

Titre: Modélisation numérique d'écoulements de fluide dans des petits entrefers en trois dimensions par éléments finis virtuels
Title: **Title:** Modélisation numérique d'écoulements de fluide dans des petits entrefers en trois dimensions par éléments finis virtuels

Auteur: Robin Giguère
Author:

Date: 2004

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Giguère, R. (2004). Modélisation numérique d'écoulements de fluide dans des petits entrefers en trois dimensions par éléments finis virtuels [Master's thesis, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.
<https://publications.polymtl.ca/7250/>

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

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/7250/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: François Bertrand, & Philippe A. Tanguy
Advisors:

Programme: Unspecified
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENTS DE
FLUIDE DANS DES PETITS ENTREFERS EN TROIS
DIMENSIONS PAR ÉLÉMENTS FINIS VIRTUELS

ROBIN GIGUÈRE

DÉPARTEMENT GÉNIE CHIMIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE CHIMIQUE)

JANVIER 2004



National Library
of Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque nationale
du Canada

Acquisitions et
services bibliographiques

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 0-612-89203-4

Our file Notre référence

ISBN: 0-612-89203-4

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this dissertation.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the dissertation.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de ce manuscrit.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

MODÉLISATION NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENTS DANS
DES PETITS ENTREFERS EN TROIS DIMENSIONS
PAR ÉLÉMÉNTS FINIS VIRTUELS

présenté par : GIGUÈRE Robin

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

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

Mme HEUZEY Marie-Claude, Ph.D., présidente

M. BERTRAND Francois, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. TANGUY Philippe, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. DUFOUR Steven, Ph.D., membre

Remerciements

Avant tout je tiens à remercier ma famille et mes amis pour leur soutien et leurs encouragements tout au long des mes études universitaires.

Je remercie sincèrement les Professeurs François Bertrand et Philippe Tanguy de m'avoir accueilli dans leur équipe et de m'avoir donné l'opportunité de réaliser ce projet de recherche.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance au Professeur Marie-Claude Heuzey d'avoir accepté d'être la présidente du jury. Je désire également remercier le Professeur Steven Dufour pour sa participation au jury de ce mémoire.

Je me dois de remercier tous mes collègues de l'URPEI pour leurs collaborations et leurs amitiés. En particulier, il m'importe d'exprimer ma reconnaissance envers Benjamin et Louis-Alexandre pour leurs précieux conseils et leurs disponibilités.

Finalement, j'aimerais remercier le personnel du CERDATO en France, où j'ai eu l'occasion de faire un stage de recherche dans d'agréables conditions.

Résumé

Ce mémoire de maîtrise porte sur la modélisation en trois dimensions de l'écoulement de fluide dans des géométries complexes, à faible entrefer et à parties mobiles. Cette recherche est motivée par le besoin d'améliorer la compréhension des mécanismes de mélange dans les procédés d'agitation où l'on retrouve des petits entrefers, comme c'est le cas pour les extrudeuses bivis par exemple. Les défis pour la simulation numérique de l'écoulement dans des systèmes à faible entrefer et à parties mobiles sont nombreux. D'une part, l'importante différence d'échelle entre les dimensions géométriques nécessite des maillages de très grandes tailles, dont la résolution est coûteuse en temps de calculs. D'autre part, le déplacement des parties mobiles fait en sorte que la géométrie est instationnaire car le volume du fluide évolue en fonction du temps.

Dans ce mémoire, une stratégie basée sur la méthode des éléments finis virtuels et une méthode de partitionnement du maillage a été utilisée pour modéliser l'écoulement dans les systèmes à faible entrefer et à parties mobiles. L'avantage de la méthode des éléments finis virtuels vient du fait qu'un seul maillage est nécessaire pour prendre en compte les géométries instationnaires. Les parties mobiles sont prises en compte par un ensemble de points de contrôle virtuels évoluant en fonction du temps et sur lesquels la cinématique des parties mobiles est imposée.

Deux méthodes de raffinement de maillage adaptatif ont été comparées en trois dimensions pour des éléments finis tétraédriques, le but du raffinement étant d'améliorer la discrétisation des entrefers en réduisant localement la taille de maille. Cette recherche a montré que les deux méthodes de raffinement proposées sont inefficaces en pratique. La méthode de raffinement par le barycentre n'améliore pas la précision des résultats tandis que la méthode de raffinement par les arêtes introduit des discontinuités dans le maillage, ce qui la rend incompatible pour les éléments finis P1+-P0, à base d'interpolation incomplète, utilisés dans cette recherche.

Pour adapter la discréétisation du maillage à la présence de faibles entrefers, une stratégie de partitionnement efficace du maillage a été mise en œuvre pour contrôler la position des nœuds et le nombre d'éléments présents dans les entrefers, l'objectif étant de spécifier des tailles de mailles non uniformes afin d'éviter d'avoir à générer des maillages fins dans tout le système.

En pratique, la simulation de la dispersion dans des cames triangulaires a permis de valider la méthode des éléments finis virtuels dans un contexte simplifié d'extrusion bivis. L'évaluation de la puissance d'agitation pour l'écoulement dans une cuve munie d'un ruban hélicoïdal a démontré l'efficacité de la stratégie de partitionnement efficace du maillage pour améliorer la précision des résultats.

Finalement, une étude de cas a été réalisée pour une paire d'éléments mélangeurs d'une extrudeuse ZSK-30. Les résultats obtenus montrent le potentiel de la stratégie proposée pour modéliser l'écoulement dans les extrudeuses bivis, en particulier pour la prédiction du cisaillement dans les entrefers. Dans ce système, la dimension des entrefers étant très faible, la taille de maille doit être très fine et la dimension des problèmes à résoudre s'avère la principale contrainte pour la simulation numérique de l'écoulement.

En résumé, la modélisation en trois dimensions de l'écoulement dans de faibles entrefers, par la méthode des éléments finis et une méthode de partitionnement du maillage, montre un bon potentiel d'après les cas étudiés. Les perspectives futures de cette stratégie sont excellentes puisque l'amélioration de la performance des calculateurs permettra la modélisation plus rapide et plus précise de l'écoulement dans les faibles entrefers.

Abstract

The objective of this research is the three-dimensional modelling of fluid flows in geometry with small gaps based on the fictitious domain method. Small gaps play an important role in the mixing efficiency of agitation process used in the chemical reactors, and in the operation of single-screw and twin-screw extruders. The work is motivated by the need to improve the understanding of fluid flow and the optimization of process equipment design. There are many challenges in the numerical simulation of fluid flow in small gaps, particularly in the case of time-evolving topologies. First, fine meshes are required to account for the important scale differences between the geometrical dimensions, and they involve the solution of large algebraic systems, both leading to high computational cost. Also, the moving parts imply a transient geometry because of the changing volume of fluid with time and adequate numerical techniques must be developed.

In this work, a strategy based on the fictitious domain method and an efficient mesh partitioning method is used to model the fluid flow in geometry with small gaps and moving parts. The fictitious domain method requires only a single mesh to take into account the transient geometry, and the moving parts are described by a set of control points, on which the motion kinematics is imposed.

Two mesh refinement strategies were compared for the case of tetrahedral finite elements. The objective of the mesh refinement is to improve the precision of the simulation in the region of small gaps by reducing the mesh size. This research has showed that the two refinements strategies are inefficient in practice. The method based on a center-of-gravity decomposition degrades the quality of the mesh and the precision of the solution. The method based on the decomposition of the edges introduces discontinuous nodes and it is incompatible with P1+-P0 the finite element used for the fluid flow problem. An alternative to the mesh refinement strategy was used to take into account the presence of small gaps,

based on an efficient partitioning method that can cope with a non-uniform mesh size, the control of the position of the nodes and the number of elements in the small gaps.

The simulation of dispersion in triangular cams was used to validate the fictitious domain method in the context of simplified twin-screw extruders. The evaluation of power requirement for the agitation in helical ribbon has showed the efficiency of the mesh partitioning method. Finally, fluid flows in the kneading blocks section of a ZSK-30 extruders was used to illustrate the potential of the strategy to model fluid flow in twin-screw extruders, and in particular to predict the shear-rate near the moving small gaps. For the twin-screw extrusion systems, the presence of very small gaps involves a very fine and large mesh and the computational cost is the main constraint of the simulation.

In summary, according to the different cases studied, the modelling of fluid flow in geometries involving moving small gaps with the fictitious domain method and the efficient partitioning method showed good potential. In the future, with the improvement of computer performance, this method will enable faster and more accurate simulations of fluid flow in twin-screw extruders.

Table des matières

REMERCIEMENTS	IV
RÉSUMÉ.....	V
ABSTRACT.....	VII
TABLE DES MATIÈRES	IX
LISTE DES TABLEAUX	XI
LISTE DES FIGURES	XII
LISTE DES ANNEXES	XIV
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS.....	XVI
1. INTRODUCTION	1
MOTIVATIONS ET OBJECTIFS GÉNÉRAUX DE LA RECHERCHE	1
DÉFIS POUR LA SIMULATION DE GÉOMÉTRIES À FAIBLES ENTREFERS.....	2
REVUE DE LA LITTÉRATURE SUR LA MODÉLISATION NUMÉRIQUE DE L'EXTRUSION BIVIS.	4
OBJECTIFS SPÉCIFIQUES.....	8
2. MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS VIRTUELS.....	9
FORMULATION DE LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS VIRTUELS.....	10
APPLICATION : CAMES TRIANGULAIRES	13
<i>Modélisation numérique.....</i>	14

<i>Convergence partielle des méthodes itératives</i>	15
3. STRATÉGIES DE RAFFINEMENT ADAPTATIF DE MAILLAGE	19
CRITÈRE DE QUALITÉ D'UN MAILLAGE	20
TECHNIQUES DE RAFFINEMENT ADAPTATIF DE MAILLAGE EN DEUX DIMENSIONS	21
TECHNIQUES DE RAFFINEMENT ADAPTATIF DE MAILLAGE EN TROIS DIMENSIONS	25
<i>Raffinement par le barycentre</i>	25
<i>Raffinement par les arêtes</i>	26
ÉTUDE SUR L'EFFICACITÉ DU RAFFINEMENT ADAPTATIF DE MAILLAGE EN TROIS DIMENSIONS	33
CONCLUSION SUR LES MÉTHODES DE RAFFINEMENT EN TROIS DIMENSIONS	41
4. STRATÉGIE DE PARTITIONNEMENT DES ENTREFERS	42
APPLICATION : RUBAN HÉLICOÏDAL DANS UNE CUVE AGITÉE	43
5. ÉTUDE DE CAS : EXTRUSION BIVIS	51
MODÉLISATION 3D D'UNE PAIRE D'ÉLÉMENTS MÉLANGEURS	52
<i>Maillage des faibles entrefers</i>	54
<i>Résultats numériques</i>	58
CONCLUSION SUR LA MODÉLISATION DE L'EXTRUSION BIVIS	67
6. CONCLUSION	68
7. RÉFÉRENCES	71
ANNEXES	74

Liste des tableaux

Tableau 4-1 : Maillages et valeurs de Kp sans partitionnement du maillage	47
Tableau 4-2 : Maillages et valeurs de Kp avec partitionnement du maillage	50
Tableau 5-1 : Conditions opératoires pour les éléments mélangeurs	52
Tableau 5-2 : Estimation du nombre d'éléments pour un maillage très fin du fourreau.....	54
Tableau 5-3 : Paramètres et résultats des simulations pour les éléments mélangeurs	58
Tableau 5-4 : Comparaison des valeurs de la vitesse de cisaillement (s ⁻¹)	67
Tableau A-III-1 : Fonctions de base modifiées (Fonctions de base P1).....	84
Tableau A-III-2 : Fonctions de base modifiée (Éléments finis P1+)	87

Liste des figures

Figure 1-1: Géométrie et dimensions d'une extrudeuse bivis de type ZSK-30	2
Figure 1-2 : Déplacement des entrefers avec la rotation des vis	3
Figure 2-1 : Maillages avec la méthode des éléments finis (Extrusion bivis).....	9
Figure 2-2 : Maillages avec la méthode des éléments finis virtuels (Extrusion bivis).....	9
Figure 2-3 : Algorithme d'Uzawa pour la méthode des éléments finis virtuels	11
Figure 2-4 : Géométrie et conditions opératoires des cames triangulaires	13
Figure 2-5 : Dispersion expérimentale pour les cames triangulaires co-rotatives.....	13
Figure 2-6 : Maillage et paramètres numériques pour l'étude des cames triangulaires.....	14
Figure 2-7 : Algorithme d'Uzawa modifié pour la méthode des éléments finis virtuels.....	15
Figure 2-8 : Comparaison entre dispersions expérimentales et numériques	17
Figure 3-1 : Patron de subdivision par le barycentre en deux dimensions	21
Figure 3-2 : Raffinement par le barycentre sur plusieurs niveaux.....	21
Figure 3-3 : Patron de subdivision par les arêtes en deux dimensions.....	22
Figure 3-4 : Raffinement par le barycentre sur plusieurs niveaux.....	22
Figure 3-5 : Discontinuités avec raffinement par les arêtes en deux dimensions	23
Figure 3-6 : Méthode de raffinement « <i>Red and Green refinement</i> »	24
Figure 3-7 : Patron de subdivision par le barycentre en trois dimensions	25
Figure 3-8 : Patron de subdivision par les arêtes en trois dimensions.....	26
Figure 3-9 : Éléments internes produits par la décomposition des arêtes	26
Figure 3-10 : Élimination des discontinuités en trois dimensions par subdivisions.....	27
Figure 3-11 : Exemple de raffinement par les arêtes en trois dimensions	29

Figure 3-12 : Face non conforme du problème de la figure 3-11 (Éléments P1).....	30
Figure 3-13 : Face non conforme du problème de la figure 3-11 (Éléments P2).....	31
Figure 3-14 : Face non conforme du problème de la figure 3-11 (Éléments P1P)	32
Figure 3-15 : Maillages pour l'étude de l'efficacité du raffinement adaptatif.....	33
Figure 3-16 : Norme de l'erreur (maillage structuré sans raffinement)	35
Figure 3-17 : Illustration de l'arête maximale pour le raffinement par les arêtes.....	37
Figure 3-18 : Trois possibilités pour le choix de la plus grande arête.....	37
Figure 3-19 : Critère de régularité χ en fonction du niveau de raffinement de maillage	38
Figure 3-21 : Norme infinie de l'erreur pour différents maillages raffinés	39
Figure 3-23 : Norme euclidienne de l'erreur pour différents maillages raffinés	40
Figure 4-1 : Ruban hélicoïdal (dimensions en millimètres)	43
Figure 4-2 : Exemples de maillages avec les éléments finis classiques	45
Figure 4-3 : Exemples de maillages avec les éléments finis virtuels.....	46
Figure 4-4 : Partitions du maillage pour un ruban hélicoïdal (éléments finis classiques).....	48
Figure 4-5 : Exemples de construction des partitions de la cuve et maillages résultants.	49
Figure 5-1 : Maillage d'une paire d'éléments mélangeurs en trois dimensions.....	52
Figure 5-2 : Symétrie des éléments mélangeurs après une rotation de 180°	53
Figure 5-3 : Maillage grossier des éléments mélangeurs (66 439 éléments P1+-P0)	55
Figure 5-4 : Maillage fin avec partitionnement (334 869 éléments P1+-P0)	55
Figure 5-5 : Construction des partitions avant la création du maillage	56
Figure 5-6 : Agrandissement du maillage avec partitionnement du fourreau.....	57
Figure 5-7 : Norme de la vitesse au 1 ^{er} pas de temps pour le maillage grossier	59

Figure 5-8 : Norme de la vitesse au 1 ^{er} pas de temps pour maillage avec partitions	60
Figure 5-9 : Composante v de la vitesse dans la zone d'interpénétration.....	60
Figure 5-10 : Profil de pression, 1 ^{er} pas de temps, Maillage grossier, Plan de coupe	61
Figure 5-11 : Profil de pression, 1 ^{er} pas de temps, Maillage fin, Plan de coupe.....	61
Figure 5-12 : Profil de pression en fonction de la position des vis.....	62
Figure 5-13 : Vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}_{xy}$ (Maillage grossier).....	64
Figure 5-14 : Vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}_{xy}$ (Maillage Fin)	64
Figure 5-15 : Composante $\dot{\gamma}_{xy}$ dans les entrefers (Maillage Grossier).....	65
Figure 5-16 : Composante $\dot{\gamma}_{xy}$ dans les entrefers (Maillage fin)	66
Figure A.I-1 Algorithme d'Uzawa pour la résolution des problèmes fluides.....	79
Figure A.II-1 : Éléments finis de POLY3D™	80
Figure A.III-1 : Maillages avant et après raffinement par les arêtes	81
Figure A.III-2 : Face Γ commune aux éléments A, B, C, D et E	81
Figure A.III-3 : Numérotation des nœuds sur la face Γ pour éléments finis P1	82
Figure A.III-4 : Profil de \tilde{N}_3 , après la condensation (P1)	85
Figure A.III-5 : Numérotation des nœuds sur la face Γ pour éléments finis P1+	85
Figure A.III-6 : Profil de $N_3^{(A)}$ et \tilde{N}_3 , avant et après la condensation (P1+)	88
Figure A.III-7 : Profil de $N_7^{(A)}$ et \tilde{N}_7 , avant et après la condensation (P1+)	88

Liste des Annexes

Annexe I: Formulation mathématique des éléments finis	75
Annexe II : Éléments finis tétraédriques	80
Annexe III : Traitement des nœuds non conformes	81

Liste des sigles et abréviations

<u>Sigle</u>	<u>Descriptions</u>	<u>Unité</u>
A	Matrice de conduction	
B	Matrice de divergence	
C	Constante pour analyse d'erreur	
D	Diamètre de l'agitateur	<i>m</i>
D_f	Diamètre du fourreau	<i>mm</i>
E	Entraxe	<i>mm</i>
E_{v-v}	Entrefer vis-vis	<i>mm</i>
E_{v-f}	Entrefer vis-fourreau	<i>mm</i>
f	Force	<i>N</i>
f	fonction à interpolation par éléments finis	
F	Vecteur force	<i>N</i>
h	Taille de maille moyenne	<i>mm</i>
h_{\max}	Taille de la plus grande arête	<i>m</i>
J	Matrice jacobienne	
K _p	Constante de puissance	
N	Vitesse de rotation de l'agitateur	<i>tour/s</i>
N	Fonctions d'interpolation basées sur polynômes de Lagrange	
\tilde{N}	Fonctions d'interpolation après condensation des nœuds non conformes	
n	Nombre d'éléments du maillage	
p, P	Pression	<i>Pa</i>
P	Puissance d'agitation	<i>W</i>
P_0	Position initiale d'un traceur numérique	<i>m</i>

$P(t)$	Position d'un traceur numérique au temps t	m
$R_i^{(e)}$	Résidu du nœud i pour l'élément e	
r, s	Paramètre de pénalisation pour la méthode d'Uzawa	
t	Temps	s
T	Température	K
u, v, w	Composante de la vitesse pour les directions x,y et z	m/s
u^*, v^*, w^*	Solution numérique pour composante de la vitesse	m/s
\mathbf{u}, \mathbf{v}	Vecteur vitesse	m/s
\mathbf{v}^*	Vecteur vitesse de l'objet mobile	m/s
$\mathbf{V}^{(i)}$	Vecteur solution de la vitesse à l'itération i	m/s
$V_{\text{réel}}$	Volume de l'élément réel	m^3
$V_{\text{régulier}}$	Volume du plus grand tétraèdre régulier	m^3
V	Volume total du domaine	m^3
$\dot{\gamma}$	Tenseur de vitesse cisaillement	s^{-1}
$\dot{\gamma}_{xy}$	Composante xy du tenseur de vitesse de cisaillement	s^{-1}
η	Viscosité apparente	$Pa \cdot s$
μ	Viscosité newtonienne	$Pa \cdot s$
λ	Multiplicateur de Lagrange	
χ	Critère de régularité géométrique	
\tilde{u}	Estimé de la solution	m/s
δu	Déviation de la solution	m/s
η, λ, ξ	Coordonnées sur l'élément de référence	
ϕ, φ, ψ	Fonctions d'interpolation basées sur polynômes de Lagrange	
$\hat{\phi}$	Fonctions d'interpolation sur l'élément de référence	
$\tilde{\phi}$	Fonctions d'interpolation modifiées après condensation des nœuds non conformes	
ξ	Fonctions-tests	

1. Introduction

Motivations et objectifs généraux de la recherche

Les géométries à faible entrefer sont courantes dans les procédés d'agitation, où elles jouent un rôle important dans les mécanismes de mélange de fluides visqueux. La modélisation de l'écoulement dans de telles géométries est un défi important pour de nombreux procédés, par exemple dans les procédés de mélange en cuve agitée, les procédés d'extrusion bivis et monovis et pour les filières d'extrusion.

La compréhension de l'écoulement dans les entrefers est essentielle pour concevoir, contrôler et améliorer les procédés d'agitation. Bien souvent, les données expérimentales pour caractériser l'écoulement ne sont pas disponibles car la prise de mesure est difficile, coûteuse et parfois impossible sur les systèmes industriels. Par exemple, dans le procédé d'extrusion bivis, des investissements importants sont nécessaires pour obtenir des mesures expérimentales précises sur le profil de vitesse, de pression et de cisaillement, alors qu'en industrie il est souvent impossible d'obtenir ces informations. Dans ces circonstances, l'utilisation de méthodes numériques pour décrire et quantifier les phénomènes d'écoulement est complémentaire aux méthodes empiriques.

En raison de la complexité des géométries à faibles entrefers, la modélisation des phénomènes d'écoulement est en général tridimensionnelle et instationnaire. La simulation numérique des systèmes à faible entrefer requiert l'utilisation de maillages très fins. Compte tenu que la différence d'échelle entre les dimensions géométriques génère des maillages de grande taille, la résolution numérique de ces problèmes est fort coûteuse en temps de calcul, en mémoire et en espace disque.

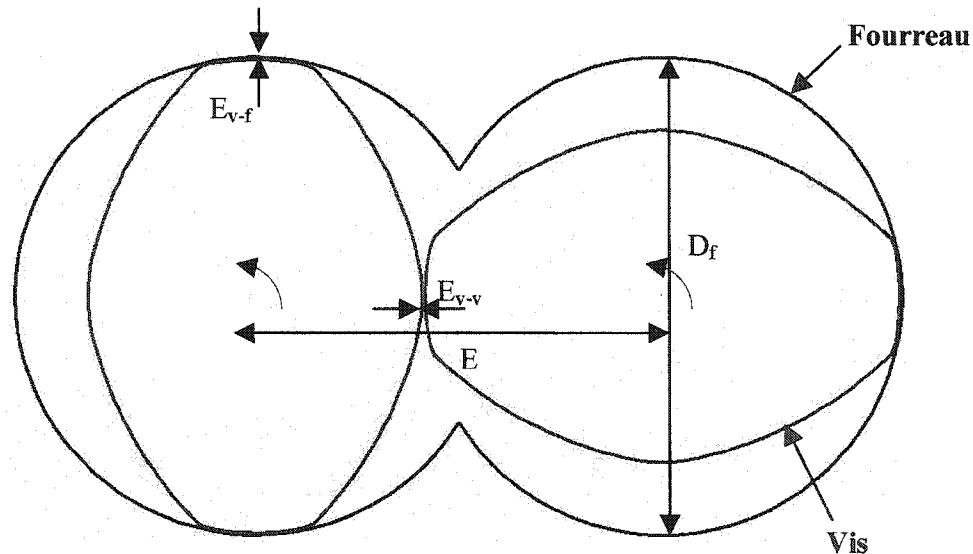
L'objectif de cette recherche est de développer des stratégies de simulation en trois dimensions de l'écoulement des fluides pour le procédé d'extrusion bivis. Plus généralement, l'objectif de ces travaux est de mettre au point une stratégie numérique

efficace pour la modélisation de l'écoulement dans des géométries à faible entrefer et à parties mobiles.

Défis pour la simulation de géométries à faibles entrefers

Éléments mélangeurs pour l'extrusion bivis

Utilisons l'exemple d'une paire d'éléments mélangeurs d'une extrudeuse bivis pour illustrer la problématique de la simulation de l'écoulement dans une géométrie à faible entrefer. La figure 1-1 montre la section d'une extrudeuse co-rotative de type ZSK-30, utilisée notamment dans l'industrie des polymères pour alimenter des filières d'extrusion.



<i>Diamètre du fourreau</i>	D_f	30.85 mm
<i>Entraxe</i>	E	26.20 mm
<i>Entrefer vis-vis</i>	E_{v-v}	0.20 mm
<i>Entrefer vis-fourreau</i>	E_{v-f}	0.15 mm

Figure 1-1: Géométrie et dimensions d'une extrudeuse bivis de type ZSK-30

Dans ce système, on constate la présence d'entrefers vis-vis et vis-fourreau très faibles, le rapport entre le diamètre du fourreau et la dimension des entrefers est de 1 : 500, ce qui constitue un problème d'échelle considérable. En extrusion bivis, l'importance des entrefers

sur la qualité du mélange est bien connue. Une vis neuve se comporte différemment d'une vis usée, car l'usure des vis fait varier la taille des entrefers et modifie l'écoulement à l'intérieur du fourreau. Mentionnons qu'à partir d'un ratio de 1 :50, un entrefer peu être considéré comme faible.

Le défi pour modéliser avec précision l'écoulement du fluide dans les entrefers vient du fait qu'un maillage avec une taille de maille très petite est nécessaire. L'importante différence d'échelle entre la dimension des entrefers et la dimension du fourreau se traduit par des maillages comportant un très grand nombre d'éléments. D'autre part, puisque les vis sont en rotation, la géométrie du chenal d'écoulement évolue dans le temps et les zones de faibles entrefers se déplacent avec les vis. Dans ces conditions, il est difficile d'utiliser un maillage qui soit bien adapté à la position des entrefers à chaque pas de temps de la simulation transitoire.

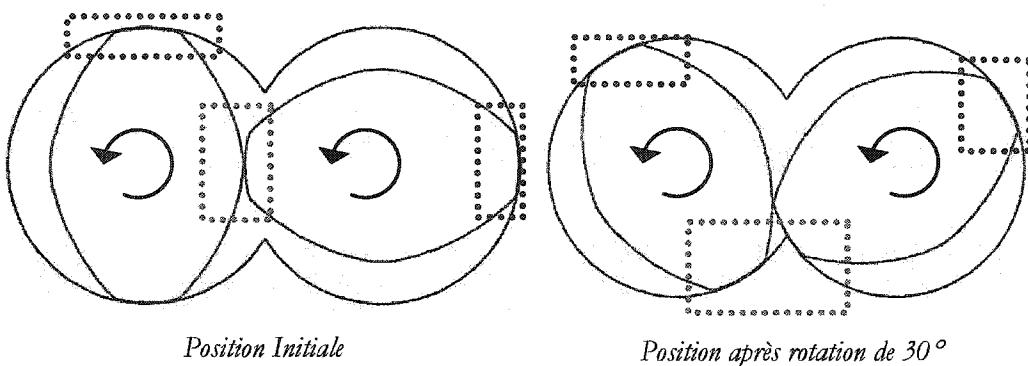


Figure 1-2 : Déplacement des entrefers avec la rotation des vis

En résumé, la modélisation en trois dimensions de l'écoulement dans les entrefers d'extrudeuse bivis demande la résolution de problèmes de grande taille. En pratique, le temps de calcul apparaît comme la principale contrainte, d'autant plus que les calculs doivent être répétés pour plusieurs pas de temps. En conséquence, la mise au point d'une stratégie numérique pour prendre en compte la présence de faibles entrefers en déplacement est nécessaire pour réaliser la simulation numérique rapide et efficace du procédé d'extrusion bivis.

Revue de la littérature sur la modélisation numérique de l'extrusion bivis

La modélisation de l'écoulement dans les géométries ayant des parties mobiles et des faibles entrefers est un sujet très vaste. Une brève revue de la littérature sur les stratégies de simulation de l'écoulement dans les extrudeuses bivis est utile pour illustrer et comprendre les défis qui se posent sur le plan de la simulation numérique, particulièrement dans le cas de l'écoulement dans des faibles entrefers.

En extrusion bivis, les éléments de vis sont modulaires et une infinité de combinaisons de vis est possible pour adapter le procédé aux produits désirés. Pour concevoir et optimiser rapidement une extrudeuse, une bonne connaissance des mécanismes de mélange et de transport est donc importante. Depuis plusieurs années, des efforts considérables ont été entrepris pour caractériser l'écoulement dans les extrudeuses bivis et plusieurs études expérimentales ont été réalisées. Les modèles empiriques basés sur des données expérimentales sont toutefois limités et coûteux expérimentalement, d'autant plus qu'il existe un grand nombre de configurations de vis. La modélisation numérique est donc une solution intéressante pour quantifier les profils de pression, de vitesse et de cisaillement, ainsi que la distribution du temps de séjour et la puissance consommée.

En raison de la géométrie complexe et instationnaire des systèmes d'extrusion bivis, les modèles mathématiques analytiques sont peu nombreux. Ces modèles sont unidimensionnels et concernent les prédictions de perte de charge et de débit dans des éléments convoyeurs, en utilisant des simplifications géométriques. Mentionnons à ce sujet les travaux de Booy (1978), sur la description mathématique de la géométrie des vis interpenetrées utilisées en extrusions bivis et la prédition analytique du débit associé aux éléments convoyeurs.

Dans la littérature, la méthode des éléments finis est généralement utilisée pour la résolution des équations d'échanges en raison de sa capacité à traiter les écoulements de fluides non

newtoniens évoluant dans des géométries complexes avec des maillages non structurés. Dans un premier temps, les simulations numériques ont été développées pour des systèmes simplifiés en deux dimensions d'extrusion bivis. Cependant, Rauwendaal (1981) a montré par des études expérimentales que l'écoulement dans les extrudeuses bivis est tridimensionnel, en particulier dans la zone d'interpénétration. C'est pourquoi des efforts importants ont été mis en œuvre pour la modélisation instationnaire en trois dimensions de l'extrusion bivis.

Un défi dans la modélisation de l'écoulement dans les extrudeuses bivis provient de la rotation des vis à l'intérieur du fourreau (géométrie instationnaire). Avec des méthodes classiques de simulation numérique, basées sur les éléments finis ou les volumes finis, il est nécessaire de générer un nouveau maillage pour chacun des pas de temps de la simulation transitoire afin de tenir compte des changements géométriques du système.

Différentes approches sont proposées dans la littérature pour tenir compte du déplacement des vis et du changement du volume du fluide en fonction du temps. Mours *et al.* (2000) ont modélisé en trois dimensions l'écoulement d'un fluide isotherme dans une extrudeuse bivis, en utilisant l'hypothèse d'un écoulement quasi stationnaire. Cette hypothèse est utilisée lors du post traitement pour générer une solution instationnaire en assemblant des solutions stationnaires, calculées à chaque pas de temps. Par cette technique, 100 maillages ont été nécessaires pour représenter une révolution des vis et ceux-ci ont été produits en utilisant un générateur automatique de maillage. Une stratégie similaire a été utilisée par Bravo *et al.* (2000) pour modéliser des éléments mélangeurs pour des cas bidimensionnels et tridimensionnels. Récemment, Ishikawa (2002) a étudié le mélange en trois dimensions, dans les extrudeuses en utilisant 30 maillages générés manuellement avant la simulation, pour représenter seulement un quart de rotation des vis. En exploitant les symétries des vis, ils ont considéré l'écoulement comme périodique après un quart de tour, ce qui permettait de réduire le nombre de pas de temps à calculer.

Pour éviter la tâche fastidieuse de générer des nouveaux maillages à chaque pas de temps, des méthodes basées sur un seul maillage ont été proposées dans la littérature. Ainsi, Avalosse (1997) a employé une stratégie de superposition de maillages pour modéliser l'écoulement dans l'ensemble du fourreau d'une extrudeuse bivis en deux dimensions. Cette technique consiste à superposer un maillage dynamique, représentant les vis en rotation, sur un maillage statique du fourreau. A chaque pas de temps, la position du maillage dynamique des vis est mise à jour et une procédure identifie si les éléments du maillage statique sont situés à l'intérieur ou à l'extérieur des vis. Lorsqu'un élément fini du maillage statique est sur la frontière d'une des vis, le vecteur vitesse associé à la rotation des vis est alors imposé sur chacun des nœuds de cet élément. Les vecteurs vitesse sont ensuite introduits dans les équations d'échanges par une technique de pénalisation. Cette méthode est simple à mettre en œuvre, mais la qualité de la description de la géométrie des vis reste limitée, car les nœuds sur lesquels les vecteurs vitesse sont imposés sont situés sur le maillage statique. Comme la description de la cinématique des vis dépend de la position des nœuds sur le maillage statique, un maillage suffisamment fin est nécessaire pour traiter adéquatement les géométries à faible entrefer.

Plus récemment, la technique de superposition de maillages a été étendue aux cas en trois dimensions par Avalosse (2002) en intégrant une méthode de raffinement local et adaptatif de maillage, pour des éléments finis de forme cubique. Le raffinement adaptatif permet d'affiner localement le maillage statique, ce qui améliore la description des vis avec la méthode de superposition de maillages. Cette méthode, implantée dans le logiciel *POLYFLOW*, a permis aux auteurs de réaliser des simulations en extrusion bivis en trois dimensions pour des éléments mélangeurs et convoyeurs.

La technique de superposition de maillages présente certaines similitudes avec la méthode des éléments finis virtuels (Bertrand et al., 1997) et utilisé par Bertrand *et al.* (2003) pour la modélisation en deux dimensions de l'écoulement dans les extrudeuses bivis. La méthode des éléments finis virtuels diffère par le fait que la description des vis est réalisée à l'aide d'un ensemble de points dont la position est complètement indépendante de la position des

nœuds du maillage du fourreau. Avec cette méthode, la rotation des vis est imposée sur chacun des points sous forme de contraintes cinématiques introduites dans les équations d'échanges par des multiplicateurs de Lagrange (Fortin et Glowinski, 1983). Cette technique, combinée à une stratégie de raffinement local et adaptatif de maillage a été utilisée pour modéliser l'écoulement dans les faibles entrefers d'une paire d'éléments de mélange en deux dimensions.

En résumé, les méthodes basées sur l'hypothèse d'un écoulement quasi stationnaire et un remaillage nécessitent le développement d'un générateur automatique de maillage, bien adapté aux systèmes à modéliser. En pratique, ces méthodes sont limitées et laborieuses pour la mise en œuvre rapide de simulations sur des nouvelles géométries. Pour les méthodes basées sur un seul maillage du fourreau, une stratégie de raffinement de maillage est utile pour assurer une bonne description des vis et des entrefers. L'avantage de ces techniques est dans la facilité à traiter de nouvelles géométries, car ces méthodes sont basées sur un seul maillage de référence.

La validation des résultats numériques avec des mesures expérimentales est également un défi important dans les problèmes de modélisation numérique. Il existe peu de données dans la littérature pouvant être utilisées pour mesurer la qualité des simulations numériques dans les extrudeuses bivis. Dans bien des cas, seules des données globales sur la perte de charge et le débit sont disponibles et il est difficile de quantifier les phénomènes locaux de l'écoulement du fluide. D'autre part, les simulations réalisées sont basées sur des approximations et des simplifications géométriques et il devient difficile de trouver des conditions expérimentales comparables pour la validation. Soulignons les travaux expérimentaux de McCullough et Hilton (1993), qui ont mesuré la pression localement à différentes positions dans le fourreau, et ce en fonction de la rotation des vis. Ces travaux ayant été réalisés pour un fluide non newtonien, il nécessite toutefois la résolution de problèmes non linéaires, plus coûteux en temps de calcul.

En résumé, la littérature montre que la modélisation numérique de l'extrusion bivis en trois dimensions est à la fois complexe en raison de la géométrie instationnaire et à la fois limitée en pratique par la taille des problèmes à résoudre. Précisons que peu de publications traitent du comportement de l'écoulement dans les faibles entrefers. Dans bien des cas, des simplifications géométriques sont utilisées pour négliger l'écoulement dans les entrefers ou encore les systèmes considérés sont choisis tels que les entrefers ne sont pas trop faibles.

Objectifs spécifiques

Cette recherche s'inscrit dans le cadre du développement de stratégies numériques de modélisation de l'écoulement dans les extrudeuses bivis. L'objectif est d'étendre en trois dimensions la stratégie proposée par Bertrand *et al.* (2003) pour le cas bidimensionnel, basée sur la méthode des éléments finis virtuels et un raffinement local et adaptatif de maillage.

Les objectifs spécifiques de cette recherche sont de :

- Mettre en oeuvre la méthode des éléments finis virtuels en trois dimensions, dans le contexte de géométries à faibles entrefers;
- Développer, planter et expérimenter des techniques de raffinement local et adaptatif de maillage en trois dimensions pour des éléments finis de forme tétraédrique;
- Étudier l'influence du maillage des systèmes à faible entrefer sur la précision des simulations numériques;
- Valider la stratégie numérique avec des résultats expérimentaux.

2. Méthode des éléments finis virtuels

La simulation de l'écoulement d'un fluide dans une géométrie instationnaire possédant des parties mobiles est parfois complexe et fastidieuse avec la méthode classique des éléments finis. Pour tenir compte du changement de volume dû aux déplacements des parties mobiles, il faut générer un nouveau maillage pour chaque pas de temps de la simulation transitoire. Dans la pratique, la réalisation des maillages est une activité ardue et coûteuse en temps de travail et le besoin de remailler le système pour chaque pas de temps restreint la mise en œuvre de simulations sur de nouvelles géométries.

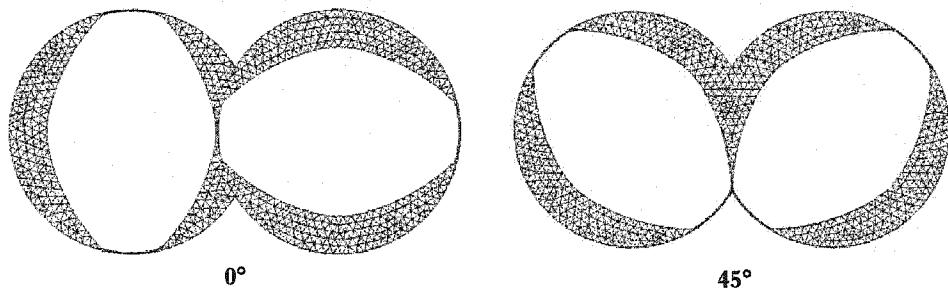


Figure 2-1 : Maillages avec la méthode des éléments finis (Extrusion bivis)

La méthode des éléments finis virtuels, qui est implantée dans le logiciel POLY3D™, permet la simulation d'écoulements dans des géométries instationnaires ayant une cinématique complexe, à partir d'un seul maillage. Cette technique est basée sur un maillage qui représente le volume global occupé par le fluide et sur un ensemble de points pour décrire les parties mobiles.

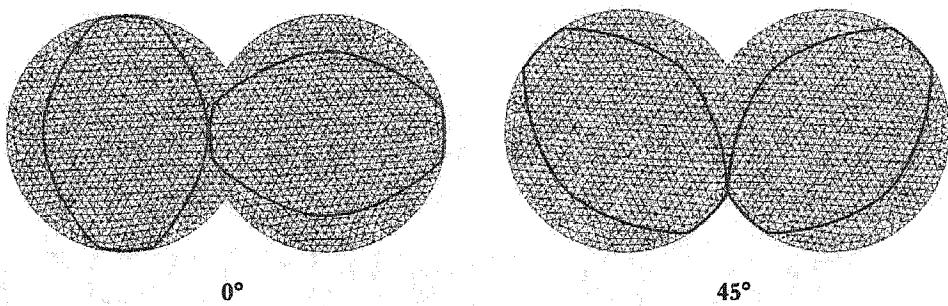


Figure 2-2 : Maillages avec la méthode des éléments finis virtuels (Extrusion bivis)

Ces points, nommés points de contrôle virtuels, permettent d'imposer la cinématique des parties mobiles en associant un vecteur vitesse à chacun de ceux-ci. Pour prendre en compte le déplacement des parties mobiles, la position des points de contrôle est simplement mise à jour à chaque pas de temps de la simulation transitoire.

Formulation de la méthode des éléments finis virtuels

Dans cette section, seul les éléments principaux de la formulation des éléments virtuels sont présentés. En complément à ces explications, la formulation de la méthode des éléments finis est détaillée en annexe.

Afin de simplifier l'écriture, considérons un écoulement laminaire, isotherme, newtonien et non inertiel, dans une géométrie ayant au moins une partie mobile. Soit un domaine Ω de frontière Γ et un objet virtuel de domaine Ω^* et de frontière Γ^* . On cherche à résoudre le problème

$$-\mu\Delta v + \text{grad } p = f \quad \text{sur } \Omega \setminus \Omega^*, \quad (\text{Eq. 2-1})$$

$$\text{div } v = 0 \quad \text{sur } \Omega \setminus \Omega^*, \quad (\text{Eq. 2-2})$$

$$v = 0 \quad \text{sur } \Gamma, \quad (\text{Eq. 2-3})$$

$$v = v^* \quad \text{sur } \Gamma^*, \quad (\text{Eq. 2-4})$$

où v^* est le vecteur vitesse de l'objet virtuel sur la frontière Γ^* .

De manière analogue au traitement de l'incompressibilité pour la méthode des éléments finis (voir annexe I), la résolution du problème 2-1 à 2-4 par la méthode des éléments finis virtuels est équivalente à résoudre un problème d'optimisation avec contraintes. En introduisant des multiplicateurs de Lagrange pour imposer la cinématique associée aux points de contrôle virtuels, on doit résoudre le problème de point selle suivant :

$$\inf_{v \in [H_0^1(\Omega)]^3} \sup_{p \in L^2(\Omega)} \sup_{\lambda \in [L^2(\Gamma^*)]^3} L_{rs}(v, p, \lambda), \quad (\text{Eq. 2-5})$$

avec le lagrangien augmenté

$$L_{rs}(v, p) = L_r(v, p) + \frac{s}{2} \int_{\Gamma^*} |v - v^*|^2 d\Gamma - \int_{\Gamma^*} \lambda \cdot (v - v^*) d\Gamma, \quad (\text{Eq. 2-6})$$

où s est un paramètre de pénalité et λ un multiplicateur de Lagrange.

Sous forme discrète, le problème consiste à trouver v_h, p_h et λ_h tel que

$$a(v_h, \phi_h) - b(\phi_h, p_h) = (\mathbf{f}_h, \phi_h) + (\lambda_h, \phi_h), \quad \forall \phi \in [H_0^1(\Omega)]^3 \quad (\text{Eq. 2-7})$$

$$b(v_h, \varphi_h) = 0, \quad \forall \varphi_h \in L^2(\Omega) \quad (\text{Eq. 2-8})$$

$$((v_h - v^*), \xi_h) = 0, \quad \forall \xi_h \in [L^2(\Gamma^*)]^3 \quad (\text{Eq. 2-9})$$

où

$$a(v_h, \phi_h) = \mu \int_{\Omega} \operatorname{grad} \phi_h \cdot \operatorname{grad} v_h d\Omega, \quad (\text{Eq. 2-10})$$

$$b(v_h, \varphi_h) = \int_{\Omega} \varphi_h \operatorname{div} v_h d\Omega. \quad (\text{Eq. 2-11})$$

Une version adaptée de l'algorithme d'Uzawa (Bertrand *et al.*, 1997) permet la résolution du problème discret en ajoutant une étape pour la mise à jour des multiplicateurs de Lagrange. Les solveurs utilisés pour la résolution des systèmes linéaires sont basés sur des méthodes de Krylov selon les propriétés des matrices impliquées (Bertrand et Tanguy, 2002).

- o. Étant donné $V^{(0)}$ et $P^{(0)}$
1. Pour $n = 0, 1, 2, \dots$ jusqu'à convergence
 - 1.1 Résoudre le problème primal pour déterminer $V^{(n+1)}$
 - $$[A + rB^T B] V^{(n+1)} = -B^T P^{(n)} + F$$
 - 1.2 Résoudre le problème dual
 - $$B[A + rB^T B]^{-1} B^T P^{(n+1)} = B[A + rB^T B]^{-1} F$$
 - 1.3 Mettre à jour $V^{(n+1)}$
 - 1.4 Mettre à jour les multiplicateurs de Lagrange associés aux points de contrôle virtuels

Figure 2-3 : Algorithme d'Uzawa pour la méthode des éléments finis virtuels

Les multiplicateurs de Lagrange associés aux points de contrôle virtuels font en sorte que l'algorithme d'Uzawa modifié converge plus lentement qu'avec l'approche classique des éléments finis. Une attention particulière au niveau de la discréétisation des objets virtuels est nécessaire pour obtenir une précision satisfaisante de la solution pour un temps de calcul raisonnable. Par exemple, les objets virtuels doivent être représentés avec un nombre de points de contrôle suffisant afin d'éviter un phénomène de porosité numérique des parties solides. En effet, un nombre insuffisant de points de contrôle risque de permettre un écoulement du fluide au travers des objets virtuels, entraînant une erreur de modélisation. À l'opposé, l'utilisation d'un grand nombre de points de contrôle introduit beaucoup de contraintes dans les équations d'échange et la convergence des solveurs itératifs risque alors d'être très lente.

Application : cames triangulaires

Les travaux expérimentaux d'Avalosse et Crochet (1997) offrent la possibilité de valider la méthode des éléments finis virtuels dans un contexte simplifié d'extrusion bivis, où les entrefers ne sont pas trop faibles (1 :30). En utilisant un fourreau transparent, ces auteurs ont étudié la dispersion d'un sirop de maïs, un fluide newtonien, pour les configurations co-rotative et contra-rotative.

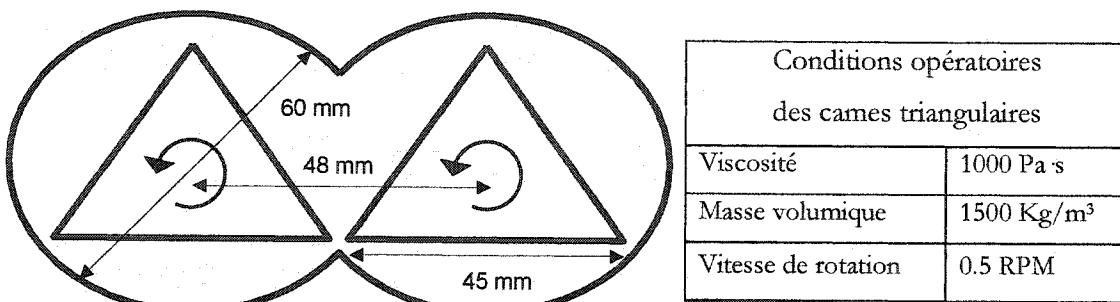


Figure 2-4 : Géométrie et conditions opératoires des cames triangulaires

En fonctionnant à basse vitesse de rotation, ils ont filmé la dispersion d'une goutte de sirop de maïs coloré en rouge. La figure 2-5 présente les résultats de dispersion expérimentale à intervalles de 120° de rotation des cames co-rotatives.

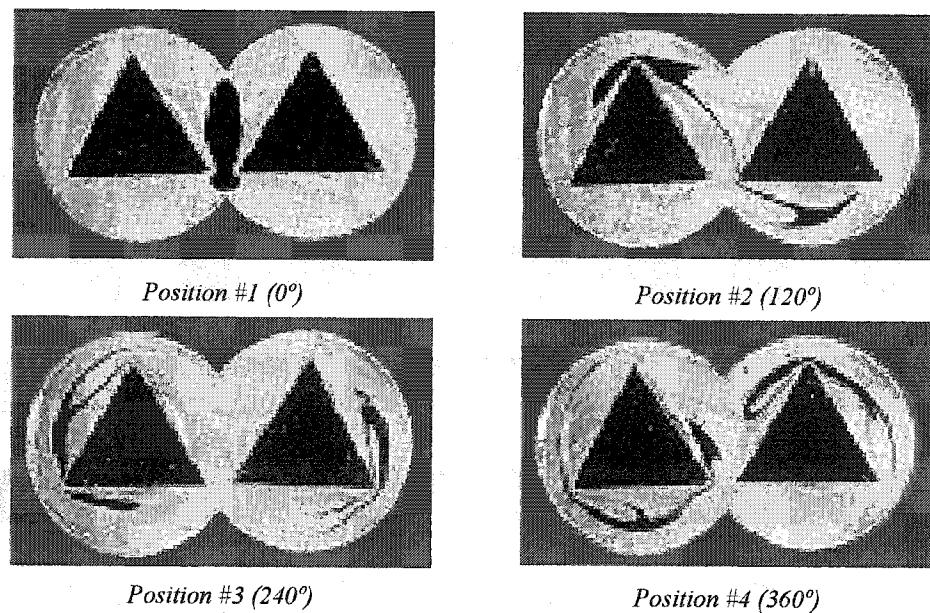
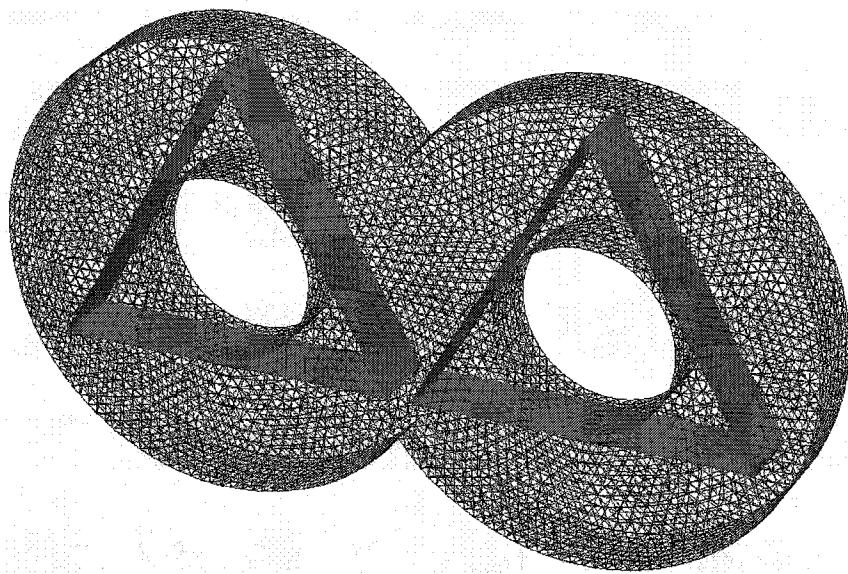


Figure 2-5 : Dispersion expérimentale pour les cames triangulaires co-rotatives

Modélisation numérique

Une simulation numérique a été réalisée pour valider la méthode des éléments finis virtuels avec les résultats expérimentaux de dispersion. Le maillage du fourreau est présenté à la figure 2-6, sur lequel les cames virtuelles, en bleu, ont été superposées.



Nombre d'éléments P1+P0	56 208
Nombre de points de contrôle virtuels	3 474
Nombre de pas de temps pour 1/3 de tour	40
Temps de calcul approximatif	40 heures

Figure 2-6 : Maillage et paramètres numériques pour l'étude des cames triangulaires

Pour le maillage du fourreau, on remarque la présence de trous à l'intérieur des cames. La solution de l'écoulement à l'intérieur des cames n'étant pas nécessaire, les trous permettent de réduire le nombre d'équations à résoudre. Soulignons également que les calculs ont été réalisés pour seulement un tiers de tour, car cette période correspond à la symétrie géométrique des cames triangulaires. Pour des écoulements visqueux en régime établi, il est possible de faire l'hypothèse que la solution est périodique, ce qui permet de réduire par un facteur trois la charge de calcul d'une révolution complète des cames.

Convergence partielle des méthodes itératives

Dans ce travail, une amélioration de la méthode des éléments finis virtuels a été proposée pour accélérer l'algorithme d'Uzawa. L'expérience de la méthode des éléments finis virtuels suggère que la convergence soit contrôlée par la mise à jour des multiplicateurs de Lagrange associés aux points de contrôle virtuels (étapes 1.4 de l'algorithme de la figure 2-3). Cette mise à jour ayant lieu après la résolution de chaque point fixe de la méthode d'Uzawa, beaucoup de temps de calcul est consacré à résoudre les systèmes d'équations intermédiaires des problèmes primaux et duals (étapes 1.1 et 1.2 de la figure 2-3). L'idée proposée pour accélérer la méthode est de converger seulement partiellement les problèmes primaux et duals de l'algorithme d'Uzawa. La convergence partielle fait en sorte que les multiplicateurs de Lagrange associées aux points de contrôle virtuels sont mis à jour plus rapidement.

Une version modifiée de l'algorithme d'Uzawa (figure 2-7) a été implantée dans POLY3D™. La première et la dernière itération en point fixe sont convergées normalement tandis que pour les points fixes intermédiaires, une convergence partielle est employée en limitant le nombre d'itérations des solveurs itératifs.

0. Étant donné $V^{(0)}$ et $P^{(0)}$
1. Pour $n = 0$
 - 1.1 Résoudre **complètement** le problème primal et le problème dual pour déterminer $V^{(1)}$
 - 1.2 Mise à jour des multiplicateurs de Lagrange
2. Pour $n = 1, 2, \dots$ jusqu'à convergence partielle
 - 2.1 Résoudre **partiellement** le problème primal et le problème dual pour déterminer $V^{(n+1)}$
 - 2.2 Mettre à jour les multiplicateurs de Lagrange
3. Pour $m = n, n+1, \dots$ jusqu'à convergence complète
 - 3.1 Résoudre **complètement** le problème primal et le problème dual pour déterminer $V^{(m+1)}$
 - 3.2 Mise à jour des multiplicateurs de Lagrange

Figure 2-7 : Algorithme d'Uzawa modifié pour la méthode des éléments finis virtuels

L'implantation de la convergence partielle des solveurs itératifs a permis de réduire significativement le temps de calcul de la méthode des éléments finis virtuels en trois dimensions. Il est par contre difficile de mesurer l'accélération associée à cette technique, car celle-ci est liée au problème à résoudre. Pour l'application sur les cames triangulaires, la convergence partielle a permis de réduire le temps de calcul par un facteur 2.

La difficulté avec la convergence partielle réside dans le choix du nombre d'itérations à utiliser pour converger partiellement les solveurs itératifs, car ce nombre dépend du problème à résoudre. En pratique, un nombre entre 10 et 25 a permis une amélioration de la convergence, mais un nombre d'itérations optimal serait utile pour obtenir une meilleure accélération. Au lieu de reposer sur un nombre maximal d'itérations, la convergence partielle pourrait être basée sur un critère d'arrêt différent dans les solveurs itératifs. Somme toute, une investigation mathématique et numérique approfondie serait nécessaire pour optimiser cette technique, mais cette activité dépasse le cadre de ces travaux.

Calcul de la dispersion

La solution du champ de vitesse permet de reproduire la dispersion par une injection de traceurs numériques dans le système. Dans un premier temps, à l'aide de transformées de Fourier, la solution discrète pour chaque pas de temps est assemblée pour former une solution continue dans le temps. Ensuite, à partir de positions initiales et en intégrant numériquement en fonction du temps les vitesses données par les transformées de Fourier, on obtient la position des traceurs en fonction du temps.

Ainsi pour chaque traceur injecté, on calcule la position d'après

$$P(t) = P_0 + \int_t^{t_0} v \, dt \quad (\text{Éq. 2-12})$$

où $P(t)$ est la position d'un traceur, P_0 la position initiale et v le vecteur vitesse.

La figure 2-8 compare la dispersion de 300 traceurs provenant des calculs numériques avec les résultats expérimentaux d'Avalosse et Crochet. À première vue, la méthode des éléments finis virtuels permet de bien reproduire la dispersion expérimentale.

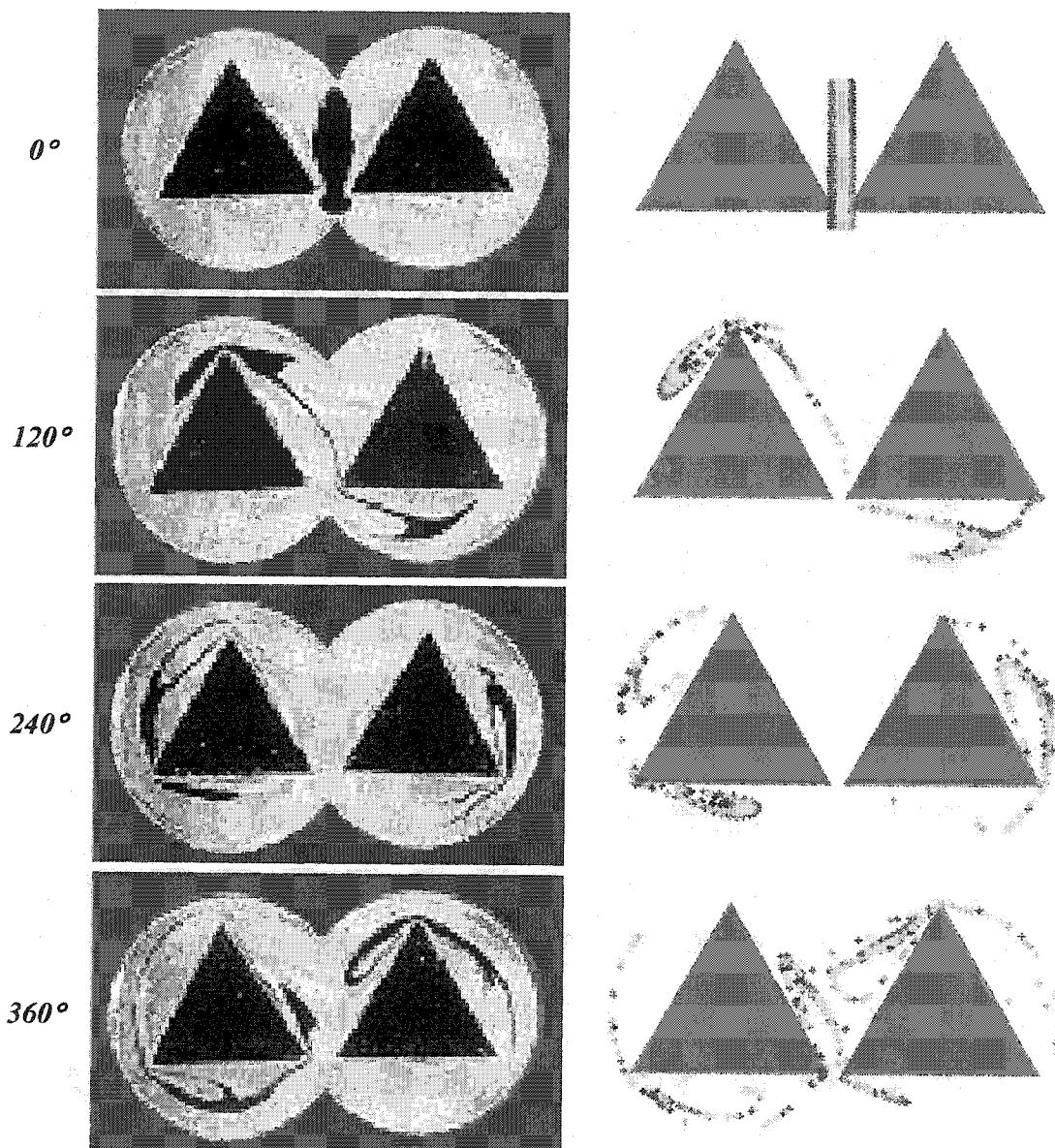


Figure 2-8 : Comparaison entre dispersions expérimentales et numériques

Les différences observées peuvent être expliquées par les facteurs suivants :

- La position initiale des traceurs numériques est différente du cas expérimental. Il est en effet difficile de reproduire exactement la configuration de la goutte initiale, celle-ci est simplifiée grossièrement par une forme rectangulaire.
- À chaque pas de temps, l'intégration numérique cumule l'erreur sur la position de traceurs, d'où une légère détérioration des résultats en fonction du temps.
- La précision du champ de vitesse est contrôlée par la qualité du maillage ainsi que par le choix des fonctions d'interpolation de la méthode des éléments finis. Un maillage plus fin et donc plus coûteux en calcul, permettrait d'améliorer la précision des simulations tout comme l'utilisation de fonctions d'interpolation à base quadratique en vitesse.

En résumé, la modélisation de la dispersion avec les cames triangulaires a permis de valider la méthode des éléments finis virtuels en trois dimensions dans un contexte simplifié d'extrusion bivis, pour lequel les entrefers ne sont pas trop importants. De plus, la convergence partielle des solveurs itératifs a permis d'accélérer par un facteur deux la résolution de ce problème, d'où l'importance de son utilisation pour des simulations coûteuses en charge de calcul.

3. Stratégies de raffinement adaptatif de maillage

Dans le contexte de géométries dans lesquelles se déplacent des parties mobiles, il apparaît avantageux que les maillages soient raffinés à chacun des pas de temps selon la position des entrefers. Pour ce faire, les méthodes de raffinement adaptatif de maillage ont pour objectif d'améliorer la précision des méthodes numériques dans les zones critiques de l'écoulement en contrôlant localement la taille des éléments. On peut classifier les techniques de raffinement adaptatif de maillage en deux catégories, d'une part les méthodes basées sur un remaillage complet du système et d'autre part, les méthodes basées sur la subdivision des éléments d'un maillage de référence.

Le remaillage complet génère un nouveau maillage solide de tétraèdres à chaque pas de temps à partir d'un maillage dynamique, composé de triangles, représentant l'enveloppe de la géométrie appelé « la peau ». En utilisant un algorithme de remaillage permettant de contrôler la répartition de la taille de mailles dans les différentes régions du domaine, il est possible de générer des maillages bien adaptés à la présence de petits entrefers. Pour être pratique, une telle procédure doit être automatisée, ce qui implique le développement et l'utilisation d'algorithmes sophistiqués de remaillage permettant de spécifier localement la taille de maille.

L'autre approche pour le raffinement de maillage vise à subdiviser les éléments en plusieurs petits éléments afin de réduire la taille de maille. L'idée est de décomposer un ou plusieurs tétraèdres se trouvant dans les zones critiques de l'écoulement, pour adapter la taille de maille aux dimensions des entrefers. Cette subdivision locale des éléments est basée sur un seul maillage de référence qui est décomposé à chaque pas de temps pour prendre en compte le déplacement des zones de faibles entrefers.

Dans ce travail, une technique de raffinement local par subdivision des éléments a été mise au point en trois dimensions pour des tétraèdres dans le but d'améliorer la précision de la méthode des éléments finis virtuels dans les systèmes à faibles entrefers.

Critère de qualité d'un maillage

Il est utile de définir la notion de qualité des éléments d'un maillage avant d'introduire les méthodes de raffinement adaptatif de maillage. Il existe plusieurs critères géométriques pour définir la régularité des éléments d'un maillage tétraédrique. Qualitativement, les éléments sont considérés réguliers lorsqu'ils se rapprochent d'un tétraèdre équilatéral. Plus un élément est déformé ou aplati, plus il est irrégulier. Le critère utilisé dans cette étude pour quantifier la régularité des éléments consiste à comparer le volume du tétraèdre réel avec le volume correspondant au tétraèdre régulier formé avec la plus grande des six arêtes de l'élément à caractériser.

Soit χ le critère de régularité, on a

$$\chi = \frac{V_{\text{Régulier}}}{V_{\text{Réel}}} \quad (\text{Eq. 3-1})$$

où $V_{\text{Réel}}$ est le volume réel du tétraèdre et $V_{\text{Régulier}}$ est le volume d'un tétraèdre régulier calculé en fonction de la taille de la plus grande arête du tétraèdre notée h_{\max} .

$$V_{\text{Régulier}} = \frac{\sqrt{2}}{12} (h_{\max})^3 \quad (\text{Eq. 3-2})$$

En pratique, la précision de la solution numérique obtenue avec la méthode des éléments finis s'améliore lorsque la valeur de χ diminue. C'est pourquoi on cherche à conserver une valeur faible pour le critère de régularité de l'équation 3-1.

La notion de taille de maille est utilisée pour l'analyse de convergence de l'erreur numérique. Celle-ci est toutefois difficile à définir pour des tétraèdres non structurés dans un contexte de raffinement local de maillage où la distribution de la taille de maille est non uniforme. Pour quantifier le niveau de discrétisation des maillages, on utilise une taille de maille moyenne noté h , qui est donnée par

$$h = \sqrt[3]{\frac{V}{n}} \quad (\text{Eq. 3-3})$$

où V est le volume du domaine et n le nombre total d'éléments.

Techniques de raffinement adaptatif de maillage en deux dimensions

En deux dimensions, deux stratégies de raffinement adaptatif ont été proposées par Bertrand *et al.* (2003) pour les éléments finis de forme triangulaire, soit le raffinement par le barycentre et le raffinement par les arêtes. Une révision de ces deux stratégies nous apparaît utile pour introduire les méthodes de raffinement en trois dimensions mises au point dans cette recherche.

Décomposition par le barycentre

La méthode de raffinement par le barycentre est obtenue en ajoutant un nœud au barycentre de l'élément à décomposer, la subdivision produisant trois nouveaux éléments (figure 3-1). Cette technique à l'avantage d'être simple dans son application : aucune condition aux limites n'est ajoutée et le processus peut être répété sur plusieurs niveaux de raffinement. Néanmoins, ce patron de subdivision ne réduit pas la taille de maille maximale, car les arêtes de l'élément décomposé sont conservées lors de la subdivision. La taille de la maille de l'élément décomposé n'est donc pas diminuée et la régularité des éléments produits est nécessairement moins bonne.

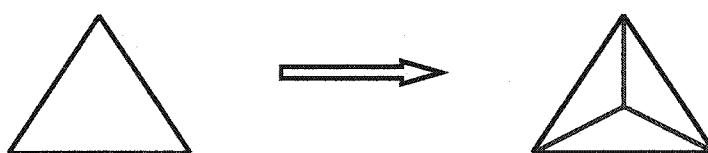


Figure 3-1 : Patron de subdivision par le barycentre en deux dimensions

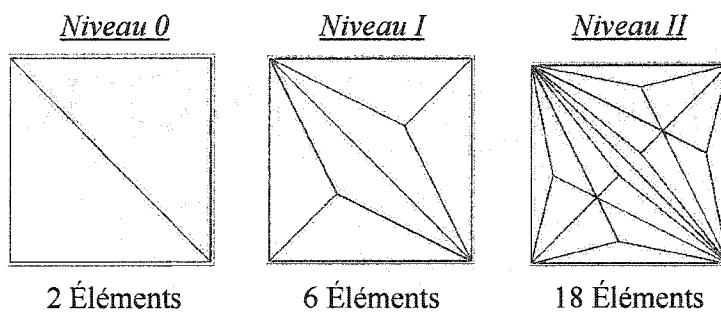


Figure 3-2 : Raffinement par le barycentre sur plusieurs niveaux

Comme le montre la figure 3-2, les éléments générés par le raffinement barycentrique sont de qualité inférieure à ceux du maillage de référence et la taille de l'arête maximale n'est pas diminuée par la décomposition. Les propriétés de convergence et la précision des interpolations de la méthode des éléments finis étant influencées par la taille de maille et la régularité géométrique des éléments, la méthode de raffinement barycentrique n'apparaît pas très intéressante dans ces conditions.

Décomposition par les arêtes

La seconde technique, la méthode de raffinement basée sur la décomposition des arêtes, conserve la régularité des éléments lors de la subdivision. Cette décomposition est obtenue en ajoutant des nœuds au milieu des arêtes de l'élément à subdiviser et quatre nouveaux éléments sont alors produits. L'avantage de cette décomposition provient de la régularité des éléments subdivisés qui est identique à celle de l'élément décomposé, ce qui permet de conserver les propriétés de convergence du maillage de base.

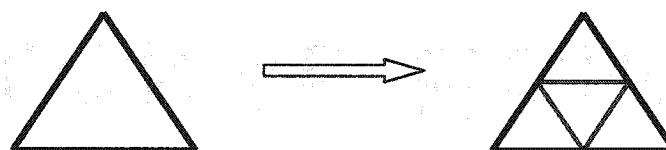


Figure 3-3 : Patron de subdivision par les arêtes en deux dimensions

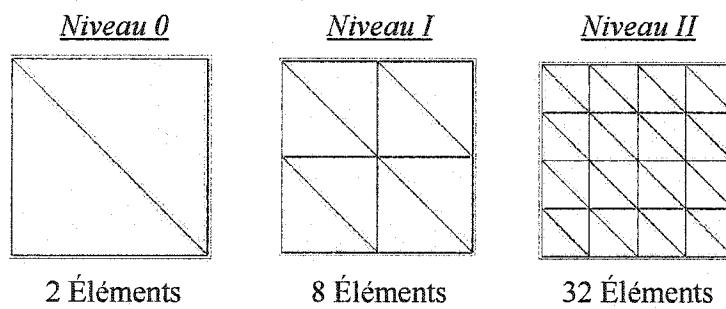


Figure 3-4 : Raffinement par le barycentre sur plusieurs niveaux

Par contre, cette décomposition introduit des discontinuités topologiques sur la frontière entre les éléments raffinés et ceux non raffinés qui entraîne des discontinuités au niveau des fonctions d'interpolation (figure 3-5). Ces discontinuités sont situées sur les nœuds dits « non conformes » se trouvant sur une arête d'un élément non décomposé.

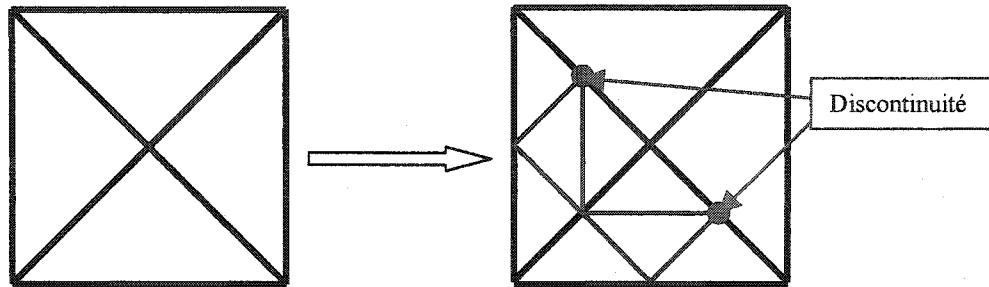


Figure 3-5 : Discontinuités avec raffinement par les arêtes en deux dimensions

Un traitement adéquat est nécessaire pour éliminer ces discontinuités. Il existe deux stratégies pour éliminer les discontinuités générées par la décomposition basée sur les arêtes. La première est un raffinement supplémentaire pour éliminer les nœuds non conformes par une décomposition des éléments problématiques avec un patron de subdivision adapté. La seconde stratégie est d'imposer la continuité de la solution sur les nœuds non conformes par une opération de condensation effectuée lors de l'assemblage du système d'équations, en exprimant les nœuds non conformes en fonction des nœuds conformes (Fortin et Tanguy, 1984).

Traitement des discontinuités

1) Élimination des discontinuités par raffinement de maillage

En deux dimensions, la technique de raffinement rouge et vert (*Red and Green refinement* en anglais) permet d'éliminer les discontinuités topologiques sur un maillage d'éléments triangulaires (Verfuth, 1996). L'idée est de repérer les éléments dont au moins une arête partage un nœud non conforme, pour ensuite le décomposer et former deux nouveaux triangles éliminant la discontinuité du maillage (figure 3-6). En deux dimensions, cette

procédure est simple à mettre en pratique, mais elle ne permet pas de conserver la régularité des éléments produits lors de l'élimination des nœuds non conformes et une attention particulière doit être portée sur la qualité du maillage produit.

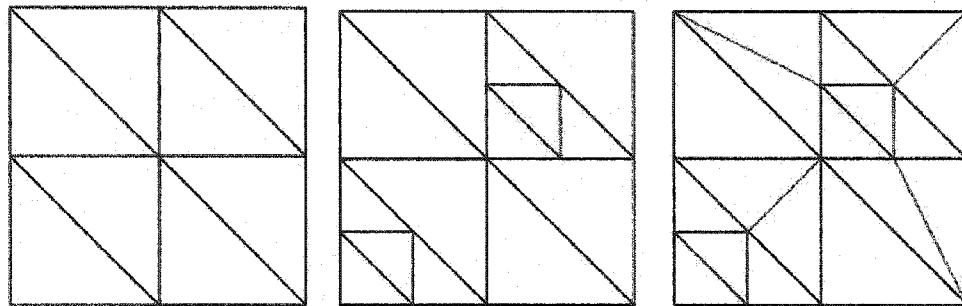


Figure 3-6 : Méthode de raffinement « *Red and Green refinement* »

2) Condensation des nœuds non conformes dans le système d'équations

L'autre alternative pour traiter les nœuds non conformes introduits par la décomposition des arêtes est de les éliminer directement de la formulation du problème à résoudre par une procédure de condensation des degrés de liberté non conformes (Fortin et Tanguy, 1984). Pour y arriver, il suffit d'exprimer les nœuds non conformes en fonction des nœuds conformes pour ensuite les éliminer du système d'équations à résoudre. Cette méthode est utilisée pour respecter la continuité des fonctions d'interpolation sur les nœuds non conformes. Le développement détaillé de l'opération de condensation des nœuds non conformes est fourni en annexe à ce mémoire.

En résumé, la méthode de raffinement par les arêtes avec élimination des nœuds non conformes apparaît la plus appropriée pour le raffinement de maillage adaptatif, car elle conserve la régularité du maillage et les propriétés de convergence. C'est d'ailleurs cette technique qui a été retenue par Bertrand *et al.* (2003) pour modéliser l'écoulement en deux dimensions dans les entreffers en extrusion bivis.

Techniques de raffinement adaptatif de maillage en trois dimensions

Pour étendre le raffinement de maillage en trois dimensions, des patrons de subdivisions ont été élaborés pour décomposer des éléments finis tétraédriques. En généralisant les stratégies de raffinement pour le cas tridimensionnel, des méthodes basées sur la décomposition des barycentres et des arêtes ont été développées et implantées dans POLY3D™, ces méthodes présentant chacune des avantages et des inconvénients.

Raffinement par le barycentre

L'extension de la méthode de raffinement barycentrique au cas tridimensionnel est directe. Elle s'obtient en ajoutant un nœud au barycentre du tétraèdre à décomposer, cette subdivision créant ainsi quatre nouveaux éléments. Comme pour les triangles en deux dimensions, ce raffinement dégénère de manière importante la qualité des éléments du maillage et les propriétés de convergence du système. Cette méthode n'améliore pas la discréttisation de la région raffinée car elle ne réduit pas la taille maximale des arêtes de l'élément décomposé. L'efficacité de cette méthode est donc limitée par la régularité du maillage généré et il semble difficile de décomposer plusieurs fois un même élément sans détériorer de manière importante la convergence et la précision numérique associée au maillage.

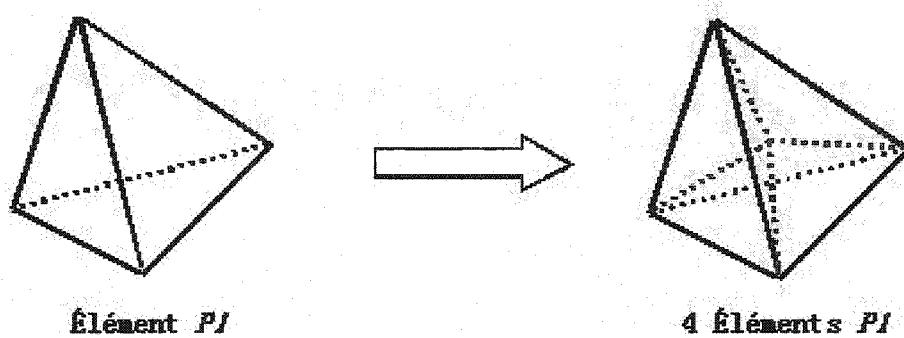


Figure 3-7 : Patron de subdivision par le barycentre en trois dimensions

Raffinement par les arêtes

La méthode de raffinement basée sur la décomposition des arêtes est plus complexe à visualiser pour les tétraèdres. La technique suggérée consiste à décomposer un tétraèdre en huit nouveaux tétraèdres : quatre tétraèdres « externes », situés aux sommets du tétraèdre de base et quatre tétraèdres « internes », formant une double pyramide à base rectangulaire.

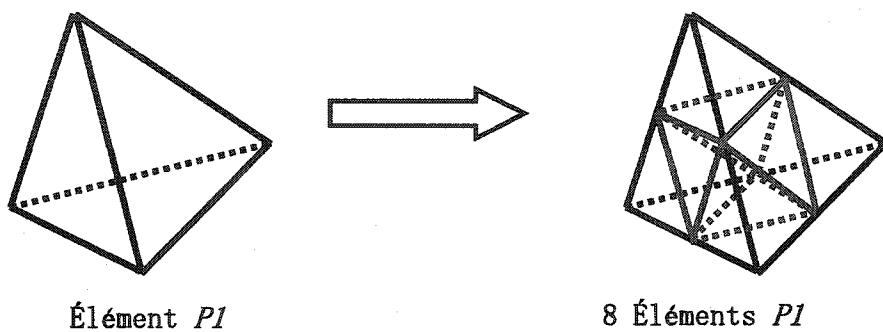


Figure 3-8 : Patron de subdivision par les arêtes en trois dimensions

Les éléments externes, «des quatre coins», sont géométriquement semblables au tétraèdre de base et la régularité des éléments est identique. Pour les éléments internes, formant une double pyramide à base rectangulaire, la régularité géométrique n'est pas toujours conservée et une légère perte en régularité est inévitable si l'élément de base est déjà déformé avant le raffinement. Mentionnons qu'en trois dimensions, il n'existe a priori aucune méthode pour décomposer les tétraèdres sans affecter la qualité des éléments.

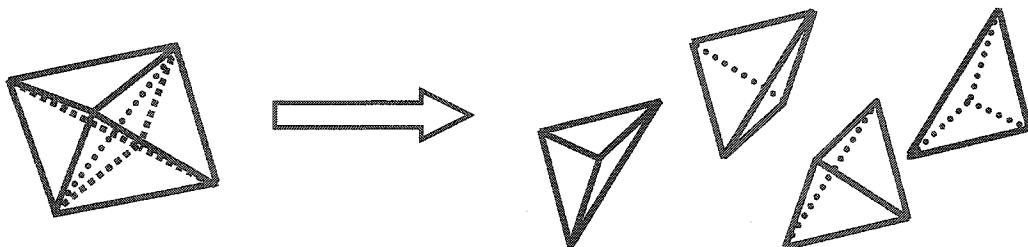


Figure 3-9 : Éléments internes produits par la décomposition des arêtes

Traitement des nœuds non conforme

Comme en deux dimensions, la décomposition par les arêtes introduit des discontinuités sur certains nœuds situés sur la frontière des régions raffinées. Les approches pour traiter les discontinuités sont limitées et plus complexes à mettre en œuvre que pour le cas bidimensionnel.

1) Élimination des discontinuités par raffinement de maillage

L'élimination des discontinuités par une stratégie de type « raffinement rouge et vert » est ardue à réaliser en trois dimensions. L'implantation d'une telle stratégie est difficile, car des algorithmes efficaces et plusieurs patrons de décomposition sont nécessaires (figure 3-10).

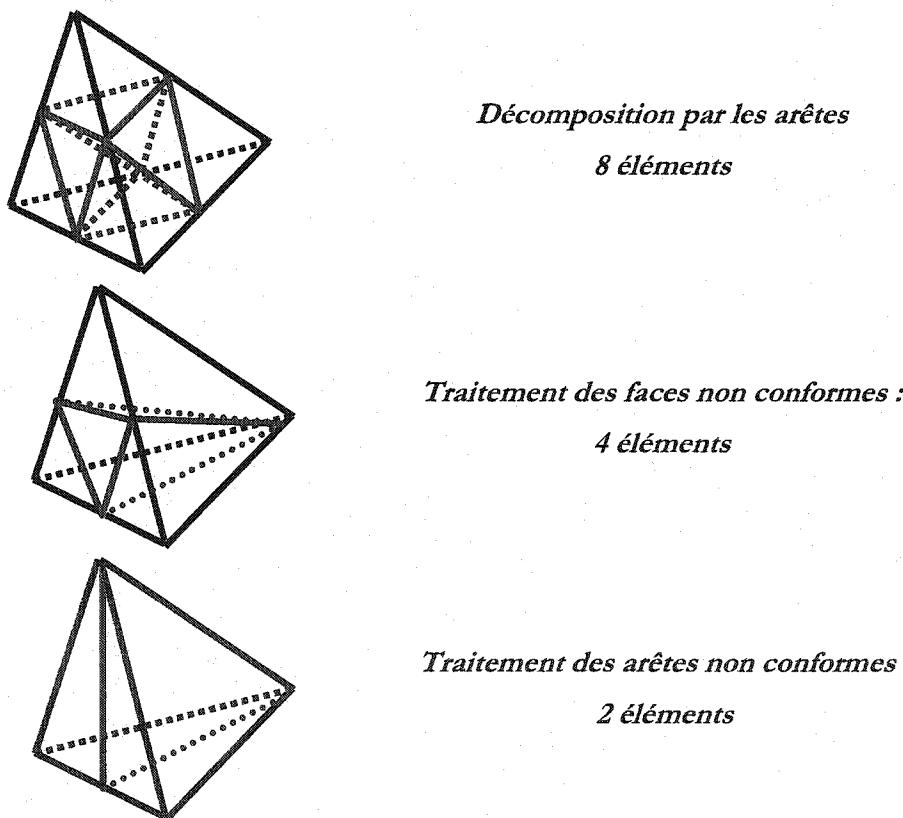


Figure 3-10 : Élimination des discontinuités en trois dimensions par subdivisions

En pratique, la méthode de raffinement rouge et vert en trois dimensions est souvent inefficace, car un trop grand nombre de tétraèdres doivent être subdivisés pour éliminer les nœuds non conformes. Dans ces conditions, il est difficile de contrôler efficacement le nombre d'éléments du maillage et de limiter la taille des problèmes à résoudre. De plus, cette technique ne conserve pas la régularité des éléments produits lors du raffinement supplémentaire éliminant les nœuds non conformes. Par conséquent, cette stratégie ne permet pas d'atteindre les objectifs du raffinement local, soit de contrôler le maillage tout en conservant la régularité des éléments.

2) Élimination des discontinuités par condensation des nœuds non conformes

Pour permettre d'éliminer les discontinuités introduites par le raffinement basé sur les arêtes, la stratégie de condensation des nœuds non conformes, proposée en deux dimensions, doit être généralisée au cas tridimensionnel.

En trois dimensions, les fonctions d'interpolation doivent être continues sur les frontières entre les éléments, c'est à dire les faces et les arêtes internes des tétraèdres. Pour que l'interpolation soit continue entre les différents éléments finis, il faut exprimer les nœuds non conformes comme une combinaison de nœuds conformes. Toutefois, pour être compatible avec l'opération de condensation, il apparaît nécessaire que les fonctions d'interpolation forment une base complète.

Pour les problèmes thermiques, l'utilisation de fonctions de base complètes de type P1 (linéaire) ou P2 (quadratique) permet la condensation des nœuds non conformes et ne pose aucune difficulté. Par contre, pour les problèmes fluides, le choix des fonctions d'interpolations est compliqué par le couplage entre la vitesse et la pression. En fluide, les fonctions d'interpolations peuvent être classées selon que la pression est continue ou non entre les éléments. Dans le cas d'éléments à pression continue, des bases d'interpolations complètes sont disponibles et la condensation des nœuds non conformes peut être réalisée, comme par exemple avec l'élément de type Taylor-Hood P2-P1 et l'élément mini P1+-P1.

Par contre, pour les éléments à pression discontinue, les bases d'interpolations utilisées en vitesse sont incomplètes et ne sont pas compatibles avec la méthode de condensation des nœuds non conformes. Pour ces bases, une fonction bulle incomplète est ajoutée au centre des faces des éléments pour respecter la condition de Brezzi (1974), entre le couplage de la vitesse et de la pression.

En trois dimensions, les méthodes à pression discontinue utilisant des fonctions de base incomplètes sont donc incompatibles avec la méthode de condensation des nœuds non conformes, ce qui est le cas entre autre pour les éléments de Crouzeix-Raviart et pour les éléments P1+-P0. Le logiciel d'éléments finis POLY3D™, utilisé dans cette recherche pour réaliser les simulations numériques, utilise des éléments finis à base complète pour les problèmes thermiques et à base incomplète pour les problèmes fluides. À l'heure actuelle, la méthode de raffinement de maillage basé sur les arêtes est donc inapplicable pour les problèmes d'écoulement de fluides dans POLY3D™.

Mentionnons qu'une description de chacun des éléments mentionnés ci-dessus est fournie en annexe à ce mémoire. Davantage d'informations sur les choix des éléments finis sont données dans le livre de Brezzi et Fortin (1991).

Traitements des discontinuités pour les éléments à base complète

Considérons un maillage de deux tétraèdres dont l'un est raffiné par la méthode non conforme (figure 3-11). Le raffinement introduit des discontinuités sur la face commune entre les deux éléments.

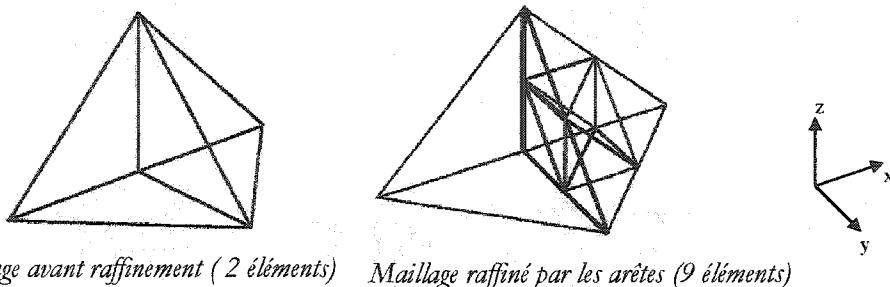
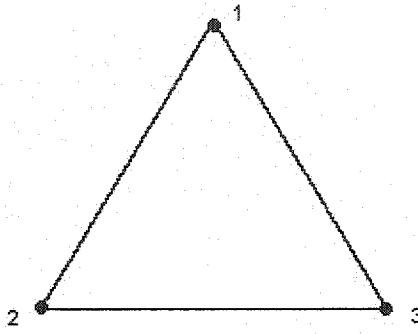


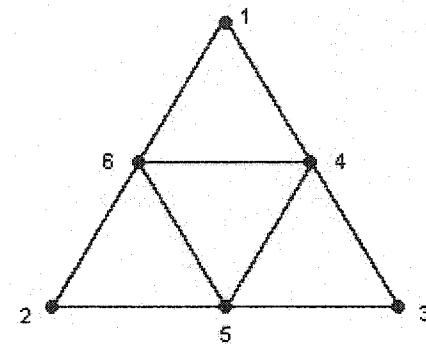
Figure 3-11 : Exemple de raffinement par les arêtes en trois dimensions

Élément linéaire de type P1

Le nombre de nœuds non conformes à éliminer varie selon la base d'interpolation utilisée pour les éléments finis. Pour les éléments linéaires P1, trois nœuds non conformes sont à traiter (nœuds #4,5 et 6 de la figure 3-12).



Face avant raffinement



Face après raffinement

Figure 3-12 : Face non conforme du problème de la figure 3-11 (Éléments P1)

La procédure d'identification des nœuds non conformes est identique au cas bidimensionnel; elle est basée sur le fait que ces nœuds sont toujours situés sur le milieu d'une arête d'un autre élément. Cette caractéristique fait en sorte qu'en trois dimensions, les opérations de condensation des nœuds non conformes sont basées sur des contraintes de continuité similaires au cas bidimensionnel.

De manière générale, on doit exprimer un degré de liberté non conforme en utilisant l'interpolation donnée par l'élément conforme partageant l'arête non conforme. Pour exprimer le degré de liberté f_i associé au nœud non conforme i , situé au milieu d'une arête entre les nœuds conformes k et j , on utilise l'expression

$$f_i = \frac{1}{2} \{ f_k + f_j \}. \quad (\text{Eq. 3-4})$$



Pour la face problématique des figures 3-11 et 3-12, il est possible d'interpoler les degrés de liberté non conformes à partir des équations

$$f_6 = \frac{1}{2} \{ f_1 + f_2 \}, \quad (\text{Eq. 3-5})$$

$$f_4 = \frac{1}{2} \{ f_1 + f_3 \}, \quad (\text{Eq. 3-6})$$

$$f_5 = \frac{1}{2} \{ f_2 + f_3 \}. \quad (\text{Eq. 3-7})$$

L'opération de condensation revient ensuite à modifier les fonctions tests et les fonctions d'interpolations (méthode de Galerkin) utilisées avec la méthode des éléments finis et à ajouter une opération de condensation lors de l'assemblage des systèmes matriciels élémentaires (voir annexe II).

Élément quadratique de type P2

Pour les éléments quadratiques P2, neuf nœuds non conformes sont à traiter.

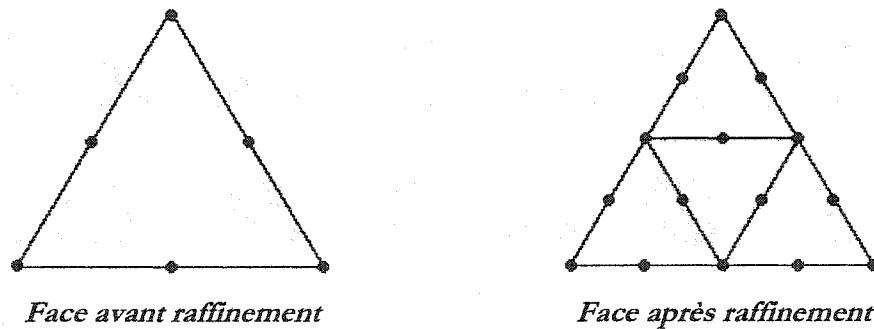
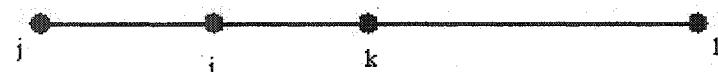


Figure 3-13 : Face non conforme du problème de la figure 3-11 (Éléments P2)

Pour obtenir une interpolation quadratique continue sur une arête non conforme, on doit l'exprimer en terme de trois nœuds conformes partageant cette arête. Ainsi,

$$f_i = \frac{1}{2} f_k + \frac{1}{3} f_l + \frac{3}{8} f_j. \quad (\text{Eq. 3-8})$$



Traitement d'éléments à base incomplète de type P1P

L'ajout des fonctions de bulles pour les bases incomplètes introduit des discontinuités sur les nœuds situés aux centres des faces des éléments décomposés. Pour des éléments d'interpolations P1+P0, utilisés pour les problèmes fluides en trois dimensions, on doit éliminer trois nœuds sur les arêtes et trois nœuds au centre des faces des éléments non conformes.

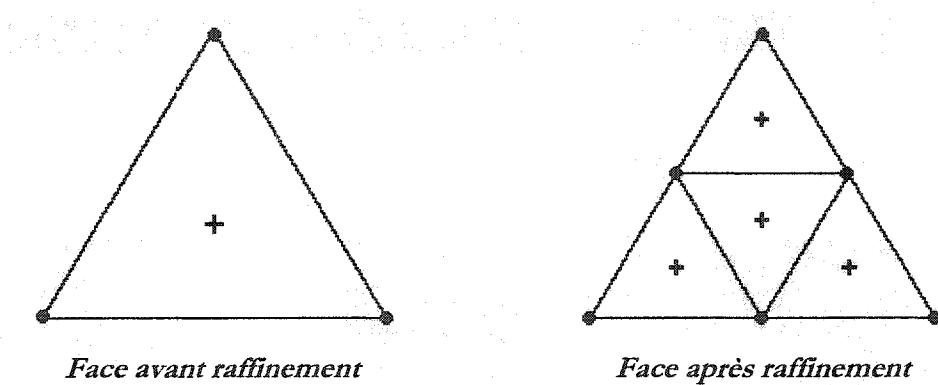


Figure 3-14 : Face non conforme du problème de la figure 3-11 (Éléments P1P)

Il est possible de démontrer l'incompatibilité de la condensation des nœuds non conformes dans le cas d'éléments finis P1+P0 à base incomplète (voir annexe II). Somme toute, les résultats obtenus avec la condensation des nœuds non conformes montrent que l'utilisation d'une base incomplète n'assure pas la continuité de l'interpolation sur l'ensemble de la face. En réalité, la méthode de condensation des nœuds non conformes est incompatible pour les bases d'interpolation incomplètes utilisées pour la résolution de problèmes fluides.

Étude sur l'efficacité du raffinement adaptatif de maillage en trois dimensions

Une étude a été menée pour connaître le potentiel des méthodes proposées en trois dimensions pour le raffinement adaptatif de maillage. Rappelons que l'objectif du raffinement est d'améliorer la précision des simulations en réduisant la taille de maille des éléments dans les zones critiques de l'écoulement. Il est donc intéressant de mesurer le potentiel des méthodes de raffinement proposé.

Pour ce faire, les méthodes de raffinement ont été expérimentées sur un problème fluide avec une géométrie simple, représentant un cube, et avec un écoulement de Poiseuille dont la solution analytique est connue. Les méthodes de raffinement basées sur la décomposition des barycentres et des arêtes ont été appliquées sur tous les éléments du maillage et répétées de façon récurrente pour comparer la décomposition après plusieurs niveaux de raffinement. L'influence du raffinement sur deux types de maillages a également été étudiée et comparée, soit pour un maillage structuré et pour un maillage non structuré avec des éléments tétraédriques linéaires P1+-P0 (figure 3-15).

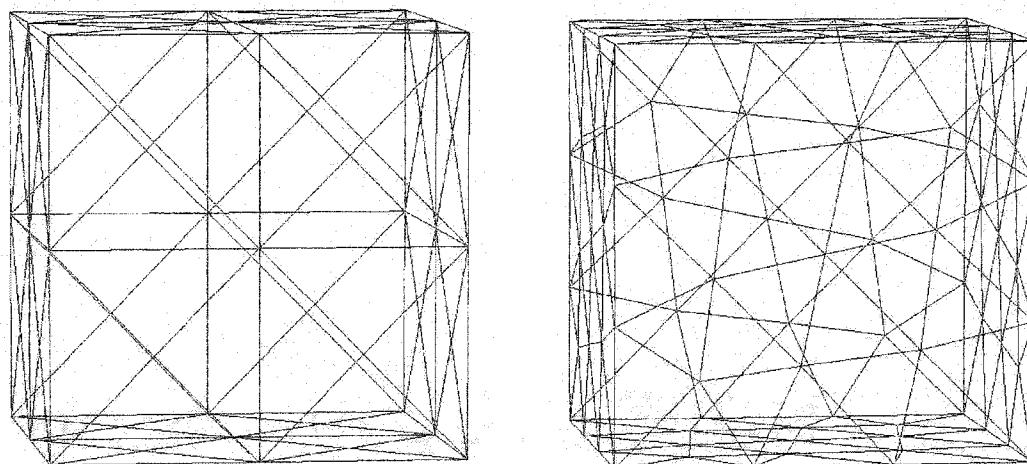


Figure 3-15 : Maillages pour l'étude de l'efficacité du raffinement adaptatif

Analyse de l'erreur en fonction de la taille de maille

Pour quantifier l'erreur de la solution numérique, il est utile de définir les normes suivantes :

$$\text{Norme infinie} : \quad \| \cdot \|_{\infty}^{\Omega} = \underset{\Omega}{\operatorname{Max}} |u - u^*| \quad (\text{Eq. 3-9})$$

$$\text{Norme euclidienne} : \quad \| \cdot \|_2^{\Omega} = \left| \int_{\Omega} (u - u^*)^2 d\Omega \right|^{1/2} \quad (\text{Eq. 3-10})$$

où u est la solution analytique tandis que u^* est la solution numérique.

Pour un écoulement de Poiseuille, le champ de vitesse correspond à un profil quadratique et la solution numérique de la méthode des éléments finis est exacte pour des éléments d'interpolation quadratique. Pour un élément linéaire de type P1+-P0, la théorie des éléments finis montre que la norme de l'erreur de la solution numérique suit une asymptote quadratique en fonction de la taille de maille.

On a ainsi

$$\|u - u^*\|_2^{\Omega} = C_2 h^2, \quad (\text{Eq. 3-11})$$

$$\|u - u^*\|_{\infty}^{\Omega} = C_{\infty} h^2, \quad (\text{Eq. 3-12})$$

où h est la taille de maille, C_2 et C_{∞} sont des constantes pour une même famille de maillages.

À la figure 3-16, les courbes des normes infinies et euclidiennes de l'erreur en fonction de la taille de maille sont présentées pour le cas des maillages structurés et on remarque une convergence quadratique. Ces résultats valident les outils numériques utilisés pour le calcul des normes et ces courbes serviront de référence pour l'analyse des maillages raffinés structurés.

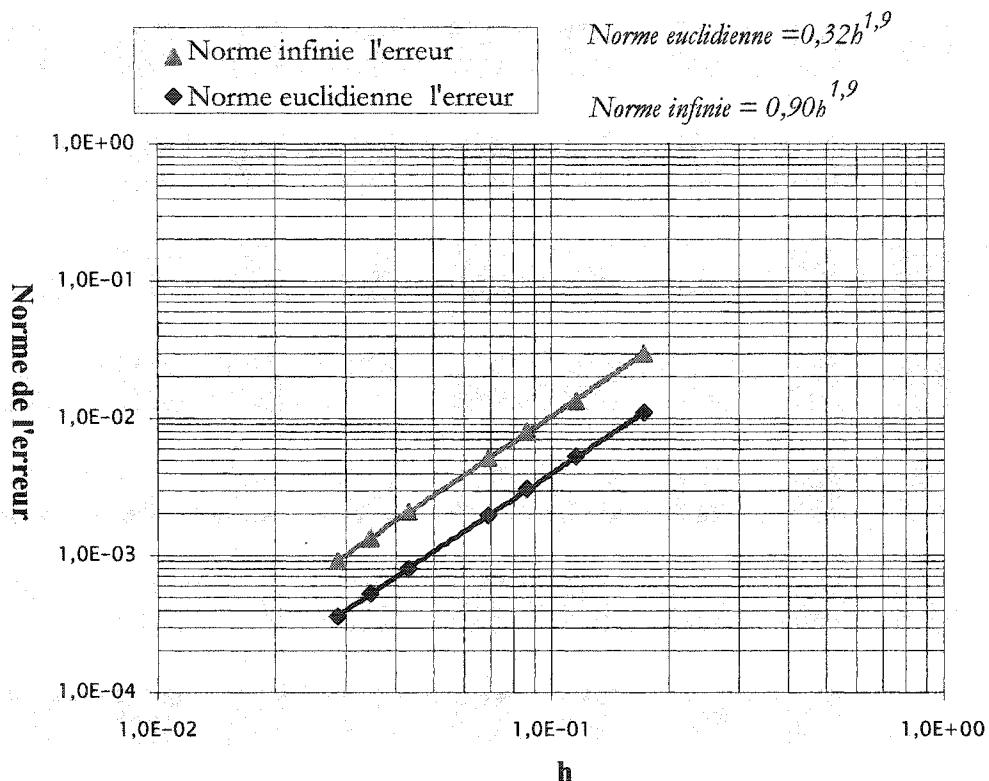


Figure 3-16 : Norme de l'erreur (maillage structuré sans raffinement)

Évaluation du critère de régularité χ pour le cas d'un tétraèdre régulier

Raffinement par les barycentres

Soit $\chi^{(i)}$, la valeur du critère de régularité pour le niveau de raffinement i , on a

$$\chi^{(i)} = \frac{\sqrt{2}}{12} \frac{(h_{\max}^{(i)})^3}{V_{R\uacute{e}el}^{(i)}} \quad (\text{Éq. 3-13})$$

On veut exprimer le rapport entre χ^i et χ^{i+1} dans le cas d'un tétraèdre régulier. Sachant que pour la décomposition barycentrique on a

$$V_{R\uacute{e}el}^{(i+1)} = V_{R\uacute{e}el}^{(i)} / 4 \quad (\text{Éq. 3-14})$$

et que la subdivision ne modifie pas la taille maximale des arêtes du maillage, on a aussi

$$h_{\max}^{(i+1)} = h_{\max}^{(i)} = h_{\max} \quad (\text{Éq. 3-15})$$

$$(\text{Éq. 3-16})$$

En substituant dans 3-13, on a

$$\chi^{(i+1)} = \frac{\sqrt{2}(h_{\max})^3}{V_{R\acute{e}el}^{(i)}/4} \quad (\text{Éq. 3-17})$$

et finalement

$$\boxed{\chi^{(i+1)} = 4 \cdot \chi^{(i)}}. \quad (\text{Éq. 3-18})$$

Pour la décomposition barycentrique, l'équation 3-18 indique que l'augmentation de χ est exponentielle, à chaque niveau de raffinement le critère régularité étant multiplié par 4.

Raffinement par les arêtes

Pour la décomposition par les arêtes d'un tétraèdre régulier, on sait que

$$V_{R\acute{e}el}^{(i+1)} = V_{R\acute{e}el}^{(i)} / 8 \quad (\text{Éq. 3-19})$$

et

$$h_{\max}^{(i+1)} = h_{\max}^{(i)} / 2. \quad (\text{Éq. 3-20})$$

En substituant 3-19 et 3-20 dans 3-12, on obtient

$$\chi^{(i+1)} = \frac{\frac{\sqrt{2}}{12} \left(h_{\max}^i / 2 \right)^3}{V_{R\acute{e}el}^{(i)}/8} = \frac{\frac{\sqrt{2}}{12} \left(h_{\max}^i \right)^3}{V_{R\acute{e}el}^{(i)}}, \quad (\text{Éq. 3-21})$$

d'où

$$\boxed{\chi^{(i+1)} = \chi^{(i)}}. \quad (\text{Éq. 3-22})$$

Pour la méthode de subdivision par les arêtes, l'expression 3-22 montre que le critère de régularité χ demeure constant avec le raffinement. Toutefois, ce dernier résultat se limite au cas d'un tétraèdre idéal et régulier. Dans le cas général, le raffinement par les arêtes génère une augmentation de χ puisqu'une des arêtes créées par la subdivision est légèrement plus grande que les arêtes de l'élément décomposé (arête en rouge sur la figure 3-17).

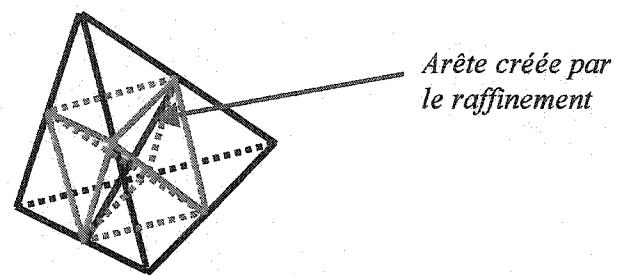


Figure 3-17 : Illustration de l'arête maximale pour le raffinement par les arêtes

La régularité χ est donc conservée seulement pour les éléments externes de la décomposition (les quatre coins). Remarquons toutefois que la perte en régularité n'est pas trop prononcée si l'élément raffiné est déjà de bonne qualité. De plus, lors de la création des quatre tétraèdres internes, il est possible de minimiser l'arête maximale en choisissant parmi les trois possibilités illustrées à la figure 3-18.

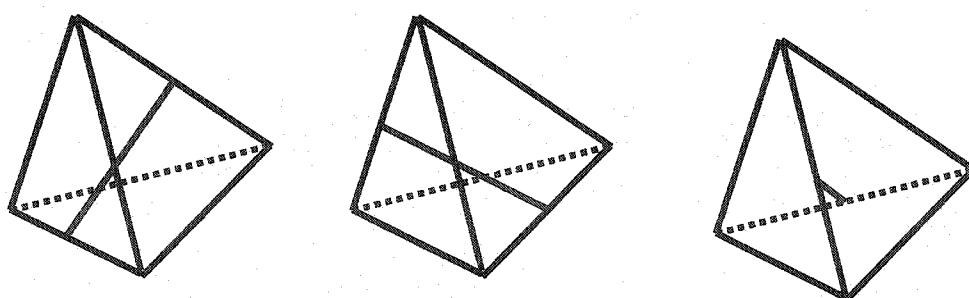


Figure 3-18 : Trois possibilités pour le choix de la plus grande arête

Influence du raffinement de maillage sur la régularité des maillages

La figure 3-19 illustre l'évolution de la moyenne du critère de régularité χ en fonction du niveau de raffinement pour les maillages structurés et non structurés du cube utilisé dans cette étude. On note qu'avec la subdivision barycentrique, le critère de régularité augmente de manière importante à chaque niveau de raffinement tandis que pour la méthode basée sur la décomposition des arêtes, la régularité augmente légèrement après chaque raffinement.

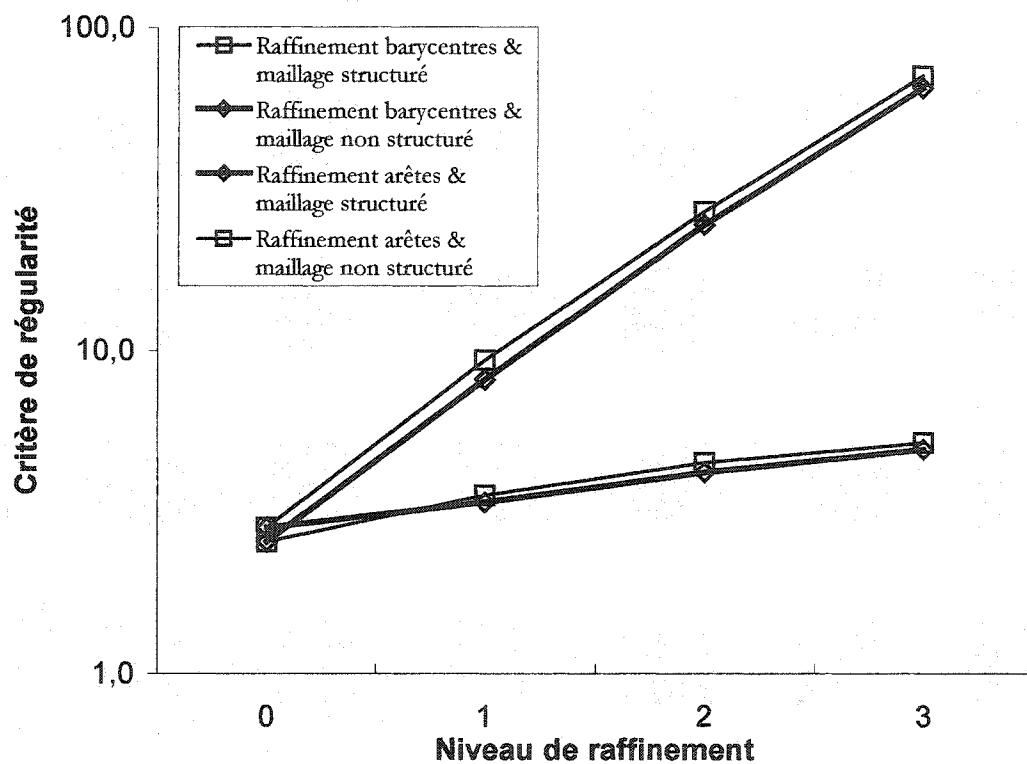


Figure 3-19 : Critère de régularité χ en fonction du niveau de raffinement de maillage

Influence du raffinement de maillage sur la précision numérique

Les normes de l'erreur ont été calculées pour les différents maillages et méthodes de raffinement dans le but de quantifier l'influence du raffinement sur la précision des simulations. L'idée est tout simplement de vérifier si les méthodes de raffinement permettent d'améliorer réellement la précision des solutions numériques qui est l'objectif du raffinement adaptatif de maillage.

Les figures 3-21 et 3-22 présentent la valeur des normes infinies et euclidiennes de l'erreur pour différentes tailles de maille moyenne avec les deux méthodes de raffinement et pour les deux types de maillage du cube.

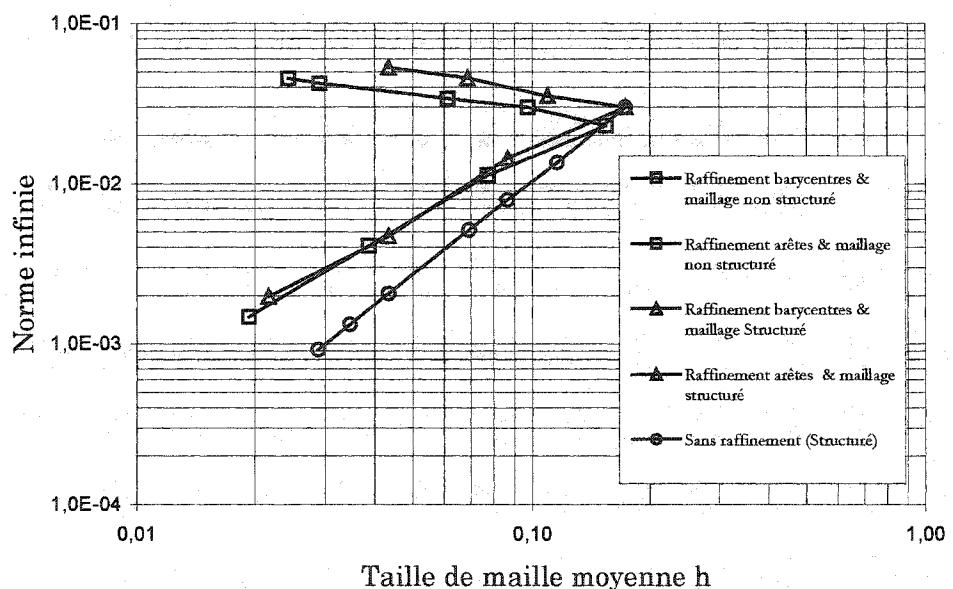


Figure 3-21 : Norme infinie de l'erreur pour différents maillages raffinés

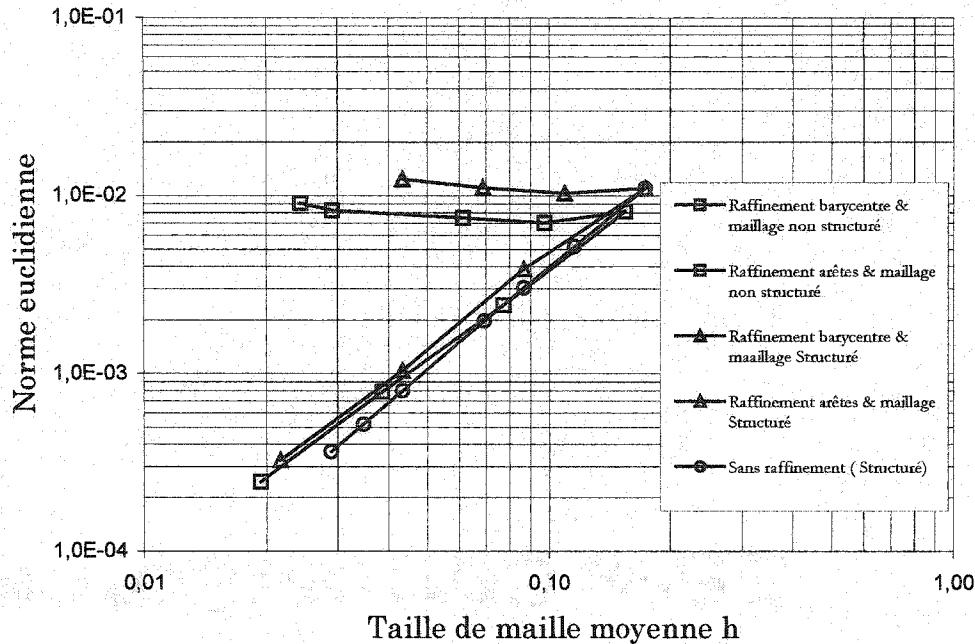


Figure 3-23 : Norme euclidienne de l'erreur pour différents maillages raffinés

L'analyse des normes de l'erreur en fonction de la taille de maillage montre que pour la méthode de raffinement basée sur les arêtes, l'erreur diminue avec la taille de maille tandis que pour la méthode basée sur le barycentre, l'erreur augmente lorsque la taille de maille diminue. Ainsi, seule la méthode basée sur la décomposition des arêtes permet de réduire l'erreur de la solution numérique et donc de répondre à l'objectif de raffinement de maillage. La légère perte de régularité pour la décomposition par les arêtes permet d'expliquer les écarts observés par rapport à la courbe de référence pour les maillages sans raffinement.

En résumé, cette étude montre que la méthode de raffinement par le barycentre détériore la précision des résultats numériques en raison de la perte de régularité des éléments, et ce, malgré l'augmentation du nombre de degrés de liberté pour le problème à résoudre. Avec la méthode par les arêtes, la régularité étant mieux conservée, le raffinement permet d'améliorer la solution numérique.

Conclusion sur les méthodes de raffinement en trois dimensions

Deux méthodes de raffinement de maillage basées sur la subdivision de tétraèdres ont été développées dans ce mémoire. La méthode basée sur les barycentres est simple à mettre en oeuvre, mais elle ne permet pas d'améliorer la précision de la solution, ce qui la rend inutile dans la pratique. La méthode basée sur les arêtes conserve la qualité du maillage, mais elle introduit des discontinuités qui sont incompatibles avec les éléments finis à pression discontinue utilisés dans POLY3D™. En trois dimensions, la nécessité d'assurer la continuité de la solution entre les faces des éléments restreint en effet le choix des fonctions d'interpolation compatibles avec cette méthode de raffinement.

4. Stratégie de partitionnement des entrefers

Les méthodes de raffinement adaptatif de maillage présentées au chapitre précédent s'avérant inefficaces pour la résolution des problèmes fluides, une solution de rechange a été mise au point pour générer les maillages de géométrie à faibles entrefers en trois dimensions. La stratégie proposée est basée sur le partitionnement efficace du volume du fluide dans le but de contrôler la position des nœuds et le nombre d'éléments du maillage dans certaines zones critiques de l'écoulement.

La méthode de partitionnement est réalisée avant la génération du maillage. Elle consiste à scinder judicieusement le domaine de calcul en plusieurs sous-volumes afin de spécifier une taille de maille adaptée à chacun des sous-volumes. La méthode de partitionnement est donc utilisée pour générer des maillages ayant une taille de maille non uniforme. De plus, les partitions ajoutent de nouvelles surfaces internes situées à l'intersection entre chacun des sous-domaine. Les algorithmes de maillage étant contraints de positionner des nœuds sur ces surfaces internes, les partitions permettent ainsi un certain contrôle de la position des nœuds du maillage.

La simulation de problèmes instationnaires à parties mobiles avec la méthode des éléments finis virtuels étant basée sur un seul maillage, la stratégie de partitionnement du maillage doit être adaptée pour tous les pas de temps. Dans ces conditions, le maillage de référence doit être partitionné en tenant compte de l'ensemble des positions possibles des parties mobiles et des entrefers.

Application : Ruban hélicoïdal dans une cuve agitée

Pour mettre en évidence les stratégies de partitionnement du maillage, considérons un système d'agitation étudié expérimentalement par Brito *et al.*(1992), composé d'un ruban hélicoïdal en rotation dans une cuve cylindrique (figure 4-1). Dans ce système, l'entrefer n'est pas aussi faible qu'en extrusion bivis mais on note quand même une différence d'échelle de 1 :16 entre la dimension de l'entrefer et le diamètre de la cuve. Cet exemple est toutefois utile pour mesurer l'influence des partitions du maillage, car des données expérimentales sont disponibles. La comparaison entre la puissance d'agitation calculée et la puissance d'agitation expérimentale permet de quantifier la qualité des résultats pour les différentes stratégies de partitionnement du volume.

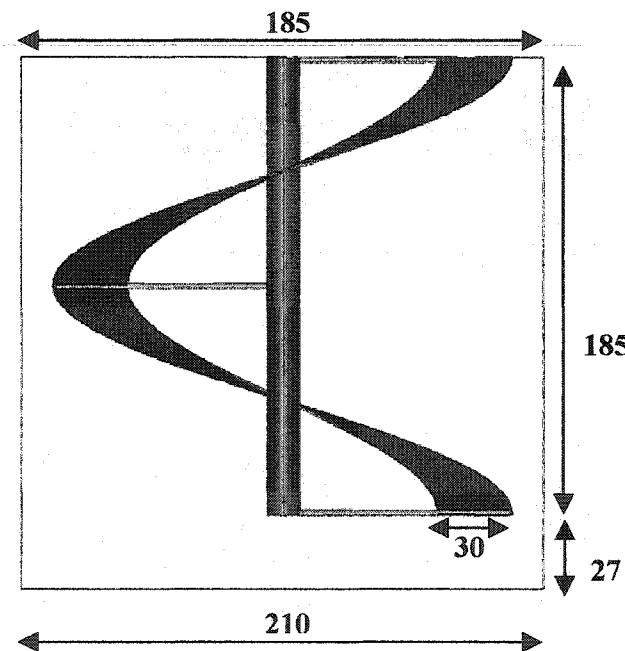


Figure 4-1 : Ruban hélicoïdal (dimensions en millimètres)

La simulation numérique de l'écoulement dans une cuve agitée est simplifiée par la présence d'un repère lagrangien pour lequel la résolution du problème se fait en régime permanent, en supposant un écoulement périodique (Tanguy *et al.*, 1992). Dans le repère de l'agitateur, la cuve est en rotation par rapport à l'agitateur et le volume du fluide reste inchangé dans le

temps. En considérant un écoulement établi, il suffit de résoudre un seul problème stationnaire.

La présence du repère lagrangien fait en sorte que la méthode des éléments finis virtuels n'est pas nécessaire pour traiter la partie mobile de ce système, car un seul maillage est suffisant pour modéliser l'écoulement du fluide en régime permanent. Il est toutefois intéressant de comparer les deux méthodes. Celles-ci ont été employées pour comparer deux stratégies de partitionnement des entrefers du maillage, soit le partitionnement de la paroi de cuve et le partitionnement du ruban hélicoïdal.

Avec différents maillages, l'écoulement isotherme d'un fluide newtonien ayant une viscosité de 1000 Pa s, une densité de 1000 kg/m³ et une vitesse de rotation du ruban de 10 tours/minutess a été calculé et la puissance d'agitation a permis de comparer les résultats.

Calcul de la puissance d'agitation

La puissance d'agitation est une donnée utile pour la validation des résultats numériques des systèmes d'agitation; elle peut être mesurée expérimentalement et elle s'obtient aussi à partir de la solution numérique du champ de vitesse.

La puissance est évaluée numériquement par

$$P = \int_{\Omega} \eta(\phi) \phi \, d\Omega, \quad (\text{Éq. 4-1})$$

où

$$\phi = \dot{\gamma} : \dot{\gamma}. \quad (\text{Éq. 4-2})$$

En utilisant l'analyse dimensionnelle, il est possible de comparer les résultats numériques et expérimentaux indépendamment du fluide et des conditions opératoires. La variable sans dimension K_p caractérise ainsi la puissance associée à un système d'agitation. Pour un fluide newtonien, on a

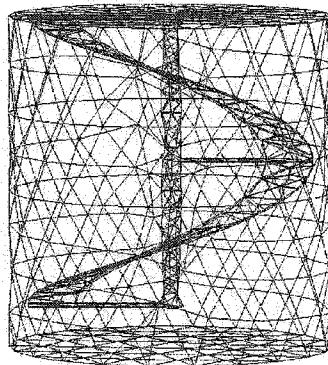
$$K_p = \frac{P}{\mu N^2 D^3}. \quad (\text{Éq. 4-3})$$

où P est la puissance d'agitation, μ la viscosité, N la vitesse d'agitation (tours/minute) et D le diamètre de l'agitateur. En régime laminaire, K_p est une constante géométrique qui caractérise la consommation de puissance associée à un système d'agitation.

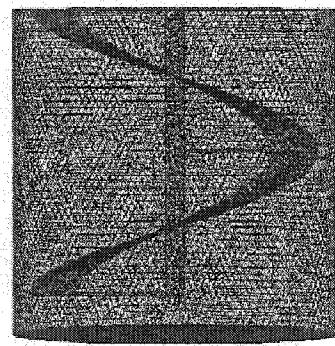
Puissance calculée avec les éléments finis classiques et virtuels

Dans un premier temps, la puissance d'agitation a été calculée pour des maillages sans partition afin de mesurer l'influence de la taille de maille sur la précision des solutions. Pour ce faire, plusieurs maillages avec différentes tailles de maille ont été générés pour les méthodes classique et virtuelle des éléments finis.

Avec les éléments finis virtuels, la discréttisation du système d'agitation est basée sur un maillage du volume de la cuve et un maillage de surface du ruban hélicoïdal. Le repère lagrangien a été utilisé à nouveau pour comparer l'approche classique avec la méthode des éléments finis virtuels.

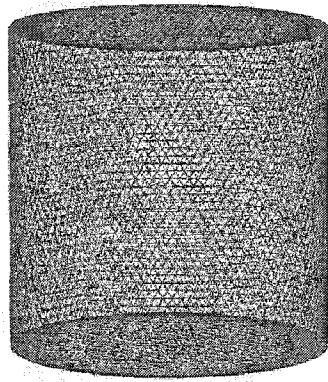


17 185 Éléments P1+P0
 $b = 15 \text{ mm}$

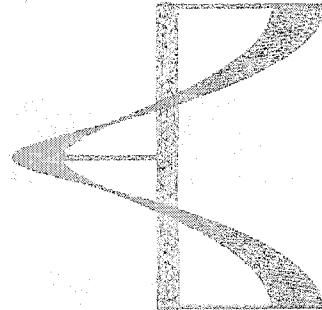


218 732 Éléments P1+P0
 $b = 5 \text{ mm}$

Figure 4-2 : Exemples de maillages avec les éléments finis classiques



Cuve
131 007 éléments P1+P0



Ruban hélicoïdal
1 806 points de contrôle virtuels

Figure 4-3 : Exemples de maillages avec les éléments finis virtuels

Les résultats du calcul de la constante K_p sont présentés au tableau 4-1. Ceux-ci montrent, comme prévu, que l'erreur sur K_p diminue avec la taille de maille et que, pour les maillages fins, la prédiction de la puissance est très proche de la valeur expérimentale, d'autant plus que celle-ci possède déjà une certaine incertitude.

Les résultats indiquent que la méthode des éléments finis virtuels permet d'obtenir des résultats comparables à la méthode classique, mais avec environ 50 % de plus d'équations. Lorsque la discréétisation est grossière, on note que l'erreur commise avec la méthode virtuelle est considérable, d'où l'importance d'utiliser un maillage bien adapté.

La régularité des éléments est meilleure pour la méthode virtuelle, car la géométrie de la cuve est simple. Avec la méthode classique des éléments finis, le maillage du volume du fluide peut être ardu en raison de la difficulté à prendre en compte la géométrie du ruban. Par exemple, l'épaisseur du ruban oblige le mailleur à traiter une surface mince et à y insérer des éléments plus ou moins aplatis. Dans ces conditions, il est difficile de maintenir bonne régularité des éléments du maillage. La méthode des éléments finis virtuels a donc l'avantage de ne pas présenter de difficulté importante pour la création de maillages réguliers.

Tableau 4-1 : Maillages et valeurs de Kp sans partitionnement du maillage

	Classique			Virtuelle		
Taille de maille (mm)	10	7,5	5	10	5	4
Nombre d'éléments	35 262	75 680	218 732	34 904	131 007	320 086
Nombre de nœuds	80 810	171 772	490 698	57 675	298 755	715 843
Nombre d'équations	218 142	472 105	1 378 792	153 719	818 288	2 027 438
Critère de régularité maximale	6000	2100	2600	13	11	8,1
Critère de régularité moyenne	3,2	2,7	2,6	2,3	2,1	2,5
Puissance (W)	25,9	24,7	23,9	30	26	23,5
Kp	147,3	140,4	135,9	170,6	147,8	133,6
$\frac{Kp - Kp_{exp}}{Kp_{exp}}$	9,1%	4,0%	0,7%	26,4%	9,5%	1,0%

Méthode de partitionnement du maillage

La consommation de puissance étant localisée près du ruban et dans l'entrefer, il est intéressant d'adapter les maillages par des partitions dans le but d'obtenir un niveau de précision comparable aux maillages fins, mais avec moins d'équations à résoudre. Deux stratégies de partition de maillage ont été expérimentées avec les méthodes des éléments finis classiques et virtuels, soit la partition du volume de la cuve en plusieurs cylindres concentriques et la partition du volume englobant le ruban hélicoïdal et l'entrefer. En spécifiant des tailles de mailles différentes pour chaque partition, les maillages créés sont alors fins près de la paroi de la cuve ou près de l'agitateur.

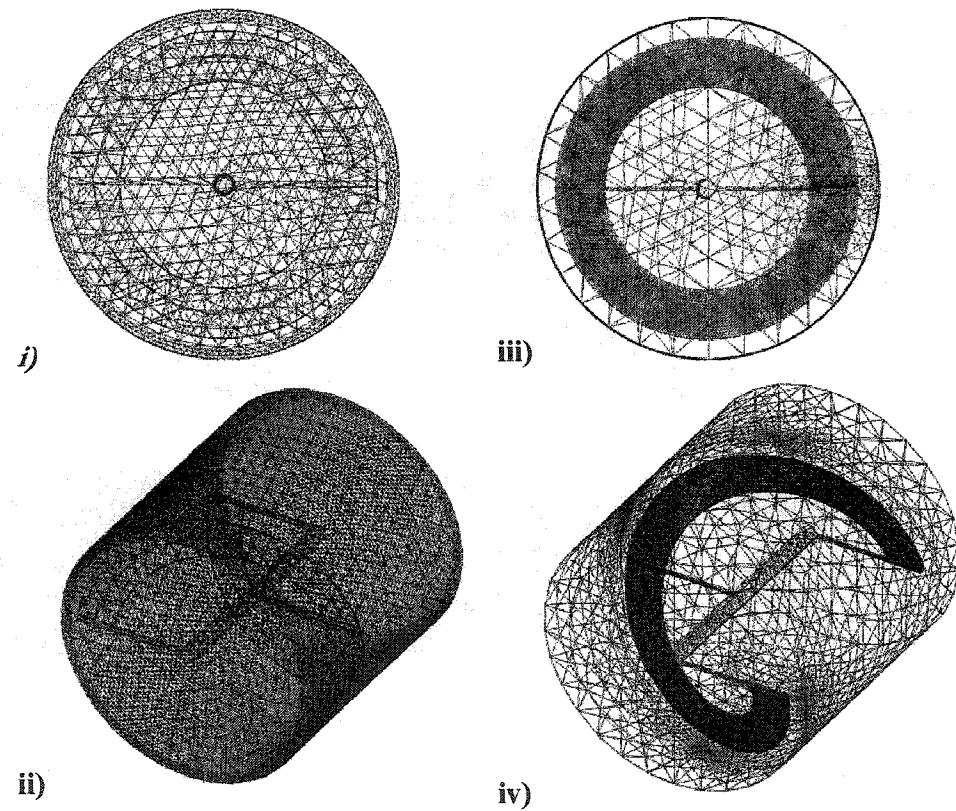


Figure 4-4 : Partitions du maillage pour un ruban hélicoïdal (éléments finis classiques)

- i) Maillage après partitionnement de la paroi de la cuve (Vue de haut)
- ii) Maillage après partitionnement de la paroi de la cuve (Vue isométrique)
- iii) Maillage après partitionnement près de l'agitateur (Vue de haut)
- iv) Maillage après partitionnement près de l'agitateur (Vue isométrique)

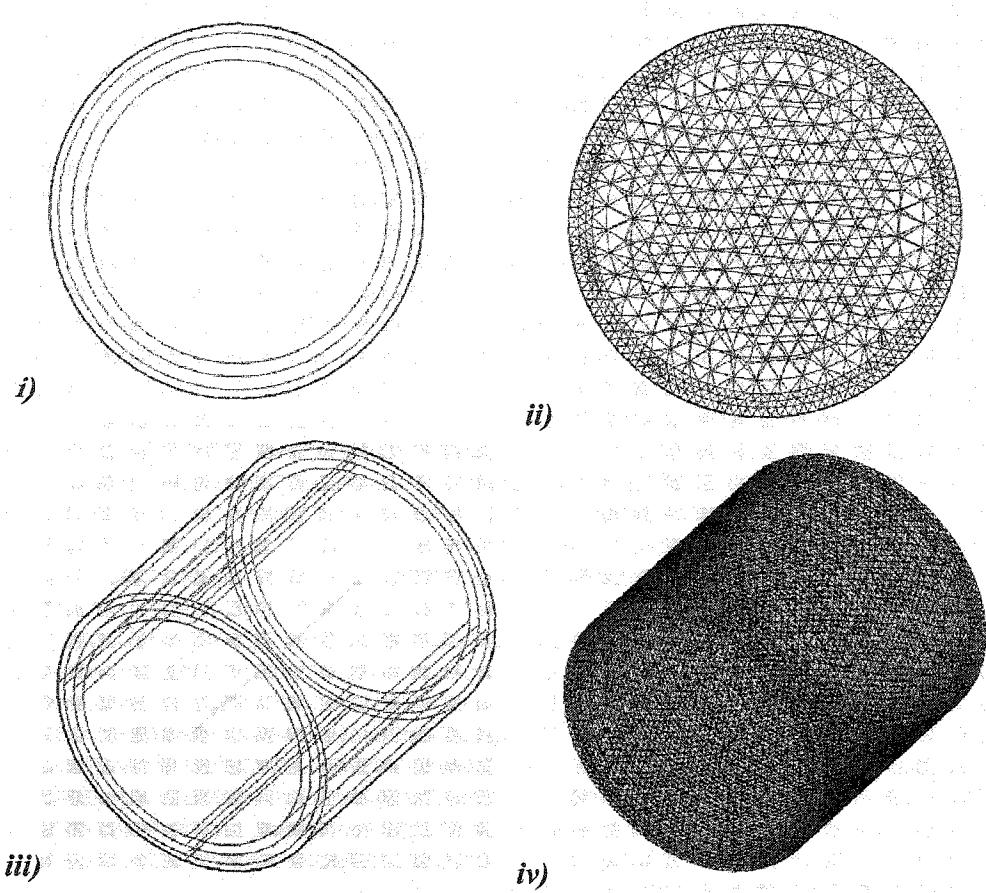


Figure 4-5 : Exemples de construction des partitions de la cuve et maillages résultants.

- i) Partitionnement de la cuve (Vue de haut),
- ii) Maillage de la cuve après partitionnement (Vue de haut),
- iii) Partitionnement de la cuve (Vue isométrique),
- iv) Maillage après partitionnement (Vue isométrique).

Le tableau 4-2 présente les informations sur les maillages avec partitions et les valeurs de K_p calculées par simulation. Pour les méthodes classique et virtuelle, le partitionnement au niveau de l'agitateur permet d'obtenir une puissance équivalente à celle d'un maillage fin, mais avec moins d'équations à résoudre. Pour la partition au niveau de la paroi de la cuve, l'erreur ne diminue pas significativement pour la méthode classique des éléments finis et il est probable que la valeur maximale du critère de régularité du maillage qui est particulièrement élevée en soit responsable.

Tableau 4-2 : Maillages et valeurs de K_p avec partitionnement du maillage

	Classique		Virtuel	
	Paroi de la cuve	Ruban	Paroi de la cuve	Ruban
Type de partition				
Taille de maille	Cuve : 15 mm Paroi : 5 mm	Cuve : 15 mm Ruban : 2 mm	Cuve : 15 mm Paroi : 5 mm	Cuve : 10 mm Ruban : 4 mm
Nombre d'éléments	51 561	72 005	37 318	76 361
Nombre de noeuds	123 078	175 390	85 196	171 916
Nombre d'équations	305 455	416 473	233 908	480 097
Critère de régularité maximale	1000	530	25	18
Critère de régularité moyenne	3,3	5,9	2,6	2,5
Puissance (W)	25,3	23,8	24,8	23,7
K_p	143,8	135,3	141,0	134,8
$\frac{K_p - K_{p_{exp}}}{K_{p_{exp}}}$	6,7%	0,2%	4,5%	0,2%

Somme toute, la comparaison entre les résultats des tableaux 4-1 et 4-2 montre que la stratégie de partitionnement, lorsque bien adaptée au problème à traiter, permet de réduire la taille des problèmes à résoudre tout en conservant la même précision.

5. Étude de cas : Extrusion bivis

La modélisation de l'écoulement en trois dimensions dans une extrudeuse bivis constitue un défi d'envergure pour les techniques de simulation numérique. Les différences d'échelles entre les dimensions géométriques requièrent l'utilisation de maillages très fins et les problèmes qui en découlent sont généralement fort coûteux en temps de calcul. Le maillage d'une extrudeuse entière peut aisément impliquer quelques centaines de millions d'équations. Il est donc impensable à l'heure actuelle de résoudre couramment ces problèmes, même avec des calculateurs très performants. Pour traiter des problèmes de dimensions plus raisonnables, moins de 3 millions d'équations, la modélisation se limite habituellement à seulement une portion d'extrudeuse bivis comprenant une ou plusieurs paires d'éléments de vis.

La modélisation de l'écoulement d'un fluide dans une paire d'éléments mélangeurs pour une extrudeuse co-rotative de type ZSK-30 a été effectuée dans le cadre de cette recherche en utilisant la méthode des éléments finis virtuels et la stratégie de partitionnement efficace du maillage.

Choix de conditions aux limites

En trois dimensions, le choix des conditions aux limites à l'entrée et à la sortie est problématique lorsque seulement une portion de l'extrudeuse est modélisée. Pour fixer un profil de pression ou de vitesse à l'entrée ou à la sortie du fourreau, il faut connaître a priori cette information, ce qui est rarement le cas en pratique où habituellement seuls le débit et la perte de charge sont connus. Sachant que l'écoulement en amont est fortement influencé par l'écoulement en aval, il est difficile de traiter les conditions aux limites sans approximations importantes sur les conditions d'entrée et de sortie. Pour imposer adéquatement des conditions aux limites en extrusion bivis, une modélisation du système d'extrusion complet serait nécessaire, comprenant la trémie d'alimentation et la filière d'extrusion.

Modélisation 3D d'une paire d'éléments mélangeurs

La géométrie et les dimensions de la section d'une extrudeuse ZSK-30 ont été présentées à la figure 1-1 du chapitre 1. En trois dimensions, les éléments mélangeurs sont obtenus en extrudant la section dans la direction axiale. Une profondeur est ainsi ajoutée au fourreau comme illustré à la figure 5-1.

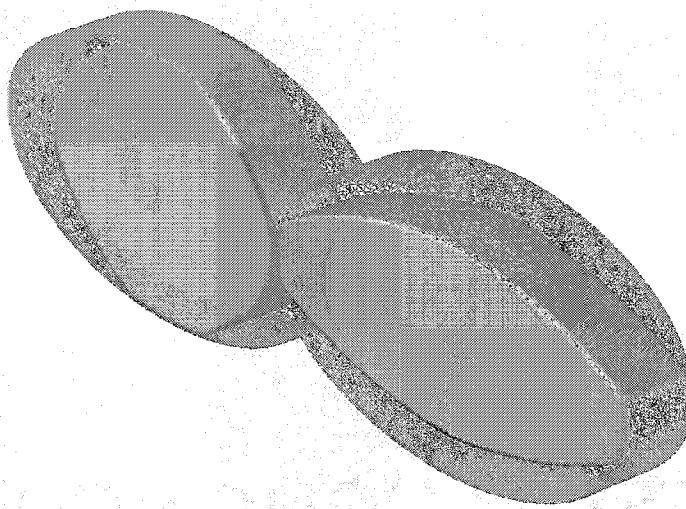


Figure 5-1 : Maillage d'une paire d'éléments mélangeurs en trois dimensions

Le problème considéré est un écoulement laminaire, isotherme et non inertiel pour un fluide newtonien et une extrudeuse pleine (Tableau 5.1). Le choix des conditions aux limites pour la composante axiale de la vitesse étant ambigu, un débit nul a été fixé comme conditions d'entrée et de sortie. Avec ce choix, l'extrudeuse bivis se réduit à un mélangeur interne, analogue aux carres triangulaires déjà étudiées, mais cette fois-ci avec de faibles entrefers. Cette simplification permet d'évaluer le cisaillement dans les entrefers qui est produit par la rotation des vis.

Tableau 5-1 : Conditions opératoires pour les éléments mélangeurs

Viscosité (Pa s)	1000 (Newtonien)
Masse volumique (Kg/m ³)	1000
Vitesse de rotation (RPM)	100

La méthode des éléments finis virtuels avec convergence partielle des solveurs itératifs a été utilisée pour résoudre ce problème instationnaire. Des déplacements de vis correspondant à une rotation de 3° ont été utilisés à chaque pas de temps et la résolution a été effectuée à l'aide du schéma de Gear.

Il est intéressant de remarquer que la géométrie des éléments mélangeurs à deux filets présente une symétrie très utile pour la simulation. Après une rotation d'un demi-tour, les vis reviennent à leur position initiale, ce qui permet de limiter les calculs à une demi-révolution des vis et de supposer par la suite une solution périodique de l'écoulement. Cette hypothèse, qui est valable pour un fluide visqueux en supposant un régime laminaire établi, nous a permis de faire les calculs avec 60 pas de temps au lieu de 120.

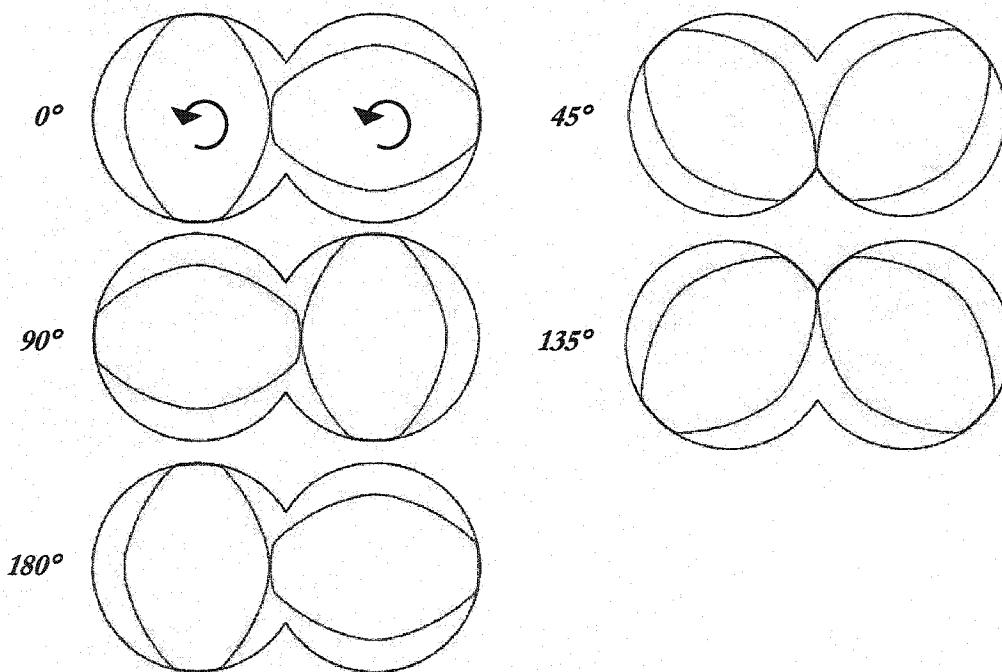


Figure 5-2 : Symétrie des éléments mélangeurs après une rotation de 180°

Maillage des faibles entrefers

Le maillage du fourreau présente des difficultés en raison des entrefers très faibles et de leurs déplacements avec la rotation des vis. Pour calculer avec précision l'écoulement dans les entrefers, un maillage avec une taille de maille très fine dans tout le fourreau serait idéal pour assurer une discrétisation toujours bien adaptée aux entrefers en déplacement.

L'estimation du nombre d'éléments nécessaires pour mailler finement l'ensemble du fourreau nous permet d'apprécier l'envergure d'un tel maillage. Le tableau 5-2 présente le nombre d'éléments nécessaire pour mailler le fourreau avec une taille de maille de 0.05 mm, permettant d'insérer au moins trois éléments dans les entrefers.

Tableau 5-2 : Estimation du nombre d'éléments pour un maillage très fin du fourreau

<u>Nombre d'éléments</u>	
2D	600 000
3D	30 000 000 /millimètre de profondeur

Ces estimations suggèrent qu'avec un maillage fin dans tout le fourreau, la taille du système d'équations à résoudre est démesurée en trois dimensions. Les extrudeuses mesurant au minimum un mètre, la résolution de milliards d'équations devrait être répétée pour les 60 pas de temps!

Une stratégie est donc nécessaire pour limiter la taille des problèmes tout en assurant une bonne description des entrefers. Étant donné que les méthodes de raffinement adaptatif de maillage ne sont pas efficaces en trois dimensions, la stratégie de partitionnement du maillage, présentée au chapitre 4, a été utilisée pour modéliser l'écoulement dans les éléments mélangeurs. Les résultats obtenus à l'aide de deux maillages générés avec le logiciel *IDEAS* ont été comparés, soit un maillage grossier et un maillage fin, avec partitionnement des zones de faibles entrefers.

Maillage grossier

Dans le cas du maillage grossier, la taille de maille est adaptée aux dimensions du fourreau et celle-ci est plus fine au niveau de la zone d'interpénétration (figure 5-3). Par contre, une seule bande d'éléments est présente dans les entrefers pour ce maillage grossier.

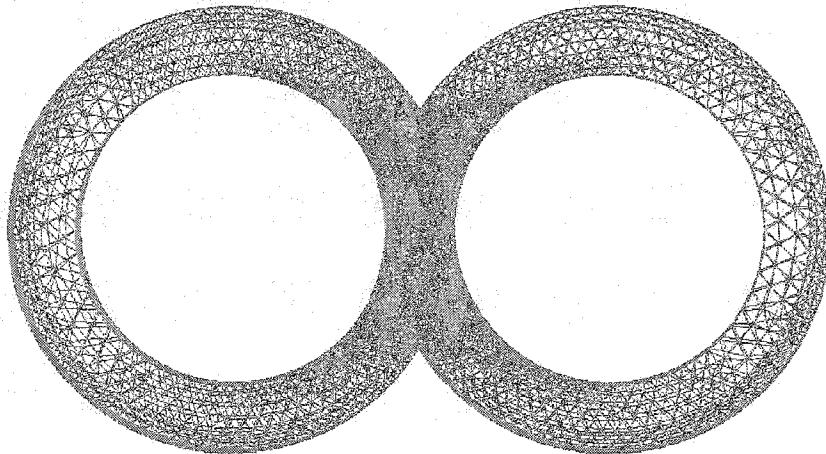


Figure 5-3 : Maillage grossier des éléments mélangeurs (66 439 éléments P1+-P0)

Maillage fin avec partitions des entrefers

Pour le maillage fin, la présence d'entrefers très faibles est prise en compte avant la génération du maillage, par la méthode de partitionnement du volume. La figure 5-4 montre le maillage obtenu avec la méthode de partitionnement, où les régions d'entrefers vis-fourreau et vis-vis sont discrétisées très finement.

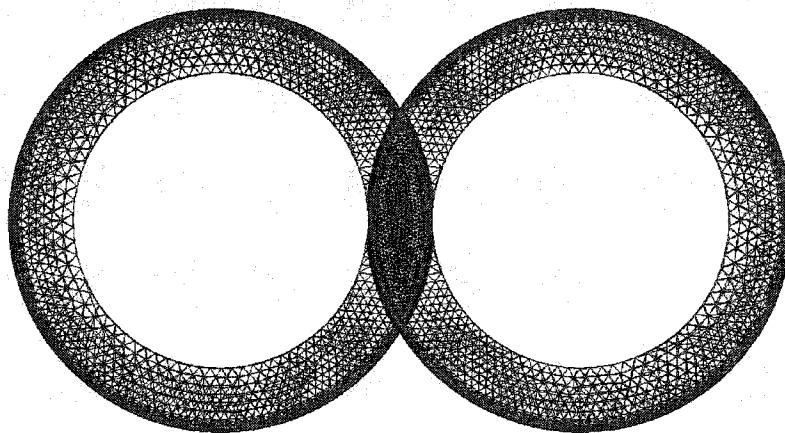
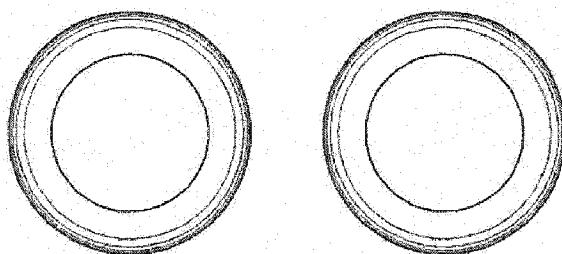


Figure 5-4 : Maillage fin avec partitionnement (334 869 éléments P1+-P0)

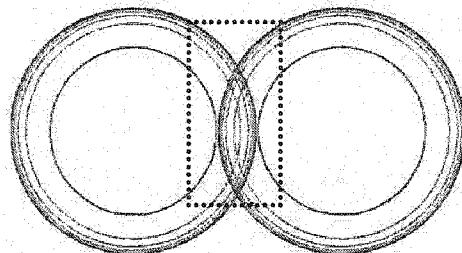
Rappelons que le partitionnement du fourreau dans les régions de faibles entrefers constraint les algorithmes de maillage à insérer des éléments dans chacun des sous-volumes et à mettre des nœuds sur chaque surface interne des partitions. Les partitions permettent ainsi de contrôler le nombre d'éléments et la position des nœuds dans les entrefers.

La construction des partitions du fourreau se fait de manière analogue aux partitions utilisées pour la paroi de la cuve du ruban hélicoïdal. Elle consiste à générer des sous-volumes près des parois et dans la zone d'interpénétration des vis. Dans un premier temps, des cylindres sont utilisés pour représenter chaque demi-fourreau et des partitions sont créées sur ces cylindres au niveau des entrefers vis-fourreau (figure 5-5.i). Ensuite, le volume du fourreau est construit avec l'addition des deux cylindres et la zone d'interpénétration est alors bien adaptée aux positions des deux vis. (figure 5-5.ii et 5-5.iii). Cette méthode de construction permet d'assurer la présence de partitions dans les entrefers pour toutes les positions possibles des vis en rotation.

i)



ii)



iii)

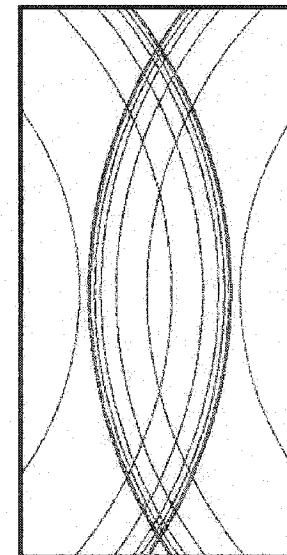


Figure 5-5 : Construction des partitions avant la création du maillage

- i) Partitionnement des deux demi-fourreaux,
- ii) Addition des deux demi-fourreaux
- iii) Partitionnement dans la zone d'interpénétration des vis

À la figure 5-6, certaines zones du maillage fin avec partitions sont agrandies, ce qui permet d'observer la présence de plusieurs bandes d'éléments au niveau des entrefers. On remarque aussi la transition rapide et assez régulière entre les régions fines et grossières.

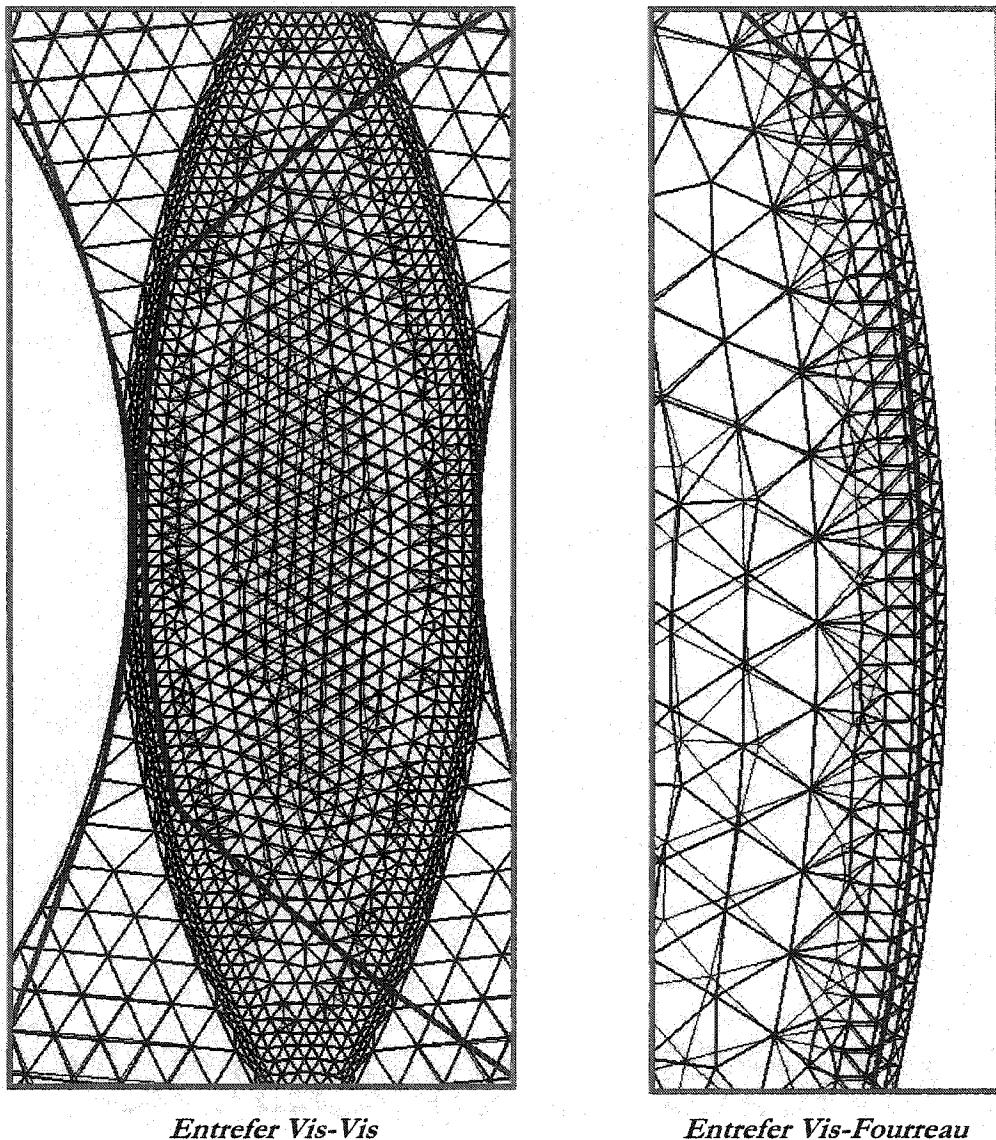


Figure 5-6 : Agrandissement du maillage avec partitionnement du fourreau

Résultats numériques

Les informations sur les maillages et les résultats des simulations numériques sont présentés au tableau 5-3. Les calculs ont été réalisés avec un calculateur IBM HPC690, à 16 processeurs et 32 GB de mémoire. Pour le maillage grossier, le temps de calcul est de quelques jours tandis que pour le maillage fin, le temps de calcul est de l'ordre de 20 jours.

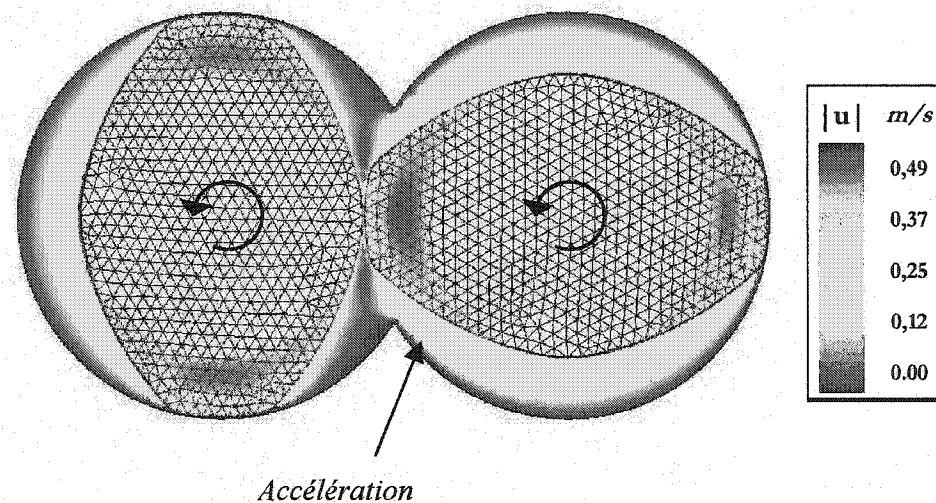
Tableau 5-3 : Paramètres et résultats des simulations pour les éléments mélangeurs

	<i>Maillage grossier</i>	<i>Maillage fin avec partitions</i>
Profondeur du fourreau	5 mm	1,25 mm
Nombre d'éléments	66 439	334 869
Nombre de nœuds	155 130	765 501
Nombre d'équations	422 496	2 181 344
Nombre de points de contrôle virtuels	4 344	1048
Nombre de pas de temps	60	60
Temps de calcul approximatif	32 heures	500 heures
Écart maximal de la vitesse aux points de contrôle, 1 ^{er} pas de temps (m/s)	3,94E-02	7,97E-03
Écart moyen sur vitesse aux points de contrôle, 1 ^{er} pas de temps (m/s)	1,33E-03	8,68E-04
Valeur maximale de la vitesse, 1 ^{er} pas de temps (m/s)	0,49	0,20

Notons que la profondeur du fourreau est différente pour les deux maillages utilisés. Il s'est avéré impossible de produire un maillage fin avec une profondeur de 5 mm, car plus d'un million d'éléments auraient été nécessaires pour un tel maillage. C'est pourquoi dans le cas du maillage fin, seulement le quart de l'épaisseur du fourreau et des vis a été considéré, soit 1.25 mm.

Profil de vitesse

Pour le maillage grossier, les résultats du tableau 5-3 indiquent une valeur maximale de vitesse à l'intérieur du fourreau de 0.49 m/s, soit une vitesse environ trois fois supérieures à la vitesse périphérique en bout de vis, qui est de 0.17 m/s. À la figure 5-7, la norme de la vitesse sur un plan de coupe au centre du fourreau montre que cette vitesse maximale est située à l'intérieur des vis virtuelles, près des entrefers. Cette observation est importante, car la solution cherchée se trouve à l'extérieur des vis et le comportement de la vitesse à l'intérieur des vis est un artéfact numérique sans importance.



**Figure 5-7 : Norme de la vitesse au 1^{er} pas de temps pour le maillage grossier
(Plan de coupe au centre du fourreau avec vis virtuelles superposées)**

Pour la norme de la vitesse à l'extérieur des vis, on note une valeur maximale d'environ 0.22 m/s, située de part et d'autre de la vis se trouvant dans la zone d'interpénétration. À ces endroits, la vitesse est plus importante que la vitesse périphérique, ce qui correspond à une accélération du fluide en réponse aux mouvements combinés des deux vis.

Les résultats pour le maillage fin avec partitions du fourreau sont illustrés à la figure 5-8. La vitesse maximale est encore une fois située de chaque côté de la vis dans la zone d'interpénétration. L'utilisation du maillage fin avec partitions permet aussi d'éliminer la présence de vitesses élevées à l'intérieur des vis qui sont observées avec le maillage grossier.

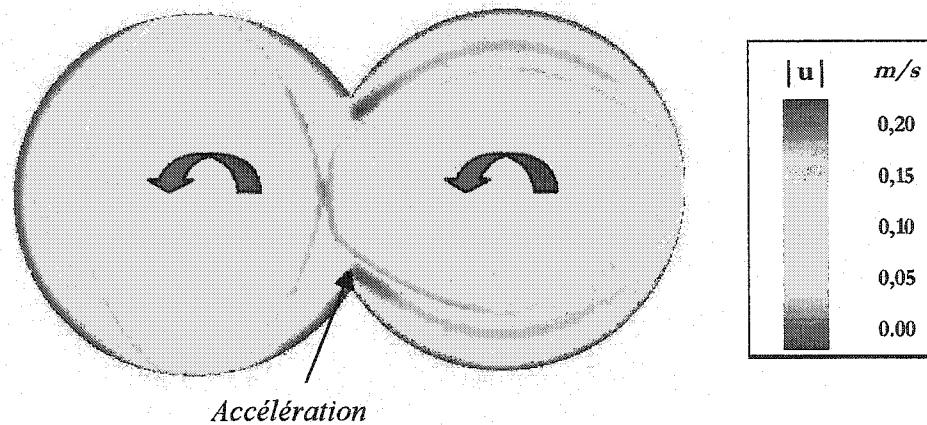


Figure 5-8 : Norme de la vitesse au 1^{er} pas de temps pour maillage avec partitions
(Plan de coupe au centre du fourreau)

La figure 5-9 compare sur un plan de coupe, la composante v de la vitesse dans la région d'interpénétration des vis, obtenue pour les maillages fin et grossier. Pour ces deux maillages, les profils de vitesse dans l'entrefer sont comparables, mais dans le cas du maillage fin, les gradients de vitesse entre les deux vis semblent mieux définis en raison de la présence d'un nombre élevé d'éléments dans cette région.

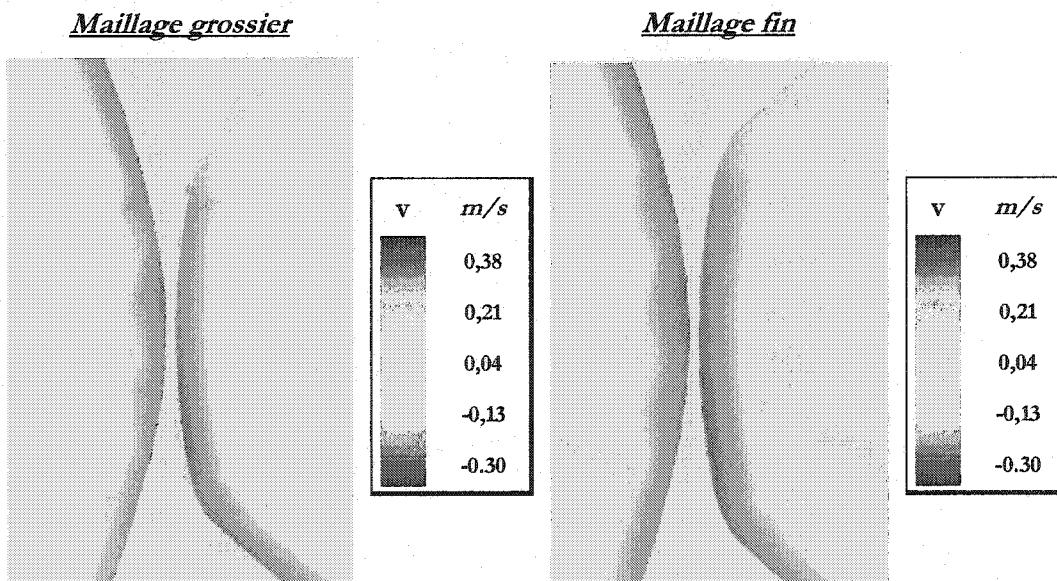


Figure 5-9 : Composante v de la vitesse dans la zone d'interpénétration.

Profil de pression

Les figures 5-10 et 5-11 montrent un plan de coupe du profil de pression au premier pas de temps pour les deux maillages. Comme prévu, des zones de compression et de dépression du fluide sont présentes de chaque côté des vis en raison de leur rotation à l'intérieur du fourreau.

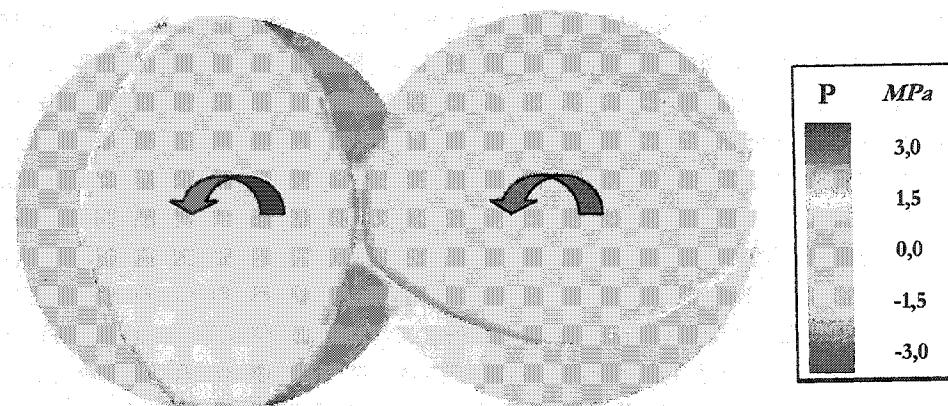


Figure 5-10 : Profil de pression, 1^{er} pas de temps, Maillage grossier, Plan de coupe

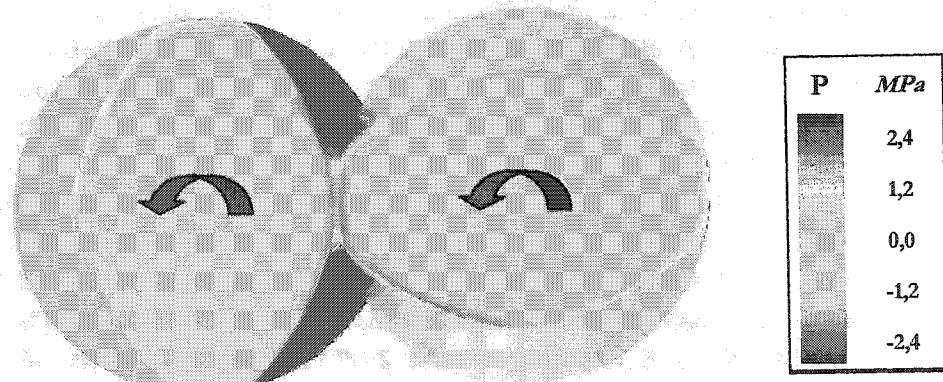


Figure 5-11 : Profil de pression, 1^{er} pas de temps, Maillage fin, Plan de coupe

La figure 5-12 montre le graphique de la valeur de la pression sur un point de mesure situé à l'intersection des deux demi-fourreaux. Ce graphique permet de comparer les résultats des deux maillages en fonction de l'angle de rotation des vis.

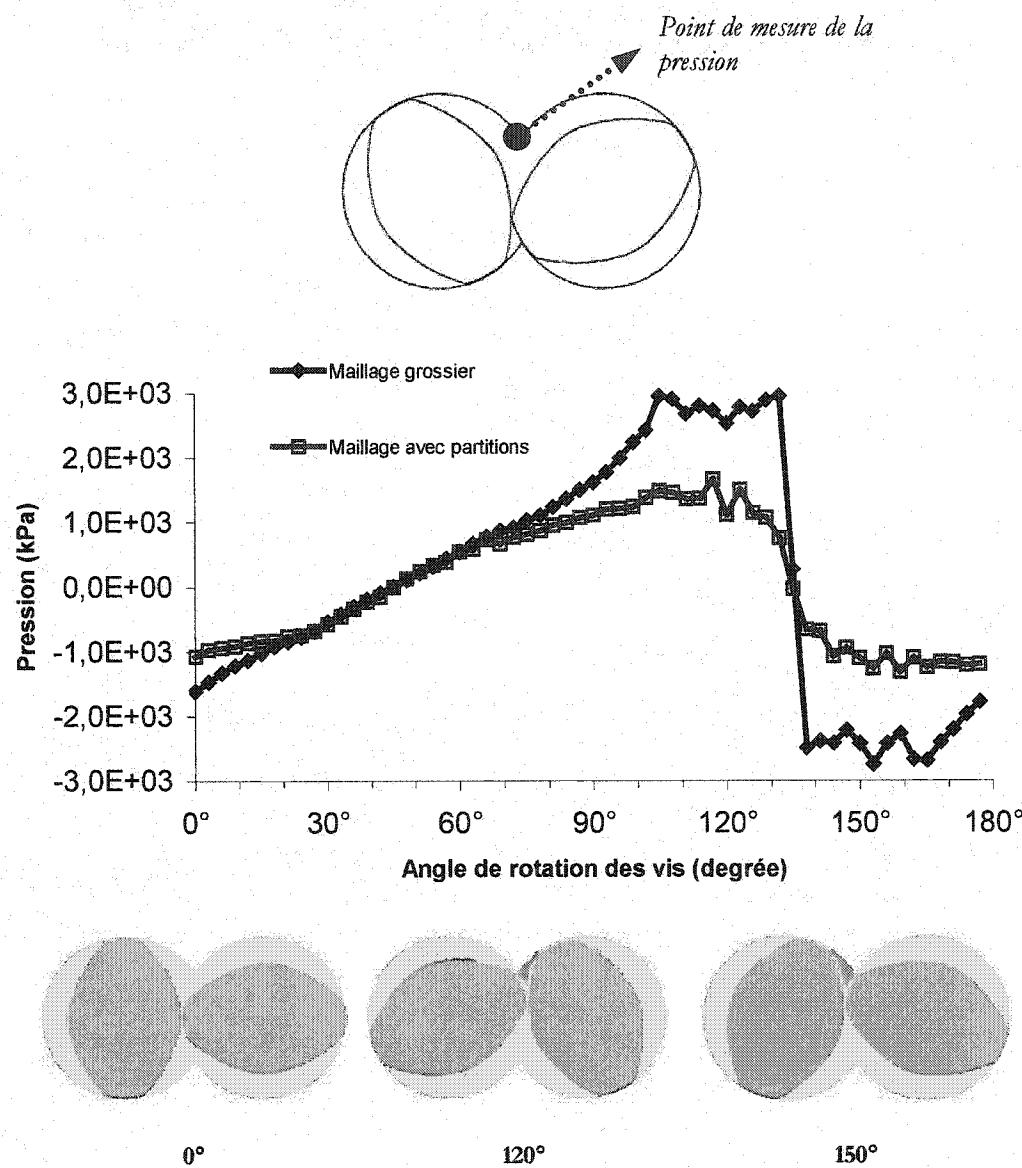


Figure 5-12 : Profil de pression en fonction de la position des vis.

Pour les deux maillages, les profils de pression de la figure 5-12 montrent qu'avant le passage des vis, le fluide subit une compression. Après le passage des vis près du point de mesure, une dépression soudaine est produite et une pression de même intensité, mais de signe opposé, est observée. Par la suite, la compression du fluide recommence jusqu'au prochain passage des vis. L'amplitude de la pression est fort différente entre les deux maillages, la pression maximale du maillage grossier étant quasiment trois fois plus élevée que celle du maillage fin avec partitions. Ces différences apparaissent lorsque les vis sont près du point de mesure. Après 30° et 60° de rotation, les vis sont loin du point de mesure et les valeurs de pression sont semblables entre les deux maillages tandis que pour les autres positions, le point de mesure est près des entrefers et des différences sont observées. Ces différences s'expliquent par une description plus précise des entrefers dans le cas du maillage fin, ce qui permet une meilleure modélisation de la pression dans le système. La courbe du maillage fin est plus régulière et elle présente moins d'oscillations de la pression lors du passage des vis.

Bien que les profils de pression correspondent qualitativement aux mesures expérimentales disponibles dans la littérature, la validation à partir de données expérimentales serait utile pour bien évaluer la qualité des résultats obtenus par la simulation numérique. À cet effet, comme mentionné au chapitre 1, McCullough et Hilton (1993) ont publié des mesures de pression en fonction de la rotation des vis pour des éléments mélangeurs avec une extrudeuse ZSK-30. Par contre, un polymère fondu dont la rhéologie est non newtonienne a été utilisé pour ces mesures et la simulation d'une loi de viscosité fortement non linéaire augmente les difficultés et la charge de calculs des méthodes numériques. Compte tenu des temps de calculs d'un écoulement newtonien, il nous apparaissait prématuré de réaliser des simulations avec des rhéologies non newtoniennes, car le traitement des non linéarités est très coûteux en temps de calcul. Mentionnons que pour le cas bidimensionnel, Bertrand *et al.* (2003) ont validé les simulations numériques en extrusion bivis avec ces mesures expérimentales et des résultats satisfaisants ont été obtenus.

Profil de cisaillement

Connaissant le champ de vitesse dans le fourreau, il est possible de calculer le cisaillement qui est appliqué sur le fluide par les vis en rotation. Le tenseur de vitesse de cisaillement est évalué numériquement par l'expression

$$\underline{\dot{\gamma}} = \frac{1}{2} [\underline{\text{grad } v} + (\underline{\text{grad } v})^T]. \quad (\text{Éq. 5-1})$$

Les composantes dominantes du tenseur de vitesse de cisaillement sont données par les composantes en x et en y de la vitesse, le maximum étant obtenu pour $\dot{\gamma}_{xy}$. Les figures 5-13 et 5-14 montrent le profil de vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}_{xy}$ sur un plan de coupe pour les deux maillages. Notons que des coordonnées cylindriques seraient utiles pour caractériser le cisaillement $\dot{\gamma}_{r\theta}$, mais la forme en huit du fourreau est mal adaptée à ces coordonnées.

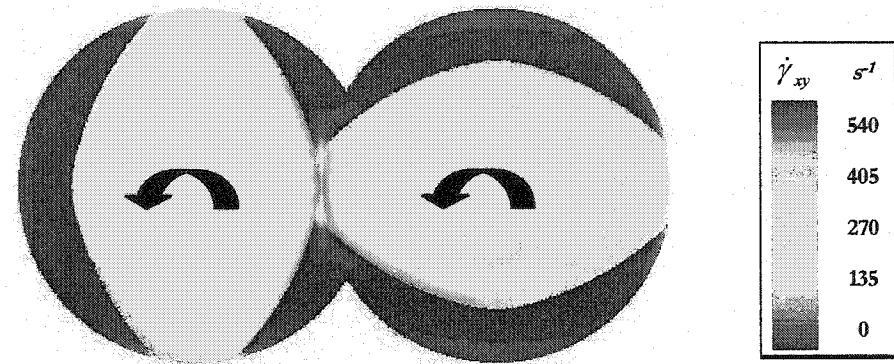


Figure 5-13 : Vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}_{xy}$ (Maillage grossier)

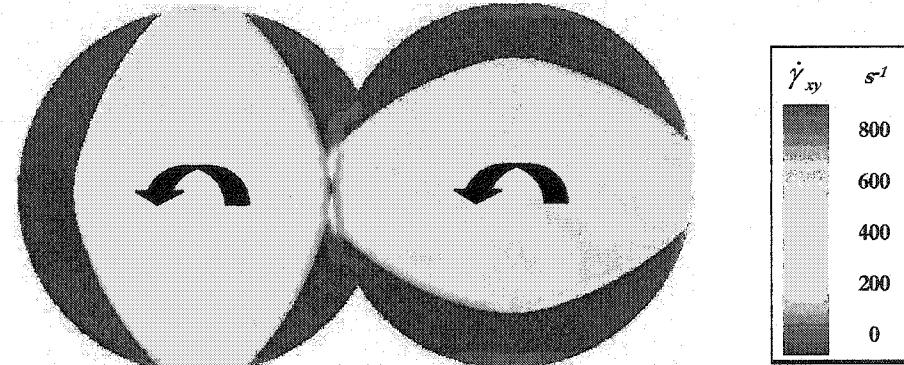
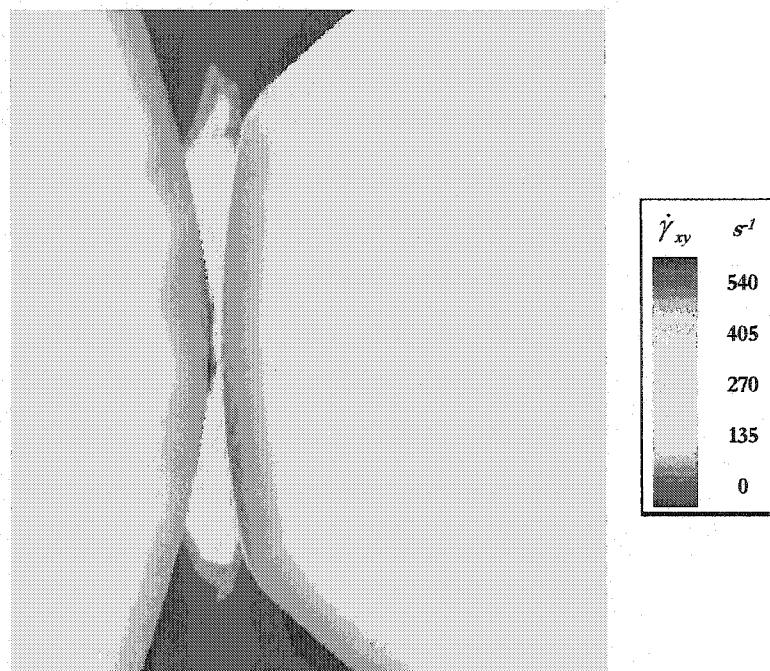


Figure 5-14 : Vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}_{xy}$ (Maillage Fin)

Les figures 5-15 et 5-16 présentent la composante $\dot{\gamma}_{xy}$ dans les entrefers vis-vis et vis-fourreau.

i)



ii)

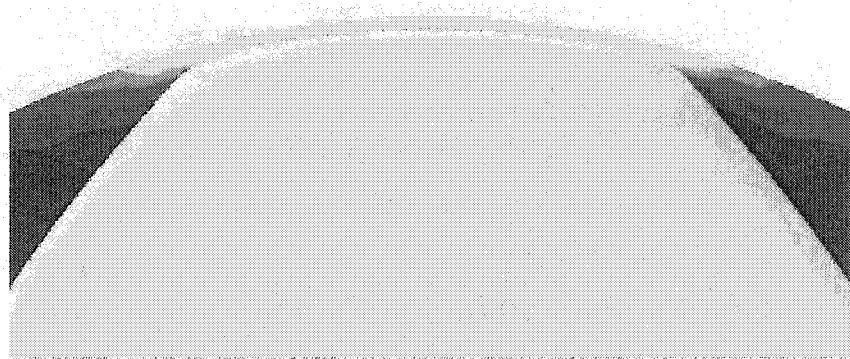
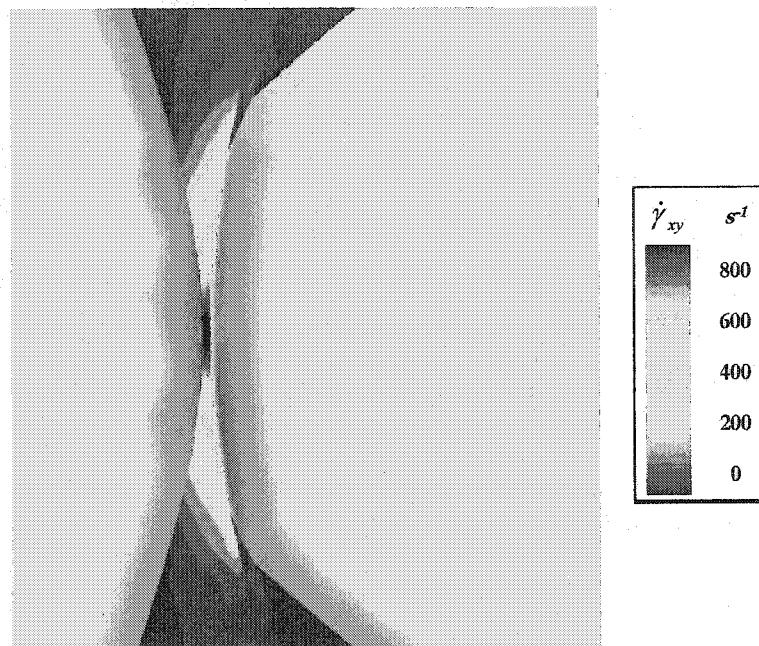


Figure 5-15 : Composante $\dot{\gamma}_{xy}$ dans les entrefers (Maillage Grossier)

- i) Entrefer Vis-Vis
- ii) Entrefer Vis-Fourreau

Comme on s'y attend, la valeur maximale de la composante $\dot{\gamma}_{xy}$ est située dans l'entrefer entre les deux vis, où les gradients de vitesse sont les plus prononcés en raison de la rotation en direction opposée des éléments mélangeurs.

i)



ii)



Figure 5-16 : Composante $\dot{\gamma}_{xy}$ dans les entrefers (Maillage fin)

- i) Entrefer Vis-Vis
- ii) Entrefer Vis-Fourreau

Pour valider les valeurs de la composante $\dot{\gamma}_{xy}$ calculées par les simulations, il est possible de les comparer avec celles données par l'approximation de la vitesse de cisaillement simple entre deux plans parallèles, basé sur la dimension des entrefers et la vitesse des vis.

Les résultats du tableau 5-4 montrent que les vitesses de cisaillements calculées par simulation sont du même ordre de grandeur que celles obtenues avec le calcul de la vitesse de cisaillement simple entre deux plans parallèles. En prenant cette vitesse de cisaillement entre deux plans comme référence, on constate que la vitesse de cisaillement calculée est plus grande pour le maillage fin, tandis que c'est le contraire pour le maillage grossier. Pour ce dernier, il est probable que le manque de résolution dans les entrefers soit responsable par sa mauvaise estimation de la vitesse de cisaillement.

Tableau 5-4 : Comparaison des valeurs de la vitesse de cisaillement (s⁻¹)

	Vis-Vis	Vis-Fourreau
Cisaillement entre 2 plans parallèles	682	533
Maillage grossier	540	400
Maillage fin avec partitions	760	570

Conclusion sur la modélisation de l'extrusion bivis

La simulation de l'écoulement d'un fluide dans une extrudeuse bivis a permis de constater que le temps de calcul est une contrainte importante pour la modélisation précise de l'écoulement dans les entrefers. Un maillage fin et de très grande taille est nécessaire pour bien prédire le comportement du fluide dans ces entrefers. Les résultats obtenus pour le maillage grossier sont toutefois intéressants, car qualitativement, ils sont comparables aux résultats du maillage fin. Somme toute, cette étude de cas illustre bien le potentiel de la méthode des éléments finis virtuels et des techniques de partitionnement de maillage pour prédire la vitesse de cisaillement du fluide dans les zones de faible entrefer en déplacement qui est une information importante pour estimer l'usure des éléments de vis.

6. Conclusion

Cette recherche avait pour objectif de développer et mettre en pratique une stratégie pour modéliser en trois dimensions l'écoulement de fluide dans des géométries à faible entrefer et à parties mobiles. Il existait un double défi lié d'une part à la géométrie instationnaire et d'autre part à la taille des maillages nécessaires pour prendre en compte adéquatement ces entrefers. Dans cette étude, une stratégie basée sur la méthode des éléments finis virtuels et le partitionnement du maillage a été proposée pour modéliser l'écoulement dans de faibles entrefers. Concrètement, cette stratégie a été expérimentée dans le cas d'un mélangeur interne, d'un ruban hélicoïdal et d'une extrudeuse bivis.

La méthode des éléments finis virtuels a été utilisée pour prendre en compte les parties mobiles dans les géométries considérées. L'avantage de cette technique réside dans le fait qu'un seul maillage est nécessaire, ce qui évite la fastidieuse tâche de générer des maillages pour chacun des pas de temps. Dans cette recherche, la convergence partielle des solveurs itératifs a été utilisée afin d'accélérer la résolution numérique de la méthode des éléments finis virtuels, ce qui a permis de réduire significativement le temps de calcul pour cette méthode. En pratique, la modélisation numérique de la dispersion pour les cames triangulaires a permis de valider en trois dimensions la méthode des éléments finis virtuels dans un contexte simplifié d'extrusion bivis où les entrefers n'étaient pas trop faibles.

Pour prendre en compte la présence d'entrefers très faibles en déplacement, des méthodes de raffinement local et adaptatif de maillage, basées sur la décomposition par les barycentres et par les arêtes, ont été développées pour le cas de tétraèdres. Cette recherche a montré que ces deux techniques sont inefficaces pour traiter des problèmes d'écoulement de fluide avec des éléments finis à pression discontinue en trois dimensions. D'un côté, la méthode de raffinement par le barycentre compromet de manière trop importante la qualité du maillage et la précision des solutions numériques est moins bonne après le raffinement. D'un autre côté, la méthode de raffinement par les arêtes introduit des discontinuités dans

la topologie du maillage et le traitement de ces discontinuités peut être réalisé seulement pour des bases complètes d'interpolation par éléments finis. Cette restriction rend incompatible le raffinement adaptatif pour les problèmes fluides à pression discontinue qui utilisent des bases incomplètes.

Une taille de maille très fine étant nécessaire pour mailler de faibles entrefers, une solution de rechange aux méthodes de raffinement de maillage a été développée pour limiter la taille des problèmes à résoudre. La méthode de partitionnement efficace du domaine a été utilisée pour contrôler la position des nœuds et la taille des éléments lors de la création du maillage. Le potentiel de cette méthode a été démontré et validé avec l'étude de la puissance d'agitation pour un ruban hélicoïdal dans une cuve agitée.

Finalement, l'étude de l'écoulement dans une extrudeuse bivis a montré la capacité de la stratégie de partitionnement du maillage combinée à la méthode des éléments finis virtuels pour modéliser les systèmes à faible entrefer en déplacement. Néanmoins, même avec des calculateurs très performants, le coût des calculs constitue toujours une contrainte majeure dans la réalisation des simulations en trois dimensions de l'écoulement dans les extrudeuses bivis. Plusieurs simplifications sont nécessaires pour permettre un temps de calcul raisonnable et celles-ci rendent difficiles la validation des simulations en extrusion bivis.

Dans le futur, plusieurs améliorations peuvent être envisagées pour résoudre des problèmes de plus en plus volumineux avec la méthodologie proposée dans cette recherche. Pour réduire la taille des problèmes, il serait entre autre fort approprié de mettre au point une méthode de raffinement adaptatif de maillage en trois dimensions pour des bases d'interpolations incomplètes à pression discontinue. L'utilisation de bases d'éléments finis complètes, à pression continue serait une possibilité intéressante, par exemple en implantant dans POLY3D™ l'élément finis P2-P1 à dix nœuds de Taylor-Hood.

Dans le but d'accélérer les calculs, des méthodes efficaces de parallélisation seraient utiles pour distribuer les calculs sur plusieurs processeurs. À cet effet, les méthodes de

décomposition de domaine semblent tout à fait appropriées pour la simulation de l'extrusion bivis. La modularité des éléments de vis utilisés en extrusion bivis rend naturelle la décomposition du fourreau en plusieurs sous-domaines, composés d'un ou de plusieurs éléments de vis. Par contre, cette méthode est encore difficile à mettre en pratique de manière efficace et performante. Des améliorations informatique et mathématique sont encore nécessaires pour permettre d'exploiter cette stratégie pour la résolution de problèmes d'écoulement industriel concrets.

En conclusion, la stratégie proposée dans cette recherche permet d'améliorer la compréhension du comportement d'un fluide dans des entrefers en déplacement. Par contre, la précision des résultats est limitée en pratique par le temps de calcul, la mémoire et l'espace disque nécessaire. Heureusement, l'amélioration continue des performances des ordinateurs permet d'être optimiste face aux perspectives futures de modélisation des systèmes complexes tels les procédés d'extrusion bivis.

7. Références

1. AVALOSSE, TH. CROCHET, M.J. 1997. «Finite-element simulation of mixing : 1. Two-dimensional flow in periodic geometry». *AIChE Journal*. 43. 577-587
2. AVALOSSE, Th., RUBIN, Y., FONDIN, L. «Non-isothermal modeling of co-rotating and contra-rotating twin screw extruders». *Journal of Reinforced Plastics and Composites*. 21. 419-429.
3. BABUSKA, I. 1973. «The finite element method with lagragian multipliers». *Num. Math.* 20. 179-192
4. BERTRAND, F., TANGUY, P.A., THIBAULT, F. 1997. «A three-dimensional fictitious domain method for incompressible fluid flow problems». *Int J Numer Methods Fluids*. 25. 719-736.
5. BERTRAND, F., TANGUY, P.A. 2002. «Krylov-based uzawa algorithms for the solution of the Stokes equations using discontinuous-pressure tetrahedral finite elements». *J. Comp. Phys.* 181. 617-638.
6. BERTRAND, F., THIBAULT, F., DELAMARE, L, TANGUY, P.A. 2003. «Adaptative finite element simulation of fluid flow in twin-screw extrusion». *Comput. Chem. Eng.* 27. 491-500

7. BOOY, M. L. 1978. «Geometry of fully wiped twin-screw equipement». *Polymer Engineering and Science*. 18. 973-984
8. BRAVO, V.L., HRYMAK, A.N., 2000. «Numerical simulation of pressure and velocity profiles in kneading elements of a co-rotating twin screw extruder». *Polymer Engineering and Science*. 40. 168-178.
9. BREZZI, F. 1974. «On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers». *RAIRO analyse numérique*. 129-151
10. BREZZI, F., FORTIN, M. 1991. «*Mixed and hybrid finite element methods :Springer series in computational mathematics*». New-York: Springer-Verlag. 350p.
11. BRITO-DE LA FUNTE, E. 1992. *Mixing of rheological complex fluids with helical ribbon and helical screw ribbon impellers*. 288p. Thèse de doctorat en génie chimique, Université Laval.
12. FORTIN, A., GARON, A. 2000. «*Les éléments finis : de la théorie à la pratique*». École Polytechnique de Montréal : Montréal. 256p.
13. FORTIN, M., GLOWINSKY, R. 1982. «*Méthodes de Lagrangien augmenté : applications à la résolution numérique de problèmes aux limites*». Dunod : Paris. 320p.
14. FORTIN, M., TANGUY, P.A. 1984. «*A non-standard mesh refinement procedure through node labelling*». Short Communication. London : John Wiley & Sons Ltd. 1361-1365

15. GLOWINSKY, R., PAN, T.-W., PERIAUX, J. 1994. «A fictitious domain method for Dirichlet problems ans applications». *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 111. 283-303.
16. ISHIKAWA, T. ,AMANO, T. 2000. «Flow partterns and mixing mechanisms in the screw mixing element of a co-rotating twin screw extrusion». *Polymer Engineering and Science.* 40. 525-541.
17. MCCULLOUGH, T.W., HILTON, B.T. 1993. «The extrusion performance of co-rotating intermeshing twin-screw extruder screw elements-an experimental investigation». *SPE ANTEC Tech. Papers*, 3372-3379
18. MOURS, M., SENGE, M., SEIDI V., WAGNER, H.-G., HOFMANN J. 2001. «*Simulation of melt flow filled and partially filled sections of a co-rotating twin-screw extruder*». PPS 17. Montréal
19. RAUWENDAAL, C. 1981.«Analysis and experimental evaluation of twin-screw extruders». *Polymer Engineering and Science.* 21. 1092
20. TANGUY, P.A., LACROIX, R., BERTRAND, F., CHOPLIN, L., BRITO-DE LA FUNTE, E. 1992. «*Finite element analysis of viscous mixing with an helical ribbon screw impeller*». *AICHE J.* 38. 939-944.
21. VERFUTH, R. 1996. «*A review of a posteriori error estimation and adaptative mesh refinement techniques*». New-York :Wiley-Teubneré Yang. 223p.

Annexes

Annexe I: Formulation mathématique des éléments finis

Dans cette annexe, la formulation classique des éléments finis pour le problème de Stokes est présentée pour compléter les explications de la méthode des éléments finis virtuels présentée au chapitre 2.

Équations d'échanges

L'écoulement d'un fluide incompressible dans un domaine Ω et une frontière Γ est gouverné par les équations de Navier-Stokes et l'équation de continuité :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{grad} \mathbf{u} \right) + \operatorname{div} \boldsymbol{\tau} + \operatorname{grad} p = \mathbf{f} \quad \text{sur } \Omega, \quad (\text{Eq. A.I-1})$$

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad \text{sur } \Omega, \quad (\text{Eq. A.I-2})$$

où \mathbf{u} est le vecteur vitesse, p la pression, \mathbf{f} une force et $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes. Pour exprimer $\boldsymbol{\tau}$ en fonction du champ de vitesse, on utilise un modèle rhéologique de la forme

$$\boldsymbol{\tau} = -2\eta(|\dot{\gamma}|)\dot{\gamma} \quad (\text{Eq. A.I-3})$$

où $\dot{\gamma}$ est le tenseur de vitesse de cisaillement :

$$\dot{\gamma} = \frac{1}{2} [\operatorname{grad} \mathbf{u} + (\operatorname{grad} \mathbf{u})^T] \quad (\text{Eq. A.I-4})$$

Avec une solution initiale et des conditions aux limites appropriées, le problème est mathématiquement bien posé.

Formulation des éléments finis

Pour simplifier l'écriture, considérons le cas stationnaire d'un fluide newtonien et isotherme, où les forces d'inertie sont négligées par rapport aux forces visqueuses.

On veut résoudre, avec la méthode des éléments finis le problème

$$-\mu \Delta \mathbf{u} + \operatorname{grad} p = \mathbf{f} \quad \text{sur } \Omega, \quad (\text{Eq. A.I-5})$$

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad \text{sur } \Omega. \quad (\text{Eq. A.I-6})$$

En utilisant des conditions aux limites homogènes de Dirichlet, ce problème revient à trouver $\mathbf{u} \in [H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega)]^3$ et $p \in L^2(\Omega)$ satisfaisant les équations A.I-5 et A.I -6.

Formulation continue

On obtient la forme variationnelle, en multipliant les équations A.I-5 et A.I-6 par des fonctions-tests bien choisies et en intégrant sur le domaine Ω :

$$-\int_{\Omega} \phi \mu \Delta \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Omega} \phi \operatorname{grad} p d\Omega = \int_{\Omega} \phi f d\Omega, \quad \text{où } \phi \in [H_0^1(\Omega)]^3 \quad (\text{Eq. A.I-7})$$

$$\int_{\Omega} \varphi \operatorname{div} \mathbf{u} d\Omega = 0, \quad \text{où } \varphi \in L^2(\Omega) \quad (\text{Eq. A.I-8})$$

On obtient, après intégration par parties,

$$\mu \int_{\Omega} \operatorname{grad} \phi \operatorname{grad} \mathbf{u} d\Omega - \int_{\Omega} p \operatorname{div} \phi d\Omega + \int_{\Gamma} \left[\frac{\mu \partial \mathbf{u}}{\partial n} - p \cdot n \right] \phi d\Gamma = \int_{\Omega} \phi f d\Omega \quad (\text{Eq. A.I-9})$$

Si les fonctions-tests sont choisies dans l'espace $H_0^1(\Omega)$, ce qui correspond à des conditions aux limites de Dirichlet homogènes, alors l'intégrale de bord

$$\int_{\Gamma} \left[\frac{\mu \partial \mathbf{u}}{\partial n} - p \cdot n \right] \phi d\Gamma = 0 \quad \text{sur } \Gamma \text{ pour } \phi \in H_0^1(\Omega). \quad (\text{Eq. A.I-10})$$

On peut finalement réécrire le problème continu sous la forme

$$a(\mathbf{u}, \phi) - b(\phi, p) = (\mathbf{f}, \phi), \quad \forall \phi \in [H_0^1(\Omega)]^3 \quad (\text{Eq. A.I-11})$$

$$b(\mathbf{u}, \varphi) = 0, \quad \forall \varphi \in L^1(\Omega) \quad (\text{Eq. A.I-12})$$

où

$$a(\mathbf{u}, \phi) = \mu \int_{\Omega} \operatorname{grad} \phi \operatorname{grad} \mathbf{u} d\Omega, \quad (\text{Eq. A.I-13})$$

$$b(\mathbf{u}, \varphi) = \int_{\Omega} \varphi \operatorname{div} \mathbf{u} d\Omega. \quad (\text{Eq. A.I-14})$$

Formulation discrète

Le problème continu A.I-11 et A.I-12 peut être résolu par la méthode des éléments finis de Galerkin sous forme discrète à partir d'un maillage du domaine Ω . La discréttisation est obtenue en utilisant un sous-espace V_h de $[H_0^1(\Omega)]^3$ pour \mathbf{u} et ϕ ainsi qu'un sous-espace Q_h de $L^2(\Omega)$ pour p et φ :

$$a(\mathbf{u}_h, \phi_h) - b(\mathbf{u}_h, \phi_h) = (\mathbf{f}_h, \phi_h), \quad \forall \phi_h \in V_h \quad (\text{Éq. A.I-15})$$

$$b(\mathbf{u}_h, \varphi_h) = 0, \quad \forall \varphi_h \in Q_h \quad (\text{Éq. A.I-16})$$

L'interpolation pour la vitesse et la pression est donnée par des polynômes de Lagrange. En utilisant la méthode de Galerkin, ces polynômes d'interpolation sont identiques aux fonctions-tests :

$$\mathbf{u}_h = \sum_{i=1}^n \phi_{h,i} \mathbf{u}_i, \quad (\text{Éq. A.I-17})$$

$$p_h = \sum_{j=1}^m \varphi_{h,j} p_j, \quad (\text{Éq. A.I-18})$$

où \mathbf{u}_i et p_j sont les valeurs discrètes de la vitesse et la pression sur les nœuds du maillage. Le problème à résoudre étant couplé en vitesse et en pression, les espaces d'approximation V_h et Q_h doivent respecter la condition de Brezzi-Babuska (Babuska, 1973, Brezzi 1974) pour garantir l'unicité de la solution. Remarquons que l'élément fini tétraédrique P1+-P0 qui est utilisé dans ces travaux pour les simulations, respecte la condition de Brezzi-Babuska.

Formulation discrète

Le problème A.I-15 et A.I-16 peut s'écrire sous forme matricielle

$$\mathbf{A}\mathbf{U} + \mathbf{B}^T \mathbf{P} = \mathbf{F}, \quad (\text{Éq. A.I-19})$$

$$\mathbf{B}\mathbf{U} = 0, \quad (\text{Éq. A.I-20})$$

où \mathbf{U} et \mathbf{P} représentent les degrés de liberté en vitesse et en pression, \mathbf{A} est la matrice de diffusion, \mathbf{B} la matrice de divergence et \mathbf{F} une force.

Équivalence avec un problème d'optimisation

La formulation du problème A.I-11 et A.I-12 peut être obtenue à partir d'un problème de minimisation avec contrainte (Fortin et Glowinsky, 1982). À l'aide de multiplicateur de Lagrange, ce problème est alors équivalent à un problème de point selle

$$\inf_{v \in [H_0^1(\Omega)]^3} \sup_{p \in L^2(\Omega)} L(v, p), \quad (\text{Éq. A.I-21})$$

où

$$L(v, p) = \frac{\mu}{2} \int_{\Omega} |\operatorname{grad} v|^2 d\Omega - \int_{\Omega} p \cdot \operatorname{div} v d\Omega + \int_{\Omega} f \cdot v d\Omega, \quad (\text{Éq. A.I-22})$$

est le lagrangien à minimiser. Pour améliorer les propriétés de convergence, on peut utiliser le lagrangien augmenté

$$L_r(v, p) = L(v, p) + \frac{r}{2} \int_{\Omega} |\operatorname{div} v|^2 d\Omega, \quad (\text{Éq. A.I-23})$$

où r est un paramètre de pénalisation.

Résolution du système matriciel

La solution du problème A.I-21 peut être obtenue par l'algorithme d'Uzawa. Cet algorithme permet de résoudre le couplage entre la pression et la vitesse de façon itérative par une méthode de point fixe :

0. Étant donné $V^{(0)}$ et $P^{(0)}$
1. Pour $n = 0, 1, 2, \dots$ jusqu'à convergence
 - 1.1 Résoudre le problème primal pour déterminer $V^{(n+1)}$

$$[A + rB^T B] V^{(n+1)} = -B^T P^{(n)} + F$$
 - 1.2 Résoudre le problème dual

$$B[A + rB^T B]^{-1} B^T P^{(n+1)} = B[A + rB^T B]^{-1} F$$
 - 1.3 Mettre à jour $V^{(n+1)}$

Figure A.I-1 Algorithme d'Uzawa pour la résolution des problèmes fluides

Annexe II : Éléments finis tétraédriques

Cette annexe présente les différents éléments finis de POLY3D™ utilisés dans ce mémoire.

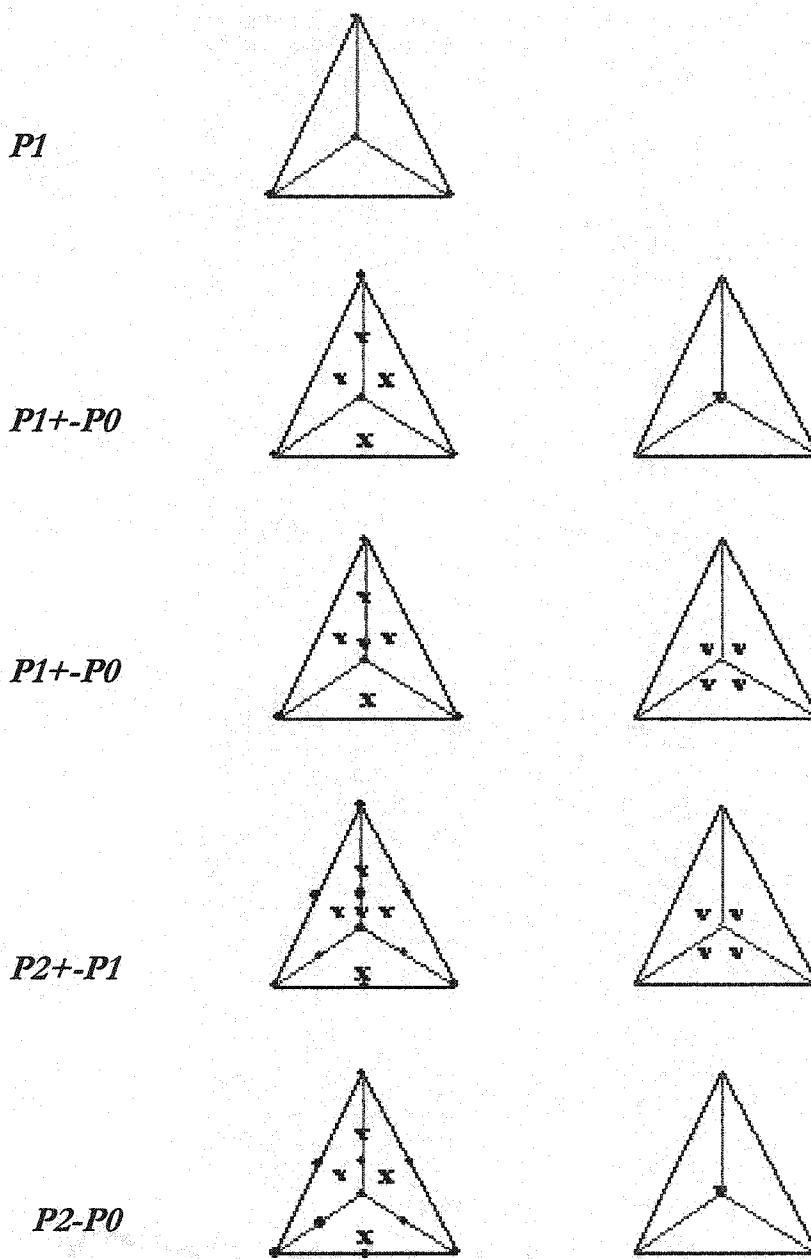
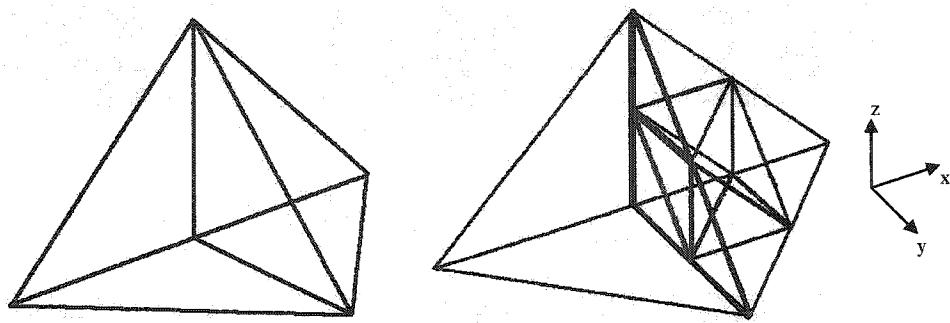


Figure A.II-1 : Éléments finis de POLY3D™

Annexe III : Traitement des nœuds non conformes

Cette annexe présente le traitement des discontinuités introduites avec la méthode de raffinement de maillage par les arêtes. Ce traitement est basé sur la condensation des nœuds non conformes situés sur les discontinuités. Considérons un maillage de deux tétraèdres dont un des éléments est décomposé selon la méthode par les arêtes (Figure A-III.1).



Maillage avant raffinement (2 éléments) Maillage raffiné par les arêtes (9 éléments)

Figure A.III-1 : Maillages avant et après raffinement par les arêtes

Sur le maillage raffiné, l'élément qui n'a pas été décomposé possède une face Γ_A commune avec quatre faces (Γ_B , Γ_C , Γ_D et Γ_E) des éléments produits par la subdivision. De façon générale, on notera par Γ la région correspondant à ces faces.

$$\Gamma_A = \Gamma_B \cup \Gamma_C \cup \Gamma_D \cup \Gamma_E, \quad (\text{Éq. A.III-1})$$

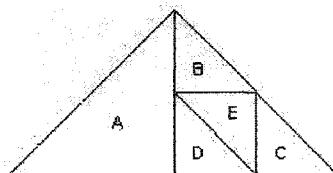


Figure A.III-2 : Face Γ commune aux éléments A, B, C, D et E

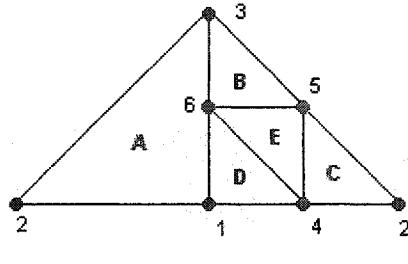
Selon le type d'élément fini utilisé, plusieurs nœuds appartenant aux faces Γ_B , Γ_C , Γ_D et Γ_E présentent des discontinuités topologiques avec les nœuds de la face Γ_A de l'élément non décomposé. Celles-ci se traduisent par des discontinuités au niveau des fonctions

d'interpolation sur cette face et un traitement est nécessaire pour éliminer les nœuds problématiques aussi appelés non conformes.

Traitements des discontinuités pour des fonctions d'interpolation P1 (Base complète)

La figure A.III.3 montre la face Γ avec les discontinuités topologiques pour le cas de fonctions d'interpolation P1. On note la présence de trois nœuds non conformes (en rouge) situés au milieu des arêtes de l'élément A.

Table des connectivités



Élément	Nœud 1	Nœud 2	Nœud 3
A	1	2	3
B	3	5	6
C	2	4	5
D	1	4	6
E	4	5	6

Figure A.III.3 : Numérotation des nœuds sur la face Γ pour éléments finis P1

Soit f , la variable à interpoler par éléments finis (température, vitesse, pression).

La condition pour que l'interpolation de f sur la face soit continue malgré la présence de nœuds non conformes est

$$f^{(A)} = \begin{cases} f^{(B)} & \text{si } x \in \Gamma_B \\ f^{(C)} & \text{si } x \in \Gamma_C \\ f^{(D)} & \text{si } x \in \Gamma_D \\ f^{(E)} & \text{si } x \in \Gamma_E \end{cases} \quad (\text{Éq. A.III-2})$$

Une condition nécessaire pour que la condition A.III-2 soit respectée est que l'interpolation sur les nœuds non conformes soit continue entre les éléments.

Ainsi, il faut que

$$f^{(A)}(x_4) = f_4, \quad (\text{Éq. A.III-3})$$

$$f^{(A)}(x_5) = f_5, \quad (\text{Éq. A.III-4})$$

$$f^{(A)}(x_6) = f_6. \quad (\text{Éq. A.III-5})$$

On démontre facilement qu'on doit avoir

$$f_4 = \frac{1}{2}(f_1 + f_2), \quad (\text{Éq. A.III-6})$$

$$f_5 = \frac{1}{2}(f_2 + f_3), \quad (\text{Éq. A.III-7})$$

$$f_6 = \frac{1}{2}(f_1 + f_3). \quad (\text{Éq. A.III-8})$$

Ces relations nous permettent d'exprimer les nœuds 4, 5 et 6 comme une combinaison linéaire des nœuds 1, 2 et 3. On peut alors interpoler f sur les éléments **B**, **C**, **D** et **E** sans faire appel aux fonctions de base correspondant aux nœuds non conformes.

Par exemple, sur l'élément **B**, on a

$$f^B = N_3^{(B)} f_3 + N_5^{(B)} f_5 + N_6^{(B)} f_6 \quad (\text{Éq. A.III-9})$$

En utilisant les équations A.III-7 et A.III-8 on obtient

$$f^B = N_3^{(B)} f_3 + N_5^{(B)} \{f_2 + f_3\} + N_6^{(B)} \{f_1 + f_3\}, \quad (\text{Éq. A.III-10})$$

$$f^B = \tilde{N}_1^{(B)} f_1 + \tilde{N}_2^{(B)} f_2 + \tilde{N}_3^{(B)} f_3, \quad (\text{Éq. A.III-11})$$

$$\tilde{N}_1^{(B)} = \frac{1}{2} N_6^{(B)}$$

avec $\tilde{N}_2^{(B)} = \frac{1}{2} N_5^{(B)}$

$$\tilde{N}_3^{(B)} = N_3^{(B)} + \frac{1}{2} \{N_6^{(B)} + N_5^{(B)}\}$$

où $\tilde{N}_i^{(B)}$ sont les fonctions de base modifiées. De la même manière, on obtient les fonctions de base modifiées sur les éléments **C**, **D** et **E**.

Tableau A-III-1 : Fonctions de base modifiées (Fonctions de base P1)

<i>Élément B</i>	<i>Élément C</i>
$\tilde{N}_1^{(B)} = \frac{1}{2} N_6^{(B)}$	$\tilde{N}_1^{(C)} = \frac{1}{2} N_4^{(C)}$
$\tilde{N}_2^{(B)} = \frac{1}{2} N_5^{(B)}$	$\tilde{N}_2^{(C)} = N_2^{(C)} + \frac{1}{2} \{N_4^{(C)} + N_5^{(C)}\}$
$\tilde{N}_3^{(B)} = N_3^{(B)} + \frac{1}{2} \{N_6^{(B)} + N_5^{(B)}\}$	$\tilde{N}_3^{(C)} = \frac{1}{2} N_5^{(C)}$
<i>Élément D</i>	<i>Élément E</i>
$\tilde{N}_1^{(D)} = N_1^{(B)} + \frac{1}{2} \{N_4^{(D)} + N_6^{(D)}\}$	$\tilde{N}_1^{(E)} = \frac{1}{2} \{N_4^{(E)} + N_6^{(E)}\}$
$\tilde{N}_2^{(D)} = \frac{1}{2} N_4^{(D)}$	$\tilde{N}_2^{(E)} = \frac{1}{2} \{N_4^{(E)} + N_5^{(E)}\}$
$\tilde{N}_3^{(D)} = \frac{1}{2} N_6^{(D)}$	$\tilde{N}_3^{(E)} = \frac{1}{2} \{N_6^{(E)} + N_5^{(E)}\}$

Il est possible de montrer à l'aide d'un exemple que l'interpolation des fonctions de base modifiées est continue sur la face Γ .

Considérons le cas particulier

$$f_1 = f_2 = 0 \quad \text{et} \quad f_3 = 1 \quad , \quad (\text{Éq. A.III-12})$$

la condition A.III-2 devient alors

$$N_3^{(A)}(x) = \tilde{N}_3 = \begin{cases} \tilde{N}_3^{(B)} & \text{si } x \in \Gamma_B \\ \tilde{N}_3^{(C)} & \text{si } x \in \Gamma_C \\ \tilde{N}_3^{(D)} & \text{si } x \in \Gamma_D \\ \tilde{N}_3^{(E)} & \text{si } x \in \Gamma_E \end{cases} \quad (\text{Éq. A.III-13})$$

La figure A.III-4 montre le profil de \tilde{N}_3 après l'opération de condensation des nœuds non conformes.

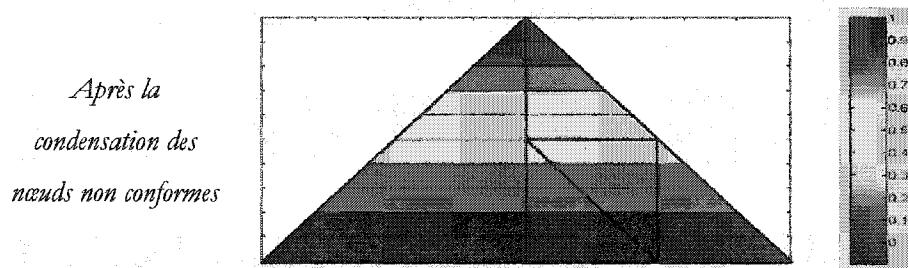


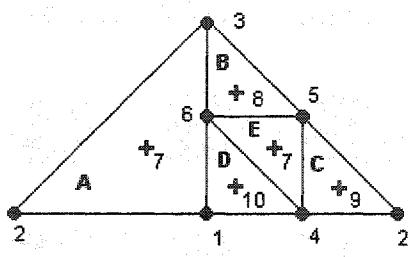
Figure A.III-4 : Profil de \tilde{N}_3 après la condensation (P1)

Après l'opération de condensation, l'interpolation devient continue sur l'ensemble de la face Γ . Cette illustration confirme que la réécriture des fonctions de base permet d'obtenir une interpolation continue pour des fonctions d'interpolation P1.

Traitement des discontinuités pour fonctions d'interpolation P1+ (Base incomplète)

En utilisant des fonctions d'interpolation P1+, six nœuds non conformes (en rouge) sont générés lors de la subdivisions par les arêtes : trois nœuds sur les milieux des arêtes (4, 5 et 6) et trois nœuds sur le milieux des faces (8, 9 et 10).

Table des connectivités



Élément	Nœud 1	Nœud 2	Nœud 3	Nœud 4
A	1	2	3	7
B	3	5	6	8
C	2	4	5	9
D	1	4	6	10
E	4	5	6	7

Figure A.III-5 : Numérotation des nœuds sur la face Γ pour éléments finis P1+

Comme pour le cas des fonctions de base P1, il est nécessaire de respecter la condition A.III-2 qui stipule que l'interpolation de f doit être continue sur l'ensemble de la face Γ . Pour réécrire les interpolations sur les éléments **B**, **C**, **D** et **E** en terme des nœuds conformes uniquement, on utilise l'interpolation donnée par $f^{(A)}$ sur les différents nœuds non conformes. On a ainsi

$$f_4 = \frac{1}{2}(f_1 + f_2), \quad (\text{Eq. A.III-14})$$

$$f_5 = \frac{1}{2}(f_2 + f_3), \quad (\text{Eq. A.III-15})$$

$$f_6 = \frac{1}{2}(f_1 + f_3). \quad (\text{Eq. A.III-16})$$

$$f_8 = \frac{1}{2}(f_3 + f_7), \quad (\text{Eq. A.III-17})$$

$$f_9 = \frac{1}{2}(f_2 + f_7), \quad (\text{Eq. A.III-18})$$

$$f_{10} = \frac{1}{2}(f_1 + f_7). \quad (\text{Eq. A.III-19})$$

En substituant ces équations dans les interpolations des éléments **B**, **C**, **D** et **E** on obtient les fonctions de base modifiées présentées au tableau A-III-2.

Tableau A-III-2 : Fonctions de base modifiée (Éléments finis P1+)

<i>Élément B</i>	<i>Élément C</i>
$\tilde{N}_1^{(B)} = \frac{1}{2} N_6^{(B)}$	$\tilde{N}_1^{(C)} = \frac{1}{2} N_4^{(C)}$
$\tilde{N}_2^{(B)} = \frac{1}{2} N_5^{(B)}$	$\tilde{N}_2^{(C)} = N_2^{(C)} + \frac{1}{2} \{N_4^{(C)} + N_5^{(C)} + N_9^{(C)}\}$
$\tilde{N}_3^{(B)} = N_3^{(B)} + \frac{1}{2} \{N_6^{(B)} + N_5^{(B)} + N_8^{(B)}\}$	$\tilde{N}_3^{(C)} = \frac{1}{2} N_5^{(C)}$
$\tilde{N}_7^{(B)} = \frac{1}{2} N_8^{(B)}$	$\tilde{N}_7^{(C)} = \frac{1}{2} N_9^{(C)}$

<i>Élément D</i>	<i>Élément E</i>
$\tilde{N}_1^{(D)} = N_1^{(D)} + \frac{1}{2} \{N_4^{(D)} + N_6^{(D)} + N_{10}^{(D)}\}$	$\tilde{N}_1^{(E)} = \frac{1}{2} \{N_4^{(E)} + N_6^{(E)}\}$
$\tilde{N}_2^{(D)} = \frac{1}{2} N_4^{(D)}$	$\tilde{N}_2^{(E)} = \frac{1}{2} \{N_4^{(E)} + N_5^{(E)}\}$
$\tilde{N}_3^{(D)} = \frac{1}{2} N_6^{(D)}$	$\tilde{N}_3^{(E)} = \frac{1}{2} \{N_6^{(E)} + N_5^{(E)}\}$
$\tilde{N}_7^{(D)} = \frac{1}{2} N_{10}^{(D)}$	$\tilde{N}_7^{(E)} = N_7^{(E)}$

Dans le cas de fonction de base P1+, il est possible de montrer à l'aide d'un exemple que les fonctions de base modifiées produisent une interpolation discontinue sur la face où sont situés les nœuds non conformes. Pour ce faire, posons

$$f_1 = f_2 = f_7 = 0 \quad \text{et} \quad f_3 = 1 \quad (\text{Éq. A.III-20})$$

On veut vérifier que

$$N_3^{(A)}(x) = \tilde{N}_3 = \begin{cases} \tilde{N}_3^{(B)} & \text{si } x \in \Gamma_B \\ \tilde{N}_3^{(C)} & \text{si } x \in \Gamma_C \\ \tilde{N}_3^{(D)} & \text{si } x \in \Gamma_D \\ \tilde{N}_3^{(E)} & \text{si } x \in \Gamma_E \end{cases} \quad (\text{Éq. A.III-21})$$

La figure A.III-6 montre le graphique du profil de \tilde{N}_3 pour le cas de fonctions d'interpolation P1+. Celle-ci montre que même après l'opération de condensation des nœuds non conformes, l'interpolation n'est pas continue. La continuité entre $N_3^{(A)}$ et \tilde{N}_3 est respectée seulement sur les nœuds et sur les arêtes tandis que des différences sont observées sur le restant de la face.

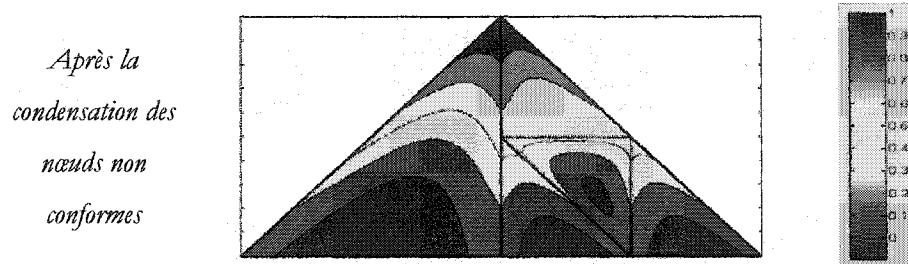


Figure A.III-6 : Profil de $N_3^{(A)}$ et \tilde{N}_3 avant et après la condensation (P1+)

On obtient des résultats similaires pour la fonction bulle.

Ainsi, en posant

$$f_1 = f_2 = f_3 = 0 \quad \text{et} \quad f_7 = 1, \quad (\text{Eq. A.III-22})$$

on peut observer le profil de \tilde{N}_7 après la condensation des nœuds non conformes (figure A.III-7).

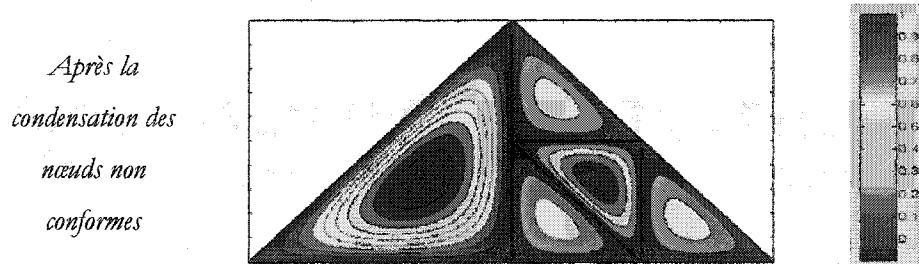


Figure A.III-7 : Profil de $N_7^{(A)}$ et \tilde{N}_7 avant et après la condensation (P1+)

Les résultats des figures A.III-6 et A.III-7 montrent que la méthode de condensation n'est pas compatible avec des fonctions d'interpolation P1+ car elle ne permet pas d'obtenir une interpolation continue sur les faces où les nœuds non conformes sont présents. On peut expliquer cette situation par le fait que les fonctions d'interpolation P1+ forment une base incomplète. Dans le cas de bases incomplètes, la condition A.III-2 qui stipule que l'interpolation doit être continue sur les nœuds non-conforme est nécessaire mais pas suffisante pour assurer la continuité sur l'ensemble de la face. C'est pourquoi seul les fonctions de base complètes sont compatibles avec l'opération de condensation des nœuds non conformes.