluides et nombres adimensionnels pour le second cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle

	Liquide (gris foncé)	Gaz (gris clair)
Masse volumique de référence ρ_r (kg/m ³)	1000	1
Viscosité dynamique μ (Pa · s)	10	0,1
Champ de pesanteur \mathbf{g} (m/s ²)		0,98
Coefficient de tension superficielle γ (N/m)		1,96
Rapport des masses volumiques		1000
Rapport des viscosités		100
Nombre de Reynolds		35
Nombre de Eötvös		125

Évolution de la forme de la bulle au cours du temps

La Figure 6.22 présente l'évolution au cours du temps de la forme de la seconde bulle. Celle-ci développe rapidement une dépression sur sa face inférieure puis prend la forme d'un croissant dont les extrémités deviennent de plus en plus pointues. On assiste à une évolution rapide de la forme de la bulle en quelques dixièmes de seconde à partir d'environ $t = 2$ s avec la formation de filaments de fluide. La bulle poursuit ensuite son ascension tandis que l'extrémité des filaments reste relativement immobile, ce qui conduit à leur allongement. En poursuivant la simulation (non présenté ici), on observe que les filaments continuent à s'allonger puis se remettent en mouvement et suivent de nouveau la bulle jusqu'à ce que celle-ci atteigne la paroi supérieure du domaine. Il semble donc que, dans les conditions de l'étude, la fragmentation des filaments ne se produise pas.

On compare les prédictions de la forme finale prise par la bulle à $t = 3$ s faites par les différents codes sur la Figure 6.23. Trois des quatre codes prédisent la formation de longs filaments de fluide qui ne sont pas observés sur les résultats fournis par le quatrième code (TP2D). Les deux codes ayant une formulation de capture d'interface prédisent que la bulle se fragmente pendant l'intervalle de temps simulé en une goutte principale et deux ou plus gouttes satellites, mais ce phénomène n'est pas observé sur les résultats obtenus par les deux codes utilisant une méthode de suivi d'interface. La forme et la position de la partie principale de la bulle sont très similaires pour les quatre codes, bien que les résultats présentent quelques variations. On

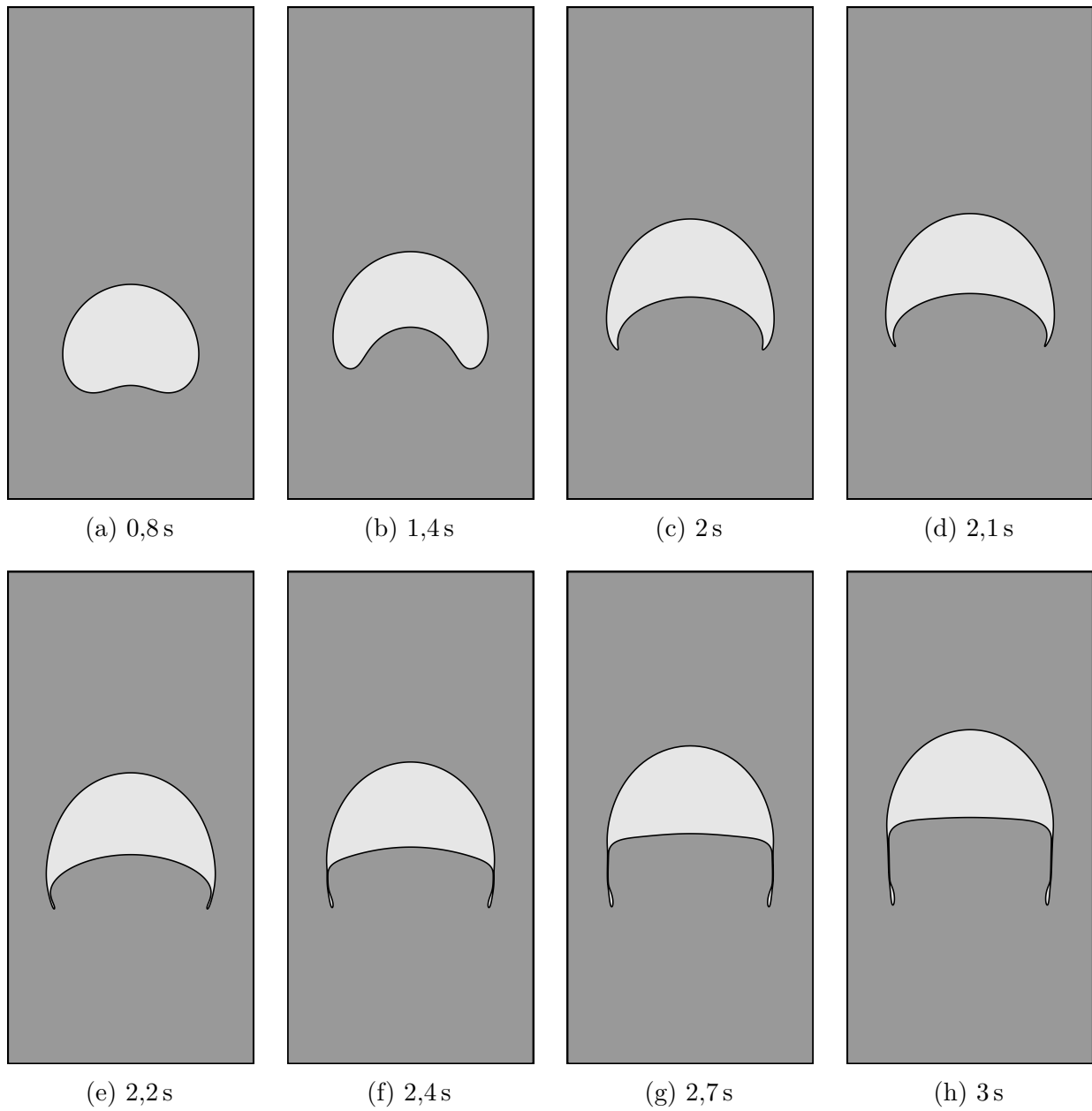


Figure 6.22 Évolution de l'interface au cours du temps pour le second cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle

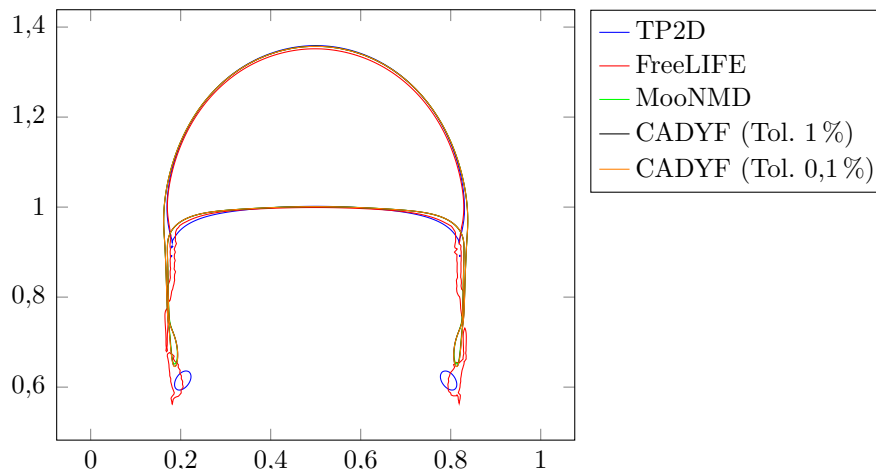


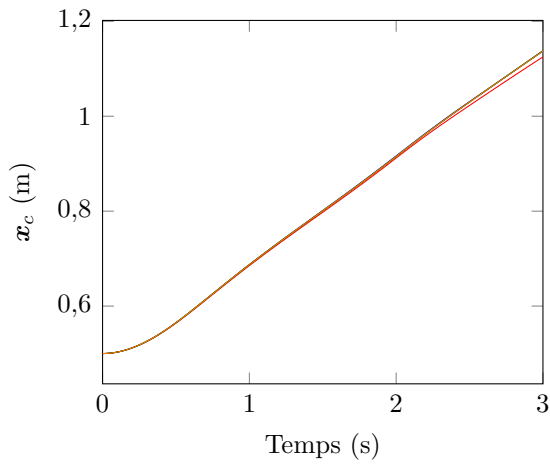
Figure 6.23 Forme prise par la bulle à $t = 3$ s pour le second cas du *benchmark*

notera que la forme finale que nous obtenons dans les deux cas est très semblable à celle fournie par MoonMD, qui utilise comme nous une méthode de suivi d'interface et une formulation faible basée sur l'utilisation de l'opérateur de Laplace-Beltrami pour l'implémentation de la force de tension superficielle.

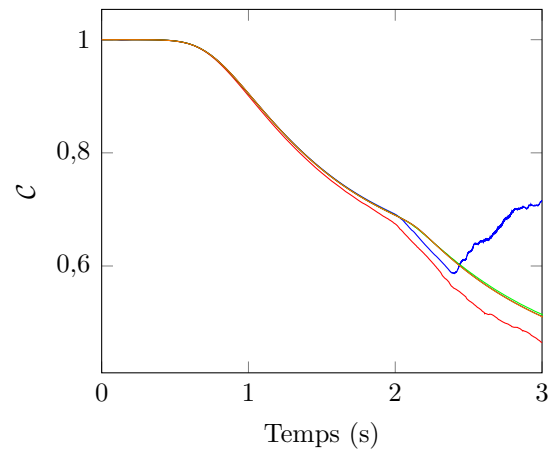
Évolution des quantités de comparaison au cours du temps

L'évolution au cours du temps des trois quantités auxquelles on s'intéresse pour cette étude est représentée sur les Figures 6.24a à 6.24c. Avant le début des déformations rapides et importantes de la bulle à $t = 2$ s, l'accord entre les codes est très bon mais des disparités plus importantes sont observables par la suite, même si certaines tendances globales se retrouvent. L'intervalle de temps physique simulé est insuffisant pour pouvoir observer la forme finale prise par la bulle dans ce cas (la circularité et la vitesse d'ascension moyenne n'atteignent pas des valeurs constantes).

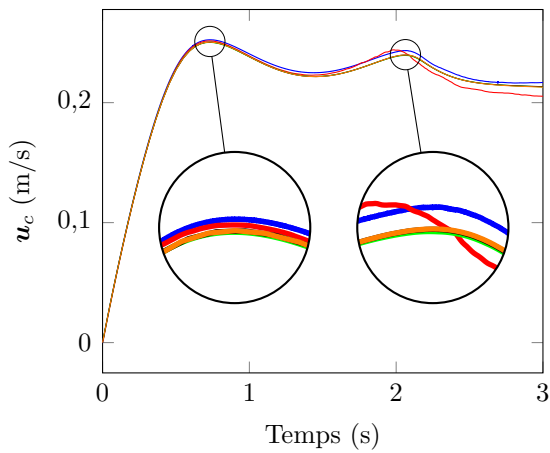
Globalement, l'accord entre les différentes formulations est bon en ce qui concerne la position du centroïde de la bulle au cours du temps et l'évolution de la vitesse d'ascension moyenne, même si les résultats obtenus par FreeLIFE sont légèrement différents des autres. La vitesse d'ascension moyenne passe, pour cette bulle, par deux maximums locaux dont le second coïncide avec l'instant où les filaments de fluide se développent. On observe plus de dispersion pour la circularité ainsi que des comportements différents puisque cette grandeur dépend de la forme de la bulle et donc de la fragmentation ou non des filaments de fluide. La circularité calculée par TP2D passe par un minimum puis réaugmente du fait de la fragmentation mais n'atteint pas de valeur minimum pour les autres codes. Encore une fois, les résultats obtenus



(a) Position du centroïde de la bulle



(b) Circularité de la bulle



(c) Vitesse d'ascension moyenne

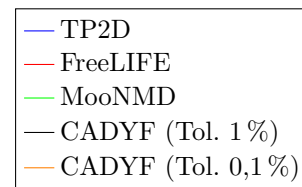


Figure 6.24 Évolution au cours du temps des quantités étudiées pour le second cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle

par MoonMD et ceux de cette étude sont en excellent accord entre eux.

Tableau 6.6 Comparaison des valeurs extrêmes des quantités étudiées dans le second cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle

Code utilisé	CADYF		TP2D	FreeLIFE	MoonMD
	Tol. 1 %	Tol. 0,1 %			
Circularité minimale \mathcal{C}_{\min}	0,5107	0,5105	0,5869	0,4647	0,5144
Instant où $\mathcal{C} = \mathcal{C}_{\min}$ $t_{\mathcal{C}=\mathcal{C}_{\min}}$ (s)	3,0000	3,0000	2,4004	3,0000	3,0000
Vitesses d'ascension max. $v_{c,\max}$ (m/s)	0,2505 0,2397	0,2505 0,2398	0,2524 0,2434	0,2514 0,2440	0,2502 0,2393
Instants où $v_c = v_{c,\max}$ $t_{v_c=v_{c,\max}}$ (s)	0,7313 2,0645	0,7312 2,0637	0,7332 2,0705	0,7281 1,9844	0,7317 2,0600
Position finale du centroïde $y_c(t = 3\text{ s})$ (m)	1,1373	1,1372	1,1380	1,1249	1,1376

Le Tableau 6.6 présente les valeurs extrêmes prises par les quantités étudiées ainsi que les instants auxquels sont atteints ces extrémums pour la seconde bulle. On utilise les mêmes mesures que pour la première bulle (à ceci près que la vitesse d'ascension moyenne passe par deux maximums locaux) ainsi que le même traitement des résultats afin d'améliorer leur précision. Les résultats que nous obtenons sont de nouveau compris dans les intervalles de confiance fournis et sont très proches des valeurs obtenues par les autres codes, et notamment ceux de MoonMD.

Comportement de la procédure de remaillage

La procédure de remaillage est déclenchée 53 et 65 fois pour ces deux cas où la tolérance sur l'erreur relative est respectivement de 1 % et de 0,1 %. Les déformations de la bulle sont beaucoup plus importantes et il devient alors nécessaire de remailler régulièrement le domaine afin d'assurer que l'erreur reste inférieure à la tolérance, notamment dans l'intervalle de temps où les filaments se développent. La Figure 6.25 présente un exemple de maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour ce cas à la fin du temps physique simulé et montre que les éléments du maillage sont principalement concentrés près des filaments.

Le nombre de nœuds dans le maillage (Figure 6.26a) reste relativement constant dans un premier temps puis augmente lorsque la forme de la bulle se met à changer rapidement aux alentours de $t = 2\text{ s}$. Cette augmentation est d'autant plus marquée dans le cas où la tolérance

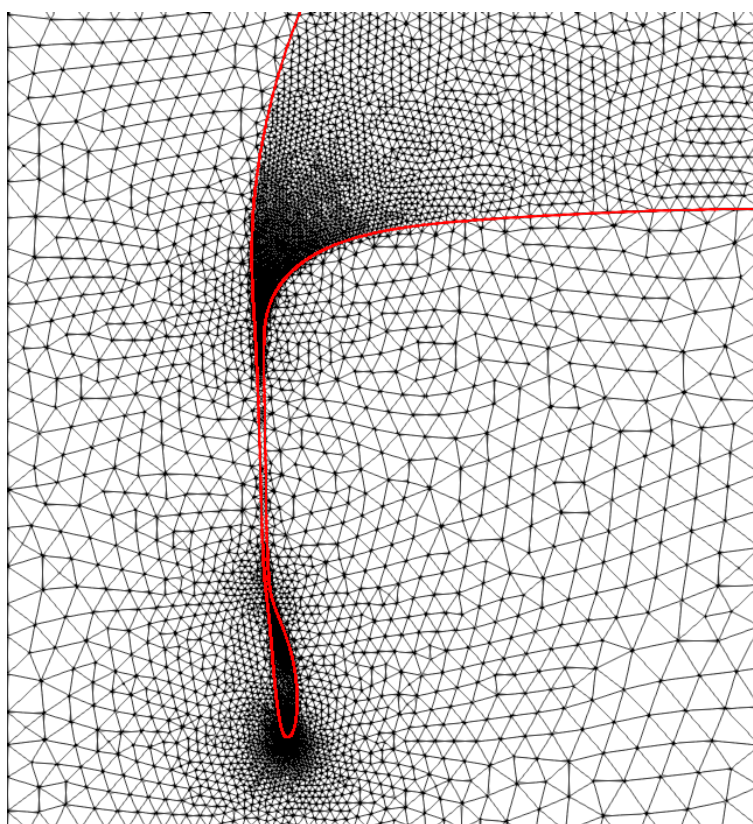


Figure 6.25 Maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour le second cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle à $t = 3$ s. L'interface est représentée en rouge.

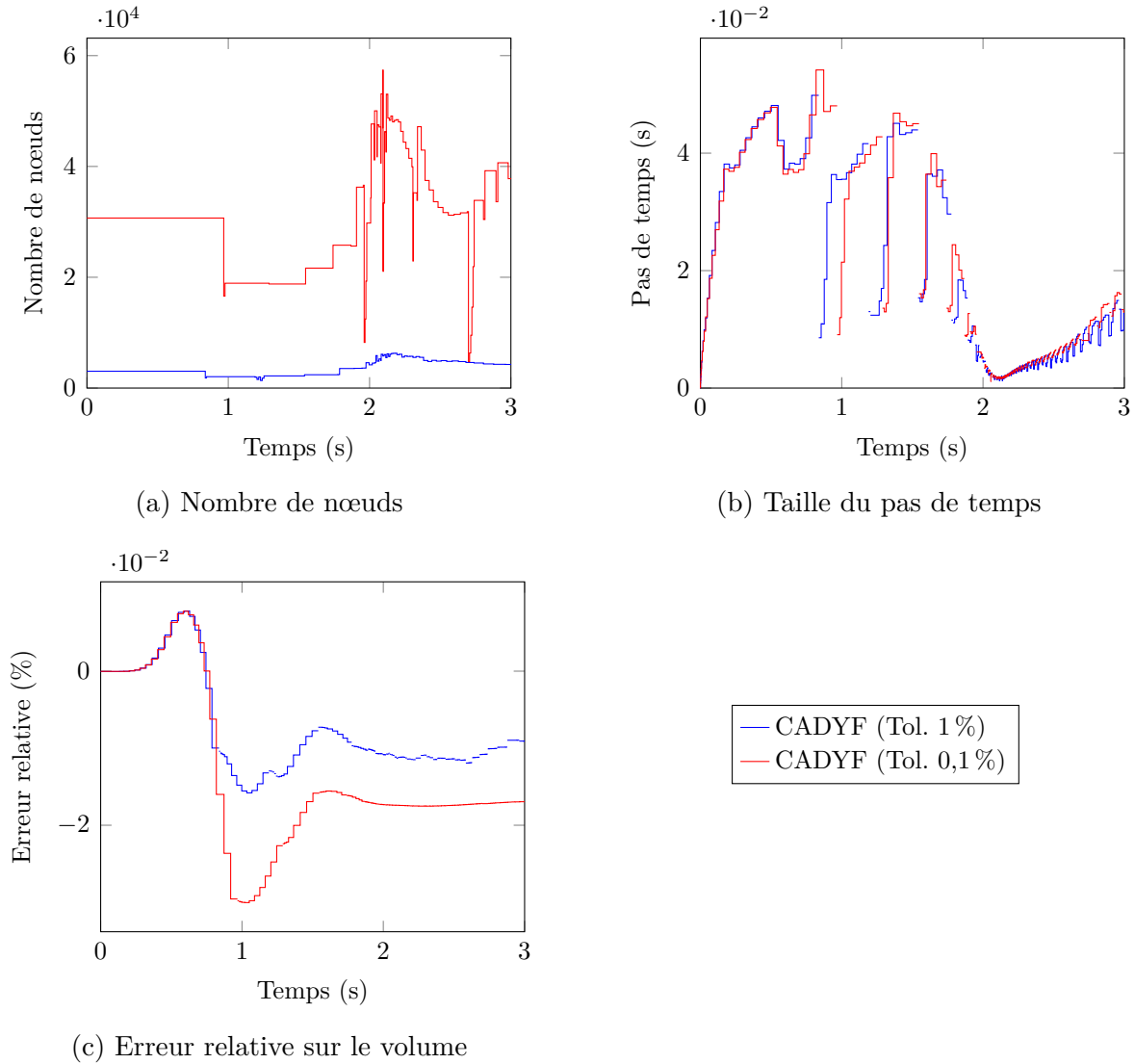


Figure 6.26 Évolution du nombre de nœuds dans le maillage, de la taille du pas de temps et de l'erreur relative sur le volume au cours du temps pour les simulations du second cas du *benchmark* de l'ascension d'une bulle. Les discontinuités sur les graphes de la taille du pas de temps et de l'erreur relative sur le volume et les sauts dans la valeur du nombre de nœuds indiquent les instants où le domaine est remaillé.

d'erreur relative vaut 0,1 %. Le nombre de nœuds dans le maillage diminue quelque peu une fois que la bulle a terminé sa phase de déformation rapide, après avoir atteint un maximum vers $t = 2,2$ s. Dans le cas où la tolérance utilisée est de 0,1 %, on remarque que le nombre de nœuds dans le maillage diminue drastiquement avant de remonter très rapidement à plusieurs reprises. Ce phénomène est vraisemblablement causé par la combinaison (1) de la remise à zéro des déplacements du pseudo-solide lors du remaillage, et (2) du déclenchement du processus de remaillage immédiatement après une précédente reprise. Puisque les déplacements sont très faibles au moment où la simulation est stoppée, l'erreur estimée en norme « déformation » est elle aussi très faible. L'adaptation de maillage est alors pilotée principalement par l'erreur estimée en norme « énergie » et cible ainsi moins les régions qui nécessitent d'être raffinées afin de représenter fidèlement les déplacements du pseudo-solide. Une analyse des maillages générés par la procédure adaptative indique que le déraffinement se produit globalement et est exacerbé loin de la bulle, ce qui laisse penser que les régions ayant le plus d'influence sur les résultats de la simulation sont affectées dans une moindre mesure par ce comportement. Les cycles de remaillage qui suivent permettent au nombre de nœuds de retrouver des valeurs similaires à celles qui précèdent ces phénomènes mais il y a lieu de s'interroger sur l'accumulation d'erreur engendrée par la succession rapide de remaillages et par la chute initiale du nombre d'éléments dans le domaine. Une stratégie possible de mitigation consiste à prévenir ou à empêcher le déclenchement du processus de remaillage immédiatement après une reprise, par exemple en diminuant le facteur de réduction d'erreur afin d'assurer que l'erreur estimée à la fin de la première itération soit inférieure à la tolérance d'erreur relative.

Les évolutions de la taille du pas de temps au cours des deux simulations, présentées sur la Figure 6.26b, sont comparables et sont caractérisées une chute importante lors de la phase de formation des filaments et de déformation rapide de la bulle suivie d'une augmentation par la suite. L'erreur commise sur le volume de la bulle au cours du temps (Figure 6.26c) est ici encore faible tout au long des simulations et provient principalement de l'erreur due à la résolution des équations dans un premier temps avant de quasiment stagner de $t = 1,8$ s jusqu'à la fin de la simulation. La contribution du processus de remaillage, identifiable par les discontinuités notamment dans le cas où la tolérance est de 1 %, devient alors la source principale d'erreur sur le volume de la bulle.

Cette simulation a été réalisé sur la même machine que le premier cas étudié et a nécessité 726 s et 5006 s de temps de calcul équivalent sur un cœur, respectivement pour une tolérance de 1 % et de 0,1 %. Le *benchmark* ne fournit cependant pas de valeurs comparatives pour les autres codes.

6.4 Ballotement d'un liquide dans une enceinte confinée partiellement remplie

Le cas de calcul présenté dans cette dernière partie est une étude d'une vague impactante représentative d'un phénomène de ballotement dans une enceinte confinée partiellement remplie par un liquide. Cette étude a pour objectif d'utiliser conjointement l'ensemble des développements réalisés dans cette thèse et représente une démonstration des capacités de l'ensemble logiciel CADYF à traiter des problèmes polyphasiques réalistes et ayant un intérêt à la fois industriel et scientifique.

Le cas ici étudié a été décrit par Guilcher *et al.* [94, 98] dans le cadre de simulations des équations d'Euler en régime compressible par une méthode SPH (*Smoothed-Particle Hydrodynamics*) puis a été repris dans d'autres études (*e.g.* : Hay *et al.* [108], Étienne *et al.* [116] et Lortie [118]). Parmi les différents cas décrits dans ces travaux, nous nous intéressons à une situation qui correspond à un phénomène d'impact de type ELP3 (voir Figure 1.2) où un volume de gaz est emprisonné et comprimé par une vague déferlante. Ce cas sera par la suite nommé « *Large Gas Pocket* » ou LGP.

6.4.1 Description du cas de calcul

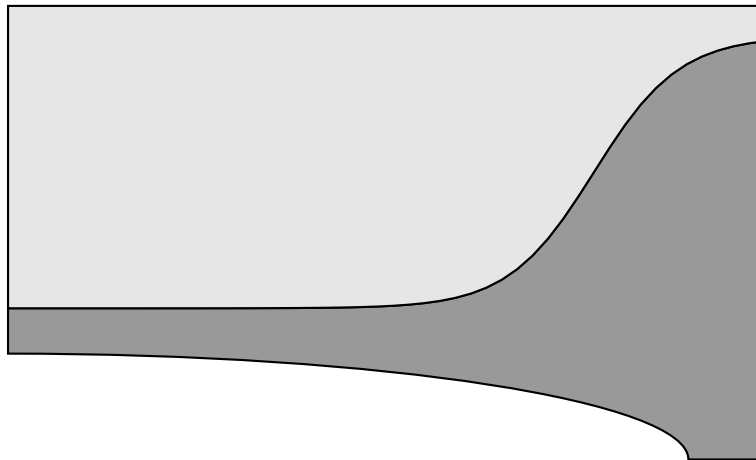


Figure 6.27 Représentation du domaine utilisé pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie

La simulation est réalisée en utilisant un domaine bidimensionnel correspondant à une vue en coupe de l'enceinte contenant le liquide. La géométrie de l'enceinte, représentée sur la Figure 6.27, correspond à un domaine rectangulaire de 20 m par 12 m coupé par une ellipse de demi-grand axe 18 m et de demi-petit axe 2,8 m centrée sur le coin inférieur gauche afin de créer une bathymétrie variable. Les deux domaines de calcul contiennent respectivement un

liquide (de l'eau, dans le domaine gris foncé) et un gaz (de l'air, dans le domaine gris clair), séparés par une interface.

Tableau 6.7 Paramètres utilisés dans la définition de la forme initiale de l'interface pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie

	h (m)	a (m)	x_p	x_l (m)	r (m ⁻¹)
Cas « LGP »	7,6	3,6	3,1	5,0	0,44
Cas « IGP »	7,6	3,6	2,5	5,0	0,44
Cas « SGP »	7,6	3,6	2,3	5,0	0,44
Cas « FTI »	7,6	3,6	2,5	5,0	0,36

La définition de la forme initiale de l'interface est générée en utilisant la formule analytique suivante :

$$y = h + a \tanh(r(x - x_p x_l)) \quad (6.7)$$

qui permet de créer différentes formes de vagues initiales en fonction des paramètres. Ce jeu de paramètre permet notamment de définir d'autres cas représentatifs d'un phénomène ELP3 où la taille de la poche de gaz emprisonnée est plus ou moins importante (cas « *Intermediate Gas Pocket* » et « *Small Gas Pocket* » ou IGP et SGP) ainsi qu'un cas représentatif d'un phénomène ELP2 où le liquide remonte le long de la paroi solide (cas « *Flip-Through Impact* » ou FTI). Les paramètres utilisés pour le cas étudié sont contenus dans le Tableau 6.7.

La simulation est réalisée en utilisant des fluides représentant de l'eau et de l'air, modélisés comme des fluides compressibles à l'aide de l'équation d'état des gaz raidis et de l'équation d'état des gaz parfaits respectivement. Les valeurs des constantes de modélisation utilisées pour l'eau sont déterminées comme dans la Section 5.2.1 afin que la capacité thermique massique à pression constante soit égale à $c_p = 1$ kcal/kg/K et que la vitesse du son dans le fluide soit égale à $a_{\text{son},0} = 1500$ m/s. Les propriétés physiques des fluides et les grandeurs thermodynamiques de référence relatives à cette simulation sont contenues dans le Tableau 6.8.

6.4.2 Mise en place de la simulation

Les premières tentatives de réalisation de cette simulation se sont soldées par des échecs dont les causes sont liées (1) au coût de calcul très important de la simulation, et (2) à des problèmes de stabilité numérique. Une analyse dimensionnelle du problème permet de mettre en évidence que la simulation telle que décrite précédemment représente un important défi d'un point de vue numérique. Notamment, le nombre de Reynolds (basé sur la longueur du

Tableau 6.8 Propriétés physiques des fluides et propriétés thermodynamiques de référence pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie

	Gaz (air)	Liquide (eau)
Équation d'état	Gaz parfait	Gaz raidi
Masse volumique de référence ρ_r (kg/m ³)	1,2257	998,78
Pression de référence p_r (Pa)	101 325	101 325
Température de référence T_r (K)	288,15	288,15
Viscosité dynamique μ (Pa · s)	$1,7965 \cdot 10^{-5}$	$1,1080 \cdot 10^{-3}$
Capacité thermique c_p (J/kg/K)	1005,9	4081,9
Conductivité thermique λ (W/m/K)	$2,522 \cdot 10^{-2}$	$5,968 \cdot 10^{-1}$
Coefficient de tension superficielle γ (N/m)		$72,8 \cdot 10^{-3}$
Champ de pesanteur \mathbf{g} (m/s ²)		9,81

domaine et une échelle de vitesse déduite du nombre de Froude) atteint une valeur très élevée, proche de $250 \cdot 10^6$, qui explique les deux problèmes rencontrés. En effet, ces conditions créent une très longue région de cisaillement tout le long de l'interface qui s'apparente à une couche limite dans laquelle se forment de nombreux tourbillons. La méthode d'adaptation de maillage cherche à représenter très fidèlement ces régions, ce qui fait fortement augmenter le nombre d'éléments dans le maillage et nous empêche de poursuivre la simulation sur les ressources dont nous disposons.

On choisit de réaliser une mise à l'échelle partielle du problème afin de réduire le nombre de Reynolds d'un facteur mille (arbitrairement choisi) tout en conservant les mêmes valeurs pour l'ensemble des autres nombres adimensionnels (notamment ceux qui ont une grande influence sur les résultats, tels que les nombres de Mach, Weber et Froude et les rapports des propriétés physiques des fluides). La mise à l'échelle est effectuée en deux temps. On divise tout d'abord toutes les dimensions du problème de façon que le domaine de calcul soit à l'échelle 1 : 20, ce qui demande d'ajuster certaines propriétés physiques des fluides afin de conserver la similitude complète. On modifie dans un second temps les valeurs de la viscosité dynamique et de la conductivité thermique des deux fluides (pour conserver le nombre de Prandtl) afin d'obtenir l'ordre de grandeur souhaité pour le nombre de Reynolds³. Les résultats présentés par la suite seront remis aux échelles du cas de référence. En complément de cette réduction du nombre de Reynolds, nous utilisons la méthode de stabilisation SUPG [26] (*Streamline Upwind Petrov-Galerkin*) pour les écoulements dominés par la convection afin de répondre aux problèmes de stabilité numérique rencontrés.

La solution initiale du problème est nulle pour toutes les variables dépendantes, à l'exception de la pression qui doit être égale au champ de pression hydrostatique. La forme initiale de l'interface rend difficile la détermination du champ de pression hydrostatique analytique et on utilise donc une approximation du champ de pression initial. Cette approximation est obtenue en réalisant une simulation d'un problème identique à celui étudié, à ceci près que les deux fluides sont des fluides incompressibles, sur un intervalle de temps très court (le champ de pression se met en place immédiatement puisque la vitesse du son est infinie dans un fluide incompressible).

Enfin, les conditions aux limites imposées sur toutes les parois du domaine de calcul sont des conditions de glissement et de conditions de flux de chaleur normal nul (adiabatique). La condition de non-pénétration du fluide sur la paroi inférieure à bathymétrie variable est imposée comme une contrainte à l'aide d'un multiplicateur de Lagrange. Des angles de contact de 90° sont imposés aux deux extrémités de l'interface.

3. Les quantités mises à l'échelle notées avec un tilde valent $\tilde{\mu}_i = 50\mu_i$, $\tilde{\lambda}_i = 50\lambda_i$, $\tilde{\gamma} = \gamma/20$ et $\tilde{\mathbf{g}} = 20\mathbf{g}$.

6.4.3 Comportement de la procédure de remaillage

L'adaptation de maillage est pilotée cette fois-ci par trois estimateurs d'erreur : les deux estimateurs que l'on utilise habituellement (norme « énergie » et norme « déformation ») et un estimateur d'erreur basé sur le flux de chaleur (norme « thermique ») qui permet d'estimer l'erreur commise sur le champ de température. La tolérance d'erreur relative utilisée pour déclencher le processus de remaillage est de 3% sur les trois estimateurs d'erreur. On utilise un facteur de réduction d'erreur valant 0,7 et des valeurs minimales et maximales de 10^{-6} m et $2 \cdot 10^{-1}$ m pour la taille des éléments du maillage (pour le domaine à l'échelle 1 : 20). Le domaine de calcul est remaillé entièrement 35 fois au total pour l'intervalle de temps simulé.

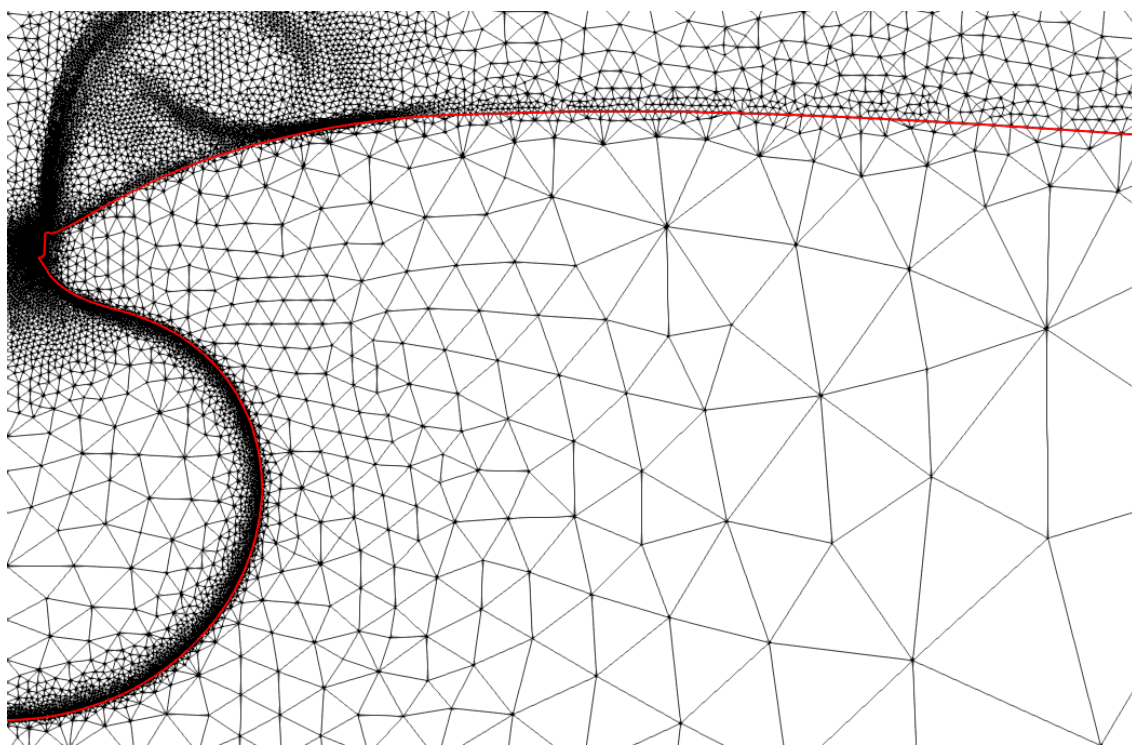


Figure 6.28 Maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie à $t = 2,089$ s. L'interface est représentée en rouge.

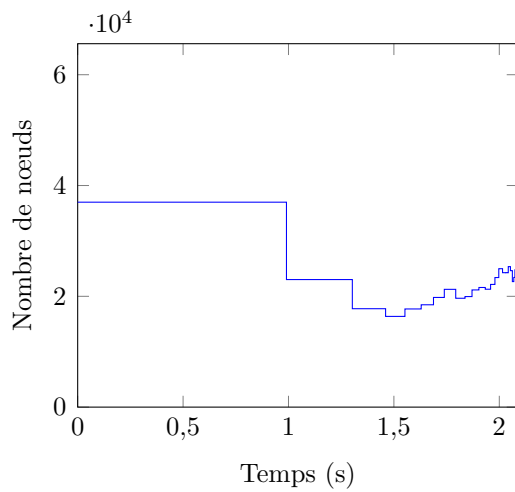
La simulation est stoppée manuellement lorsque la lèvre de la vague devient très proche de la paroi de gauche de l'enceinte, aux alentours de $t = 2,089$ s. À cet instant, la poche de gaz et la lèvre de la vague ont la géométrie d'une tuyère de Laval (convergent-divergent) qui cause la formation d'un jet subsonique dans lequel le nombre de Mach local augmente très rapidement. Ces phénomènes forcent les méthodes adaptatives en temps à diminuer fortement le pas d'intégration d'une part et nécessitent de remailler souvent et d'augmenter grandement

la densité d'éléments autour de la lèvre d'autre part, ce qui rend la poursuite de la simulation très coûteuse.

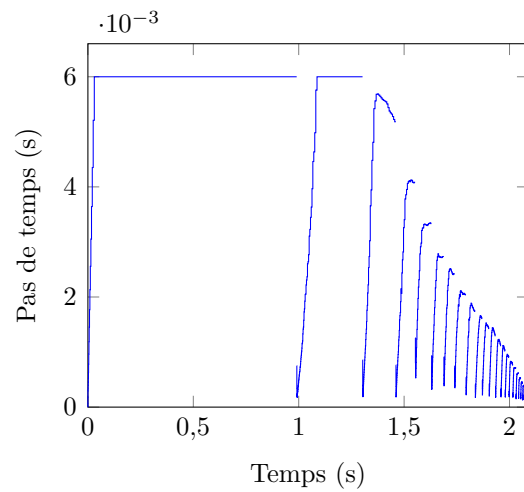
La Figure 6.28 présente le maillage généré par la procédure de remaillage adaptatif au niveau de la lèvre et de la crête de la vague juste avant que l'on ne mette fin à la simulation. Le jet s'échappant de la poche de gaz emprisonnée par la vague est identifiable dans le maillage, au-dessus de la crête. La densité d'éléments est très importante au bord du jet, là où le cisaillement est très fort. On remarque aussi que l'interface est très raffinée dans la région proche de la lèvre de la vague, notamment à proximité du col du convergent-divergent, tandis que le maillage est beaucoup moins dense sur le reste de la crête.

La Figure 6.29, qui présente l'évolution du nombre de nœuds dans le maillage et de la taille du pas de temps au cours de l'intervalle de temps simulé, permet de mettre en évidence l'augmentation de la fréquence à laquelle le domaine de calcul est remaillé vers la fin de la simulation, lorsque la vague déferlante se forme et emprisonne la poche de gaz. Le nombre d'éléments dans le maillage diminue dans un premier temps avant de se mettre à augmenter lentement puis très rapidement vers la fin de la simulation. L'augmentation lente du nombre de nœuds est causée par la formation de tourbillons dans le domaine contenant le gaz, au sein de la zone de cisaillement située au niveau de l'interface, tandis que l'augmentation plus rapide à $t > 2$ s est due à la formation du jet s'échappant de la poche de gaz et à l'augmentation du nombre de Mach dans cette région.

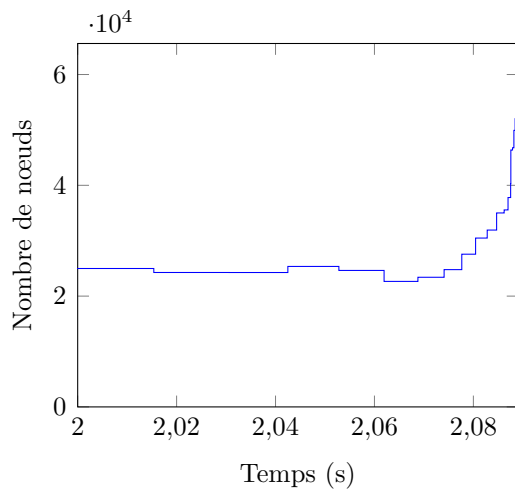
La taille du pas de temps semble suivre une tendance de décroissance linéaire au cours du temps et prend des valeurs très faibles vers la fin de la simulation. On observe que le pas de temps est beaucoup plus réduit par l'algorithme adaptatif au moment où l'on effectue une reprise du calcul que pour les simulations réalisées auparavant. L'erreur commise lors du transfert des solutions est vraisemblablement plus importante pour ce problème puisqu'il faut non seulement transférer un champ supplémentaire (la température) mais également assurer la conservation de la masse localement, ce que ne permet pas de faire la méthode de transfert par interpolation quadratique utilisée lorsque les fluides sont compressibles. La Figure 6.30 illustre d'ailleurs que l'erreur relative sur la conservation de la masse des deux fluides est principalement causée ici par le processus de remaillage et de transfert de la solution, notamment à la fin de la simulation. Cette erreur reste néanmoins assez faible tout au long de l'intervalle de temps simulé et atteint des valeurs maximales de $1 \cdot 10^{-2} \%$ et $4 \cdot 10^{-3} \%$ pour le domaine contenant le liquide et le domaine contenant le gaz respectivement.



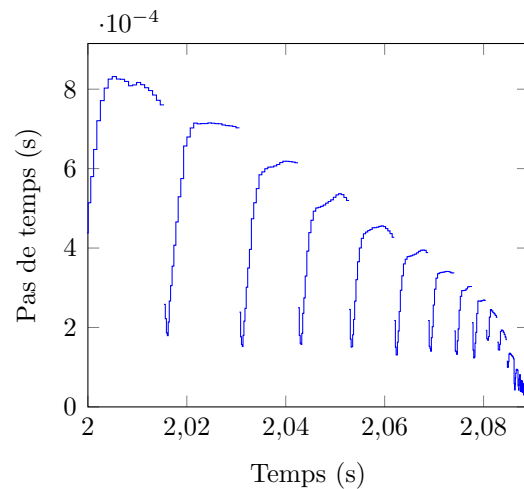
(a) Nombre de nœuds



(b) Taille du pas de temps



(c) Nombre de nœuds (zoom)



(d) Taille du pas de temps (zoom)

Figure 6.29 Évolution du nombre de nœuds dans le maillage et de la taille du pas de temps au cours du temps pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie. Les discontinuités sur les graphes de la taille du pas de temps et les sauts dans la valeur du nombre de nœuds indiquent les instants où le domaine est remaillé.

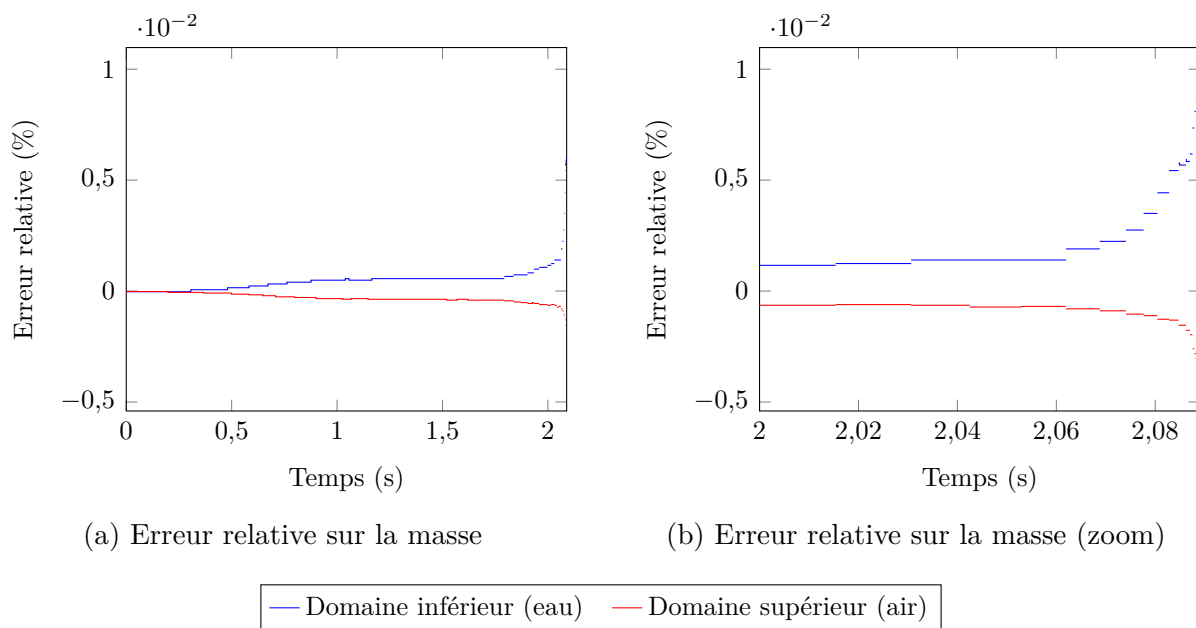


Figure 6.30 Évolution de l'erreur relative commise sur la masse des deux domaines au cours du temps pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie. Les discontinuités sur les graphes indiquent les instants où le domaine est remaillé.

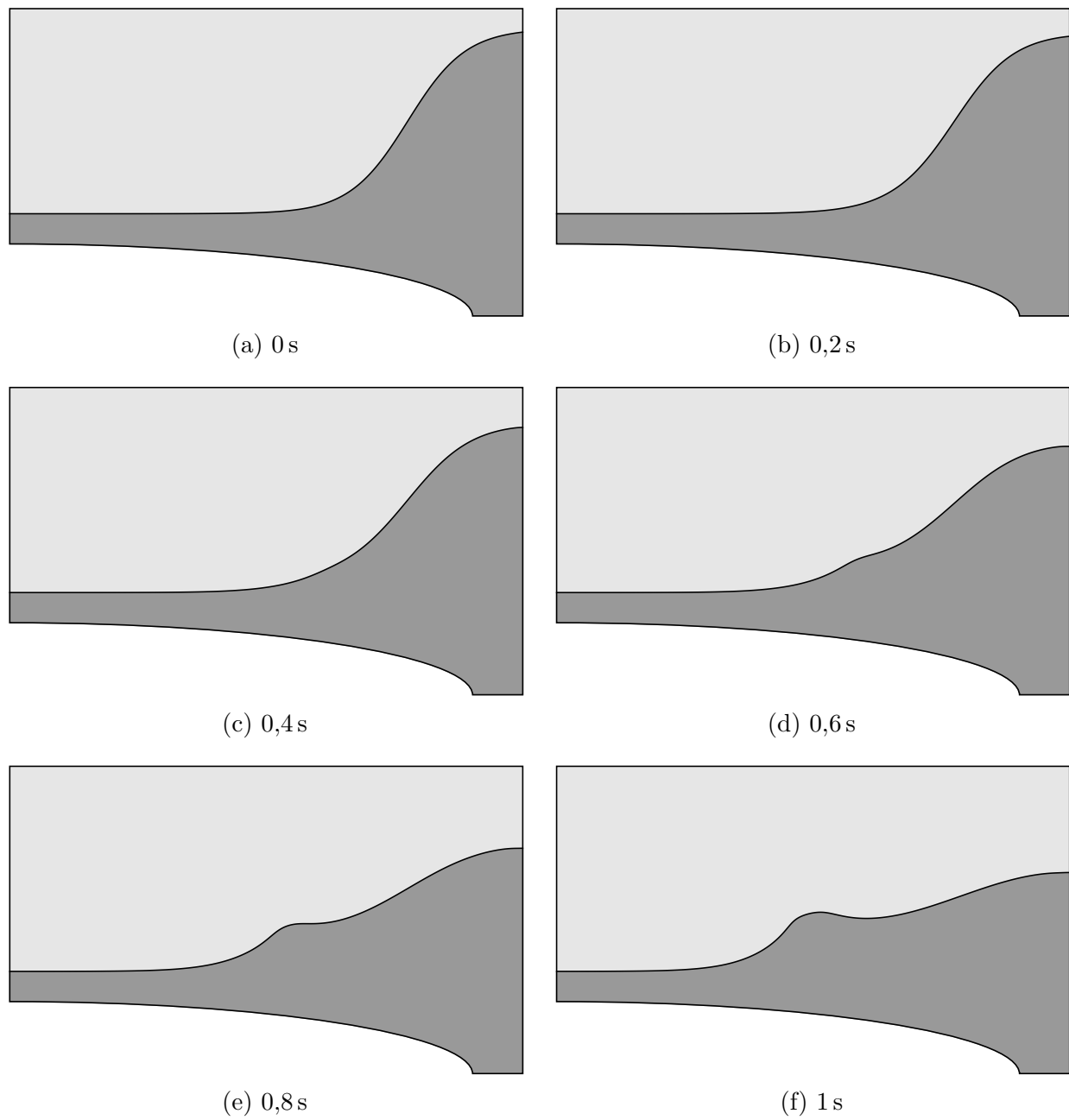


Figure 6.31 Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie (domaine de calcul complet). La zone identifiée par les tirets sur la Figure 6.31k est celle qui est représentée sur les Figures 6.32a à 6.32j.

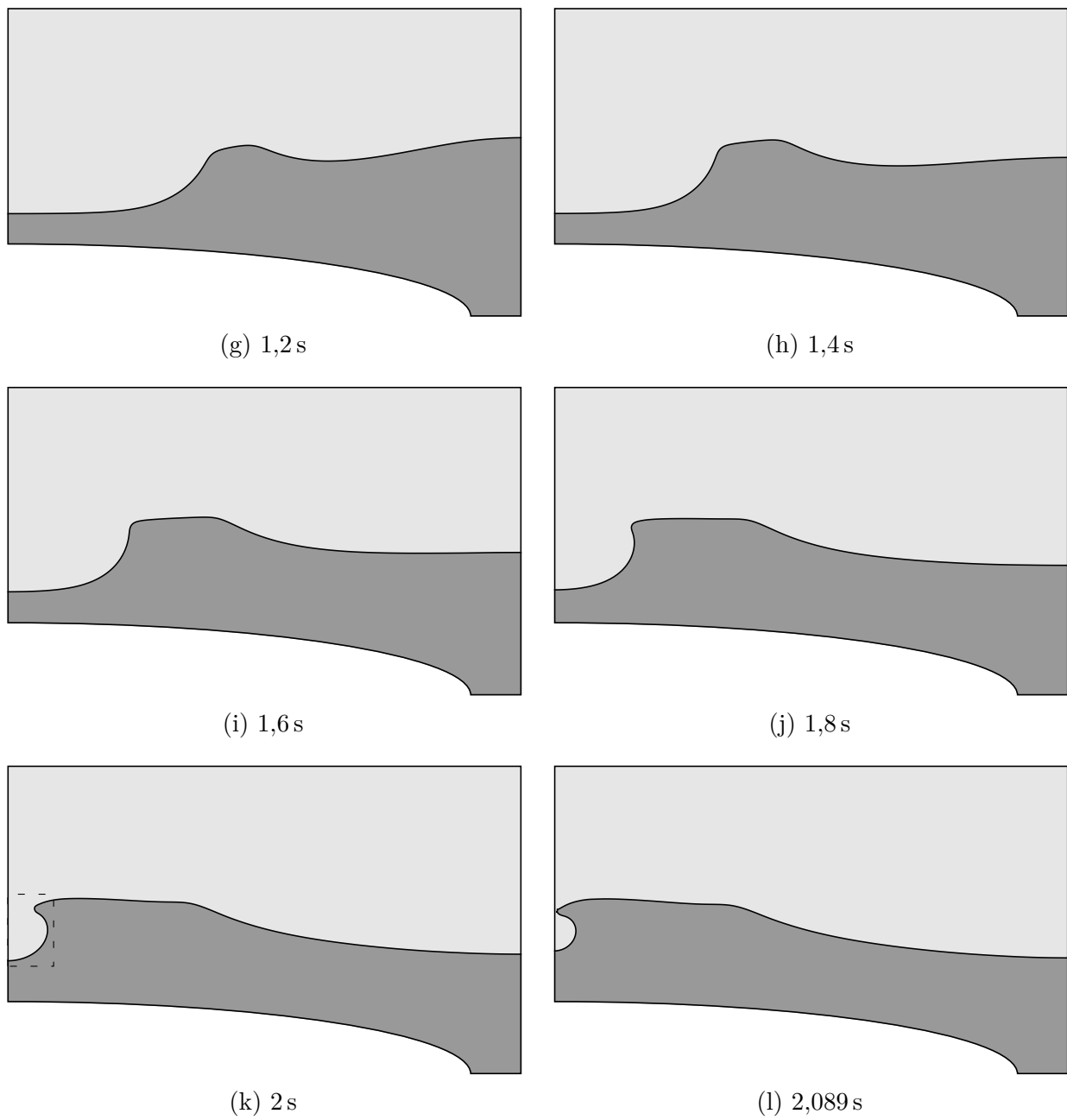


Figure 6.31 (suite) Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie (domaine de calcul complet). La zone identifiée par les tirets sur la Figure 6.31k est celle qui est représentée sur les Figures 6.32a à 6.32j.

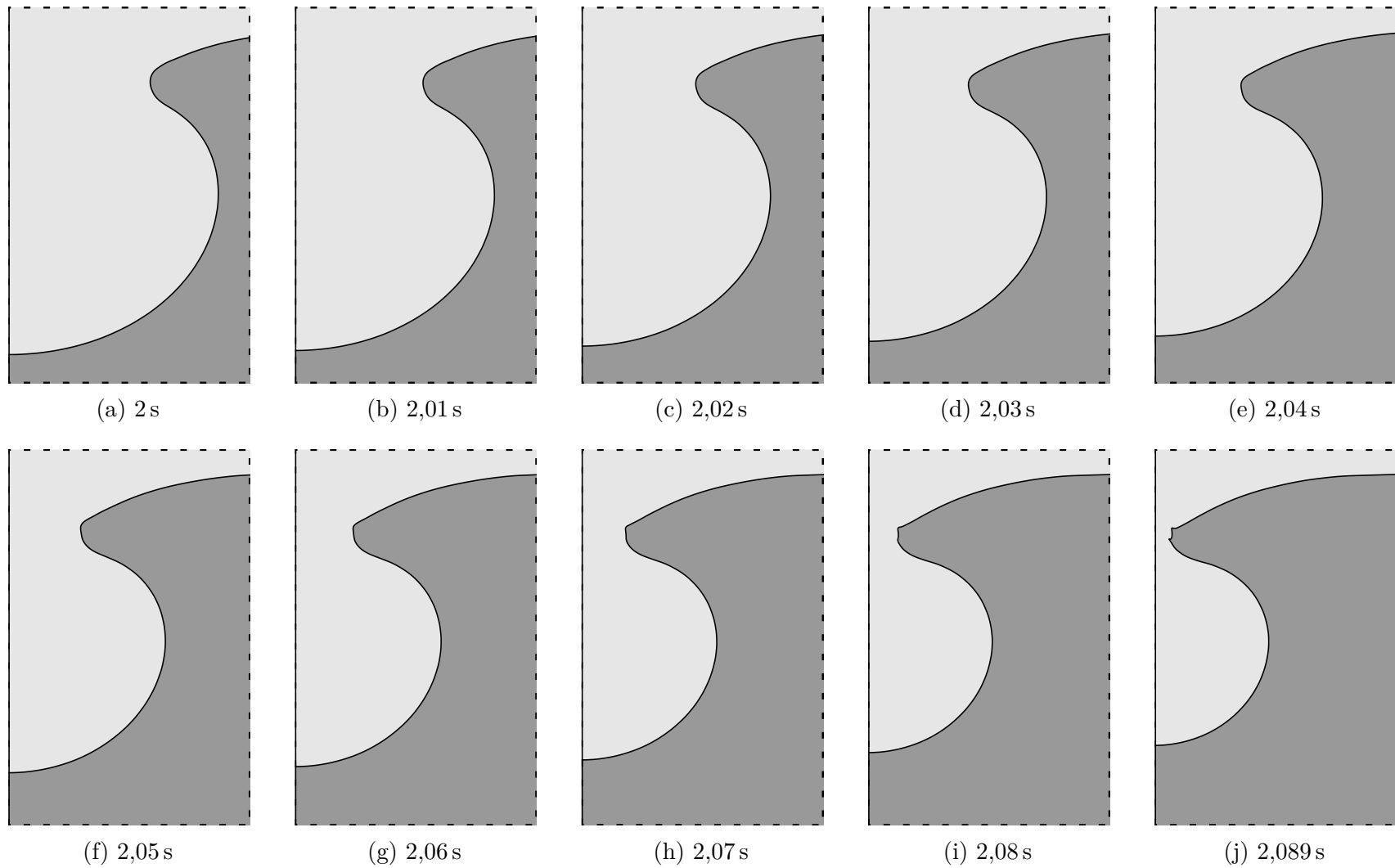


Figure 6.32 Évolution de l'interface au cours du temps pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie (agrandissement de la lèvre de la vague). Le domaine représenté est identifié par les tirets sur la Figure 6.31k.

6.4.4 Analyse des résultats numériques

L'évolution temporelle de la forme prise par l'interface et la formation de la vague déferlante sont illustrées par les Figures 6.31 et 6.32. La crête de la vague apparaît quelques instants avant $t = 0,6$ s, à cause de la bathymétrie variable, puis se propage vers la paroi de gauche de l'enceinte. Un rouleau caractéristique d'une vague déferlante se forme à partir de $t \approx 1,6$ s et la lèvre de la vague devient par la suite clairement visible. Deux structures prenant la forme de pics pointus et de plus en plus étirés, identifiables notamment sur la Figure 6.32j, apparaissent sur l'interface au niveau de la lèvre vers la fin de la simulation. Ces pics sont causés par le jet s'échappant de la poche de gaz et sont vraisemblablement précurseurs de la formation de filaments de liquide qui à terme se fragmenteraient en gouttelettes et formeraient des embruns. Les conditions observées pour cette simulation sont par ailleurs propices au développement d'instabilités de surface libre, notamment d'instabilités de Kelvin-Helmholtz sur la crête de la vague et d'instabilités de Rayleigh-Taylor dans la poche de gaz comprimé. L'introduction d'une perturbation à la forme initiale de l'interface serait néanmoins nécessaire pour que ces instabilités puissent se développer.

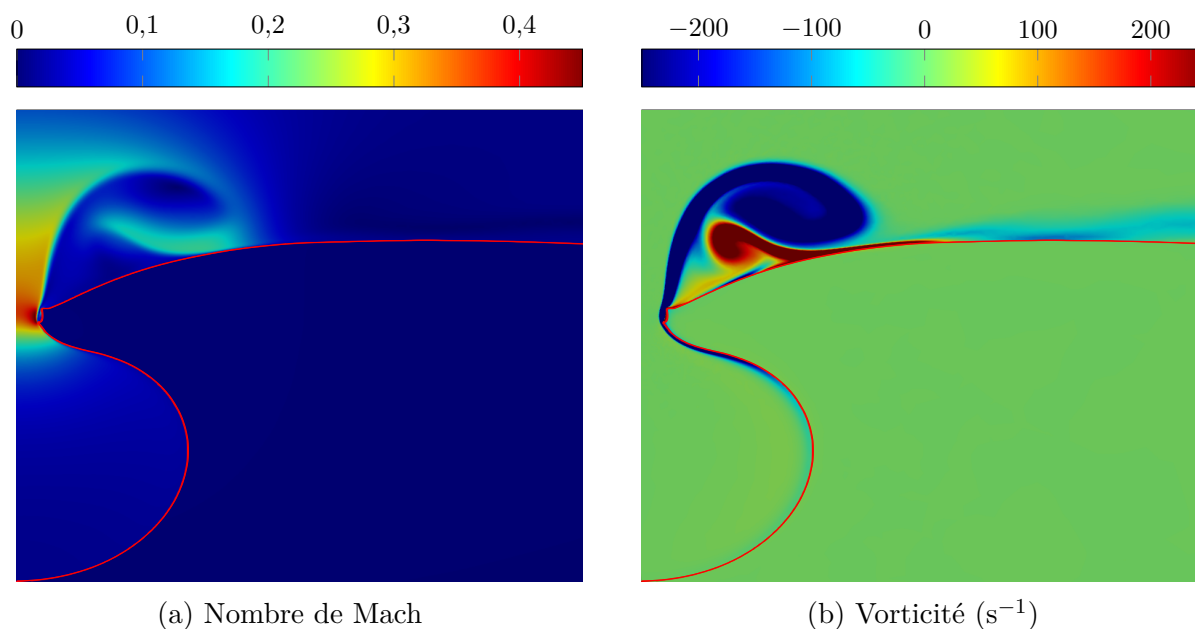


Figure 6.33 Repr sentation du nombre de Mach et de la vorticit  au niveau de la cr te de la vague pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confin e partiellement remplie   $t = 2,089$ s. L'interface est repr sent e en rouge.

La distribution du nombre de Mach et le champ de vorticit    proximit  de la l vre de la vague   $t = 2,089$ s sont pr sent s sur la Figure 6.33. Le nombre de Mach atteint un maximum de 0,45 dans la section la plus  troite (le col du convergent-divergent) comme on s'y attendrait.

Le champ de vorticit  permet quant   lui d'identifier des zones fortement cisill es le long de l'interface et sur la l vre de la vague ainsi que deux tourbillons contrarotatifs g n r s par le jet s' chappant de la poche de gaz.

La Figure 6.34 pr sente l' volution au cours du temps de la pression relative, de la temp rature relative et du nombre de Mach sur la paroi de gauche du r servoir. La Figure 6.34a met en  vidence l'augmentation de pression dans le domaine contenant le liquide (et, dans une moindre mesure, dans la poche de gaz) caus e par l'arriv e de la vague impactante. La pression maximale atteinte   la fin de la simulation sur la paroi vaut approximativement 0,6 bar. Les efforts exerc s par le fluide sur la paroi du r servoir continueraient d'augmenter si la simulation  tait poursuivie et l'impact de la l vre de la vague cr erait par ailleurs une zone o  les contraintes seraient tr s importantes.

La variation de temp rature caus e par la compression du gaz est assez faible, de l'ordre de 5 K, mais celle-ci se produit rapidement et dans une zone tr s r duite limit e   la poche de gaz. La temp rature dans le jet est inf rieure   la temp rature ambiante (  cause de la d tente dans le divergent form  par la l vre et la paroi du r servoir). La temp rature augmenterait vraisemblablement plus si la simulation  tait poursuivie et des ph nom nes tels que les changements d' tat qui ne sont pour le moment pas mod lis s pourraient alors se produire (par exemple si les fluides utilis s mod lisaient du gaz naturel   l' tat gazeux et   l' tat liquide). Le nombre de Mach atteint   la fin de la simulation une valeur de 0,33 au maximum sur la paroi, au col du convergent-divergent. Comme pour la temp rature, l' volution du nombre de Mach est tr s localis e et tr s rapide. Ces r sultats montrent bien que la mod lisation par des fluides compressibles  tait justifi e pour cette  tude.

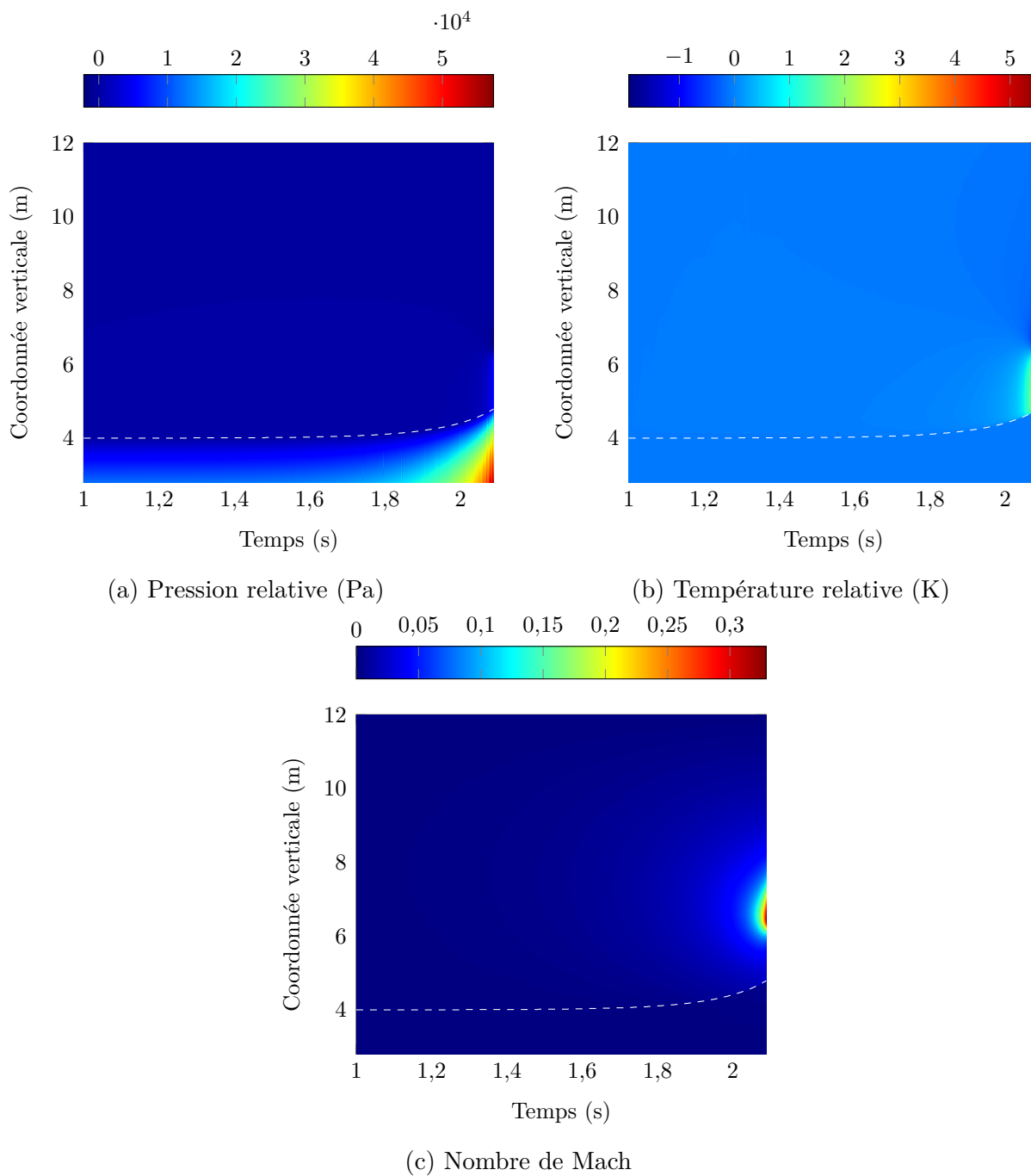


Figure 6.34 Évolution de la pression relative, de la température relative et du nombre de Mach au cours du temps sur la paroi de gauche du réservoir pour la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie. La position de l'interface sur la paroi au cours du temps est représentée par la ligne en pointillés blancs.

CHAPITRE 7 CONCLUSION

Nous avons développé, dans le cadre de cette thèse, une approche adaptative en espace et en temps permettant de réaliser des simulations numériques, par la méthode des éléments finis, d'écoulements instationnaires polyphasiques à phases séparées avec prise en compte de la tension superficielle et de la compressibilité des fluides.

Les méthodes adaptatives mises en œuvre nous ont permis de réaliser des simulations pour lesquelles les erreurs de discrétisation spatiale et temporelle sont connues et contrôlées en tout temps, tout en faisant en sorte que le coût de calcul soit le plus faible possible. La méthode de suivi d'interface employée, l'implémentation de la force de tension superficielle *via* l'opérateur de Laplace-Beltrami et la modélisation de la compressibilité des fluides par différentes équations d'état permettent par ailleurs de représenter fidèlement et avec une grande précision le comportement physique des fluides ainsi que les phénomènes se produisant à proximité des interfaces. Enfin, l'algorithme d'adaptation de maillage pour les simulations instationnaires et la méthode de remaillage que nous avons développée contribuent à minimiser la charge de travail de l'utilisateur et permettent d'automatiser et de rendre autonome l'ensemble de la chaîne de calcul.

À ce jour et à notre connaissance, aucune approche similaire à la nôtre n'a été développée et présentée dans la littérature.

7.1 Synthèse des travaux réalisés

Ces travaux emploient une méthode de représentation explicite des interfaces séparant deux fluides non miscibles. Les interfaces discrètes sont une collection de segments appartenant aux éléments triangulaires qui constituent le maillage du domaine de calcul. Cette formulation permet de modéliser simplement et de façon précise les phénomènes physiques se produisant à l'interface tels que la force de tension superficielle. Elle permet par ailleurs de représenter fidèlement les petites structures interfaciales telles que les instabilités de surface libre, notamment lorsque les éléments du maillage ont une géométrie courbe (comme par exemple les éléments de Taylor-Hood isoparamétriques P_2 - P_1).

La méthode de suivi d'interface nécessite que les méthodes numériques employées permettent de déformer le maillage au cours du calcul afin de suivre les déformations et les déplacements des interfaces. Cette approche requiert par ailleurs de remailler le domaine de calcul lorsque les déformations deviennent trop importantes. La déformation du domaine de calcul au cours

de la simulation est basée sur l'utilisation conjointe d'une formulation ALE des équations qui permet de déplacer de façon arbitraire les nœuds du maillage et de la méthode du pseudo-solide qui propage les déplacements des interfaces et des frontières dans le domaine de calcul.

L'approche adaptative que nous avons développée est conçue de façon que les décisions prises durant la réalisation d'une simulation ne soient plus laissées à la seule charge de l'utilisateur comme d'ordinaire mais soient effectuées par des algorithmes aux fondations mathématiques solides. On diminue ainsi la charge de travail de l'utilisateur ainsi que le nombre d'interventions qu'il doit effectuer durant la simulation. L'aspect adaptatif en temps et en espace des méthodes numériques mises en œuvre permet de quantifier et contrôler l'erreur commise lors de la discrétisation et la résolution du problème tout en maîtrisant le coût de calcul pour atteindre l'objectif de simultanément « calculer juste et au juste coût ».

La procédure *hp*-adaptative d'intégration en temps basée sur la méthode BDF permet de sélectionner de façon automatique et dynamique les caractéristiques de l'intégrateur utilisé (taille du pas de temps et ordre de la méthode) au cours de la simulation. Cet algorithme a trois objectifs distincts : (1) contrôler l'erreur de discrétisation temporelle, (2) assurer la stabilité numérique de la méthode de résolution, et (3) faire en sorte que la méthode la plus efficace numériquement pour atteindre la précision souhaitée soit employée.

L'algorithme d'adaptation de maillage pour les simulations instationnaires permet de faire en sorte que la discrétisation spatiale utilisée reste adaptée au problème et à sa solution tout au long de la simulation. L'objectif ici est de diminuer le niveau global d'erreur spatiale tout en faisant en sorte que celle-ci soit équidistribuée sur l'ensemble des éléments du maillage. Notre implémentation est basée sur la méthode d'estimation d'erreur par reconstruction des gradients de Zienkiewicz et Zhu qui possède les avantages d'être peu coûteuse et simple à mettre en place. On utilise différents estimateurs d'erreur afin de (1) déclencher automatiquement le processus de remaillage lorsque l'erreur spatiale devient trop importante, et (2) déterminer la taille optimale des éléments dans le domaine de calcul. La procédure de remaillage pour les problèmes instationnaires avec frontières déformables que nous avons développée permet d'automatiser l'algorithme de maillage par front mobile pour permettre de générer des nouveaux maillages au cours de la simulation.

L'intérêt que l'on a porté à la modélisation des processus physiques intervenant dans les écoulements polyphasiques à phases séparées fait en sorte que les résultats obtenus par la simulation numérique soient aussi représentatifs que possible de la réalité. Les travaux effectués sur la modélisation des fluides compressibles et faiblement compressibles à l'aide de l'équation d'état des gaz parfaits et de l'équation d'état des gaz raidis nous permettent de mieux modéliser

les écoulements à nombre de Mach élevé ainsi que la propagation d'ondes acoustiques et de discontinuités (ondes de choc) au sein des fluides lors, par exemple, d'impacts.

L'influence des forces interfaciales sur la forme prise par l'interface au cours du temps et le comportement de la ligne de contact sont par ailleurs pris en compte grâce à une implémentation de la force de tension superficielle sous forme variationnelle *via* l'opérateur de Laplace-Beltrami et d'une condition aux limites permettant de fixer l'angle de contact.

Les simulations numériques réalisées ont permis de vérifier et valider l'implémentation des méthodes numériques et des modèles physiques utilisés dans ces travaux. La procédure complète de vérification et de validation a été conduite en trois étapes. Nous avons tout d'abord vérifié que les implémentations des équations et de la procédure d'intégration en temps avaient été réalisées correctement à l'aide de la méthode des solutions manufacturées (MMS). Les modèles employés pour les écoulements compressibles et pour la force de tension superficielle ont ensuite été validés séparément afin de confirmer qu'ils étaient capables de représenter la réalité physique sur des problèmes analytiques simples : propagation d'une onde de choc, modélisation d'un processus d'impact et équation de Young-Laplace.

La troisième et dernière étape a consisté à poursuivre la validation sur des cas plus complexes mettant en œuvre l'ensemble des méthodes numériques et des modèles implémentés dans le cadre de ces travaux. Les capacités et les limitations de notre approche ont par ailleurs été illustrées grâce à ces simulations. Les quatre cas de démonstration considérés couvrent un grand nombre d'applications, ayant soit un intérêt industriel soit un intérêt scientifique plus fondamental, allant de la simulation d'instabilités caractéristiques de nombreux écoulements polyphasiques à phases séparées (instabilités de Rayleigh-Taylor et de Kelvin-Helmholtz) à la simulation d'une vague impactante dans une enceinte confinée partiellement remplie par un liquide en passant par la simulation d'ascension de bulles sous l'effet de la poussée d'Archimède. Ces simulations ont mis en évidence que notre approche était capable de capturer précisément des phénomènes physiques se produisant aux petites et aux grandes échelles spatiales et ayant une évolution rapide ou lente au cours du temps. La comparaison quantitative et qualitative des résultats obtenus avec d'autres études numériques et/ou avec des données expérimentales permet de valider l'ensemble de la chaîne de calcul mise en place dans ces travaux dans le cadre de la simulation d'écoulements instationnaires polyphasiques à phases séparées.

7.2 Limitations de l'approche développée et propositions d'améliorations

La formulation issue de ces travaux souffre de quatre limitations principales qui limitent son champ d'application. De nombreuses pistes d'améliorations permettraient par ailleurs de

rendre la représentation physique des écoulements polyphasiques à phases séparées encore plus fidèle à la réalité et l'ensemble logiciel plus robuste et plus performant.

Les deux premières limitations sont des conséquences directes du choix d'utiliser une méthode de suivi d'interface. Il est en effet difficile de prendre en compte les changements de topologie des interfaces (*e.g.* : coalescence de gouttes, atomisation d'une nappe de fluide et formation de gouttelettes, déferlement d'une vague sur elle-même ou impact avec une paroi, ...) avec une telle formulation. De même, la modélisation correcte du comportement de la ligne de contact dans les coins de la géométrie du domaine de calcul où les vecteurs tangents et normaux ne sont pas définis de façon unique n'est pas triviale. Les travaux réalisés par Quan et Schmidt [75] et Quan *et al.* [85] peuvent par exemple servir de point de départ au développement d'algorithmes permettant de simuler, avec une méthode de suivi d'interface basée sur une formulation ALE, la division et la coalescence de gouttes, et plus généralement tout changement topologique d'un domaine de calcul. Un important effort de modélisation est probablement nécessaire afin de représenter correctement la physique de ces phénomènes et pour que ces algorithmes vérifient *a minima* les lois de conservation.

La troisième limitation majeure de notre approche concerne la dimension spatiale des problèmes pouvant être résolus. Un effort important serait nécessaire pour implémenter l'ensemble des modèles et des méthodes numériques utilisés dans notre approche pour les simulations tridimensionnelles. Si l'implémentation de certains aspects est assez simple et peut être effectuée rapidement, d'autres demandent beaucoup plus de travail et nécessiteront vraisemblablement de réécrire partiellement ou entièrement certains algorithmes. La génération de maillage est actuellement le principal problème puisqu'aucune méthode permettant de générer des maillages volumiques n'est implémentée dans notre ensemble logiciel. L'utilisation de logiciels externes spécialisés dans la génération de maillage est envisageable mais demanderait d'adapter la chaîne de calcul pour que ceux-ci puissent utiliser l'information provenant de l'estimation d'erreur *a posteriori*.

La simulation de problèmes tridimensionnels ferait apparaître de façon encore plus évidente la quatrième et dernière limitation principale de notre approche. L'implémentation partielle de la parallélisation en mémoire partagée (standard OpenMP) et l'absence totale de parallélisation en mémoire distribuée (standard MPI) limitent à l'heure actuelle la taille des problèmes pouvant être résolus. Un des avantages de la méthode des éléments finis est que le support de calcul est minimal, ce qui limite les échanges de données à réaliser entre les différentes instances du logiciel mais le travail à accomplir est malgré tout assez important et demandera probablement lui aussi de réécrire une partie des algorithmes. Un point potentiellement limitant est l'utilisation d'un solveur direct pour la résolution du problème monolithique

entièrement couplé par la méthode de Newton-Raphson. Bien qu'une version parallèle en mémoire distribuée du solveur PARDISO existe et que d'autres solveurs directs tels que MUMPS soient disponibles, la question de l'efficacité du parallélisme de ces méthodes reste en suspens et il sera peut-être nécessaire de s'orienter vers des solveurs itératifs (*e.g.* : méthode du gradient conjugué avec préconditionnement, méthode GMRES) pour obtenir de bonnes performances.

Les cas de validation ont permis de mettre en évidence que l'implémentation possédait des problèmes de robustesse qui généraient des oscillations parasites ou rendaient la réalisation de certaines simulations impossible lorsque la forme compressible des équations de Navier-Stokes est utilisée. Des travaux portant les méthodes numériques pour les écoulements compressibles permettraient de rendre le solveur plus stable lorsque le nombre de Mach est élevé. L'implémentation d'une méthode de capture de discontinuité telle que celle proposée par Codina [44] résoudrait par ailleurs le problème des oscillations parasites rencontrées lors de l'étude de la propagation d'une onde de choc. Les cas de démonstration ont quant à eux permis d'identifier que le maillage pouvait parfois générer des maillages non valides, notamment lorsque la taille des éléments varie très rapidement à proximité des frontières du domaine et que des éléments à géométrie courbe sont utilisés. L'utilisateur est dans ces situations forcé à intervenir manuellement sur les paramètres de génération de maillage pour que la simulation puisse être poursuivie. Il est envisageable ici de travailler sur l'algorithme de génération de maillage par front mobile et/ou de traiter les éléments ayant un volume négatif ou nul une fois le maillage généré.

Le remaillage du domaine de calcul, le transfert de la solution sur le nouveau maillage et la reprise du calcul sont pour le moment des étapes qui possèdent un coût assez important et qui introduisent de l'erreur dans la solution. Les travaux réalisés par Muller [122] et Muller *et al.* [123] sont entièrement compatibles avec la méthodologie que nous avons mis en œuvre et pourraient être employés pour ne remailler et lisser le maillage que dans certaines régions au lieu de faire ces opérations globalement. L'utilisation de ces méthodes permettrait de réduire le coût global de la procédure de remaillage et ferait en sorte qu'aucune erreur de transfert ne soit introduite dans les régions du domaine qui ne sont pas remaillées. Les méthodes de transfert par projection de Galerkin qui ont été développées dans ces mêmes travaux fournissent une première piste pour réduire l'erreur de transfert de la solution mais un travail permettant de rendre ces méthodes conservatives pour les écoulements compressibles sera *a priori* nécessaire.

Nous pouvons également identifier plusieurs pistes d'amélioration de la modélisation de la physique des écoulements polyphasiques à phases séparées. La simulation de la vague

impactante dans une enceinte confinée a montré que la réalisation de simulations à grand nombre de Reynolds nécessitait d'énormes ressources de calcul pour pouvoir représenter précisément les structures tourbillonnaires de l'écoulement ainsi que les couches cisillées. Les méthodes adaptatives mises en œuvre cherchent pour ces problèmes à résoudre toutes les échelles spatiales et temporelles de l'écoulement et les simulations que l'on réalise s'apparentent à des simulations numériques directes (DNS). On pourrait ainsi envisager d'utiliser un modèle de turbulence et une approche URANS pour ces écoulements afin de modéliser la majeure partie des structures turbulentes ayant une petite échelle au lieu de tenter de les résoudre exactement. Enfin, nous avons généralement imposé des conditions de glissement sur les parois solides des domaines de calcul là où des conditions d'adhérence auraient dû être utilisées afin de représenter plus fidèlement la réalité. L'utilisation de conditions d'adhérence à la paroi empêcherait cependant le déplacement de la ligne de contact. Cette incompatibilité pourrait être levée en implémentant un modèle représentant de façon macroscopique le comportement de la ligne de contact dans ces conditions.

RÉFÉRENCES

- [1] T. Young, « An essay on the cohesion of fluids », *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, t. 95, p. 65-87, 1805. DOI : 10.1098/rstl.1805.0005.
- [2] C.-L. M. H. Navier, « Mémoire sur les lois du mouvement des fluides », *Mémoires de l'Académie Royale des Sciences de l'Institut de France*, t. 6, p. 389-440, 1823.
- [3] W. J. M. Rankine, « On the thermodynamic theory of waves of finite longitudinal disturbance », *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, t. 160, p. 277-288, 1870. DOI : 10.1098/rstl.1870.0015.
- [4] J. W. Strutt (3rd Baron Rayleigh), « On the Capillary Phenomena of Jets », *Proceedings of the Royal Society of London*, t. 29, n° 196-199, p. 71-97, 1879. DOI : 10.1098/rsp1.1879.0015.
- [5] P. H. Hugoniot, « Sur la propagation du mouvement dans les corps et spécialement dans les gaz parfaits (première partie) », *Journal de l'École Polytechnique*, t. 57, p. 3-97, 1887.
- [6] P. H. Hugoniot, « Sur la propagation du mouvement dans les corps et spécialement dans les gaz parfaits (deuxième partie) », *Journal de l'École Polytechnique*, t. 58, p. 1-125, 1889.
- [7] W. Sutherland, « The viscosity of gases and molecular force », *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, t. 36, n° 223, p. 507-531, 1893. DOI : 10.1080/14786449308620508.
- [8] H. Wadell, « Sphericity and Roundness of Rock Particles », *The Journal of Geology*, t. 41, n° 3, p. 310-331, 1933. DOI : 10.1086/624040.
- [9] R. A. Bagnold, « Interim Report on Wave-Pressure Research », *Journal of the Institution of Civil Engineers*, t. 12, n° 7, p. 202-226, 1939. DOI : 10.1680/ijoti.1939.14539.
- [10] C. F. Curtiss et J. O. Hirschfelder, « Integration of Stiff Equations », *Proceedings of the National Academy of Sciences*, t. 38, n° 3, p. 235-243, 1952. DOI : 10.1073/pnas.38.3.235.
- [11] G. Dahlquist, « Convergence and stability in the numerical integration of ordinary differential equations », *Mathematica Scandinavica*, t. 4, p. 33-53, 1956. DOI : 10.7146/math.scand.a-10454.

- [12] P. D. Lax et R. D. Richtmyer, « Survey of the stability of linear finite difference equations », *Communications on Pure and Applied Mathematics*, t. 9, n° 2, p. 267-293, 1956. DOI : 10.1002/cpa.3160090206.
- [13] S. Chandrasekhar, *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. 1961, ISBN : 978-0-48664-071-6.
- [14] G. Dahlquist, « A special stability problem for linear multistep methods », *BIT*, t. 3, n° 1, p. 27-43, 1963. DOI : 10.1007/bf01963532.
- [15] S. A. Thorpe, « Experiments on the instability of stratified shear flows: Immiscible fluids », *Journal of Fluid Mechanics*, t. 39, n° 1, p. 25-48, 1969. DOI : 10.1017/s0022112069002023.
- [16] C. Huh et L. E. Scriven, « Hydrodynamic model of steady movement of a solid/liquid/fluid contact line », *Journal of Colloid and Interface Science*, t. 35, n° 1, p. 85-101, 1971. DOI : 10.1016/0021-9797(71)90188-3.
- [17] C. S. Peskin, « Flow patterns around heart valves: A numerical method », *Journal of Computational Physics*, t. 10, n° 2, p. 252-271, 1972. DOI : 10.1016/0021-9991(72)90065-4.
- [18] J.-M. Delhaye, « Conditions d'interface et sources d'entropie dans les systèmes diphasiques », Commissariat à l'Énergie Atomique, rapport technique CEA-R-4562, 1974. adresse : https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:6168972.
- [19] J.-M. Delhaye, « Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. Local instant formulation », *International Journal of Multiphase Flow*, t. 1, n° 3, p. 395-409, 1974. DOI : 10.1016/0301-9322(74)90012-3.
- [20] E. B. Dussan V. et S. H. Davis, « On the motion of a fluid-fluid interface along a solid surface », *Journal of Fluid Mechanics*, t. 65, n° 1, p. 71-95, 1974. DOI : 10.1017/s0022112074001261.
- [21] L. F. Shampine et M. K. Gordon, *Computer Solution of Ordinary Differential Equations, The Initial Value Problem*. 1975, ISBN : 978-0-7167-0461-4.
- [22] W. F. Noh et P. Woodward, « SLIC (Simple Line Interface Calculation) », in *5th International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, 1976, p. 330-340. DOI : 10.1007/3-540-08004-X_336.
- [23] S. Skelboe, « The control of order and steplength for backward differentiation methods », *BIT*, t. 17, n° 1, p. 91-107, 1977. DOI : 10.1007/bf01932401.

- [24] R. Clift, J. R. Grace et M. E. Weber, *Bubbles, Drops, and Particles*. 1978, ISBN : 978-0-12-176950-5.
- [25] C. W. Hirt et B. D. Nichols, « Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries », *Journal of Computational Physics*, t. 39, n° 1, p. 201-225, 1981. DOI : 10.1016/0021-9991(81)90145-5.
- [26] A. N. Brooks et T. J. R. Hughes, « Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, t. 32, n° 1-3, p. 199-259, 1982. DOI : 10.1016/0045-7825(82)90071-8.
- [27] D. L. Youngs, « Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion », in *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, 1982, p. 273-285.
- [28] R. D. Grigorieff, « Stability of multistep-methods on variable grids », *Numerische Mathematik*, t. 42, n° 3, p. 359-377, 1983. DOI : 10.1007/BF01389580.
- [29] D. H. Sharp, « An overview of Rayleigh-Taylor instability », *Physica D: Nonlinear Phenomena*, t. 12, n° 1-3, p. 3-18, 1984. DOI : 10.1016/0167-2789(84)90510-4.
- [30] S. H. Lo, « A new mesh generation scheme for arbitrary planar domains », *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, t. 21, n° 8, p. 1403-1426, 1985. DOI : 10.1002/nme.1620210805.
- [31] J. Glimm, O. McBryan, R. Menikoff et D. H. Sharp, « Front Tracking Applied to Rayleigh-Taylor Instability », *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, t. 7, n° 1, p. 230-251, 1986. DOI : 10.1137/0907016.
- [32] J. Peraire, M. Vahdati, K. Morgan et O. C. Zienkiewicz, « Adaptive remeshing for compressible flow computations », *Journal of Computational Physics*, t. 72, n° 2, p. 449-466, 1987. DOI : 10.1016/0021-9991(87)90093-3.
- [33] O. C. Zienkiewicz et J. Z. Zhu, « A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis », *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, t. 24, n° 2, p. 337-357, 1987. DOI : 10.1002/nme.1620240206.
- [34] D. E. Fyfe, E. S. Oran et M. J. Fritts, « Surface tension and viscosity with lagrangian hydrodynamics on a triangular mesh », *Journal of Computational Physics*, t. 76, n° 2, p. 349-384, 1988. DOI : 10.1016/0021-9991(88)90147-7.
- [35] S. Osher et J. A. Sethian, « Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations », *Journal of Computational Physics*, t. 79, n° 1, p. 12-49, 1988. DOI : 10.1016/0021-9991(88)90002-2.

- [36] M. Ainsworth, J. Z. Zhu, A. W. Craig et O. C. Zienkiewicz, « Analysis of the Zienkiewicz-Zhu *a-posteriori* error estimator in the finite element method », *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, t. 28, n° 9, p. 2161-2174, 1989. DOI : 10.1002/nme.1620280912.
- [37] G. Dziuk, « An algorithm for evolutionary surfaces », *Numerische Mathematik*, t. 58, n° 1, p. 603-611, 1991. DOI : 10.1007/bf01385643.
- [38] J.-F. Héту, « Méthodes d'éléments finis adaptatives pour les écoulements visqueux incompressibles », thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, 1991. adresse : <https://search.proquest.com/docview/303984490>.
- [39] J. U. Brackbill, D. B. Kothe et C. Zemach, « A continuum method for modeling surface tension », *Journal of Computational Physics*, t. 100, n° 2, p. 335-354, 1992. DOI : 10.1016/0021-9991(92)90240-y.
- [40] J. Peraire, J. Peiró et K. Morgan, « Adaptive remeshing for three-dimensional compressible flow computations », *Journal of Computational Physics*, t. 103, n° 2, p. 269-285, 1992. DOI : 10.1016/0021-9991(92)90401-J.
- [41] S. O. Unverdi et G. Tryggvason, « A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows », *Journal of Computational Physics*, t. 100, n° 1, p. 25-37, 1992. DOI : 10.1016/0021-9991(92)90307-K.
- [42] O. C. Zienkiewicz et J. Z. Zhu, « The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part 1: The recovery technique », *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, t. 33, n° 7, p. 1331-1364, 1992. DOI : 10.1002/nme.1620330702.
- [43] O. C. Zienkiewicz et J. Z. Zhu, « The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part 2: Error estimates and adaptivity », *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, t. 33, n° 7, p. 1365-1382, 1992. DOI : 10.1002/nme.1620330703.
- [44] R. Codina, « A discontinuity-capturing crosswind-dissipation for the finite element solution of the convection-diffusion equation », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, t. 110, n° 3-4, p. 325-342, 1993. DOI : 10.1016/0045-7825(93)90213-h.
- [45] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski et G. Zanetti, « Modelling Merging and Fragmentation in Multiphase Flows with SURFER », *Journal of Computational Physics*, t. 113, n° 1, p. 134-147, 1994. DOI : 10.1006/jcph.1994.1123.

- [46] M. Sussman, P. Smereka et S. Osher, « A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow », *Journal of Computational Physics*, t. 114, n° 1, p. 146-159, 1994. DOI : 10.1006/jcph.1994.1155.
- [47] N.-E. Wiberg et X. D. Li, « Superconvergent patch recovery of finite-element solution and *a-posteriori* L^2 norm error estimate », *Communications in Numerical Methods in Engineering*, t. 10, n° 4, p. 313-320, 1994. DOI : 10.1002/cnm.1640100406.
- [48] Y. C. Chang, T. Y. Hou, B. Merriman et S. Osher, « A Level Set Formulation of Eulerian Interface Capturing Methods for Incompressible Fluid Flows », *Journal of Computational Physics*, t. 124, n° 2, p. 449-464, 1996. DOI : 10.1006/jcph.1996.0072.
- [49] M. Lesoinne et C. Farhat, « Geometric conservation laws for flow problems with moving boundaries and deformable meshes, and their impact on aeroelastic computations », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, t. 134, n° 1-2, p. 71-90, 1996. DOI : 10.1016/0045-7825(96)01028-6.
- [50] J. A. Sethian, « Theory, algorithms, and applications of level set methods for propagating interfaces », *Acta Numerica*, t. 5, p. 309-395, 1996. DOI : 10.1017/s0962492900002671.
- [51] E. G. Puckett, A. S. Almgren, J. B. Bell, D. L. Marcus et W. J. Rider, « A High-Order Projection Method for Tracking Fluid Interfaces in Variable Density Incompressible Flows », *Journal of Computational Physics*, t. 130, n° 2, p. 269-282, 1997. DOI : 10.1006/jcph.1996.5590.
- [52] Y. D. Shikhmurzaev, « Moving contact lines in liquid/liquid/solid systems », *Journal of Fluid Mechanics*, t. 334, p. 211-249, 1997. DOI : 10.1017/s0022112096004569.
- [53] U. M. Ascher et L. R. Petzold, *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations*, 1^{re} éd. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1998, ISBN : 978-0-89871-412-8.
- [54] R. P. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman et S. Osher, « A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method) », *Journal of Computational Physics*, t. 152, n° 2, p. 457-492, 1999. DOI : 10.1006/jcph.1999.6236.
- [55] D. Gueyffier, J. Li, A. Nadim, R. Scardovelli et S. Zaleski, « Volume-of-Fluid Interface Tracking with Smoothed Surface Stress Methods for Three-Dimensional Flows », *Journal of Computational Physics*, t. 152, n° 2, p. 423-456, 1999. DOI : 10.1006/jcph.1998.6168.

- [56] S. Popinet et S. Zaleski, « A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension », *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, t. 30, n° 6, p. 775-793, 1999. DOI : 10.1002/(sici)1097-0363(19990730)30:6<775::aid-fld864>3.0.co;2-%23.
- [57] R. Scardovelli et S. Zaleski, « Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow », *Annual Review of Fluid Mechanics*, t. 31, n° 1, p. 567-603, 1999. DOI : 10.1146/annurev.fluid.31.1.567.
- [58] R. A. Cairncross, P. R. Schunk, T. A. Baer, R. R. Rao et P. A. Sackinger, « A finite element method for free surface flows of incompressible fluids in three dimensions. Part I. Boundary fitted mesh motion », *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, t. 33, n° 3, p. 375-403, 2000. DOI : 10.1002/1097-0363(20000615)33:3<375::aid-fld13>3.0.co;2-o.
- [59] N. Couty et L. Brosset, « 3D numerical simulation of sloshing impacts including fluid-structure interaction », in *13th International Conference on Ship and Shipping Research (NAV'2000)*, 2000.
- [60] G. Russo et P. Smereka, « A Remark on Computing Distance Functions », *Journal of Computational Physics*, t. 163, n° 1, p. 51-67, 2000. DOI : 10.1006/jcph.2000.6553.
- [61] E. Bänsch, « Finite element discretization of the Navier-Stokes equations with a free capillary surface », *Numerische Mathematik*, t. 88, n° 2, p. 203-235, 2001. DOI : 10.1007/PL00005443.
- [62] M. Behr, « Stabilized space-time finite element formulations for free-surface flows », *Communications in Numerical Methods in Engineering*, t. 17, n° 11, p. 813-819, 2001. DOI : 10.1002/cnm.451.
- [63] P. J. Roache, « Code Verification by the Method of Manufactured Solutions », *Journal of Fluids Engineering*, t. 124, n° 1, p. 4-10, 2001. DOI : 10.1115/1.1436090.
- [64] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli *et al.*, « A front-tracking method for the computations of multiphase flow », *Journal of Computational Physics*, t. 169, n° 2, p. 708-759, 2001. DOI : 10.1006/jcph.2001.6726.
- [65] R. Scardovelli et S. Zaleski, « Interface reconstruction with least-square fit and split Eulerian-Lagrangian advection », *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, t. 41, n° 3, p. 251-274, 2003. DOI : 10.1002/flid.431.
- [66] P.-G. de Gennes, F. Brochard-Wyart et D. Quéré, *Capillarity and Wetting Phenomena: Drops, Bubbles, Pearls, Waves*. 2004, ISBN : 978-1-44191-833-8. DOI : 10.1007/978-0-387-21656-0.

- [67] J. E. Pilliod et E. G. Puckett, « Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces », *Journal of Computational Physics*, t. 199, n° 2, p. 465-502, 2004. DOI : 10.1016/j.jcp.2003.12.023.
- [68] S. Étienne, D. Pelletier et A. Garon, « An Updated Lagrangian Monolithic Formulation for Steady-State Fluid-Structure Interaction Problems », in *43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2005. DOI : 10.2514/6.2005-1086.
- [69] P. H. Saksono et D. Perić, « On finite element modelling of surface tension. Variational formulation and applications - Part I: Quasistatic problems », *Computational Mechanics*, t. 38, n° 3, p. 265-281, 2005. DOI : 10.1007/s00466-005-0747-5.
- [70] P. H. Saksono et D. Perić, « On finite element modelling of surface tension. Variational formulation and applications - Part II: Dynamic problems », *Computational Mechanics*, t. 38, n° 3, p. 251-263, 2005. DOI : 10.1007/s00466-005-0745-7.
- [71] W. Dettmer et D. Perić, « A computational framework for free surface fluid flows accounting for surface tension », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, t. 195, n° 23-24, p. 3038-3071, 2006. DOI : 10.1016/j.cma.2004.07.057.
- [72] S. Hysing, « A new implicit surface tension implementation for interfacial flows », *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, t. 51, n° 6, p. 659-672, 2006. DOI : 10.1002/flid.1147.
- [73] S. Groß et A. Reusken, « An extended pressure finite element space for two-phase incompressible flows with surface tension », *Journal of Computational Physics*, t. 224, n° 1, p. 40-58, 2007. DOI : 10.1016/j.jcp.2006.12.021.
- [74] A. Prosperetti et G. Tryggvason, *Computational Methods for Multiphase Flow*. 2007, ISBN : 978-0-52184-764-3.
- [75] S. Quan et D. P. Schmidt, « A moving mesh interface tracking method for 3D incompressible two-phase flows », *Journal of Computational Physics*, t. 221, n° 2, p. 761-780, 2007. DOI : 10.1016/j.jcp.2006.06.044.
- [76] W. Ren et W. E, « Boundary conditions for the moving contact line problem », *Physics of Fluids*, t. 19, n° 2, 2007. DOI : 10.1063/1.2646754.
- [77] Y. Bartosiewicz, J. Laviéville et J.-M. Seynhaeve, « A first assessment of the NEPTUNE_CFD code: Instabilities in a stratified flow comparison between the VOF method and a two-field approach », *International Journal of Heat and Fluid Flow*, t. 29, n° 2, p. 460-478, 2008. DOI : 10.1016/j.ijheatfluidflow.2007.09.005.

- [78] M. Muradoglu et G. Tryggvason, « A front-tracking method for computation of interfacial flows with soluble surfactants », *Journal of Computational Physics*, t. 227, n° 4, p. 2238-2262, 2008. DOI : 10.1016/j.jcp.2007.10.003.
- [79] S. Étienne, A. Garon et D. Pelletier, « Code Verification for Unsteady Flow Simulations with High Order Time-Stepping Schemes », in *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2009. DOI : 10.2514/6.2009-169.
- [80] S. Ganesan et L. Tobiska, « A coupled arbitrary Lagrangian-Eulerian and Lagrangian method for computation of free surface flows with insoluble surfactants », *Journal of Computational Physics*, t. 228, n° 8, p. 2859-2873, 2009. DOI : 10.1016/j.jcp.2008.12.035.
- [81] S. Ganesan et L. Tobiska, « Modelling and simulation of moving contact line problems with wetting effects », *Computing and Visualization in Science*, t. 12, n° 7, p. 329-336, 2009. DOI : 10.1007/s00791-008-0111-3.
- [82] S. Hysing, S. Turek, D. Kuzmin *et al.*, « Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics », *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, t. 60, n° 11, p. 1259-1288, 2009. DOI : 10.1002/flid.1934.
- [83] S. Hysing, S. Turek, D. Kuzmin *et al.*, *Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics*, Benchmark Reference Data, 2009. adresse : <http://www.feautflow.de/en/benchmarks/cfdbenchmarking/bubble.html>.
- [84] P.-O. Persson, J. Bonet et J. Peraire, « Discontinuous Galerkin solution of the Navier-Stokes equations on deformable domains », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, t. 198, n° 17-20, p. 1585-1595, 2009. DOI : 10.1016/j.cma.2009.01.012.
- [85] S. Quan, J. Lou et D. P. Schmidt, « Modeling merging and breakup in the moving mesh interface tracking method for multiphase flow simulations », *Journal of Computational Physics*, t. 228, n° 7, p. 2660-2675, 2009. DOI : 10.1016/j.jcp.2008.12.029.
- [86] M. Muradoglu et S. Tasoglu, « A front-tracking method for computational modeling of impact and spreading of viscous droplets on solid walls », *Computers & Fluids*, t. 39, n° 4, p. 615-625, 2010. DOI : 10.1016/j.compfluid.2009.10.009.
- [87] L. Charlot, « Calcul et analyse de sensibilité des écoulements à surface libre », thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, 2011. adresse : <https://publication.s.polymtl.ca/514/>.

- [88] T. Flåtten, A. Morin et S. T. Munkejord, « On Solutions to Equilibrium Problems for Systems of Stiffened Gases », *SIAM Journal on Applied Mathematics*, t. 71, n° 1, p. 41-67, 2011. DOI : 10.1137/100784321.
- [89] S. Groß et A. Reusken, *Numerical Methods for Two-phase Incompressible Flows*. 2011, ISBN : 978-3-642-19685-0. DOI : 10.1007/978-3-642-19686-7.
- [90] L. Štrubelj et I. Tiselj, « Numerical simulations of basic interfacial instabilities with incompressible two-fluid model », *Nuclear Engineering and Design*, t. 241, n° 4, p. 1018-1023, 2011. DOI : 10.1016/j.nucengdes.2010.03.032.
- [91] G. Tryggvason, R. Scardovelli et S. Zaleski, *Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multiphase Flows*. 2011, ISBN : 978-0-51197-526-4. DOI : 10.1017/CB09780511975264.
- [92] W. Lafeber, L. Brosset et H. Bogaert, « Elementary Loading Processes (ELP) involved in breaking wave impacts: Findings from the Sloskel project », in *22nd International Offshore and Polar Engineering Conference*, International Society of Offshore and Polar Engineers, 2012. adresse : <https://www.onepetro.org/conference-paper/ISOPE-I-12-373>.
- [93] L. Brosset, J.-M. Ghidaglia, P.-M. Guilcher et L. L. Tarnec, « Generalized Bagnold Model », in *23rd International Offshore and Polar Engineering Conference*, International Society of Offshore and Polar Engineers, 2013. adresse : <https://www.onepetro.org/conference-paper/ISOPE-I-13-331>.
- [94] P.-M. Guilcher, N. Couty, L. Brosset et D. Le Touzé, « Simulations of Breaking Wave Impacts on a Rigid Wall at Two Different Scales with a Two-Phase Fluid Compressible SPH Model », *International Journal of Offshore and Polar Engineering*, t. 23, n° 04, p. 241-253, 2013. adresse : <https://www.onepetro.org/journal-paper/ISOPE-13-23-4-241>.
- [95] M. E. Rognes, D. A. Ham, C. J. Cotter et A. T. T. McRae, « Automating the solution of PDEs on the sphere and other manifolds in FEniCS 1.2 », *Geoscientific Model Development Discussions*, t. 6, n° 3, p. 3557-3614, 2013. DOI : 10.5194/gmdd-6-3557-2013.
- [96] J. H. Snoeijer et B. Andreotti, « Moving Contact Lines: Scales, Regimes, and Dynamical Transitions », *Annual Review of Fluid Mechanics*, t. 45, n° 1, p. 269-292, 2013. DOI : 10.1146/annurev-fluid-011212-140734.
- [97] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor et J. Z. Zhu, *The Finite Element Method: its Basis and Fundamentals*, 7^e éd. 2013, ISBN : 978-1-85617-633-0. DOI : 10.1016/c2009-0-24909-9.

- [98] P.-M. Guilcher, Y. Jus, N. Couty, L. Brosset, Y.-M. Scolan et D. Le Touzé, « 2D Simulations of Breaking Wave Impacts on a Flat Rigid Wall - Part 1: Influence of the Wave Shape », in *24th International Offshore and Polar Engineering Conference*, International Society of Offshore and Polar Engineers, 2014. adresse : <https://www.onepetro.org/conference-paper/ISOPE-I-14-321>.
- [99] A. Hay, K. R. Yu, S. Étienne, A. Garon et D. Pelletier, « High-order temporal accuracy for 3D finite-element ALE flow simulations », *Computers & Fluids*, t. 100, p. 204-217, 2014. DOI : 10.1016/j.compfluid.2014.04.036.
- [100] Y. Sui, H. Ding et P. D. M. Spelt, « Numerical Simulations of Flows with Moving Contact Lines », *Annual Review of Fluid Mechanics*, t. 46, n° 1, p. 97-119, 2014. DOI : 10.1146/annurev-fluid-010313-141338.
- [101] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor et P. Nithiarasu, *The Finite Element Method for Fluid Dynamics*, 7^e éd. 2014, ISBN : 978-1-85617-635-4. DOI : 10.1016/c2009-0-26328-8.
- [102] L. Charlot, S. Étienne, A. Hay, D. Pelletier et A. Garon, « High-order time integrators for front-tracking finite-element analysis of viscous free-surface flows », *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, t. 77, n° 11, p. 668-693, 2015. DOI : 10.1002/flid.4001.
- [103] A. Hay, S. Étienne, A. Garon et D. Pelletier, « Time-integration for ALE simulations of Fluid-Structure Interaction problems: Stepsize and order selection based on the BDF », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, t. 295, p. 172-195, 2015. DOI : 10.1016/j.cma.2015.06.006.
- [104] A. Hay, S. Étienne et D. Pelletier, « An ALE/FE formulation for high precision interface tracking in separated multiphase flows », in *22nd AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2015. DOI : 10.2514/6.2015-3421.
- [105] A. Hay, S. Étienne, D. Pelletier et A. Garon, « *hp*-Adaptive time integration based on the BDF for viscous flows », *Journal of Computational Physics*, t. 291, p. 151-176, 2015. DOI : 10.1016/j.jcp.2015.03.022.
- [106] INCOSE, *Systems Engineering Handbook: A Guide for System Life Cycle Processes and Activities*. John Wiley & Sons, 2015, ISBN : 978-1-118-99940-0. adresse : <https://www.incose.org/products-and-publications/se-handbook>.

- [107] ISO/IEC/IEEE, « Systems and software engineering - System life cycle processes », International Organization for Standardization, International Electrotechnical Commission et Institute of Electrical and Electronics Engineers, Norme ISO/IEC/IEEE 15288:2015, 2015. DOI : 10.1109/IEEESTD.2015.7106435.
- [108] A. Hay, S. Étienne et D. Pelletier, « Adaptive simulation of gas-liquid impact waves », in *54th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2016. DOI : 10.2514/6.2016-1594.
- [109] A. Hay et D. Pelletier, « Adaptive time integration for separated two-phase viscous flows », in *54th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2016. DOI : 10.2514/6.2016-1342.
- [110] J. Donea, A. Huerta, J.-P. Ponthot et A. Rodríguez-Ferran, « Arbitrary Lagrangian-Eulerian Methods », in *Encyclopedia of Computational Mechanics*, E. Stein, R. de Borst et T. J. R. Hughes, éd., 2^e éd. John Wiley & Sons, 2017, ISBN : 978-1-119-17681-7. DOI : 10.1002/9781119176817.ecm2009.
- [111] S. Ganesan, A. Hahn, K. Simon et L. Tobiska, « ALE-FEM for Two-Phase and Free Surface Flows with Surfactants », in *Transport Processes at Fluidic Interfaces*, 2017, p. 5-31. DOI : 10.1007/978-3-319-56602-3_1.
- [112] S. Mirjalili, S. Jain et M. Dodd, « Interface-capturing methods for two-phase flows: An overview and recent developments », *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, p. 117-135, 2017.
- [113] É. Muller, « Application de modèles de turbulence à deux équations à la résolution éléments finis d'écoulements instationnaires », mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal, 2017. adresse : <https://publications.polymtl.ca/2574/>.
- [114] M. O. Abu-Al-Saud, S. Popinet et H. A. Tchelepi, « A conservative and well-balanced surface tension model », *Journal of Computational Physics*, t. 371, p. 896-913, 2018. DOI : 10.1016/j.jcp.2018.02.022.
- [115] F. Dias et J.-M. Ghidaglia, « Slamming: Recent Progress in the Evaluation of Impact Pressures », *Annual Review of Fluid Mechanics*, t. 50, n° 1, p. 243-273, 2018. DOI : 10.1146/annurev-fluid-010816-060121.
- [116] S. Étienne, Y.-M. Scolan et L. Brosset, « Numerical Study of Density Ratio Influence on Global Wave Shapes Before Impact », in *37th International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering*, American Society of Mechanical Engineers, 2018. DOI : 10.1115/omae2018-78624.

- [117] S. Fortin, S. Étienne, C. Béguin, D. Pelletier et L. Brosset, « Numerical Study of the Influence of Weber and Reynolds Numbers on the Development of Kelvin-Helmholtz Instability », in *28th International Ocean and Polar Engineering Conference*, International Society of Offshore and Polar Engineers, 2018. adresse : <https://www.onepetro.org/conference-paper/ISOPE-I-18-703>.
- [118] S. Lortie, « Simulation d'écoulements à surface libre entre un liquide et un gaz compressible », mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal, 2018. adresse : <https://publications.polymtl.ca/3272/>.
- [119] É. Muller, D. Pelletier et A. Garon, « Adaptive Meshing and Time-Integrators for Monolithic Finite Element Solution of the URANS Equations », in *2018 AIAA Aerospace Sciences Meeting*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2018. DOI : 10.2514/6.2018-0367.
- [120] S. Popinet, « Numerical Models of Surface Tension », *Annual Review of Fluid Mechanics*, t. 50, n° 1, p. 49-75, 2018. DOI : 10.1146/annurev-fluid-122316-045034.
- [121] S. Fortin, « Étude de bistabilité des bulles ellipsoïdales par une méthode ALE de résolution des écoulements diphasiques », mémoire de maîtrise, Polytechnique Montréal, 2019. adresse : <https://publications.polymtl.ca/4005/>.
- [122] É. Muller, « Méthode d'adaptation de maillage locale et conservative pour la simulation d'écoulements instationnaires par la méthode des éléments finis », thèse de doctorat, Polytechnique Montréal, 2020, à paraître.
- [123] É. Muller, Y. Vautrin, D. Pelletier et A. Garon, « A local adaptive remeshing procedure for unsteady incompressible viscous flows », in *AIAA Scitech 2020 Forum*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2020. DOI : 10.2514/6.2020-0085.
- [124] Y. Vautrin, É. Muller, D. Pelletier, S. Étienne et C. Béguin, « Automatic adaptive remeshing for unsteady interfacial flows with surface tension », in *AIAA Scitech 2020 Forum*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2020. DOI : 10.2514/6.2020-0338.

ANNEXE A TRANSFORMATION ENTRE L'ÉLÉMENT DE RÉFÉRENCE ET L'ÉLÉMENT RÉEL

On présente ici la formulation mathématique des transformations de coordonnées qui sont utilisées pour passer de l'élément de référence aux éléments réels et vice-versa. On considèrera par la suite que l'élément de référence appartient à un espace de référence de dimension m et que l'élément réel appartient à l'espace physique de dimension n (avec $m \leq n$). On notera par la suite $\mathbf{x} = (x, y, z)$ et $\mathbf{r} = (r, s, t)$ les coordonnées d'un point dans l'espace physique et dans l'espace de référence respectivement. Les développements présentés ici sont adaptés de la formulation utilisée par le projet *open source* FEniCS qui est détaillée par Rognes *et al.* [95].

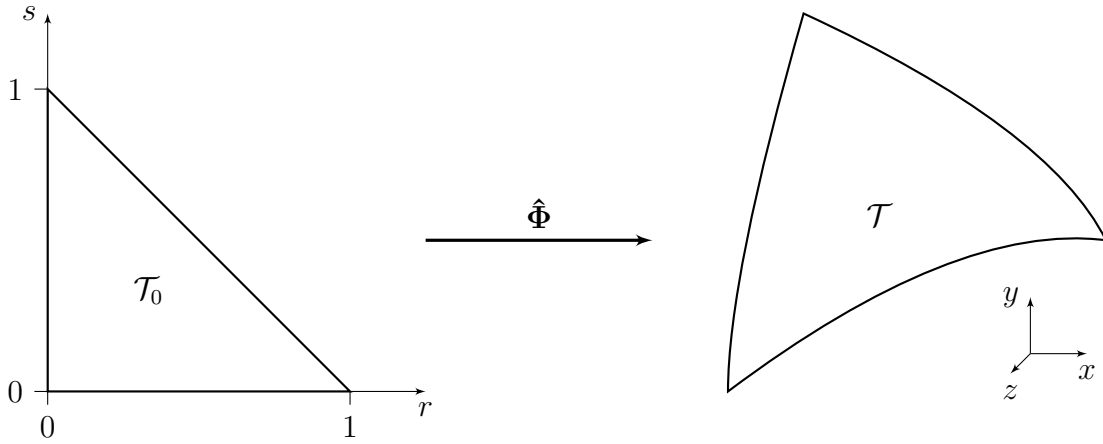


Figure A.1 Illustration de la transformation de coordonnées $\hat{\Phi}$ entre l'élément de référence \mathcal{T}_0 et l'élément réel \mathcal{T} (un triangle contenu dans l'espace cartésien tridimensionnel)

On considère qu'une transformation de coordonnées $\hat{\Phi} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ permettant de passer de l'élément de référence à l'élément réel existe. Cette transformation, illustrée sur la Figure A.1, fournit une relation entre les coordonnées d'un même point dans les deux systèmes de coordonnées :

$$\mathbf{x} = \hat{\Phi}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.1})$$

On détermine à partir de la transformation de coordonnées les expressions de la matrice jacobienne de la transformation $\bar{\bar{\mathbf{J}}}$ ainsi que de son déterminant J . De façon générale, la matrice jacobienne $\bar{\bar{\mathbf{J}}}$ de la transformation est fournie par l'expression suivante :

$$\bar{\bar{\mathbf{J}}} = \frac{\partial(x, y, z)}{\partial(r, s, t)} \quad (\text{A.2})$$

ce qui donne en pratique les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}
\overline{\overline{\mathbf{J}}}_{1\text{D}\rightarrow 1\text{D}} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} \end{pmatrix} & \overline{\overline{\mathbf{J}}}_{1\text{D}\rightarrow 2\text{D}} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} \\ \frac{\partial y}{\partial r} \end{pmatrix} & \overline{\overline{\mathbf{J}}}_{2\text{D}\rightarrow 2\text{D}} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial s} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial s} \end{pmatrix} \\
\overline{\overline{\mathbf{J}}}_{1\text{D}\rightarrow 3\text{D}} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} \\ \frac{\partial y}{\partial r} \\ \frac{\partial z}{\partial r} \end{pmatrix} & \overline{\overline{\mathbf{J}}}_{2\text{D}\rightarrow 3\text{D}} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial s} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial s} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial s} \end{pmatrix} & \overline{\overline{\mathbf{J}}}_{3\text{D}\rightarrow 3\text{D}} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial x}{\partial t} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial t} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial t} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{A.3}$$

Les différents coefficients de ces matrices sont déterminés à partir de la représentation de la géométrie des éléments finis. En général, on utilise pour cela le fait que la géométrie est représentée en utilisant les fonctions de forme géométriques $N_i^{e,g}$ (qui peuvent différer des fonctions de forme utilisées pour représenter la solution du problème) par $\mathbf{x}_h^e(\mathbf{r}) = \sum_i \mathbf{x}_i^e N_i^{e,g}(\mathbf{r})$. On peut alors déterminer les expressions des coefficients de la matrice jacobienne en dérivant simplement cette formule.

Certaines de ces matrices jacobiennes ne sont pas des matrices carrées, ce qui nous incite à définir les notions de pseudo-déterminant et de pseudo-inverse. Le pseudo-déterminant correspond à la racine carrée du déterminant de Gram qui s'exprime ici :

$$J = \det \left(\overline{\overline{\mathbf{J}}}^T \overline{\overline{\mathbf{J}}} \right)^{1/2} \tag{A.4}$$

tandis la matrice pseudo-inverse $\overline{\overline{\mathbf{J}}}^+$ est le pseudo-inverse de Moore-Penrose qui s'écrit dans ce cas :

$$\overline{\overline{\mathbf{J}}}^+ = \left(\overline{\overline{\mathbf{J}}}^T \overline{\overline{\mathbf{J}}} \right)^{-1} \overline{\overline{\mathbf{J}}}^T \tag{A.5}$$

On notera que si la matrice jacobienne est carrée, ces définitions se simplifient sont égales au déterminant et à l'inverse de la matrice respectivement.

On peut enfin utiliser les règles usuelles de changements de coordonnées pour exprimer le gradient d'une fonction scalaire ϕ (*e.g.* : les fonctions de forme des éléments finis ou le coefficient de tension superficielle afin de pouvoir exprimer le terme de Marangoni) sur l'élément réel à partir des gradients de celles-ci sur l'élément de référence :

$$\nabla \phi(\mathbf{x}) = \left(\overline{\overline{\mathbf{J}}}^+ \right)^T \nabla_0 \phi(\mathbf{r}) \tag{A.6}$$

où les opérateurs nabla dans les deux systèmes de coordonnées sont définis par $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$ et $\nabla_0 = \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial s}, \frac{\partial}{\partial t} \right)$.

ANNEXE B DÉRIVATION DES CONDITIONS DE SAUT À L'INTERFACE ENTRE DEUX FLUIDES

Les conditions aux limites à l'interface sont obtenues en effectuant des bilans intégraux sur un volume matériel comprenant les deux fluides et une partie de l'interface (voir par exemple Delhayé [18, 19]). On considère la situation représentée sur la Figure B.1 où le volume matériel $V(t)$ est l'union $V_1(t) \cup V_2(t)$ de deux volumes de fluides différents ayant respectivement pour surfaces extérieures $A_1(t)$ et $A_2(t)$. Ces deux volumes sont séparés par l'interface sur la surface $A_i(t)$. L'intersection de la surface matérielle extérieure $A(t) = A_1(t) \cup A_2(t)$ et de l'interface définit une courbe $C(t)$.

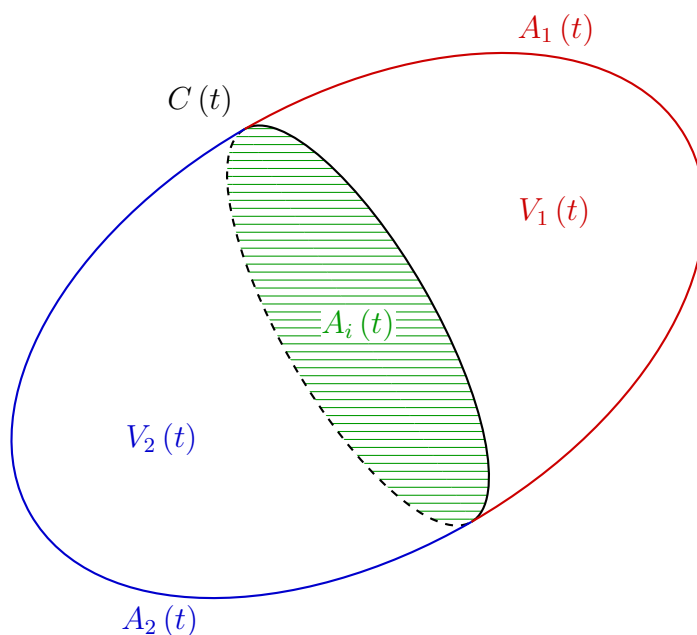


Figure B.1 Représentation du volume matériel utilisé pour la dérivation des conditions d'interface. L'interface $A_i(t)$ sépare deux fluides contenus respectivement dans les volumes $V_1(t)$ et $V_2(t)$ (de surfaces extérieures respectives $A_1(t)$ et $A_2(t)$). L'intersection de l'interface et de la surface extérieure définit une courbe $C(t)$.

L'interface est considérée ici comme une surface infiniment mince et de masse nulle puisque notre étude sera conduite en supposant qu'il n'y a pas de changement d'état à l'interface. Considérer l'interface comme une surface d'épaisseur non nulle permettrait d'étudier le cas plus représentatif de la réalité où le changement d'état se produit de façon continue dans une zone mince en passant par un état intermédiaire où coexistent les deux états, ce qui se

produit notamment pour les mélanges lors de la transition entre les états solide et liquide.

B.1 Conservation de la masse

L'équation intégrale de conservation de la masse s'écrit pour le volume matériel V :

$$\frac{d}{dt}(m_{\text{sys}}) = \frac{d}{dt} \int_{V_1} \rho_1 dV + \frac{d}{dt} \int_{V_2} \rho_2 dV = 0 \quad (\text{B.1})$$

L'utilisation de la règle de Leibniz pour la dérivation sous le signe d'intégration permet ensuite de réécrire chacun de ces deux termes ainsi :

$$\frac{d}{dt} \int_{V_1} \rho_1 dV = \int_{V_1} \frac{\partial \rho_1}{\partial t} dV + \int_{A_1} \rho_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 dS + \int_{A_i} \rho_1 \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_1 dS \quad (\text{B.2})$$

en notant \mathbf{u}_1 la vitesse du fluide (égale à la vitesse de la surface matérielle A_1), \mathbf{u}_i la vitesse de l'interface et \mathbf{n}_1 le vecteur normal unitaire sortant du domaine V_1 .

Le théorème de la divergence (théorème de Gauss ou de Green-Ostrogradski) permet ensuite d'exprimer l'intégrale sur la surface matérielle A_1 ainsi :

$$\int_{A_1} \rho_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 dS = \int_{V_1} \nabla \cdot (\rho_1 \mathbf{u}_1) dV - \int_{A_i} \rho_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 dS \quad (\text{B.3})$$

En combinant ces résultats, on obtient alors :

$$\begin{aligned} \int_{V_1} \left(\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_1 \mathbf{u}_1) \right) dV + \int_{V_2} \left(\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_2 \mathbf{u}_2) \right) dV \\ - \int_{A_i} (\rho_1 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{n}_1 + \rho_2 (\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{n}_2) dS = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Ce résultat devant être valide quels que soient V_1 , V_2 et A_i , les intégrandes des trois intégrales sont nécessairement identiquement nulles. Les deux premières intégrales permettent de retrouver l'équation de continuité des équations de Navier-Stokes (Équation (4.18a)) dans chacune des phases tandis que la dernière donne la condition de conservation de la masse à l'interface :

$$\rho_1 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{n}_1 + \rho_2 (\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{n}_2 = 0 \quad (\text{B.5})$$

Chacun des deux termes $m_k = \rho_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{n}_k$ correspond au flux de masse de chaque fluide à travers l'interface. En l'absence de changement d'état, ces termes sont nuls et la conservation

de la masse s'écrit :

$$(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{n}_1 = 0 \quad (\text{B.6a})$$

$$(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{n}_2 = 0 \quad (\text{B.6b})$$

Ces conditions traduisent le fait que les vecteurs $\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i$ ($k \in 1, 2$) sont dans le plan tangent à l'interface. S'il existait une discontinuité entre ces vecteurs à l'interface, la contrainte tangentielle serait infinie. Par conséquent, on doit avoir égalité entre les vecteurs $\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_i$ et $\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_i$ à l'interface. La condition de conservation de la masse à l'interface devient donc :

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 \quad (\text{B.7a})$$

$$\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n} \quad (\text{B.7b})$$

en notant $\mathbf{n} = \mathbf{n}_1 = -\mathbf{n}_2$.

B.2 Conservation de la quantité de mouvement

Soit V un volume matériel. On considère que sont appliquées des forces volumiques \mathbf{g} sur V , des contraintes $\overline{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}\mathbf{n}$ sur la surface externe A de V et une force de tension superficielle $\gamma\mathbf{N}$ sur l'intersection C de l'interface A_i et de la surface externe A (où \mathbf{N} est le vecteur unitaire normal à C contenu dans le plan tangent à A_i et dirigé vers l'extérieur de cette surface¹). La conservation de la quantité de mouvement s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathbf{p}_{\text{sys}}) &= \frac{d}{dt} \int_{V_1} \rho_1 \mathbf{u}_1 dV + \frac{d}{dt} \int_{V_2} \rho_2 \mathbf{u}_2 dV \\ &= \int_{V_1} \rho_1 \mathbf{g} dV + \int_{V_2} \rho_2 \mathbf{g} dV + \int_{A_1} \overline{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_1 \mathbf{n}_1 dS + \int_{A_2} \overline{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_2 \mathbf{n}_2 dS + \int_C \gamma \mathbf{N} dC \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

ce qui traduit que la variation de la quantité de mouvement totale dans le volume matériel est égale à la somme des forces extérieures qui s'appliquent sur ce volume (seconde loi de Newton). On procède comme dans la partie précédente : la règle de Leibniz et le théorème de la divergence sont appliqués aux dérivées temporelles du membre de gauche tandis que l'on applique le théorème de la divergence aux termes des forces dues aux contraintes.

Le terme de tension superficielle nécessite quant à lui l'utilisation du théorème de Stokes qui

1. Si \mathbf{t} est le vecteur unitaire tangent à C et \mathbf{n} est le vecteur normal à la surface, alors $\mathbf{N} = -\mathbf{n} \times \mathbf{t}$

permet d'obtenir l'identité suivante :

$$\int_C \gamma \mathbf{N} \, dC = \int_{A_i} (-\gamma (\underline{\nabla} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + \underline{\nabla} \gamma) \, dS \quad (\text{B.9})$$

en notant $\underline{\nabla}$ l'opérateur gradient surfacique ($\underline{\nabla} \gamma = (\overline{\mathbf{I}} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \nabla \gamma$). La divergence surfacique (opérateur de Laplace-Beltrami) est obtenue par extension à partir de cette définition.

Le premier terme du membre de droite correspond à l'expression classique de la force de tension superficielle $\gamma \kappa \mathbf{n}$ (κ étant la courbure moyenne de l'interface) et le second terme est nul si le coefficient de tension superficielle γ est constant. Ce second terme est néanmoins non nul en présence d'agents tensioactifs (*surfactants*) et est la source de l'effet Marangoni qui est classiquement illustré par le phénomène des « larmes de vin » où des différences de concentration en éthanol (dus à l'évaporation) créent un gradient de tension superficielle sur la paroi d'un verre de vin.

En regroupant les intégrales et en écrivant la nullité des intégrandes, on obtient l'équation de conservation de la quantité de mouvement des équations de Navier-Stokes (Équation (4.18b)) dans chacune des phases et la condition de conservation de la quantité de mouvement à l'interface :

$$\dot{m}_1 \mathbf{u}_1 + \dot{m}_2 \mathbf{u}_2 - \overline{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_1 \mathbf{n}_1 - \overline{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_2 \mathbf{n}_2 - \gamma (\underline{\nabla} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + \underline{\nabla} \gamma = 0 \quad (\text{B.10})$$

où \mathbf{n} peut être égal à \mathbf{n}_1 ou \mathbf{n}_2 selon le cas afin que le coefficient de tension superficielle soit positif². On se placera dans le premier cas par la suite.

En l'absence de changement d'état, les deux premiers termes sont nuls et la condition de conservation de la quantité de mouvement à l'interface est finalement :

$$\overline{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_1 \mathbf{n} - \overline{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_2 \mathbf{n} = -\gamma (\underline{\nabla} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + \underline{\nabla} \gamma \quad (\text{B.11})$$

où les tenseurs des contraintes s'expriment $\overline{\overline{\boldsymbol{\sigma}}} = -p \overline{\overline{\mathbf{I}}} + \overline{\overline{\boldsymbol{\tau}}}$ avec $\overline{\overline{\boldsymbol{\tau}}}$ le tenseur des contraintes visqueuses pour un fluide newtonien (voir Équations (4.17) et (4.19)).

B.3 Conservation de l'énergie

La conservation de l'énergie totale $E = e + \frac{1}{2} V^2$ (avec e l'énergie interne et V la norme du vecteur vitesse) s'obtient en écrivant que la variation de l'énergie totale contenue dans un volume au cours du temps est égale à la somme du flux de chaleur $\mathbf{q} = -k \nabla T$ (loi de Fourier)

2. Du fluide ayant les forces d'attraction créant la force de tension superficielle les plus importantes vers le second, c'est-à-dire du liquide vers le gaz.

à travers la surface matérielle et du travail des forces volumiques, surfaciques et linéiques s'appliquant sur le volume de contrôle :

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} (\mathbf{E}_{\text{sys}}) &= \frac{d}{dt} \int_{V_1} \rho_1 \left(e_1 + \frac{1}{2} V_1^2 \right) dV + \frac{d}{dt} \int_{V_2} \rho_2 \left(e_2 + \frac{1}{2} V_2^2 \right) dV \\
 &= \int_{V_1} \rho_1 \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_1 dV + \int_{V_2} \rho_2 \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_2 dV \\
 &+ \int_{A_1} (\overline{\boldsymbol{\sigma}}_1 \mathbf{n}_1) \cdot \mathbf{u}_1 dS + \int_{A_2} (\overline{\boldsymbol{\sigma}}_2 \mathbf{n}_2) \cdot \mathbf{u}_2 dS \\
 &- \int_{A_1} \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{n}_1 dS - \int_{A_2} \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{n}_2 dS + \int_C \gamma \mathbf{N} \cdot \mathbf{u}_i dC
 \end{aligned} \tag{B.12}$$

À partir de cette équation, on détermine l'équation de conservation de l'énergie interne en retranchant l'équation de conservation de l'énergie mécanique qui peut être obtenue en calculant le produit scalaire de l'équation de conservation de la quantité de mouvement et du vecteur vitesse. On détermine ensuite une équation traduisant la conservation de l'enthalpie qui permet finalement d'obtenir la condition de saut pour l'équation de conservation de l'énergie.