

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ANALYSE DE SENSIBILITÉ D'ÉCOULEMENTS MULTIFLUIDES

CHARLES PESTIEAU

DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES ET DE GÉNIE INDUSTRIEL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(AOÛT 2006)



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 978-0-494-19322-8

Our file Notre référence

ISBN: 978-0-494-19322-8

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

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

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent 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 thesis.

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

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

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 :

ANALYSE DE SENSIBILITÉ D'ÉCOULEMENTS MULTIFLUIDES

présenté par : PESTIEAU Charles

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

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

M. ADJENGUE Luc, Ph.D., président

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

M. SAUCIER Antoine, Ph.D., membre

À Mathew, qui est parti malgré nous
et à Isabelle, qui est restée malgré tout

REMERCIEMENTS

Je tiens d'abord à remercier mon directeur de recherche, M. Steven Dufour, pour sa patience, son calme et sa bonne humeur en toutes circonstances. Son soutien continu et ses conseils, ainsi que ceux de Marie-Claude Heuzey, ont été grandement appréciés.

Je voudrais aussi remercier tout le personnel enseignant et administratif du département de mathématiques et de génie industriel dont le soutien m'a été indispensable et qui ont rendu mon séjour à l'École Polytechnique aussi agréable qu'instructif.

Je remercie également mes nombreux collègues pour leurs réponses à mes questions et pour une bonne ambiance de travail.

Finalement, je remercie mes amis qui sont ma famille.

RÉSUMÉ

Ce mémoire traite du calcul des sensibilités appliqué aux écoulements multifluides. Une sensibilité représente le taux de variation d'une variable de l'écoulement par rapport à un paramètre de design. Nous développons les équations des sensibilités et leurs conditions frontières d'une manière générale, ce qui permet de traiter des paramètres de valeur ou de forme. L'approche des sensibilités continues est utilisée. Nous appliquons cette méthode aux écoulements multifluides, visqueux et laminares de fluides immiscibles. L'interface entre les différents fluides est décrite par une variable globale obéissant à une équation de transport. Cette équation de transport, ainsi que celles de Navier-Stokes, sont dérivées pour obtenir les équations des sensibilités. À la connaissance de l'auteur ces équations n'ont pas été obtenues auparavant.

Les équations ainsi obtenues sont discrétisées selon la méthode des éléments finis. Nous utilisons des éléments quadratiques pour discrétiser les composantes de la vitesse et la variable transportée, et des éléments linéaires discontinus pour la pression. Le maillage est adapté à la solution, et en particulier à la position de l'interface, selon la méthode d'estimation de l'erreur de Zhu et Zienkiewicz. L'implantation du code est vérifiée à l'aide de solutions manufacturées. À cette fin, nous vérifions que la régression de l'erreur en fonction du raffinement du maillage correspond aux prédictions théoriques.

Nous présentons deux applications du calcul des sensibilités dans le contexte des écoulements multiphases. La première examine le comportement de l'interface entre deux fluides en coextrusion pour des variations de la viscosité et des débits d'entrée. Pour la seconde, nous calculons les sensibilités de l'écoulement d'un liquide dans un gaz dans le contexte des jets. Une analyse des sensibilités est conduite dans les deux cas.

ABSTRACT

This thesis deals with sensitivity computations as applied to free surface flows. Sensitivities characterize the influence of a design parameter on a state variable. We derive the sensitivity equations and their boundary conditions in a general way, allowing for the use of both value and shape parameters. This is done before we discretize the equations. We study multiphase laminar flows for high viscosity fluids. The free surface is modeled using a global variable satisfying a separate equation. This equation along with the Navier-Stokes equations are differentiated to obtain the equations of sensitivity. To the authors knowledge these equations are derived for the first time.

The above equations are then discretized using the finite element method. Quadratic elements are used for the velocity components of the speed and for the extra variable describing the free surface and linear discontinuous elements are used for pressure. The mesh is adapted using the Zhu-Zienkiewicz error estimator, with special attention given to the free surface. We verify numerical method with the use of manufactured solutions. To do this, we verify that the convergence of the observed error corresponds to the theory.

Two applications of sensitivity computations for free surface flows are presented. The first studies the behavior of the free surface between two coextruded liquids with respect to variations in viscosity and flow rate. In the second, we compute the sensitivity of a liquid jet flowing in a gas. In both cases, a sensitivity analysis is conducted.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	vii
TABLE DES MATIÈRES	viii
LISTE DES TABLEAUX	xi
LISTE DES FIGURES	xii
LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES	xiv
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 LA MÉTHODE DE L'ÉQUATION DES SENSIBILITÉ POUR LES ÉCOULEMENT MULTIPHASES	3
1.1 La modélisation des écoulements incompressibles	3
1.2 Les écoulements multiphases et les conditions aux interfaces	5
1.3 La condition d'immiscibilité et la pseudo-concentration	7
1.4 L'équation des sensibilités pour les écoulements multiphases	9
1.4.1 Équations générales des sensibilités	9
1.4.2 Conditions aux frontières pour les sensibilités	13
1.4.2.1 Conditions de Dirichlet	13
1.4.2.2 Conditions de Neumann	15
CHAPITRE 2 LA DISCRÉTISATION DES ÉQUATIONS	20

2.1	Formulation variationnelle	20
2.1.1	Forme faible des équations de l'écoulement	21
2.1.2	Forme faible des équations de sensibilité	25
2.2	Discrétisation des formes faibles	26
2.2.1	Discrétisation des équations de l'écoulement	27
2.2.2	Discrétisation des équations de la sensibilité	31
2.3	Détails d'implantation	34
2.3.1	Présence des dérivées de l'écoulement	34
2.3.2	Choix de l'élément fini	36
2.3.3	Technique de stabilisation	36
CHAPITRE 3	LES STRATÉGIES NUMÉRIQUES	38
3.1	Le cycle de remaillage adaptatif	38
3.1.1	L'estimateur d'erreur	38
3.1.1.1	Projection locale	39
3.1.1.2	Norme de l'erreur	41
3.1.2	L'opérateur de transition	42
3.2	Le cycle de localisation de l'interface	44
CHAPITRE 4	VÉRIFICATION	47
4.1	Problème de vérification pour les sensibilités	47
4.1.1	Description du problème	48
4.1.2	Paramètre de valeur	51
4.1.3	Paramètre de forme	55
4.2	Vérification du suivi de l'interface	58
4.2.1	Géométrie de la filière analytique	59
4.2.2	Champ de vitesse analytique	59
4.2.3	Calcul de la surface libre	60
4.3	Vérification pour les écoulements multifluides	61

CHAPITRE 5	APPLICATIONS	67
5.1	La coextrusion	67
5.1.1	Description du problème de l'écoulement	67
5.1.1.1	Adimensionnalisation	68
5.1.2	Description du problème de sensibilités	70
5.1.2.1	Conditions limites	70
5.1.2.2	Adimensionnalisation	72
5.1.2.3	Sensibilités normalisées	72
5.1.2.4	Solution de l'écoulement	74
5.1.2.5	Analyse de sensibilité	74
5.1.3	Calcul de solutions voisines	80
5.2	Les jets libres	81
5.2.1	Description du problème de l'écoulement	82
5.2.1.1	Conditions limites	82
5.2.1.2	Adimensionnalisation	83
5.2.2	Description du problème des sensibilités	83
5.2.3	Solution de l'écoulement	84
5.2.3.1	Analyse de sensibilité	86
5.2.4	Calcul de solutions voisines	90
CONCLUSION		92
RÉFÉRENCES		94

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 5.1	Position de l'interface pour des perturbations de la viscosité .	81
Tableau 5.2	Position de l'interface pour des perturbations de la viscosité .	91

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Interface entre deux phases	6
Figure 3.1	Algorithme de remaillage adaptatif	39
Figure 3.2	Algorithme de localisation de l'interface	44
Figure 4.1	Description du problème analytique de vérification	49
Figure 4.2	Régression des erreurs de l'écoulement	52
Figure 4.3	Régression des erreurs de la sensibilité pour un paramètre de valeur	53
Figure 4.4	Régression des erreurs de la sensibilité pour un paramètre de forme	58
Figure 4.5	Géométrie utilisée pour la vérification de la modélisation des écoulements multiphases stationnaires.	59
Figure 4.6	Caractéristiques associées au champ de vitesse analytique . . .	60
Figure 4.7	Maillage de 14655 éléments et isovaleurs de la pseudo-concentration ($F = 0, 2, 0, 5, 0, 8$), pour le champ de vitesse analytique . . .	61
Figure 4.8	Coupe d'une filière plane	62
Figure 4.9	Maillage de 5952 éléments et interface pour un ratio des débits de $Q_A/Q_B = 10$	65
Figure 4.10	Maillage de 5959 éléments et interface pour un ratio des visco- sités de $\mu_A/\mu_B = 0.1$	65

Figure 5.1	Le problème de la coextrusion	75
Figure 5.2	Maillage adapté pour l'interface et sa sensibilité (4026 éléments)	76
Figure 5.3	Sensibilité S_u par rapport au débit et à la viscosité	77
Figure 5.4	Sensibilité S_v par rapport au débit et à la viscosité	78
Figure 5.5	Sensibilité S_F par rapport au débit et à la viscosité	79
Figure 5.6	Valeur de S_F le long de l'interface (paramètres de débit et de viscosité)	79
Figure 5.7	Jet libre : conditions frontières de l'écoulement	82
Figure 5.8	Jet libre : conditions frontières de la sensibilité (débit)	84
Figure 5.9	Jet libre : conditions frontières de la sensibilité (viscosité)	84
Figure 5.10	Écoulement du Jet	85
Figure 5.11	Maillage adapté pour la pseudo-concentration F et sa sensibilité S_F , (3247 éléments)	86
Figure 5.12	Sensibilité S_u par rapport au débit et à la viscosité	88
Figure 5.13	Sensibilité S_v par rapport au débit et à la viscosité	88
Figure 5.14	Sensibilité S_F par rapport au débit et à la viscosité	89
Figure 5.15	Valeur de S_F le long de l'interface (paramètres de débit et de viscosité)	89
Figure 5.16	Maillage adapté pour la pseudo-concentration F et sa sensibilité par rapport à la viscosité (6183 éléments)	90

LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES

Variables de l'écoulement

$\mathbf{u} = (u, v)$	vitesse
p	pression
T	température
F	variable de pseudo-concentration

Sensibilités

$\mathbf{S}_u^a$	sensibilité de la vitesse au paramètre a
S_p^a	sensibilité de la pression au paramètre a
S_T^a	sensibilité de la température au paramètre a
S_F^a	sensibilité de la pseudo-concentration au paramètre a
μ', ρ', c'_p , etc.	dérivées des propriétés rhéologiques
$\mathbf{f}', q'_s$	termes sources pour les équations des sensibilités
$\mathbf{t}' = \mathbf{S}_\sigma \cdot \mathbf{n}$	sensibilité de la force de traction

Équations

σ	tenseur de Cauchy (tenseur des contraintes)
$\dot{\gamma}(\mathbf{u})$	tenseur vitesse-de-déformation
$\mathbf{t} = \sigma \cdot \mathbf{n}$	force de traction
$\mathbf{g}$	force de gravité
$\mathbf{f} = (f_x, f_y)$	force volumique
q_s	source de chaleur

Propriétés des fluides

μ	viscosité dynamique
ρ	masse volumique
c_p	chaleur massique à pression constante
β	dilatation thermique
λ	conductivité thermique
α	coefficient de tension superficielle

Géométrie du domaine de calcul

Ω	domaine de calcul
Ω_1	région occupée par le premier fluide
Ω_2	région occupée par le deuxième fluide
Γ	frontière du domaine ($\Gamma = \partial\Omega$)
Γ^-	frontière en amont de l'écoulement (entrée des fluides)
Γ^+	frontière en aval de l'écoulement (sortie des fluides)
Γ^0	paroi solide
$\mathbf{n}$	normale extérieure à la frontière $\Gamma = \partial\Omega$
Σ	interface (surface libre) entre les deux fluides
$\mathbf{n}_\Sigma$	vecteur normal à l'interface
$\mathbf{t}_\Sigma$	vecteur tangent à l'interface
κ	courbure locale de l'interface

Symboles mathématiques

∇	gradient
:	double contraction
$\mathbf{I}$	matrice identité de dimension deux
$(\zeta, \xi)_\Omega$	produit scalaire de deux fonctions

Formes faibles

$\delta p, \delta \mathbf{u}$, etc.	fonctions tests
$\delta S_p, \delta \mathbf{S}_u$	fonctions tests pour les sensibilités

Discrétisation

ϕ_i^α	fonctions d'interpolation de la variable α
T_i, S_{Ti} , etc.	coefficients d'interpolation (valeurs nodales)
T_h , etc.	solution pour T obtenue par la méthode des éléments finis
N_α	nombre de noeuds par élément pour la variable α

Adimensionnalisation

$\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p}$, etc.	variables adimensionnelles
u_0	vitesse de référence
T_0	température de référence
L_0	longueur de référence
ρ_0, μ_0 , etc.	valeurs de référence

Conditions frontières

Γ_{Du}	courbe avec conditions de Dirichlet en vitesse
Γ_{Nu}	courbe avec conditions de Neumann en vitesse
Γ_{DT}	courbe avec conditions de Dirichlet en température
Γ_{NT}	courbe avec conditions de Neumann en température
$\mathbf{x}_f = (x_f, y_f)$	point de la frontière
$\mathbf{u}_f$	valeur frontière de la vitesse
T_f	valeur frontière de la température
F_f	valeur frontière de la pseudo-concentration
$\mathbf{T}_f$	valeur frontière de la traction

Projection locale

Q_h	solution numérique
Q^*	solution enrichie
Ω_P	sous-domaine voisin du point P
$\mathbf{P}$	base polynomiale de degré deux
$\ \cdot \ _K$	norme L^2 sur l'élément K
$\ e^\alpha \ _\Omega$	erreur globale de la variable α
h	taille de l'élément
δ_K	taille cible de l'élément K

INTRODUCTION

En mécanique des fluides, les études numériques ont d'abord été appliquées au problème d'analyse qui vise à prédire le comportement d'un écoulement pour des paramètres de design donnés tels que la géométrie du domaine, les conditions aux frontières, les propriétés physiques du fluide ou encore le modèle mathématique utilisé pour la simulation. Plus récemment, on a appliqué les mêmes méthodes au problème inverse qui consiste à prédire l'effet des paramètres de design sur un écoulement donné. On appelle ceci le problème de design et c'est dans ce contexte qu'apparaît l'analyse de sensibilité.

Une sensibilité exprime justement l'influence d'un paramètre de design sur les variables d'état de l'écoulement. Les sensibilités ont de multiples utilités telles que le calcul rapide de solutions voisines, l'analyse d'incertitude, l'identification de paramètres dominants ou de zones sensibles ou encore dans la recherche de paramètres de design optimaux.

On obtient les équations de sensibilité par différentiation des équations de l'écoulement et le calcul numérique se fait par une discrétisation de l'espace selon la méthode des éléments finis. Ce processus comporte donc deux étapes et on distingue parmi les méthodes de calcul des sensibilités celles dites continues, pour lesquelles la différentiation se fait en premier lieu, suivie d'une discrétisation des équations des sensibilités, et celles dites discrètes pour lesquelles les équations de l'écoulement sont d'abord discrétisées et ensuite différenciées. On obtient dans les deux cas un système d'équations discrètes pour les sensibilités et en général les deux systèmes d'équations ne sont pas identiques. Les avantages et les inconvénients des deux méthodes sont comparés au deuxième chapitre. Nous choisissons la méthode continue pour des raisons de simplicité et de souplesse d'implantation. On lui donne aussi le nom de méthode de l'équation des sensibilités.

L'utilisation de méthodes numériques implique la présence d'erreurs de discrétisations. Le calcul de l'écoulement et celui des sensibilités sont tous deux entachés d'erreur. Il est impossible d'éliminer complètement ces erreurs mais il est possible de les contrôler grâce à l'adaptation de maillage. Les deux étapes de cette méthode sont l'estimation de l'erreur et le remaillage du domaine guidé par l'erreur estimée. Une étape de vérification et de validation, essentielles à toute démarche numérique, consiste à appliquer ce processus à un problème analytique dont la solution est connue. On doit alors s'assurer de la convergence de la solution numérique vers la solution analytique par une étude systématique de raffinements du maillage.

L'objectif principal du présent projet est d'élargir le domaine d'application d'un code d'éléments finis pour inclure l'analyse des sensibilités dans le contexte des écoulements multiphasés. Les équations des sensibilités sont développées et implantées pour deux types d'écoulements multiphasés : la coextrusion et les jets libres.

Ce mémoire est structuré de la façon suivante. Dans le premier chapitre, nous présentons les équations de Navier-Stokes et de conservation de l'énergie et nous développons les équations générales des sensibilités qui leurs sont associées. La méthode de résolution numérique est exposée au deuxième chapitre. Nous décrivons la forme faible des équations de l'écoulement et des sensibilités ainsi que leur discrétisation. Au troisième chapitre, on discute de certains détails d'implantation. Le quatrième chapitre est consacré au traitement de l'erreur et à la vérification de la méthodologie de résolution à l'aide de solutions manufacturées. Finalement, au dernier chapitre, on présente le calcul des sensibilités pour deux écoulements multiphasés différents. Ces résultats sont accompagnés d'une analyse de sensibilité et de plusieurs calculs de solutions voisines.

CHAPITRE 1

LA MÉTHODE DE L'ÉQUATION DES SENSIBILITÉ POUR LES ÉCOULEMENT MULTIPHASES

Ce chapitre présente le développement de l'équation générale des sensibilités pour les écoulements multiphases incompressibles et stationnaires régis par les équations de Navier-Stokes et de conservation de l'énergie. On expose d'abord les équations de Navier-Stokes et de conservation de l'énergie régissant l'écoulement d'un seul fluide. La description du problème est alors complétée par les conditions limites aux parois solides. On passe ensuite aux écoulements multifluides où les conditions aux interfaces entre les différents fluides sont décrites. La méthode de la pseudo-concentration pour la localisation de l'interface est ensuite présentée. L'équation générale des sensibilités est finalement développée pour ce type d'écoulement et on décrit les conditions aux frontières associées à ce problème.

1.1 La modélisation des écoulements incompressibles

On considère ici les écoulements permanents, laminaires (à faible nombre de Reynolds) et incompressibles de fluides visqueux avec transfert de chaleur. Ces écoulements sont régis par *l'équation de conservation de la masse*,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.1)$$

l'équation de conservation de la quantité de mouvement,

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] - \rho \mathbf{g} \beta (T - T_0) + \mathbf{f}, \quad (1.2)$$

ainsi que l'équation de conservation de l'énergie, avec l'hypothèse de Boussinesq pour le phénomène de convection naturelle,

$$\rho c_p(\mathbf{u} \cdot \nabla T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + q_s. \quad (1.3)$$

Cette dernière équation est ajoutée lorsque l'écoulement ne peut être considéré comme isotherme. Les variables de l'écoulement sont le vecteur vitesse $\mathbf{u}$ de composantes (u, v) , la pression p et la température T . Notons que le gradient est appliqué à l'aide de deux produits différents. Celui noté par un point est le produit matriciel ordinaire, de sorte que la quantité suivante est un scalaire,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = (\partial/\partial x, \partial/\partial y) \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \partial u/\partial x + \partial v/\partial y.$$

Par contre, le produit représenté sans le point est le produit tensoriel, ou produit direct, et l'expression suivante est alors un tenseur,

$$\nabla \mathbf{u} = (\partial/\partial x, \partial/\partial y) \otimes \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_x & u_y \\ v_x & v_y \end{pmatrix}.$$

Les propriétés physiques, ou rhéologiques, de l'écoulement sont la masse volumique ρ , la viscosité dynamique μ , le coefficient de dilatation thermique β , la chaleur massique à pression constante c_p et la conductivité thermique λ . En général, ces propriétés dépendent des variables de l'écoulement et tout particulièrement de la température. Toutefois, ces effets sont considérés comme étant négligeables dans les écoulements étudiés. Enfin, $\mathbf{g}$ est le vecteur de gravité, T_0 est une température de référence, $\mathbf{f}$ est une force volumique et q_s est une source de chaleur.

Les *conditions limites* du système formé des équations (1.1), (1.2) et (1.3) sont :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u} &= \mathbf{u}_{Du}, & \text{sur } \Gamma_{Du}; \\
 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{t}_{Nu}, & \text{sur } \Gamma_{Nu}; \\
 T &= T_{DT}, & \text{sur } \Gamma_{DT}; \\
 -\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n} &= q_{NT}, & \text{sur } \Gamma_{NT},
 \end{aligned} \tag{1.4}$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur de Cauchy défini par $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mu[(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)]$, ce qui est valable pour les fluides newtoniens faisant l'objet de cette étude. Nous avons noté $\mathbf{n}$, la normale extérieure à la frontière $\Gamma = \partial\Omega$ du domaine de calcul Ω . Finalement les ensembles Γ_{Du} et Γ_{Nu} sont les domaines de définition des conditions de Dirichlet et de Neumann en vitesse, et satisfont les relations :

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{Du} \cup \Gamma_{Nu} &= \partial\Omega; \\
 \Gamma_{Du} \cap \Gamma_{Nu} &= \emptyset.
 \end{aligned}$$

On retrouve des relations analogues pour les conditions limites en température :

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{DT} \cup \Gamma_{NT} &= \partial\Omega; \\
 \Gamma_{DT} \cap \Gamma_{NT} &= \emptyset.
 \end{aligned}$$

1.2 Les écoulements multiphases et les conditions aux interfaces

Une *surface libre* est une région de contact entre des milieux de différentes phases, soit les phases liquides, solides et gazeuses. Elle peut aussi être la région séparant deux matières différentes mais de même phase. Nous ne considérons que les interfaces fluide-fluide et fluide-gaz.

Lors de l'étude d'un problème multifluide, on posera en fait un problème différent pour chaque phase de sorte que des conditions limites doivent être imposées aux interfaces pour que le problème soit bien posé. Considérons la situation illustrée à la figure 1.1, où les fluides 1 et 2 se trouvent de part et d'autre de l'interface Σ et occupent les régions identifiées par Ω_1 et Ω_2 . Les fluides étudiés dans cette recherche étant non miscibles, nous pouvons exprimer le domaine de définition des équations par $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$. On notera $\mathbf{n}_\Sigma$, le vecteur normal à l'interface et $\mathbf{t}_\Sigma$, le vecteur tangent.

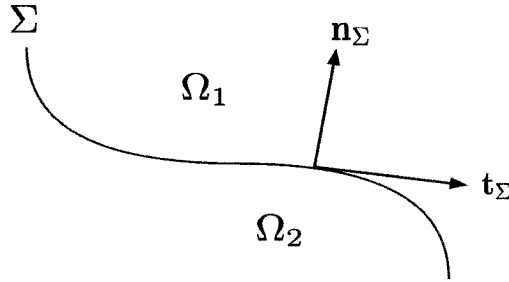


Figure 1.1 Interface entre deux phases

Les conditions à l'interface, (Batchelor (1967), Landau et Lifshitz (1987)), sont alors données par

la *continuité de la vitesse normale*,

$$\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \mathbf{u}_\Sigma \cdot \mathbf{n}_\Sigma, \quad (1.5)$$

où $\mathbf{u}_1$ et $\mathbf{u}_2$ sont les vitesses des fluides 1 et 2 à l'interface alors que $\mathbf{u}_\Sigma$ est la vitesse de l'interface elle-même ;

la *continuité de la vitesse tangentielle*,

$$\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{t}_\Sigma = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{t}_\Sigma, \quad (1.6)$$

et l'équilibre des forces à l'interface,

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 - \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \alpha \kappa \mathbf{n}_\Sigma, \quad (1.7)$$

où α est le coefficient de tension superficielle des fluides 1 et 2 et κ est la courbure locale de la surface libre. Notre étude porte uniquement sur des fluides immiscibles et de viscosité différente de sorte que le tenseur de Cauchy est discontinu à l'interface. Ceci se traduit dans l'équation (1.7) par un coefficient de tension superficielle non nul $\alpha > 0$. Nous pouvons supposer, sans perte de généralité, que $\mathbf{n}_\Sigma$ pointe dans la direction du fluide 1, tel qu'illustré à la figure 1.1, et que le rayon de courbure est positif si le centre de courbure se trouve dans le fluide 1.

Lorsque les phénomènes thermiques sont pris en compte, l'équation (1.3) entre en jeu et des conditions limites à l'interface doivent lui être associées, soit la *continuité de la température*,

$$T_1 = T_2, \quad (1.8)$$

ainsi que la *continuité du flux de chaleur*,

$$\lambda_1 \mathbf{n}_\Sigma \cdot \nabla T_1 = \lambda_2 \mathbf{n}_\Sigma \cdot \nabla T_2. \quad (1.9)$$

Remarquons que si $\lambda_1 \neq \lambda_2$, l'équation (1.9) implique une discontinuité du gradient de température $\mathbf{n}_\Sigma \cdot \nabla T$ à l'interface.

1.3 La condition d'immiscibilité et la pseudo-concentration

Puisque seuls les écoulements de fluides non miscibles sont étudiés, la condition de continuité de la vitesse normale à l'interface (1.5) devient en fait une condition de non pénétration de la surface libre. Dans le cas d'un écoulement stationnaire, cette

condition devient

$$\mathbf{u}_\Sigma \cdot \mathbf{n}_\Sigma = 0. \quad (1.10)$$

Ceci constitue une condition aux frontières de part et d'autre de l'interface pour les deux phases. Il faut noter qu'elle n'est définie qu'à l'interface, dont la position est a priori inconnue. Nous allons donc plutôt considérer une condition équivalente, définie sur tout le domaine Ω . Définissons la fonction

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

Cette fonction est connue sous le nom de *pseudo-concentration* des fluides 1 et 2 dans le domaine Ω (Thompson (1986)). La position de l'interface est donnée par l'ensemble des points $\mathbf{x}$ pour lesquels F est égal à $\frac{1}{2}$.

À l'aide de la pseudo-concentration, nous pouvons maintenant définir une expression équivalente à la condition d'immiscibilité (1.10), sous la forme d'une équation de transport (Agassant *et al.* (1994)),

$$\mathbf{u}_i \cdot \nabla F = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad \text{pour } i = 1, 2, \quad (1.11)$$

dont l'avantage est d'être définie sur tout le domaine Ω . Avec les conditions limites appropriées appliquées à F , le saut de cette fonction identifiera la position de la surface libre dans Ω . Puisque l'équation de transport (1.11) est hyperbolique, une condition limite ne doit être appliquée qu'en amont de l'écoulement,

$$\Gamma_\Omega^- = \{\mathbf{x} \in \partial\Omega \mid \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n} < 0\}, \quad (1.12)$$

où $\mathbf{n}$ est la normale extérieure au domaine Ω . Nous avons donc la condition limite,

$$F = F_{\Gamma^-} \quad \text{sur } \Gamma^-(\Omega). \quad (1.13)$$

L'équation de transport (1.11) ajoutée aux équations de conservation de masse (1.1), d'énergie (1.3) et de mouvement (1.2) complète ainsi la description du problème d'écoulement à surface libre.

1.4 L'équation des sensibilités pour les écoulements multiphases

Cette section présente le développement de l'équation générale des sensibilités dans le cas d'écoulements multiphases, incompressibles et stationnaires décrits par les équations de Navier-Stokes, de conservation de l'énergie et de transport.

1.4.1 Équations générales des sensibilités

La solution des équations d'un écoulement multiphase décrites dans les sections précédentes nous donne la valeur des variables de l'écoulement $\mathbf{u}$, p , T et F en chaque point $\mathbf{x}$ du domaine Ω . Pour l'analyse des sensibilités, on considère que les variables de l'écoulement dépendent en plus des paramètres du problème tels que les conditions frontières, la géométrie du domaine ou les propriétés physiques des fluides. Si a désigne un de ces paramètres, on notera cette dépendance de la façon suivante :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, a) = (u(\mathbf{x}, a), v(\mathbf{x}, a));$$

$$p = p(\mathbf{x}, a);$$

$$T = T(\mathbf{x}, a);$$

$$F = F(\mathbf{x}, a).$$

On définit les sensibilités de ces variables par :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_u &= (S_u, S_v) = \left(\frac{\partial u}{\partial a}, \frac{\partial v}{\partial a} \right); \\ S_p &= \frac{\partial p}{\partial a}; \\ S_T &= \frac{\partial T}{\partial a}; \\ S_F &= \frac{\partial F}{\partial a}. \end{aligned}$$

Ces dérivées partielles représentent donc, en chaque point du domaine, le taux de variation de la solution de l'écoulement par rapport au paramètre a . De telles dérivées existent donc dans un espace de solutions paramétrisées par a . Il n'est pas question ici de résoudre les équations de l'écoulement pour chaque valeur du paramètre a pour ensuite prendre la dérivée par rapport à ce paramètre. Nous allons plutôt évaluer ces dérivées en résolvant les équations des sensibilités obtenues par différentiation des équations de l'écoulement par rapport au paramètre a . Ainsi, pour l'équation de conservation de la masse, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a}(\nabla \cdot \mathbf{u}) &= \frac{\partial}{\partial a}(0) \\ &\iff \\ \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial a} \right) &= 0 \\ &\iff \\ \nabla \cdot \mathbf{S}_u &= 0. \end{aligned} \tag{1.14}$$

On applique le même traitement aux équations de conservation du mouvement et de l'énergie. Pour bien comprendre le processus de différentiation que nous venons d'entreprendre, remarquons que dans l'espace des solutions paramétrisées par a , chaque solution est à l'équilibre, c'est-à-dire qu'elle respecte les équations de l'écoulement

données pour une valeur du paramètre de design a . Dans cette approche générale, on suppose que toutes les variables et tous les coefficients peuvent dépendre du paramètre a et doivent donc être dérivés. Afin de dériver correctement l'équation de conservation du mouvement, nous avons explicité cette dépendance :

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{da} \left\{ \rho(a) (\mathbf{u}(a) \cdot \nabla) \mathbf{u}(a) \right\} = \\
& \frac{d}{da} \left\{ -\nabla p(a) + \nabla \cdot [\mu(a) (\nabla \mathbf{u}(a) + (\nabla \mathbf{u}(a))^T)] \right. \\
& \quad \left. - \rho(a) \mathbf{g}(a) \beta(a) (T(a) - T_0(a)) + \mathbf{f}(a) \right\} \\
& \quad \Longleftrightarrow \\
& \rho'(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \rho(\mathbf{s}_u \cdot \nabla) \mathbf{u} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{s}_u = -\nabla s_p \\
& \quad + \nabla \cdot [\mu'(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) + \mu(\nabla \mathbf{s}_u + (\nabla \mathbf{s}_u)^T)] \\
& \quad - (\rho' \mathbf{g} \beta + \rho \mathbf{g}' \beta + \rho \mathbf{g} \beta') (T - T_0) - \rho \mathbf{g} \beta (s_T - T'_0) \\
& \quad + \mathbf{f}'. \tag{1.15}
\end{aligned}$$

Par convention, les sensibilités des variables d'écoulement sont représentées par le symbole « S » alors qu'un « $'$ » identifie les sensibilités de toutes les autres quantités.

Notons qu'en général, les propriétés d'un fluide dépendent aussi des variables de l'écoulement. Par exemple, la viscosité peut dépendre non seulement du paramètre a mais également de la température et de la vitesse $\mathbf{u} = (u, v)$. Si l'on considère une telle dépendance pour une quantité telle que la viscosité,

$$\mu = \mu(u, v, T; a), \tag{1.16}$$

la sensibilité μ' doit être obtenue à l'aide de la règle de dérivation des fonctions

composées :

$$\begin{aligned}\mu' = \frac{d\mu}{da} &= \frac{\partial\mu}{\partial a} + \frac{\partial\mu}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial a} + \frac{\partial\mu}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial a} + \frac{\partial\mu}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial a} \\ &= \frac{\partial\mu}{\partial a} + \frac{\partial\mu}{\partial u} S_u + \frac{\partial\mu}{\partial v} S_v + \frac{\partial\mu}{\partial T} S_T.\end{aligned}\quad (1.17)$$

Il suffit donc de tenir compte des bonnes dépendances et l'équation des sensibilités est obtenue en appliquant la dérivée totale d'une façon complètement mécanique. Il en est de même pour les deux autres équations de l'écoulement.

Avec l'équation de conservation de l'énergie, on obtient :

$$(\rho' c_p + \rho c'_p) \mathbf{u} \cdot \nabla T + \rho c_p (\mathbf{s}_u \cdot \nabla T + \mathbf{u} \cdot \nabla s_T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T + \lambda \nabla s_T) + q'_s. \quad (1.18)$$

Finalement, pour l'équation de transport, on obtient :

$$\mathbf{s}_u \cdot \nabla F + \mathbf{u} \cdot \nabla s_F = 0. \quad (1.19)$$

À ce stade, il convient de remarquer qu'on a différencié l'équation de conservation de la masse (1.1) à l'aide d'une dérivée partielle alors que les trois autres équations de l'écoulement ont subi une dérivée totale. Ceci est correct puisqu'aucune propriété du fluide n'entre en jeu dans l'équation (1.1). Les dérivées totale et partielle sont alors équivalentes.

Pour terminer cette section, notons que si l'on cherche des sensibilités par rapport à plus d'un paramètre, il y aura un système formé des équations (1.14), (1.15), (1.18) et (1.19) pour chaque paramètre. Passons maintenant aux conditions frontières.

1.4.2 Conditions aux frontières pour les sensibilités

Nous devons porter une attention particulière aux conditions frontières appliquées au système d'équations des sensibilités. Le calcul des conditions frontières dépend en effet de la nature du paramètre de design a . On distingue deux types de paramètres a : les paramètres de valeur et les paramètres de forme. Pour les paramètres de valeur, seules les variables et les propriétés physiques sont fonction du paramètre. Les paramètres de forme représentent le cas le plus général où non seulement les variables et les propriétés physiques, mais aussi la géométrie du domaine dépendent du paramètre.

1.4.2.1 Conditions de Dirichlet

On obtient les conditions aux frontières pour les sensibilités selon la même procédure que celle appliquée aux équations aux dérivées partielles.

Par exemple, considérons une condition de Dirichlet imposée sur la température pour chacune des solutions paramétrisées par a :

$$T(\mathbf{x}; a) = T_f(\mathbf{x}; a), \quad \forall \mathbf{x}_f \in \Gamma_{DT}. \quad (1.20)$$

La condition aux frontières pour la sensibilité de la température s'obtient par différentiation de ces conditions par rapport à a :

$$\frac{dT}{da}(\mathbf{x}; a) = \frac{dT_f}{da}(\mathbf{x}; a), \quad \forall \mathbf{x}_f \in \Gamma_{DT}. \quad (1.21)$$

Pour un paramètre de valeur, la définition de la géométrie, et donc celle des courbes frontières, ne dépend pas du paramètre a . On a alors un déplacement nul de la frontière ce qui s'exprime par $\partial x_f / \partial a = 0$. La dérivée totale de l'expression (1.21) devient donc une dérivée partielle. Ainsi, pour un paramètre de valeur, la condition de Dirichlet

est

$$\frac{\partial T}{\partial a}(\mathbf{x}; a) \equiv S_T(\mathbf{x}; a) = \frac{\partial T_f}{\partial a}(\mathbf{x}; a), \quad \forall \mathbf{x}_f \in \Gamma_{DT}. \quad (1.22)$$

Pour un paramètre de forme par contre, en plus de la variation de la valeur de la condition limite $T_f(\mathbf{x}; a)$, il faut tenir compte du fait que la frontière elle-même peut se déplacer lorsque le paramètre a varie. Soit la paramétrisation de la frontière Γ_{DT} :

$$\Gamma_{DT} = \left\{ \left(x_f(t; a), y_f(t; a) \right) \middle| t \in [0, 1] \right\}, \quad (1.23)$$

où $\mathbf{x}_f = (x_f, y_f)$ sont les coordonnées des points appartenant à Γ_{DT} . L'expression (1.21) devient alors

$$\frac{\partial T}{\partial a} + \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a} = \frac{dT_f}{da}(\mathbf{x}; a), \quad \forall \mathbf{x}_f \in \Gamma_{DT}, \quad (1.24)$$

ce qui donne pour la condition de Dirichlet d'un paramètre de forme,

$$\frac{\partial T}{\partial a}(\mathbf{x}; a) \equiv S_T(\mathbf{x}; a) = \frac{dT_f}{da}(\mathbf{x}; a) - \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} - \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a}, \quad \forall \mathbf{x}_f \in \Gamma_{DT}. \quad (1.25)$$

Dans cette expression nous avons isolé la sensibilité de la température non seulement parce qu'il s'agit de la variable dépendante dans les équations des sensibilités, mais également parce qu'elle est la seule valeur inconnue. En effet, les termes $\partial x_f / \partial a$ et $\partial y_f / \partial a$ correspondent au déplacement de la frontière alors que le terme dT_f / da est la variation de la valeur de la condition limite de la température selon a . Ces quantités font partie des données du problème. Les termes $\partial T / \partial x$ et $\partial T / \partial y$, pour leur part, sont des dérivées premières de la solution de l'écoulement et sont calculés à partir d'une solution numérique de l'écoulement obtenue dans une première étape. L'évaluation de ces dérivées à la frontière du domaine n'est pas une tâche facile, ce qui explique une moins bonne performance des solveurs pour les paramètres de forme (cf. Turgeon (2001)).

Remarquons pour finir que la condition frontière pour un paramètre de valeur peut être obtenue à partir de la condition frontière pour un paramètre de forme en annulant les déplacements de la frontière ($\partial x_f / \partial a = \partial y_f / \partial a = 0$), ce qui conduit à la mise en œuvre générale de la méthode. Aussi, pour les conditions aux frontières en vitesse, on écrira directement les expressions générales :

$$S_u(\mathbf{x}; a) = \frac{du_f}{da}(\mathbf{x}; a) - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} - \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a}, \quad \forall \mathbf{x}_f \in \Gamma_{Du}; \quad (1.26)$$

$$S_v(\mathbf{x}; a) = \frac{dv_f}{da}(\mathbf{x}; a) - \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} - \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a}, \quad \forall \mathbf{x}_f \in \Gamma_{Dv}, \quad (1.27)$$

où les deux derniers termes s'annulent toujours dans le cas d'un paramètre de valeur puisque les déplacements $\partial x_f / \partial a$ et $\partial y_f / \partial a$ sont nuls.

On termine la description des conditions de Dirichlet en dérivant la valeur de la pseudo-concentration imposée en amont de l'écoulement :

$$S_F(\mathbf{x}; a) = \frac{dF_{\Gamma^-}}{da}(\mathbf{x}; a) - \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} - \frac{\partial F}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a}, \quad \forall \mathbf{x}_f \in \Gamma^-(\Omega). \quad (1.28)$$

Notons qu'à l'instar de l'équation de transport (1.11), l'équation de la sensibilité de la pseudo-concentration ne possède que des conditions de Dirichlet.

1.4.2.2 Conditions de Neumann

Nous allons commencer par donner les conditions de Neumann pour un paramètre de forme en calculant encore une fois la dérivée totale des conditions frontières de

l'écoulement. Considérons d'abord l'imposition d'un flux de chaleur :

$$-\lambda(T(\mathbf{x}; a); a) \nabla T(\mathbf{x}; a) \cdot \mathbf{n}(a) = q_f(\mathbf{x}, T; a), \quad \forall \mathbf{x}_f \in \Gamma_{NT}. \quad (1.29)$$

Nous ne tenons pas compte de toutes les dépendances rencontrées jusqu'ici. Par exemple, il est entendu que la température est la seule variable de l'écoulement affectant la conductivité thermique λ . La nouveauté pour une condition de Neumann provient de la présence de la normale extérieure $\mathbf{n}$ à la courbure Γ_{NT} . Dans le cas d'un paramètre de forme a , la courbe frontière Γ_{NT} , et donc la normale, connaissent un déplacement en fonction de a .

Une fois que toutes les dépendances sont bien exprimées, on peut prendre correctement la dérivée totale de la condition de Neumann :

$$\frac{d\lambda}{da} \nabla T \cdot \mathbf{n} + \lambda \nabla \frac{dT}{da} \cdot \mathbf{n} + \lambda \nabla T \cdot \frac{d\mathbf{n}}{da} = \frac{dq_f}{da} \quad (1.30)$$

où

$$\begin{aligned} \frac{d\lambda}{da} &= \frac{d\lambda}{da}(T(\mathbf{x}; a); a) \\ &= \frac{\partial \lambda}{\partial a} + \frac{\partial \lambda}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial a} + \frac{\partial \lambda}{\partial T} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a} \right) \end{aligned} \quad (1.31)$$

et

$$\frac{dT}{da} = \frac{\partial T}{\partial a} + \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a}. \quad (1.32)$$

Encore ici, on choisira d'isoler à droite tous les termes faisant partie de la donnée du problème, ce qui inclut les termes dépendants de la géométrie, et de ne conserver à gauche que les sensibilités. Ceci nous donne :

$$\begin{aligned}
& \left(-\frac{\partial \lambda}{\partial a} - \frac{\partial \lambda}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial a} \right) \nabla T \cdot \mathbf{n} - \lambda \nabla \frac{\partial T}{\partial a} \cdot \mathbf{n} = \\
& \frac{dq_f}{da} + \frac{\partial \lambda}{\partial T} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a} \right) \nabla T \cdot \mathbf{n} + \lambda \nabla \left(\frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a} \right) \cdot \mathbf{n} \\
& + \lambda \nabla \cdot \frac{d\mathbf{n}}{da} \quad \forall \mathbf{x}_f \in \Gamma_{NT}.
\end{aligned} \tag{1.33}$$

On définira la sensibilité de la conductivité par :

$$\lambda' = \frac{\partial \lambda}{\partial a} + \frac{\partial \lambda}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial a}, \tag{1.34}$$

de sorte que le membre de droite de (1.33) se réduit à :

$$-\lambda' \nabla T \cdot \mathbf{n} - \lambda' \nabla S_T \cdot \mathbf{n}. \tag{1.35}$$

Dans le membre de droite de (1.33), nous remarquons la présence de dérivées secondes de l'écoulement. En effet,

$$\begin{aligned}
& \nabla \left(\frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a} \right) = \\
& \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a}, \frac{\partial^2 T}{\partial y \partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \frac{\partial y_f}{\partial a} \right].
\end{aligned} \tag{1.36}$$

L'évaluation de ces dérivées secondes, à partir de la solution numérique de l'écoulement, est une tâche encore plus ardue que celle des dérivées premières exigées pour les conditions de Dirichlet (voir Turgeon (2001)). C'est pourquoi nous ne traiterons pas ce cas dans nos applications.

Dans le cas d'un paramètre de valeur, la condition de Neumann pour l'équation de

conservation de l'énergie devient simplement

$$-\lambda' \nabla T \cdot \mathbf{n} - \lambda' \nabla S_T \cdot \mathbf{n} = \frac{dq_f}{da}. \quad (1.37)$$

On traite en dernier lieu l'équation de conservation du mouvement, dont les conditions frontières sont données sous forme de tractions par :

$$\mathbf{t}_f \equiv \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mu(\mathbf{x}; a) [\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}; a) + (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}; a))^T] \cdot \mathbf{n}(a) - p(\mathbf{x}; a) \cdot \mathbf{n}. \quad (1.38)$$

La dérivée totale de cette expression est alors :

$$\begin{aligned} \mu' [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \cdot \mathbf{n} + \mu [\nabla \mathbf{s}_u + (\nabla \mathbf{s}_u)^T] \cdot \mathbf{n} - s_p \cdot \mathbf{n} = \\ \frac{d\mathbf{t}_f}{da} - \mu [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \cdot \frac{d\mathbf{n}}{da} - \\ \mu \left[\nabla \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a} \right) + \left(\nabla \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a} \right) \right)^T \right] \cdot \mathbf{n} \\ + \left(\frac{\partial p}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial p}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a} \right) \cdot \mathbf{n} + p \frac{d\mathbf{n}}{da}, \end{aligned} \quad (1.39)$$

où l'on a défini la sensibilité de la viscosité par

$$\mu' = \frac{\partial \mu}{\partial a} + \frac{\partial \mu}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial a}. \quad (1.40)$$

Une fois de plus, tous les termes de sensibilités se retrouvent dans le membre de gauche tandis que les données du problème et leurs dépendances sur la géométrie se retrouvent dans le membre de droite.

Finalement, cette formule générale, valable pour tous les types de paramètres, se

simplifie grandement dans le cas d'un paramètre de valeur :

$$\mu'[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \cdot \mathbf{n} + \mu[\nabla \mathbf{s}_u + (\nabla \mathbf{s}_u)^T] \cdot \mathbf{n} - s_p \cdot \mathbf{n} = \frac{d\mathbf{t}_f}{da}. \quad (1.41)$$

Nous utiliserons l'abréviation suivante pour donner les conditions frontières sur certaines figures :

$$\mathbf{S}_\sigma \cdot \mathbf{n} = \frac{d\mathbf{t}_f}{da}. \quad (1.42)$$

CHAPITRE 2

LA DISCRÉTISATION DES ÉQUATIONS

Ce chapitre présente la méthode de résolution par éléments finis pour les équations aux dérivées partielles de l'écoulement et des sensibilités. Dans la première section on donne la formulation variationnelle des équations. La discrétisation du problème selon la méthode de Galerkin est obtenue à la deuxième section. Dans la troisième section, on discute de certains détails d'implantation se rapportant aux équations des sensibilités. Le choix des éléments finis est donné et pour finir, on décrit la technique de stabilisation utilisée.

2.1 Formulation variationnelle

La formulation variationnelle, ou forme faible, associée aux équations de l'écoulement et des sensibilités, s'obtient en multipliant ces équations par une fonction test et en intégrant sur le domaine de calcul Ω . On procède ensuite à l'intégration par parties de certains termes dans le but de réduire l'ordre des dérivées et de faire apparaître les conditions frontières naturelles.

Pour simplifier l'écriture qui sera parfois lourde, nous introduisons la notation suivante pour l'intégrale d'un produit de deux fonctions :

$$(\zeta, \xi)_{\Omega} = \int_{\Omega} \zeta \cdot \xi \, d\Omega, \quad \text{pour les fonctions } \zeta \text{ et } \xi \text{ de } \Omega \rightarrow \mathbf{R}^n.$$

Pour les fonctions de $\Omega \rightarrow \mathbf{R}^{n \times n}$, le produit à intégrer sera défini par $\zeta \cdot \xi = \zeta : \xi = \zeta_{ij} \xi_{ji}$, où la convention de sommation des indices est employée.

On retrouve aussi un produit semblable avec l'intégrale prise sur une partie de la frontière $\Gamma \subset \partial\Omega$:

$$(\zeta, \xi)_\Gamma = \int_\Gamma \zeta \cdot \xi \, d\Gamma, \quad \text{pour les fonctions } \zeta \text{ et } \xi \text{ de } \Gamma \rightarrow \mathbf{R}^n.$$

2.1.1 Forme faible des équations de l'écoulement

La première étape consiste à multiplier les équations de l'écoulement par des fonctions tests notées δp , $\delta \mathbf{u} = (\delta u, \delta v)$, δT et δF respectivement nulles sur $\emptyset$, $\Gamma_{D\mathbf{u}}$, Γ_{DT} et $\Gamma^-(\Omega)$. On procède ensuite à l'intégration des équations de :

Conservation de la matière :

$$\int_\Omega (\nabla \cdot \mathbf{u}) \cdot \delta p \, d\Omega = (\nabla \cdot \mathbf{u}, \delta p)_\Omega = 0, \quad (2.1)$$

où cette égalité et celles qui suivent doivent être satisfaites pour chaque fonction test ;

Conservation de la quantité de mouvement :

$$\begin{aligned} & \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}, \delta \mathbf{u})_\Omega - (\nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u})), \delta \mathbf{u})_\Omega + (\nabla p, \delta \mathbf{u})_\Omega \\ & + (\rho \mathbf{g} \beta (T - T_o), \delta \mathbf{u})_\Omega - (\mathbf{f}, \delta \mathbf{u})_\Omega = 0, \end{aligned} \quad (2.2)$$

où nous avons utilisé le tenseur vitesse-de-déformation $\dot{\gamma}(\mathbf{u}) = 1/2(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$. On intègre maintenant par parties les termes de diffusion visqueuse et de pression pour obtenir la forme faible de l'équation du mouvement,

$$\begin{aligned} & \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}, \delta \mathbf{u})_\Omega + 2\mu(\dot{\gamma}(\mathbf{u}), \dot{\gamma}(\delta \mathbf{u}))_\Omega - ((2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u}) - p\mathbf{I}) \cdot \mathbf{n}, \delta \mathbf{u})_{\Gamma_{Nu}} \\ & - (p, \nabla \cdot \delta \mathbf{u})_\Omega + (\rho \mathbf{g} \beta (T - T_o), \delta \mathbf{u})_\Omega - (\mathbf{f}, \delta \mathbf{u})_\Omega = 0. \end{aligned} \quad (2.3)$$

L'intégration par parties du terme de pression est obtenue à partir du gradient,

$$\nabla \cdot (p \delta \mathbf{u}) = (\nabla p) \cdot \delta \mathbf{u} + p(\nabla \cdot \delta \mathbf{u}),$$

qui est d'abord intégré,

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (p \delta \mathbf{u}) d\Omega = \int_{\Omega} (\nabla p) \cdot \delta \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Omega} p(\nabla \cdot \delta \mathbf{u}) d\Omega. \quad (2.4)$$

Le théorème de la divergence est ensuite appliqué au membre de gauche,

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (p \delta \mathbf{u}) d\Omega = \int_{\Gamma=\partial\Omega} (p \delta \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} d\Gamma.$$

Remarquons que l'intégrand de droite possède une deuxième forme,

$$(p \delta \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = (p \mathbf{I} \cdot \mathbf{n}) \cdot \delta \mathbf{u},$$

où $\mathbf{I}$ est la matrice identité de dimension deux et $\mathbf{n}$ est la normale extérieure à la frontière $\Gamma = \partial\Omega$. Cette forme se prête mieux à notre notation abrégée puisque

$$\int_{\Gamma} (p \mathbf{I} \cdot \mathbf{n}) \cdot \delta \mathbf{u} d\Gamma = (p \mathbf{I} \cdot \mathbf{n}, \delta \mathbf{u})_{\Gamma}.$$

Ainsi, l'intégrale par parties (2.4) s'écrit sous la forme abrégée,

$$(p \mathbf{I} \cdot \mathbf{n}, \delta \mathbf{u})_{\Gamma} = (\nabla p, \mathbf{n})_{\Omega} + (p, \nabla \cdot \delta \mathbf{u})_{\Omega}. \quad (2.5)$$

Pour sa part, l'intégration par parties du terme de diffusion visqueuse provient du gradient,

$$\nabla \cdot (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u}) \cdot \delta(\mathbf{u})) = ((\nabla \cdot 2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u})) \cdot \delta(\mathbf{u})) + (2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u}) : \nabla \delta(\mathbf{u})). \quad (2.6)$$

Remarquons que le dernier terme de cette équation est le produit de deux tenseurs

dont le premier est symétrique,

$$2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u}) : \nabla\delta(\mathbf{u}) = \mu(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T) : \nabla\delta(\mathbf{u}),$$

et cette symétrie nous permet d'écrire,

$$\begin{aligned} \mu(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T) : (\nabla\delta(\mathbf{u})) &= \mu(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T) : (\nabla\delta(\mathbf{u}))^T \\ &= \mu/2 (\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T) : (\nabla\delta(\mathbf{u}) + \nabla\delta(\mathbf{u})^T) \\ &= 2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u}) : \dot{\gamma}(\delta(\mathbf{u})). \end{aligned}$$

L'intégration de l'équation (2.6) donne alors,

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u}) \cdot \delta(\mathbf{u})) d\Omega = \int_{\Omega} (\nabla \cdot 2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u})) \cdot \delta(\mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Omega} 2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u}) : \dot{\gamma}(\delta(\mathbf{u})) d\Omega,$$

et après application du théorème de la divergence au membre de gauche on obtient,

$$\int_{\Gamma} (2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u}) \cdot \delta(\mathbf{u})) \cdot \mathbf{n} d\Gamma = \int_{\Omega} (\nabla \cdot 2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u})) \cdot \delta(\mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Omega} 2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u}) : \dot{\gamma}(\delta(\mathbf{u})) d\Omega,$$

ce qui s'écrit, en version abrégée,

$$(2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}, \delta(\mathbf{u}))_{\Gamma} = (\nabla \cdot (2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u})), \delta(\mathbf{u}))_{\Omega} + 2\mu(\dot{\gamma}(\mathbf{u}), \dot{\gamma}(\delta(\mathbf{u})))_{\Omega}. \quad (2.7)$$

La combinaison des intégrales par parties des termes de pression et de diffusion visqueuse (équations (2.5) et (2.7)), nous permet de comprendre le passage de l'équation (2.2) à l'équation (2.3). On obtient en effet,

$$\begin{aligned} -(\nabla \cdot (2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u})), \delta(\mathbf{u}))_{\Omega} + (\nabla p, \delta(\mathbf{u}))_{\Omega} = \\ 2\mu(\dot{\gamma}(\mathbf{u}), \dot{\gamma}(\delta(\mathbf{u})))_{\Omega} - (p, \nabla \cdot \delta(\mathbf{u}))_{\Omega} - ((2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u}) - p\mathbf{I}) \cdot \mathbf{n}, \delta(\mathbf{u}))_{\Gamma}. \end{aligned}$$

Rappelons pour finir que la frontière se divise en deux parties $\Gamma = \Gamma_{Du} \cup \Gamma_{Nu}$ et que

les fonctions tests $\delta(\mathbf{u})$ s'annulent sur la partie Γ_{Du} , où ont été imposées les conditions de Dirichlet, de sorte que,

$$((2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u}) - p\mathbf{I}) \cdot \mathbf{n}, \delta(\mathbf{u}))_{\Gamma} = ((2\mu\dot{\gamma}(\mathbf{u}) - p\mathbf{I}) \cdot \mathbf{n}, \delta(\mathbf{u}))_{\Gamma_{Nu}};$$

Conservation de l'énergie :

$$(\rho c_p \mathbf{u} \cdot \nabla T, \delta T)_{\Omega} + (\nabla \cdot (\lambda \nabla T), \delta T)_{\Omega} + (q_s, \delta T)_{\Omega} = 0, \quad (2.8)$$

et après intégration par parties du terme de diffusion on obtient la forme faible de l'équation d'énergie

$$(\rho c_p \mathbf{u} \cdot \nabla T, \delta T)_{\Omega} - (\lambda \nabla T, \nabla \delta T)_{\Omega} + (\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}, \delta T)_{\Gamma_{NT}} + (q_s, \delta T)_{\Omega} = 0. \quad (2.9)$$

L'intégration par parties du terme de diffusion provient de l'intégration du gradient,

$$\nabla \cdot (\lambda \nabla T \delta T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \delta T + \lambda \nabla T \cdot (\nabla \delta T)$$

et de l'application du théorème de la divergence au membre de gauche,

$$\int_{\Gamma} (\lambda \nabla T \delta T) \cdot \mathbf{n} d\Gamma = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \delta T d\Omega + \int_{\Omega} \lambda \nabla T \cdot (\nabla \delta T) d\Omega.$$

En notation abrégée ceci devient,

$$(\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}, \delta T)_{\Gamma} = (\nabla \cdot (\lambda \nabla T), \delta T)_{\Omega} + (\lambda \nabla T, \nabla \delta T)_{\Omega},$$

et puisque les fonctions tests δT s'annulent sur la partie Γ_{DT} de la frontière on obtient,

$$(\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}, \delta T)_{\Gamma} = (\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}, \delta T)_{\Gamma_{NT}};$$

Pseudo-concentration :

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla F, \delta F)_\Omega = 0. \quad (2.10)$$

2.1.2 Forme faible des équations de sensibilité

On note cette fois les fonctions tests δS_p , $\delta \mathbf{S}_u = (\delta S_u, \delta S_v)$, δS_T et δS_F qui s'annulent respectivement sur $\emptyset$, Γ_{D_u} , Γ_{DT} et $\Gamma^-(\Omega)$. On procède ensuite à l'intégration des équations de :

Sensibilité de la conservation de la masse :

$$(\nabla \cdot \mathbf{S}_u, \delta S_p)_\Omega = 0, \quad (2.11)$$

où cette égalité et celles qui suivent doivent être satisfaites pour chaque fonction test ;

Sensibilité de la conservation de la quantité de mouvement :

$$\begin{aligned} & (\rho'(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \rho(\mathbf{S}_u \cdot \nabla \mathbf{u}) + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{S}_u), \delta \mathbf{S}_u)_\Omega \\ & - (\nabla(2\mu' \dot{\gamma}(\mathbf{u})) + \nabla(2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{S}_u)), \delta \mathbf{S}_u)_\Omega + (\nabla S_p, \delta \mathbf{S}_u)_\Omega \\ & + ((\rho \mathbf{g} \beta)'(T - T_o) + \rho \mathbf{g} \beta(S_T - T'_o), \delta \mathbf{S}_u)_\Omega - (\mathbf{f}', \delta \mathbf{S}_u)_\Omega = 0. \end{aligned} \quad (2.12)$$

On obtient la forme faible après intégration par parties des termes de diffusion visqueuse et de pression,

$$\begin{aligned} & (\rho'(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \rho(\mathbf{S}_u \cdot \nabla \mathbf{u}) + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{S}_u), \delta \mathbf{S}_u)_\Omega \\ & + (2\mu' \dot{\gamma}(\mathbf{u}) + 2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{S}_u), \nabla \delta \mathbf{S}_u)_\Omega - (2\mu' \dot{\gamma}(\mathbf{u}) + 2\mu \dot{\gamma}(\mathbf{S}_u), \delta \mathbf{S}_u)_{\Gamma_{N_u}} \\ & - (S_p, \delta \mathbf{S}_u)_\Omega + (S_p \mathbf{I} \cdot \mathbf{n}, \delta \mathbf{S}_u)_{\Gamma_{N_u}} \\ & + ((\rho \mathbf{g} \beta)'(T - T_o) + \rho \mathbf{g} \beta(S_T - T'_o), \delta \mathbf{u})_\Omega - (\mathbf{f}', \delta \mathbf{S}_u)_\Omega = 0; \end{aligned} \quad (2.13)$$

Sensibilité de la conservation de l'énergie :

$$\begin{aligned} & ((\rho c_p)' \mathbf{u} \cdot \nabla T + \rho c_p \mathbf{S}_u \cdot \nabla T + \rho c_p \mathbf{u} \cdot \nabla S_T, \delta S_T)_\Omega \\ & - (\nabla \cdot (\lambda' \nabla T + \lambda \nabla S_T), \delta S_T)_\Omega - (q'_s, \delta S_T)_\Omega = 0. \end{aligned} \quad (2.14)$$

On obtient la forme faible après intégration par parties du terme de diffusion,

$$\begin{aligned} & ((\rho c_p)' \mathbf{u} \cdot \nabla T + \rho c_p \mathbf{S}_u \cdot \nabla T + \rho c_p \mathbf{u} \cdot \nabla S_T, \delta S_T)_\Omega \\ & + (\lambda' \nabla T + \lambda \nabla S_T, \nabla \delta S_T)_\Omega - ((\lambda' \nabla T + \lambda \nabla S_T) \cdot \mathbf{n}, \delta S_T)_{\Gamma_{NT}} \\ & - (q'_s, \delta S_T)_\Omega = 0; \end{aligned} \quad (2.15)$$

Sensibilité de la pseudo-concentration :

$$(\mathbf{S}_u \cdot \nabla F + \mathbf{u} \cdot \nabla S_F, \delta S_F)_\Omega = 0. \quad (2.16)$$

2.2 Discrétisation des formes faibles

Les variables u , v , p , T et F et leurs sensibilités sont approximées par des combinaisons linéaires de fonctions d'interpolation ϕ_i . Nous employons ici la méthode de Galerkin pour laquelle ces mêmes fonctions d'interpolation sont utilisées comme fonctions tests de la formulation faible. Ainsi, les fonctions décrivant les variables dépendantes et celles pour les fonctions tests s'écrivent respectivement :

$$\alpha(\mathbf{x}) \approx \alpha_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N^\alpha} \alpha_i \phi_i^\alpha(\mathbf{x}) \quad \text{où} \quad \delta \alpha_i = \phi_i^\alpha(\mathbf{x}), \quad (2.17)$$

où $\alpha = u, v, p, T, F, S_u, S_v, S_p, S_T$ ou S_F . On notera N^α le nombre de noeuds par élément et donc le nombre de fonctions d'interpolation pour chacune des variables.

Les coefficients α_i représentent les valeurs nodales. L'indice h nous indique qu'il s'agit d'une fonction approximée par éléments finis. Notons en dernier lieu qu'il est possible d'utiliser des fonctions d'interpolation différentes pour le calcul d'une variable et de sa sensibilité. Pour une question de simplicité d'implantation, nous n'avons pas retenu cette possibilité.

On peut maintenant procéder à la discrétisation des formulations faibles en remplaçant simplement les variables dépendantes par leurs approximations éléments finis, et les fonctions test par les fonctions d'interpolation. Nous commençons par les équations de l'écoulement.

2.2.1 Discrétisation des équations de l'écoulement

Conservation de la masse :

La discrétisation conduit à l'approximation suivante de la forme faible,

$$(\nabla \cdot \mathbf{u}, \delta p)_\Omega \approx (\nabla \cdot \mathbf{u}_h, \phi_j^p)_\Omega = 0, \quad 1 \leq j \leq N^p,$$

où

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_h = \nabla \cdot (u_h, v_h) = \frac{\partial u_h}{\partial x} + \frac{\partial v_h}{\partial y} = \sum_{i=1}^{N^u} u_i \frac{\partial \phi_i^u}{\partial x} + \sum_{i=1}^{N^v} v_i \frac{\partial \phi_i^v}{\partial y}.$$

Ceci nous mène donc au système d'équations

$$(\nabla \cdot \mathbf{u}_h, \delta p)_\Omega = [D_1, D_2] \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.18)$$

où le membre de droite est un vecteur nul de longueur N^p et où :

$$(D_1)_{ij} = (\partial\phi_i^u/\partial x, \phi_j^p)_\Omega;$$

$$(D_2)_{ij} = (\partial\phi_i^v/\partial y, \phi_j^p)_\Omega,$$

sont les termes de divergence.

Conservation de la quantité de mouvement :

En suivant une démarche semblable à celle décrite pour l'équation de conservation de la masse, on obtient le système

$$\begin{bmatrix} V_{11} + C_1 & V_{12} & D_1^T & H_1 \\ V_{21} & V_{22} + C_2 & D_2^T & H_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \\ p_i \\ T_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_1 + H_1^0 + N_1 \\ F_2 + H_2^0 + N_2 \end{bmatrix}, \quad (2.19)$$

où :

$$(V_{11})_{ij} = (2\mu\partial\phi_i^u/\partial x, \partial\phi_j^u/\partial x)_\Omega + (\mu\partial\phi_i^u/\partial y, \partial\phi_j^u/\partial y)_\Omega;$$

$$(V_{12})_{ij} = (V_{21})_{ji} = (\mu\partial\phi_i^u/\partial x, \partial\phi_j^v/\partial y)_\Omega;$$

$$(V_{22})_{ij} = (\mu\partial\phi_i^v/\partial x, \partial\phi_j^v/\partial x)_\Omega + (2\mu\partial\phi_i^v/\partial y, \partial\phi_j^v/\partial y)_\Omega,$$

sont les termes de diffusion visqueuse et,

$$(C_1)_{ij} = (\rho u_h \partial\phi_i^u/\partial x + \rho v_h \partial\phi_i^u/\partial y, \phi_j^u)_\Omega;$$

$$(C_2)_{ij} = (\rho u_h \partial\phi_i^v/\partial x + \rho v_h \partial\phi_i^v/\partial y, \phi_j^v)_\Omega,$$

sont les termes de convection. Remarquons que ces termes ne sont pas linéaires puisque le terme de convection $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ n'est pas linéaire. Ainsi le système linéaire (2.19) ne

pourra pas résoudre simultanément les termes $\mathbf{u}$ et $\nabla \mathbf{u}$ du terme de convection. La résolution du système est alors accompli grâce à un processus itératif. Dans la formule ci-dessus nous avons linéarisé uniquement le gradient $\nabla \mathbf{u}$ et nous avons fixé la valeur de $\mathbf{u}_h = (u_h, v_h)$ en lui donnant la valeur de la vitesse obtenue à l'itération précédente :

$$\nabla \mathbf{u}_h = \nabla(u_h, v_h) = \begin{pmatrix} \sum_i^{N^u} u_i \partial \phi_i^u / \partial x & \sum_i^{N^v} v_i \partial \phi_i^v / \partial x \\ \sum_i^{N^u} u_i \partial \phi_i^u / \partial y & \sum_i^{N^v} v_i \partial \phi_i^v / \partial y \end{pmatrix}.$$

La description de la matrice est terminée par la donnée des termes de dilatation thermique,

$$(H_1)_{ij} = -(\rho \mathbf{g}_x \beta \phi_i^T, \phi_j^u)_\Omega \quad , \quad (H_2)_{ij} = -(\rho \mathbf{g}_y \beta \phi_i^T, \phi_j^v)_\Omega.$$

Dans le membre de droite on retrouve les termes indépendants des variables de l'écoulement,

$$(H_1^0)_j = -(\rho \mathbf{g}_x \beta T_0, \phi_j^u)_\Omega \quad , \quad (H_2^0)_j = -(\rho \mathbf{g}_y \beta T_0, \phi_j^v)_\Omega ,$$

pour le terme de température de référence de la dilatation thermique, ainsi que les termes de force extérieure,

$$(F_1)_j = -(f_x, \phi_j^u)_\Omega \quad , \quad (F_2)_j = -(f_y, \phi_j^v)_\Omega.$$

Finalement, on retrouve à droite les termes de bord provenant des intégrations par parties qui ne dépendent que des conditions de Neumann :

$$(N_1)_j = -((\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u}_h) + p \mathbf{I}) \cdot \mathbf{n}, \phi_j^u)_{\Gamma_{N\mathbf{u}}} \quad , \quad (N_2)_j = -((\mu \dot{\gamma}(\mathbf{u}_h) + p \mathbf{I}) \cdot \mathbf{n}, \phi_j^v)_{\Gamma_{N\mathbf{u}}};$$

Conservation de l'énergie :

Pour ce qui est de l'équation de conservation de l'énergie, on obtient le système

$$[G + E][T_i] = Q + J, \quad (2.20)$$

où

$$(G)_{ij} = (\rho c_p u_h \partial \phi_i^T / \partial x + \rho c_p v_h \partial \phi_i^T / \partial y, \phi_j^T)_\Omega$$

est le terme de convection thermique,

$$(E)_{ij} = -(\lambda \partial \phi_i^T / \partial x, \partial \phi_j^T / \partial x)_\Omega - (\lambda \partial \phi_i^T / \partial y, \partial \phi_j^T / \partial y)_\Omega$$

est le terme de conductivité thermique et où

$$(Q)_j = (q_s, \phi_j^T)_\Omega \quad \text{et} \quad (J)_j = -(\lambda \nabla T_h \cdot \mathbf{n}, \phi_j^T)_{\Gamma_{NT}}$$

sont respectivement le terme de source de chaleur extérieure et le terme de bord qui dépend des conditions frontières de Neumann en température.

Pseudo-concentration :

Pour ce qui est de l'équation de transport, on obtient le système

$$[K][F_i] = 0, \quad (2.21)$$

où

$$(K)_{ij} = (u_h \partial \phi_i^F / \partial x + v_h \partial \phi_i^F / \partial y, \phi_j^F)_\Omega.$$

Le système discret global à résoudre pour l'écoulement est donc :

$$\begin{bmatrix} V_{11} + C_1 & V_{12} & D_1^T & H_1 \\ V_{21} & V_{22} + C_2 & D_2^T & H_2 \\ D_1 & D_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & G + E \\ 0 & 0 & 0 & 0 & K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \\ p_i \\ T_i \\ F_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_1 + H_1^0 + N_1 \\ F_2 + H_2^0 + N_2 \\ 0 \\ Q + J \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

On doit remarquer que ce système est non-linéaire. En effet, si l'on explicite les dépendances des différents coefficients, on trouvera : $V(\mu)$, $C(\mathbf{u}; \rho)$, $H(\rho, \mathbf{g}, \beta)$, $G(\mathbf{u}; \rho, c_p)$, $F(f)$, $N(\mu, p)$, $H(\rho, \mathbf{g}, \beta, T_0)$, $E(\lambda)$, $Q(q_s)$, $J(\lambda)$ et $K(\mu)$. On observe que les composantes en vitesse de l'écoulement $\mathbf{u} = (u, v)$ apparaissent dans la matrice. De plus, les propriétés physiques des fluides apparaissent aussi (telles que ρ , λ et c_p qui dépendent en général des variables de l'écoulement).

2.2.2 Discrétisation des équations de la sensibilité

Ces équations font intervenir à la fois les variables de l'écoulement et leurs sensibilités. Nous allons donc formuler le problème avec deux familles de fonctions test. Par contre, il est entendu que la résolution des équations de la sensibilité se fait en une deuxième étape qui vient après la résolution des équations de l'écoulement. Ainsi, on appliquera la méthode des éléments finis uniquement aux variables de la sensibilité. Les variables de l'écoulement, déjà connues, se retrouveront dans le membre de droite puisqu'elles font partie de la donnée du problème. Nous avons décrit le processus de discrétisation en détail pour les équations de l'écoulement et on se contentera ici de donner directement la forme du système global à résoudre.

Le système discret global à résoudre pour les équations de la sensibilité est donné par

$$\begin{bmatrix} \mathcal{V} + \mathcal{C}_1 & \mathcal{V}_{12} & \mathcal{D}_1^T & \mathcal{H}_1 \\ \mathcal{V}_{21} & \mathcal{V}_{22} + \mathcal{C}_2 & \mathcal{D}_2^T & \mathcal{H}_2 \\ \mathcal{D}_1 & \mathcal{D}_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathcal{G} + \mathcal{E} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathcal{K} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{u_i} \\ S_{v_i} \\ S_{p_i} \\ S_{T_i} \\ S_{F_i} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \mathcal{F}_1 + \mathcal{H}_1^0 + \mathcal{N}_1 \\ \mathcal{F}_2 + \mathcal{H}_2^0 + \mathcal{N}_2 \\ 0 \\ \mathcal{Q} + \mathcal{J} \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} V'_{11} + C'_1 & V'_{12} & 0 & H'_1 \\ V'_{21} & V'_{22} + C'_2 & 0 & H'_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & G' + E' \\ 0 & 0 & 0 & 0 & K' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \\ p_i \\ T_i \\ F_i \end{bmatrix}.$$

Nous pouvons montrer que ce système d'équations est linéaire pour les variables de la sensibilité. Prenons par exemple les sous-matrices $\mathcal{C}$ et C' provenant du terme de convection dans l'équation de conservation du mouvement. Dans le système d'équations (2.22) résultant de la discrétisation des équations de l'écoulement, la sous-matrice $C(\mathbf{u}; \rho)$ dépend des composantes en vitesses $\mathbf{u} = (u, v)$ et fait apparaître un élément de non-linéarité dans le système d'équations. Ceci provient du fait que la vitesse apparaît aux deux facteurs du terme de convection,

$$(\rho(\mathbf{u}_h \cdot \nabla \mathbf{u}_h), \delta \mathbf{u})_\Omega = [C_1, C_2] \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \end{bmatrix}.$$

Une seule de ces occurrences peut être linéarisée dans la formulation matricielle. En

effet, nous n'avons linéarisé que le gradient de $\mathbf{u}_h$:

$$(C_1)_{ij} = (\rho[u_h \partial \phi_i^u / \partial x + v_h \partial \phi_i^u / \partial y], \phi_j^u)_\Omega;$$

$$(C_1)_{ij} = (\rho u_h \partial \phi_i^v / \partial x + \rho v_h \partial \phi_i^v / \partial y, \phi_j^v)_\Omega.$$

Par contre, pour obtenir l'équation de la sensibilité, nous avons dérivé le terme de convection de sorte que la variable de sensibilité n'apparaît plus que dans un facteur à la fois :

$$(\rho'(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \rho(S_{\mathbf{u}} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla S_{\mathbf{u}}), \delta S_{\mathbf{u}})_\Omega = [C_1, C_2] \begin{bmatrix} S_{ui} \\ S_{vi} \end{bmatrix} + [C'_1, C'_2] \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \end{bmatrix}.$$

Comme on le voit ci-dessous, on peut choisir chaque fois de linéariser le facteur de sensibilité au détriment du facteur de vitesse :

$$(C_1)_{ij} = (\rho[\phi_i^{S_u} \partial u_h / \partial x + \phi_i^{S_v} \partial u_h / \partial y], \phi_j^{S_u})_\Omega + (\rho[u_h \partial \phi_i^{S_u} / \partial x + v_h \partial \phi_i^{S_u} / \partial y], \phi_j^{S_u})_\Omega;$$

$$(C_2)_{ij} = (\rho[\phi_i^{S_u} \partial v_h / \partial x + \phi_i^{S_v} \partial v_h / \partial y], \phi_j^{S_u})_\Omega + (\rho[u_h \partial \phi_i^{S_v} / \partial x + v_h \partial \phi_i^{S_v} / \partial y], \phi_j^{S_u})_\Omega.$$

Les termes sans sensibilités sont traités par les sous-matrices :

$$(C'_1)_{ij} = (\rho'[u_h \partial \phi_i^u / \partial x + v_h \partial \phi_i^u / \partial y], \phi_j^{S_u})_\Omega;$$

$$(C'_1)_{ij} = (\rho' u_h \partial \phi_i^v / \partial x + \rho' v_h \partial \phi_i^v / \partial y, \phi_j^{S_v})_\Omega.$$

Nous verrons à la prochaine section les problèmes que peuvent nous causer la présence des dérivées de l'écoulement $\partial u_h / \partial \mathbf{x}$ et $\partial v_h / \partial \mathbf{x}$ dans les coefficients explicités ci-dessus.

2.3 Détails d'implantation

2.3.1 Présence des dérivées de l'écoulement

À la fin de la section précédente, nous avons vu que les équations des sensibilités contiennent des dérivées des variables de l'écoulement. On verra plus bas qu'il en est de même pour les conditions aux frontières. Le problème des sensibilités contient donc des données imprécises issues de la résolution numérique de l'écoulement, celle-ci ayant été effectuée dans une étape préalable. On examine les trois cas suivants : la présence des dérivées dans les équations aux dérivées partielles, dans les conditions aux frontières de Dirichlet et dans les conditions aux frontières de Neumann.

Les équations des sensibilités contiennent des dérivées de l'écoulement dans le terme de convection de l'équation du mouvement et dans tous les termes de l'équation d'énergie. On peut obtenir une amélioration de la précision de la solution en utilisant des dérivées reconstruites, qui sont plus précises (Stewart (1998) et Schetz (1993)). Nous verrons au chapitre 3 qu'une technique de reconstruction des dérivées a déjà été implantée dans le contexte du remaillage adaptatif. On a donc ajouté l'option d'utiliser ces dérivées enrichies dans les équations des sensibilités.

Dans le cas d'un paramètre de forme, les conditions aux frontières de Dirichlet contiennent également des dérivées des variables de l'écoulement. Voici un exemple :

$$S_T(\mathbf{x}; a) = \frac{dT_f}{da}(\mathbf{x}; a) - \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} - \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a}, \quad \forall \mathbf{x}_f \in \Gamma_{DT}, \quad (2.23)$$

où l'on retrouve les dérivées de la température.

D'après Gunzburger (1997), la présence de telles dérivées dans les conditions aux frontières cause plus de tort que les dérivées présentes dans les équations. Comme on ne dispose que d'une approximation numérique de ces dérivées, les conditions aux fron-

tières sont inexactes. Cette erreur se propage alors à l'intérieur du domaine de calcul. De plus, l'approximation étant d'ordre deux, les dérivées numériques sont linéaires et donc discontinues aux frontières entre les éléments, ce qui génère des conditions aux limites nodales à valeurs multiples. Il en résulte qu'un problème avec paramètre de forme est plus exigeant d'un point de vue numérique, qu'un problème avec paramètre de valeur pour lequel les conditions frontières sont obtenues analytiquement. Ainsi, lorsqu'il s'agit d'un paramètre de forme, les dérivées projetées (qui sont continues en plus d'être plus précises), seront toujours utilisées dans le calcul des conditions frontières.

L'imposition des conditions de Neumann est encore plus délicate puisqu'elles font apparaître des dérivées secondes des variables de l'écoulement. Les dérivées secondes numériques sont moins précises que les dérivées premières. En fait, elles sont constantes par élément. Par exemple, dans le cas d'un paramètre de forme, nous avons vu à l'équation 1.36 que la condition de Neumann pour l'équation d'énergie fait apparaître un terme de la forme :

$$\nabla \left(\frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a} \right) = \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y} \frac{\partial y_f}{\partial a}, \frac{\partial^2 T}{\partial y \partial x} \frac{\partial x_f}{\partial a} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \frac{\partial y_f}{\partial a} \right]. \quad (2.24)$$

L'utilisation satisfaisante d'une telle expression nécessite une technique de reconstruction des dérivées secondes encore plus élaborée. On peut par exemple, reconstruire les dérivées secondes à partir des dérivées premières déjà reconstruites. Ce procédé souffre toutefois d'imprécision aux bords. Nous n'avons pas entrepris une telle reconstruction dans le présent projet. On se limite donc à des conditions de Neumann appliquées sur des parois fixes.

2.3.2 Choix de l'élément fini

Toutes les applications étudiées dans ce projet sont isothermes, de sorte que l'équation de conservation de l'énergie n'a pas été implantée pour nos calculs. Le traitement général des équations se termine donc à cette section. Nous continuerons cependant à prendre la variable T comme exemple puisque la présentation des calculs est plus simple pour une variable scalaire.

Pour un problème isotherme, les variables des équations de conservation sont $\mathbf{u} = (u, v)$ et p . Pour discrétiser ces variables nous avons utilisé l'élément de Crouzeix-Raviart (Crouzeix et Raviart (1973)). Il s'agit d'un élément quadratique enrichi d'une bulle cubique en vitesse et linéaire discontinu en pression. Un élément quadratique continu est utilisé pour discrétiser la pseudo-concentration.

On discrétise les variables des sensibilités et celles de l'écoulement à l'aide du même élément fini et du même maillage. Ceci simplifie la programmation des structures de données et l'extraction des valeurs de l'écoulement requises lors du calcul des sensibilités. Il s'agit ici d'un choix et non d'une exigence de la méthode de l'équation des sensibilités. En effet, il est possible d'effectuer une résolution des sensibilités de façon indépendante de celle de l'écoulement.

2.3.3 Technique de stabilisation

La méthode de Galerkin conduit à des solutions entachées d'oscillations numériques lorsque le terme de convection est dominant (voir Johnson (1987)). Des problèmes de convergence ont alors tendance à se manifester. Pour pallier à cette lacune de la méthode de Galerkin, de nombreuses méthodes de stabilisation ont été mises au point. Dufour passe en revue certaines d'entre elles dont les méthodes SU (*Streamline Upwind*), SUPG (*Streamline Upwind/Petrov-Galerkin*) et GLS (*Galerkin Least-*

Squares). Nous avons obtenu les meilleurs résultats avec la méthode SUPG pour l'équation de transport et sans stabilisation pour les équations de conservation.

En première approche, puisque les équations des sensibilités sont semblables à celles de l'écoulement, les techniques de stabilisation développées pour l'écoulement ont été utilisées directement pour les sensibilités, sans réelle garantie de rendement. En pratique, on a observé une amélioration par rapport à la formulation de Galerkin standard.

CHAPITRE 3

LES STRATÉGIES NUMÉRIQUES

3.1 Le cycle de remaillage adaptatif

Le procédé de remaillage adaptatif est à buts multiples. Il permet d'abord de produire des maillages bien adaptés aux problèmes traités, c'est-à-dire raffinés aux endroits d'intérêt. De plus, l'aboutissement de la méthode est en général l'obtention d'un maillage optimal minimisant l'erreur pour un nombre donné de noeuds. Ceci est le but recherché par l'opérateur de transition. Pour finir, grâce à l'estimateur d'erreur, on peut effectuer une étude systématique de raffinement du maillage qui mène à une démonstration du bon fonctionnement du code et de la précision des simulations. Il s'agit de l'étape de vérification proposée par Roache (1998). Les différentes composantes de la méthode sont résumées à l'aide de l'algorithme de la figure 3.1.

Les deux composantes de l'algorithme que nous allons décrire dans ce chapitre sont l'estimateur d'erreur et l'opérateur de transition.

3.1.1 L'estimateur d'erreur

A priori, l'erreur est définie simplement par la différence entre la solution numérique et la solution exacte. En pratique, cette vraie erreur est inconnue puisque la solution exacte est elle-même inconnue. On cherche donc une approximation de l'erreur en comparant la solution numérique avec une solution améliorée. Cette solution améliorée, ou encore enrichie, est obtenue de la solution numérique par une méthode de projection

locale proposée par Zienkiewicz et Zhu (Zienkiewicz et Zhu (1992)a, Zienkiewicz et Zhu (1992)b).

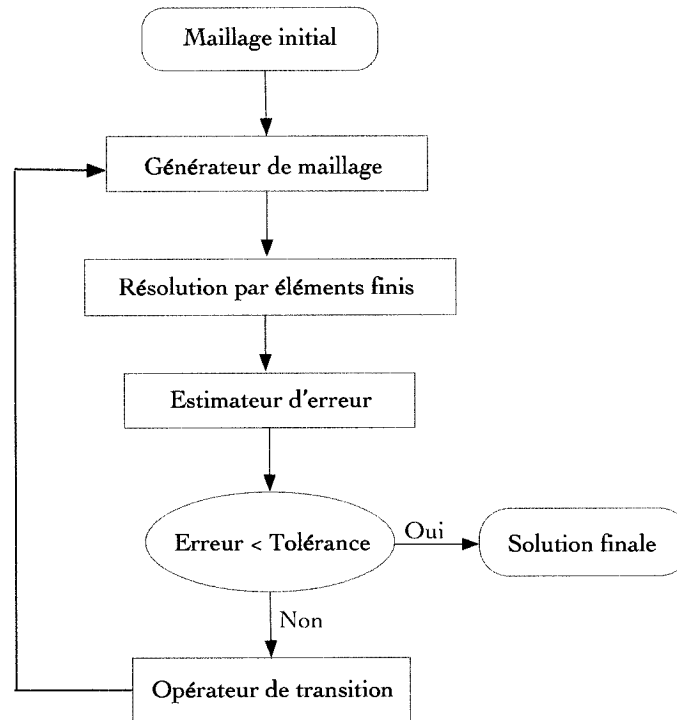


Figure 3.1 Algorithme de remaillage adaptatif

3.1.1.1 Projection locale

Considérons un champ typique de la solution, soit la température. Dans ce projet, cette variable est approximée par un élément quadratique, de sorte que les dérivées premières de T sont linéaires par morceaux, avec des discontinuités aux interfaces entre les éléments. Or, la solution exacte de ∇T est continue et plus riche qu'une simple distribution linéaire. Le principe de la projection locale consiste à reconstruire une solution plus riche et surtout continue de ∇T en utilisant l'information locale disponible dans les éléments voisins. Cette reconstruction se fait en chaque sommet P du maillage par projection du champ ∇T sur un espace de fonctions quadratiques.

La projection se fait dans un sous-domaine Ω_P voisin de P , par une méthode de moindres carrés de la façon suivante. Soit Q une quantité typique à projeter. Il peut s'agir par exemple de la dérivée de la température $\partial T/\partial x$. On désigne par Q_h la solution numérique obtenue par éléments finis et par Q^* la solution enrichie que l'on cherche à déterminer par projection et qui se présente sous la forme

$$Q^* = \mathbf{P}\mathbf{b}, \quad (3.1)$$

où $\mathbf{P}$ est une base polynômiale de degré deux et $\mathbf{b}$ est le vecteur des coefficients à déterminer :

$$\mathbf{P} = [1, \xi, \eta, \xi^2, \xi\eta, \eta^2]; \quad (3.2)$$

$$\mathbf{b} = [b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6]^T. \quad (3.3)$$

On détermine les coefficients b_i par moindres carrés en minimisant l'intégrale suivante sur le sous-domaine de projection :

$$\int_{\Omega_P} (Q^* - Q_h)^2 d\Omega. \quad (3.4)$$

Les dérivées de (3.4) par rapport aux coefficients inconnus doivent s'annuler au minimum, soit

$$\begin{aligned} \mathbf{0} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{b}} \left(\int_{\Omega_P} (\mathbf{P}\mathbf{b} - Q_h)^2 d\Omega \right) \\ &= \int_{\Omega_P} \mathbf{P}^T (\mathbf{P}\mathbf{b} - Q_h) d\Omega. \end{aligned} \quad (3.5)$$

On cherche donc à résoudre le système

$$\left[\int_{\Omega_P} \mathbf{P}^T \mathbf{P} \right] \{\mathbf{b}\} = \left\{ \int_{\Omega_P} \mathbf{P}^T Q_h \right\}. \quad (3.6)$$

Il s'agit d'un système de 6 équations dont la résolution donne les 6 inconnues b_i , qui

sont les coefficients du polynôme représentant Q^* sur le sous-domaine Ω_P .

Le polynôme Q^* est en quelque sorte une moyenne quadratique des morceaux linéaires du champ $\partial T/\partial x$ dans le voisinage Ω_P de P .

On choisit comme sous-domaine Ω_P la cellule composée des éléments comptant le point P parmi leurs sommets. On voit aisément qu'il n'est pas utile de faire une projection sur un voisinage contenant davantage d'éléments puisque le champ $\partial T/\partial x$ comporterait alors une information plus riche que les fonctions quadratiques.

On a calculé jusqu'ici une valeur enrichie en chaque sommet P du maillage. On obtient ensuite une valeur enrichie aux noeuds milieux en prenant la moyenne des valeurs aux sommets adjacents.

3.1.1.2 Norme de l'erreur

La construction d'une solution enrichie Q^* avait pour but l'estimation de l'erreur numérique. À la prochaine section, nous aurons besoin d'une mesure de cette erreur pour décider du traitement à donner à chaque élément. Il convient donc de calculer l'erreur élémentaire des variables. Si on reprend l'exemple de la température, la norme de la solution sur un élément K est donnée par

$$\|T_h\|_K = \sqrt{\int_K \nabla T_h \cdot \nabla T_h \, dK}. \quad (3.7)$$

De la même façon, la norme de l'erreur sur l'élément K est donnée par

$$\|e^{T_h}\|_K = \sqrt{\int_K \nabla(T_h - T^*) \cdot \nabla(T_h - T^*) \, dK}, \quad (3.8)$$

où ∇T^* est la solution enrichie que nous avons reconstruite. En pratique, lorsqu'on veut additionner l'erreur entre les éléments, on utilise plutôt

$$\| e^{T_h} \|_K^2 = \int_K \nabla(T_h - T^*) \cdot \nabla(T_h - T^*) dK. \quad (3.9)$$

3.1.2 L'opérateur de transition

L'opérateur de transition est la dernière étape de la boucle de remaillage adaptatif. Son rôle est de déterminer la taille des éléments du maillage suivant. Trois principes nous guident dans cette tâche. D'abord l'équirépartition de l'erreur, qui stipule qu'un maillage optimal est celui pour lequel l'erreur est la même sur chaque élément. Deuxièmement la réduction de l'erreur entre chaque nouveau maillage. Pour finir, le taux de convergence asymptotique de l'élément, qui donne l'erreur sur un élément en fonction de sa taille.

Considérons d'abord l'erreur globale accumulée sur tous les éléments,

$$\| e \|_\Omega^2 = \sum_K^{n_{elem}} \| e \|_K^2, \quad (3.10)$$

où n_{elem} est le nombre d'éléments du maillage courant. On cherche à générer un nouveau maillage dont l'erreur globale sera réduite par un facteur ζ , de sorte que l'erreur du maillage cible sera

$$\| e_{cible} \|_\Omega = \zeta \| e \|_\Omega. \quad (3.11)$$

On applique ensuite le principe d'équirépartition de l'erreur, qui nous indique de répartir l'erreur également entre les éléments, c'est-à-dire

$$\| e_{cible} \|_K = cte = \frac{\| e_{cible} \|_\Omega}{\sqrt{n_{elem}}}. \quad (3.12)$$

Finalement, le taux de convergence est une relation entre l'erreur sur un élément et sa taille, qui est donnée par

$$\| e \|_K = ch_K^\alpha, \quad (3.13)$$

où h_K est la taille de l'élément K du maillage courant, c est une constante et l'exposant α dépend de l'élément choisi et de la norme utilisée. Pour l'élément de Crouzeix-Raviart et pour la norme décrite plus haut, on a $\alpha = 2$. Aussi, le taux de convergence vaut également pour le prochain maillage et on peut écrire

$$\| e \|_K = c\delta_K^\alpha, \quad (3.14)$$

où δ_K est la taille cible pour les éléments du nouveau maillage qui seront situés dans la zone de l'élément courant K . Pour obtenir cette valeur, il suffit de combiner les équations (3.11) à (3.14), ce qui nous donne

$$\delta_K = \left(\frac{\zeta \| e \|_\Omega}{\| e \|_K \sqrt{n_{elem}}} \right)^{1/\alpha} h_K. \quad (3.15)$$

On applique cette opération sur tous les éléments K du maillage courant pour obtenir une distribution des tailles cibles sur le domaine entier. Cette fonction constante par élément est alors lissée avant d'être transmise au mailleur.

Rappelons que tout ce qui a été dit jusqu'ici sur la norme de l'erreur et l'opérateur de transition vaut pour une seule variable. Or, nous voulons contrôler la précision numérique de toutes les variables simultanément. Pour ce faire, on calcule séparément les tailles cibles pour chacune des variables et on sélectionne ensuite la plus restrictive, c'est-à-dire,

$$\delta_K = \min\{\delta_K^u, \delta_K^v, \delta_K^p, \dots, \delta_K^{S_u}, \delta_K^{S_v}, \delta_K^{S_p}, \dots\}, \quad (3.16)$$

où nous avons ajouté les variables de la sensibilité à celles de l'écoulement, puisqu'on a choisi d'utiliser le même maillage pour la résolution de ces deux problèmes.

3.2 Le cycle de localisation de l'interface

Sur le même domaine de calcul Ω , nous modélisons plusieurs fluides ayant des propriétés physiques différentes. La pseudo-concentration sert à distinguer les différentes phases de l'écoulement. À ce titre, la variable F est utilisée pour le calcul des propriétés physiques de chaque fluide, selon l'expression

$$\mu(F) = \mu_2 + (\mu_1 - \mu_2)F(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (3.17)$$

pour la viscosité et par une formule identique pour tous les paramètres apparaissant dans les équations de conservation, telle que la densité ρ , la chaleur massique c_p et la conductivité thermique λ . Ceci nous permet de résoudre un seul ensemble d'équations sur tout le domaine.

La localisation de l'interface est obtenue grâce à un cycle de résolution décrit par l'algorithme de la figure 3.2. Au départ, la position de l'interface n'est pas connue et

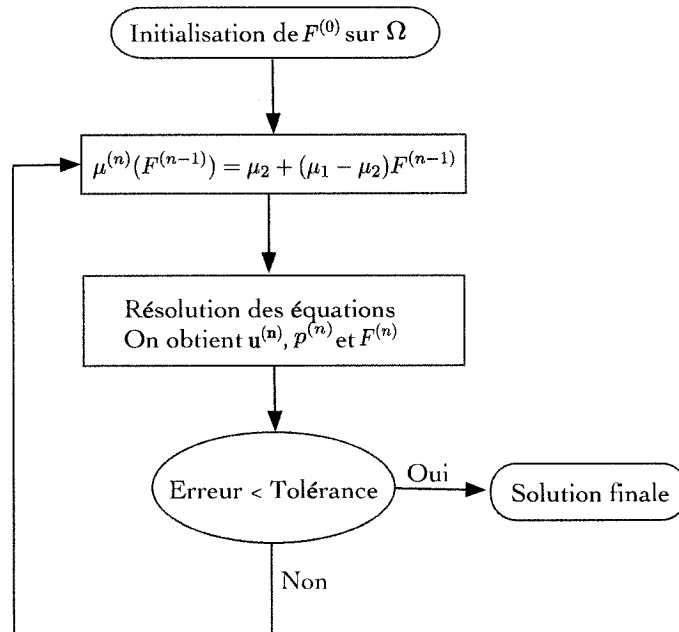


Figure 3.2 Algorithme de localisation de l'interface

la pseudo-concentration F doit être initialisée sur Ω . On évalue ensuite les propriétés rhéologiques des fluides grâce aux valeurs de $\mu(F)$, $\rho(F)$, $c_p(F)$ et $\lambda(F)$. Ceci nous permet de calculer un seul écoulement pour toutes les phases. La résolution des équations de l'écoulement entraîne le transport des conditions frontières de la variable F , imposées en amont de l'écoulement, vers l'intérieur du domaine. On obtient ainsi une nouvelle valeur de la pseudo-concentration sur Ω et on réévalue les propriétés des fluides. La résolution de l'écoulement est alors reprise et le cycle est interrompu lorsqu'on a stabilisation des résultats.

Notons qu'il s'agit ici d'une boucle itérative classique déjà active pour garantir la précision de toutes les variables, de sorte que cette méthode ne requiert aucune nouvelle implantation dans le code. En effet, les étapes décrites plus haut sont comprises dans le résolveur de Newton.

La variable de pseudo-concentration joue un rôle important puisqu'elle fixe les propriétés rhéologiques de l'écoulement. Pour cette raison, nous allons accorder une attention particulière au calcul de cette variable. La forte variation de la pseudo-concentration à l'interface entraîne des oscillations numériques. Nous cherchons à réduire cet effet en raffinant le maillage dans la région de transition où se développent les oscillations. Cette stratégie est appelée « capture d'interface » (Dufour (1999)). Pour provoquer ce raffinement supplémentaire, nous avons choisi de modifier l'opérateur de transition, de la section 3.1.2, qui détermine la taille des éléments. Cette modification, (légèrement différente de celle utilisée par Dufour), consiste à diminuer la taille cible calculée pour la variable de pseudo-concentration. Typiquement, la taille cible est réduite de moitié, de sorte que l'équation 3.16 devient

$$\delta_K = \min\{\delta_K^u, \delta_K^v, \delta_K^p, 0.5 \times \delta_K^F, \delta_K^{S_u}, \delta_K^{S_v}, \delta_K^{S_p}, 0.5 \times \delta_K^{S_F}\}, \quad (3.18)$$

où nous avons également réduit la taille cible de la sensibilité de la pseudo-

concentration, puisque cette variable connaît également une variation brusque à l'interface.

CHAPITRE 4

VÉRIFICATION

Ce chapitre est consacré à la vérification de l'implantation des méthodes de résolution présentées jusqu'ici. Les phénomènes à l'étude dans ce mémoire combinent plusieurs méthodes de calcul et chacune fera l'objet d'un exercice de vérification. L'analyse de sensibilités pour des écoulements multifluides comporte notamment des difficultés liées aux sensibilités ainsi qu'au calcul de la position de l'interface. Nous allons donc présenter trois problèmes de vérification. Le premier portera uniquement sur les sensibilités, le deuxième est une vérification de l'algorithme de suivi de l'interface et le troisième est un problème multiphase où on utilise le modèle de la pseudo-concentration.

4.1 Problème de vérification pour les sensibilités

Les parties du code se rapportant au calcul des sensibilités sont vérifiées grâce à la méthode des solutions manufacturées proposée par Roache (1998). Pour réaliser cette opération on choisit d'abord une solution analytique qui satisfait les équations de l'écoulement, ce qui est toujours possible en ajoutant un terme source de force à l'équation de conservation du mouvement. Le code est ensuite lancé pour résoudre ce problème et la progression de l'erreur est mesurée en fonction du raffinement du maillage. On s'attend alors à observer un taux de diminution de l'erreur en concordance avec la théorie. Tout décalage est signe de problème dans l'implantation ou dans l'utilisation du code. Cette démarche fournit donc à la fois une démonstration du bon fonctionnement du code et de la précision numérique des simulations. Le premier problème vise la vérification du code de calcul des sensibilités en régime laminaire.

4.1.1 Description du problème

Nous reproduisons ici une solution analytique pour un écoulement et pour sa sensibilité telle que décrite dans Turgeon (2001). Pour que la méthode soit utile il faut que la solution choisie soit suffisamment riche pour prendre en compte le plus de termes possibles de l'équation. On considère la solution artificielle suivante, qui s'apparente à une couche limite sur une plaque plane :

$$\begin{aligned} u &= U_0(1 - e^{-\eta}); \\ v &= \frac{U_0}{2} \sqrt{\frac{\mu}{\rho U_0 x}} [1 - (1 + \eta)e^{-\eta}]; \\ p &= x - 0.1, \end{aligned}$$

où

$$\eta = (y - y_0) \sqrt{\frac{\rho U_0}{\mu x}}.$$

On résout la forme adimensionnelle des équations de conservation suivantes :

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0; \quad (4.1)$$

$$\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{\mathbf{u}} = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot \left[\frac{1}{\text{Re}} (\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T) \right] + \tilde{\mathbf{f}}. \quad (4.2)$$

On a identifié par un tilde les variables adimensionnelles et le nombre de Reynolds est défini par

$$\text{Re} = \frac{\rho U_0 L}{\mu}. \quad (4.3)$$

On obtient une solution adimensionnelle en prescrivant les valeurs suivantes pour chacun des paramètres présents dans la solution analytique et dans les équations aux

dérivées partielles :

$$\begin{aligned}\mu &= (\text{Re})^{-1}, & \rho &= 1; \\ U_0 &= 1, & y_0 &= 0.\end{aligned}$$

Le nombre de Reynolds choisi est $\text{Re} = 100$. La géométrie est adimensionnée par le choix d'une longueur caractéristique L de l'ordre de l'unité.

La solution analytique donnée plus haut satisfait l'équation de continuité (4.1). Par contre, pour qu'elle satisfasse aux équations de conservation du mouvement (4.2), on doit rajouter un terme source artificiel f . Ce terme est calculé en injectant la solution analytique dans l'équation (4.2) et en annulant le reste.

La géométrie du problème est illustrée à la figure 4.1. Les conditions limites sont

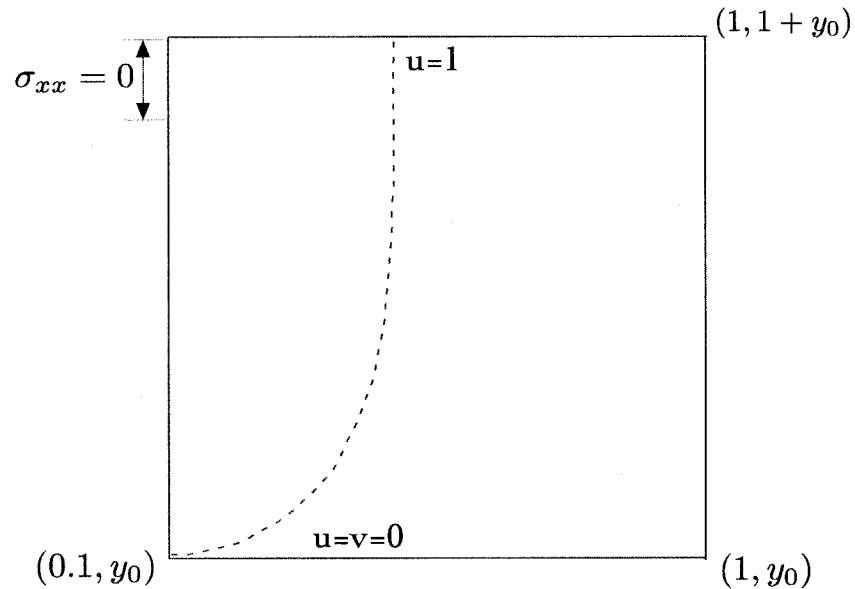


Figure 4.1 Description du problème analytique de vérification

obtenues par une évaluation directe de la solution aux frontières. On impose des conditions de Dirichlet partout à l'exception d'une petite portion de la frontière supérieure gauche où l'on impose une contrainte normale nulle. Ceci ne correspond pas tout à fait à la solution analytique mais c'est une dérogation nécessaire pour

permettre la conservation de la masse et fixer un niveau de pression.

On doit ensuite donner la solution analytique pour un problème de sensibilité correspondant à cet écoulement. Le paramètre choisi sera la position de la paroi inférieure, y_0 . On obtient la solution exacte des sensibilités par différentiation de la solution analytique de l'écoulement par rapport à ce paramètre :

$$\begin{aligned} s_u &= U_0 e^{-\eta} \eta' ; \\ s_v &= \frac{U_0}{2} \sqrt{\frac{\mu}{\rho U_0 x}} \eta e^{-\eta} \eta' ; \\ s_p &= 0 , \end{aligned}$$

$$\text{où} \quad \eta' = -\sqrt{\frac{\rho U_0}{\mu x}} .$$

Encore une fois, ces expressions satisfont aux équations des sensibilités (1.14) et (1.15) lorsqu'elles sont munies du terme source $\mathbf{f}'$. Celui-ci est obtenu en dérivant le terme source $\mathbf{f}$ calculé pour l'écoulement.

Nous pouvons maintenant entreprendre la vérification du code en comparant les solutions analytiques données plus haut avec la solution numérique de l'écoulement et de la sensibilité. La résolution numérique requiert des conditions aux frontières appropriées. Nous avons déjà vu que les conditions limites de l'écoulement sont obtenues par une simple évaluation de la fonction analytique aux frontières. Par contre, en ce qui concerne les conditions limites du problème de sensibilité, deux choix se présentent. Puisqu'il s'agit d'un paramètre de forme, les conditions limites impliquent des dérivées dans l'espace de la solution de l'écoulement. Une connaissance de cette solution à l'intérieur du domaine est donc nécessaire.

Nous avons alors le choix d'évaluer les dérivées à partir de la solution numérique

de l'écoulement ou en se servant directement de la solution analytique. La première option produit des conditions frontières entachées d'une erreur numérique. C'est le désavantage des paramètres de forme. Par contre, la deuxième option donne des conditions frontières exactes et la précision de la solution est alors la même que dans le cas d'un paramètre de valeur. Nous allons tester successivement ces deux options pour vérifier ainsi l'implantation des paramètres de valeur et de forme et comparer leur performance.

4.1.2 Paramètre de valeur

Dans un premier temps, on résout le problème test pour la sensibilité comme s'il s'agissait d'un paramètre de valeur, c'est-à-dire en imposant directement les conditions de Dirichlet exactes données par la solution analytique :

$$\begin{aligned} s_u &= U_0 e^{-\eta \eta'} ; \\ s_v &= \frac{U_0}{2} \sqrt{\frac{\mu}{\rho U_0 x}} \eta e^{-\eta \eta'} . \end{aligned}$$

La condition de Neumann ($\sigma_{xx} = 0$) de l'écoulement devient, pour la sensibilité, une condition de Neumann nulle : $\sigma'_{xx} = 0$.

Nous allons observer l'évolution des normes de l'erreur par rapport au nombre de noeuds pour plusieurs cycles adaptatifs du maillage. À la figure 4.2 on compare l'erreur exacte à l'erreur estimée selon la méthode de projection locale pour la vitesse $\mathbf{u}$. La figure 4.3 présente la même comparaison pour la sensibilité $\mathbf{s}_u$. On constate une décroissance régulière de l'erreur exacte et estimée, à la fois pour l'écoulement et la sensibilité. On atteint des niveaux d'erreurs très faibles ce qui nous permet de dire que la solution numérique converge vers la solution analytique, tant pour l'écoulement que pour la sensibilité.

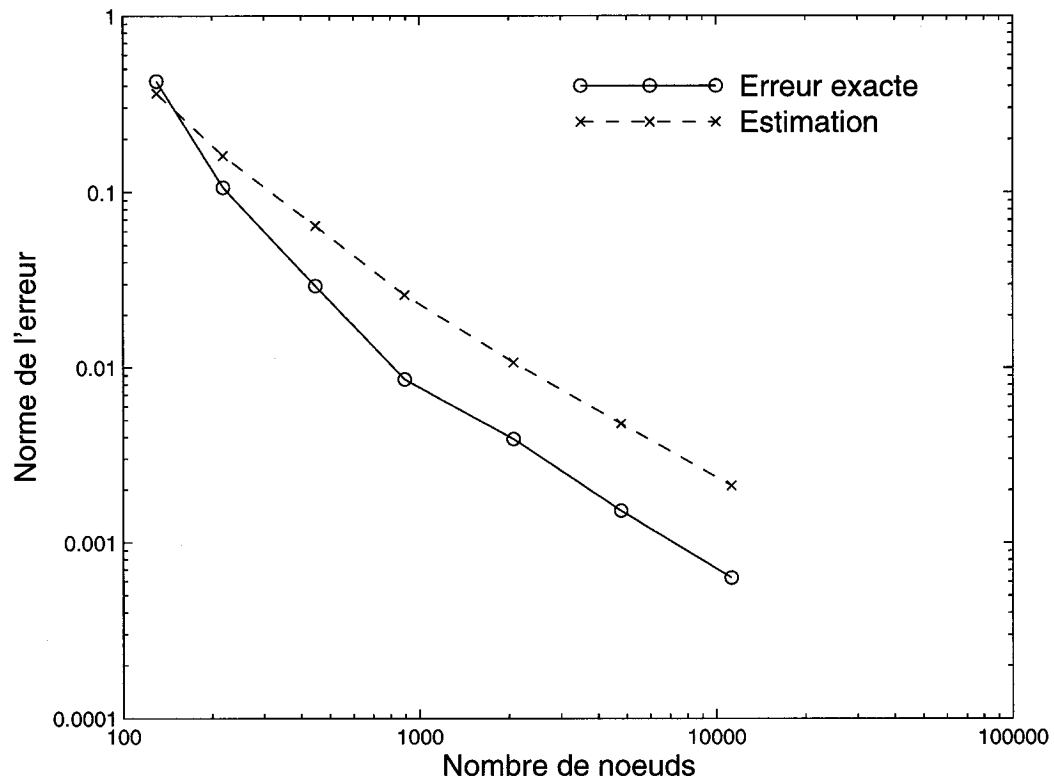


Figure 4.2 Régression des erreurs de l'écoulement

Résultats de l'écoulement

La démonstration la plus claire du bon fonctionnement de la méthode provient du taux de diminution de l'erreur qui est en concordance avec la théorie. En effet, nous avons vu au chapitre 3 que l'utilisation d'un élément quadratique prédit une erreur proportionnelle au carré de la taille des éléments (équation 3.13). Par ailleurs, il est connu que le carré de la taille des éléments est approximativement proportionnel à l'inverse du nombre de noeuds. On doit donc s'attendre à une erreur inversement proportionnelle au nombre de noeuds, ce qui correspond bien à la pente observée sur le graphique de la figure 4.2.

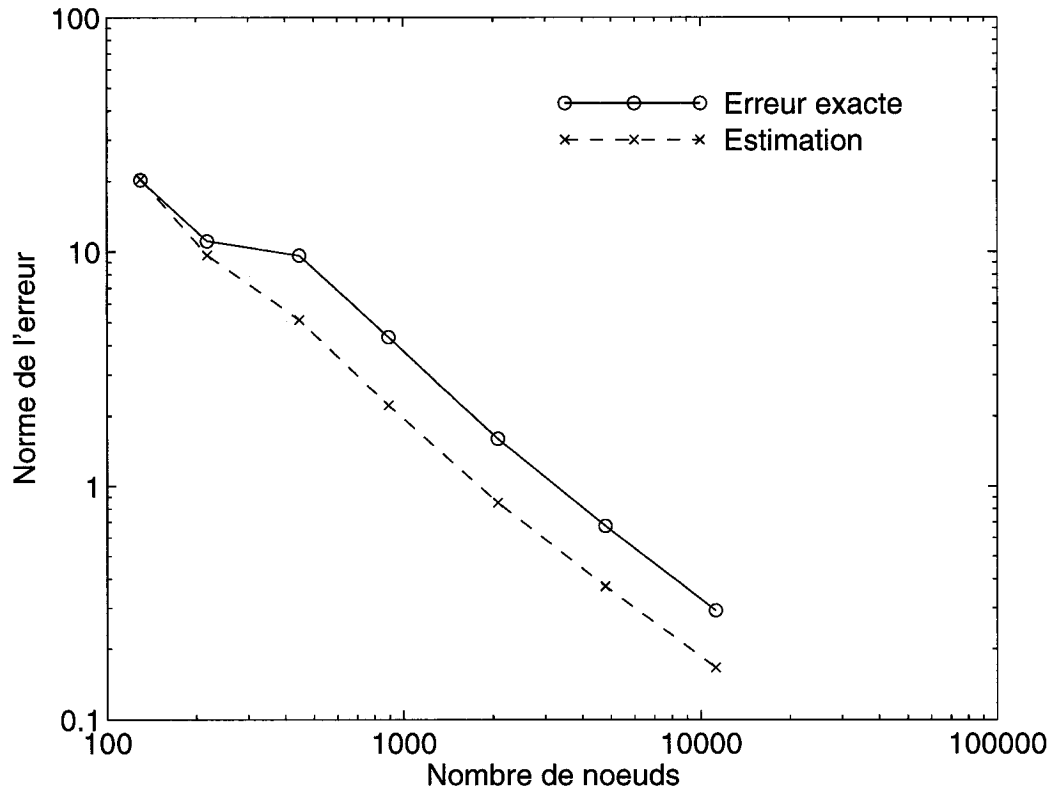


Figure 4.3 Régression des erreurs de la sensibilité pour un paramètre de valeur

En plus de démontrer le bon fonctionnement du code, ce problème de vérification nous sert à établir la performance de l'estimateur d'erreur par projection locale. Nous remarquons, à la figure 4.2, un décalage évident entre l'erreur exacte et l'erreur estimée. Une étude plus approfondie de cette situation révèle que cet écart est surtout concentré aux frontières du domaine, ce qui porte à croire que la projection locale donne de moins bons résultats pour les éléments en contact avec la frontière. Cet effet est connu et cité dans (Hétu et Pelletier (1992)a) et (Hétu et Pelletier (1992)b). Son origine provient du fait que l'information nécessaire à la projection locale est incomplète sur les éléments du bord où le domaine de projection est tronqué par la frontière. Néanmoins, cette explication demeure insatisfaisante puisque les mesures ont été répétées en soustrayant du calcul d'erreur les éléments en contact avec la

frontière sans obtenir une réduction notable de l'écart entre l'erreur vraie et l'erreur estimée. L'origine de cet écart demeure donc inexpliquée. Il est toutefois possible de conclure au bon fonctionnement de l'estimateur d'erreur puisque l'écart entre les deux erreurs diminue au même rythme que les erreurs elles-mêmes, c'est-à-dire en proportion inverse au nombre de noeuds.

Pour finir, il est essentiel de discuter ici de la condition de Neumann qui modifie la donnée du problème. L'ajout de cette condition introduit une différence notable entre le problème à résoudre et la solution analytique.

Notre choix a été de réduire au minimum la portion de la frontière sur laquelle est imposée cette condition de Neumann de façon à se rapprocher le plus possible du problème analytique. Cette démarche nous a conduit à modifier les conditions frontières d'un cycle adaptatif à l'autre. En effet, la convergence de l'algorithme semble exiger une condition de Neumann en proportion avec la taille des éléments. Nous avons donc réduit la condition de Neumann en fonction du raffinement. Les derniers cycles adaptatifs résolvent ainsi un problème qui est près du problème analytique. Cette manière de procéder nous paraît la plus correcte pour établir le bon fonctionnement du code.

Résultats de la sensibilité

À l'instar de l'erreur sur l'écoulement, on observe une réduction régulière de l'erreur sur la sensibilité en fonction du raffinement. De plus, le taux de réduction concorde bien avec la théorie, ce qui est la démonstration recherchée.

L'erreur obtenue pour le calcul de la sensibilité est plus élevée que celle de l'écoulement. Ceci est tout à fait prévisible puisque la donnée du problème comporte les dérivées de l'écoulement. La formulation des équations est donc entachée d'erreur numérique avant même d'en entamer la résolution. On remarque que, contrairement à

l'écoulement, le calcul de la sensibilité produit une erreur vraie plus élevée que l'erreur estimée. Ici aussi on doit s'attendre à ce comportement puisque l'erreur estimée ne détecte que les erreurs d'interpolations, alors que l'erreur vraie tient compte du manque de précision inhérent au calcul de la sensibilité, dû à la présence des dérivées de l'écoulement dans les équations à résoudre.

4.1.3 Paramètre de forme

On reprend maintenant le même problème test en considérant cette fois le paramètre y_0 comme un paramètre de forme, c'est-à-dire que les dérivées spatiales présentes dans les conditions frontières sont calculées à partir de la solution numérique de l'écoulement.

La façon correcte d'évaluer les conditions de Dirichlet pour un paramètre de forme est donnée par l'expression (1.25) que l'on a obtenue en établissant l'égalité entre la dérivée totale de la variable $\mathbf{u}$ et la dérivée totale de la condition frontière $\mathbf{u}_f$,

$$\frac{d\mathbf{u}}{dy_0} = \frac{d\mathbf{u}_f}{dy_0}. \quad (4.4)$$

Rappelons que dans le cas d'un paramètre de forme, ces dérivées totales impliquent le déplacement de la frontière qui est ici donné par :

$$\frac{\partial x_f}{\partial y_0} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial y_f}{\partial y_0} = 1, \quad (4.5)$$

sur la frontière inférieure alors que sur les trois autres côtés on a :

$$\frac{\partial x_f}{\partial y_0} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial y_f}{\partial y_0} = 0. \quad (4.6)$$

Ces valeurs nous permettent de déterminer les dérivées totales.

Évaluons d'abord la dérivée totale des conditions frontières. Sur la frontière inférieure on obtient :

$$\frac{du_f}{dy_0} = \frac{\partial u_f}{\partial y_0} + \frac{\partial u_f}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial y_0} = \frac{\partial u_f}{\partial y_0} + \frac{\partial u_f}{\partial y} = 0; \quad (4.7)$$

$$\frac{dv_f}{dy_0} = \frac{\partial v_f}{\partial y_0} + \frac{\partial v_f}{\partial y} \frac{\partial y_f}{\partial y_0} = \frac{\partial v_f}{\partial y_0} + \frac{\partial v_f}{\partial y} = 0. \quad (4.8)$$

Alors que sur les trois autres côtés du domaine on trouve simplement ;

$$\frac{du_f}{dy_0} = \frac{\partial u_f}{\partial y_0}; \quad (4.9)$$

$$\frac{dv_f}{dy_0} = \frac{\partial v_f}{\partial y_0}. \quad (4.10)$$

Notons que les valeurs aux frontières sont données par la solution analytique, ce qui donne un sens aux expressions $\partial u_f / \partial y$ et $\partial v_f / \partial y$.

En deuxième lieu, on donne l'équation de la dérivée totale de la variable **u**. Sur la frontière inférieure on obtient :

$$\frac{du}{dy_0} = \frac{\partial u}{\partial y_0} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial y_0} = \frac{\partial u}{\partial y_0} + \frac{\partial u}{\partial y} = S_u + \frac{\partial u}{\partial y}; \quad (4.11)$$

$$\frac{dv}{dy_0} = \frac{\partial v}{\partial y_0} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial y_0} = \frac{\partial v}{\partial y_0} + \frac{\partial v}{\partial y} = S_v + \frac{\partial v}{\partial y}. \quad (4.12)$$

Alors que sur les trois autres côtés du domaine on trouve simplement :

$$\frac{du}{dy_0} = \frac{\partial u}{\partial y_0} = S_u; \quad (4.13)$$

$$\frac{dv}{dy_0} = \frac{\partial v}{\partial y_0} = S_v. \quad (4.14)$$

L'égalité des dérivées totales nous donne maintenant les conditions de Dirichlet ap-

propriées pour la sensibilité. Sur la frontière inférieure on retrouve les conditions :

$$\begin{aligned} S_u &= -\frac{\partial u}{\partial y}; \\ S_v &= -\frac{\partial v}{\partial y}. \end{aligned}$$

Alors que sur les trois autres côtés on pose :

$$\begin{aligned} S_u &= \frac{\partial u_f}{\partial y_0}; \\ S_v &= \frac{\partial v_f}{\partial y_0}. \end{aligned}$$

On remarque que les conditions limites de la frontière inférieure sont évaluées à partir de la solution numérique $\mathbf{u} = (u, v)$ alors qu'elles sont évaluées grâce à la solution analytique sur les trois autres côtés, ce qui était attendu. Ainsi, une partie des conditions frontières seront forcément moins précises que dans le cas du paramètre de forme.

Résultats pour le paramètre de forme

Les résultats obtenus pour le paramètre de forme sont présentés à la figure 4.4. Les résultats de la solution de l'écoulement sont quasi identiques que dans le cas du paramètre de valeur et ne sont pas présentés à nouveau. En fait, la définition du problème de l'écoulement est toujours la même et seule l'adaptation du maillage est différente. Par contre, le calcul de la sensibilité produit une erreur plus grande que dans le cas du paramètre de valeur, ce qui était prévisible étant donné les conditions limites moins précises.

Encore une fois, le taux de diminution de l'erreur concorde avec la théorie puisque l'erreur est inversement proportionnelle au nombre de noeuds. On retrouve également le même effet que dans le cas de la sensibilité avec paramètre de valeur, c'est-à-

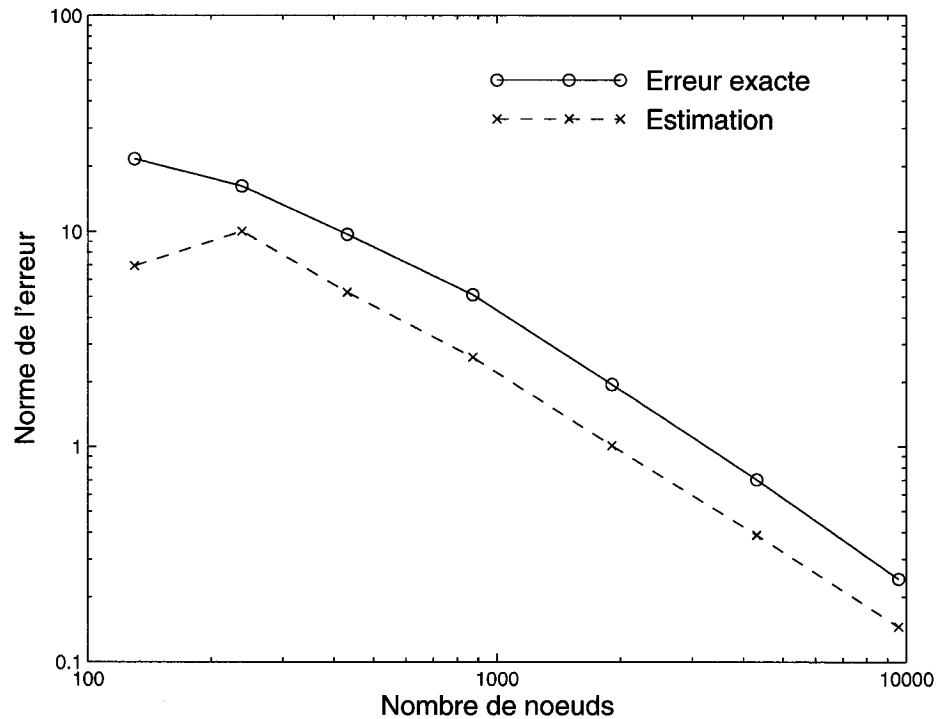


Figure 4.4 Régression des erreurs de la sensibilité pour un paramètre de forme

dire que l'erreur vraie est supérieure à l'erreur estimée. La raison en est la même, l'estimateur d'erreur détecte uniquement l'erreur d'interpolation alors que l'erreur vraie tient compte de l'inexactitude des équations de la sensibilité.

4.2 Vérification du suivi de l'interface

Dans cette section nous cherchons à vérifier le bon fonctionnement de la méthode de capture d'interface décrite à la section 3.2. Dans ce but, un champ de vitesse analytique est construit sur le domaine de calcul. Ce champ de vitesse est ensuite substitué à la solution des équations de Navier-Stokes dans l'algorithme 3.2 de la section 3.2. Le problème de vérification vise à établir si la position calculée de l'interface suit correctement les caractéristiques du champ de vitesse analytique.

4.2.1 Géométrie de la filière analytique

Tous les écoulements étudiés prennent place dans une géométrie simple, illustrée à la figure 4.5, que nous appellerons la *filière analytique*. Ses dimensions sont 2×1 unités de longueur adimensionnelle et on a inclu schématiquement les composantes d'un écoulement multiphase générique dont les différents fluides occupant les régions Ω_i , la surface libre Σ et les parois solides Γ_0 . La frontière en amont de l'écoulement est notée Γ^- et la section où entre le fluide i est identifiée par Γ_i^- . Les fluides s'écoulent de gauche à droite et sortent du domaine par la frontière notée Γ^+ .

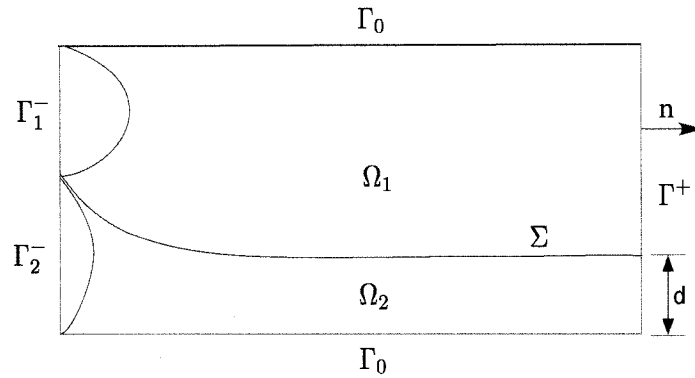


Figure 4.5 Géométrie utilisée pour la vérification de la modélisation des écoulements multiphases stationnaires.

4.2.2 Champ de vitesse analytique

Un champ de vitesse analytique est donné par :

$$\begin{aligned} u(x, y) &= [3y^2 - (x-2)^3 y^3] \exp(x-2)^3 (1-y); \\ v(x, y) &= 3y^3 (x-2)^2 (1-y) \exp(x-2)^3 (1-y). \end{aligned}$$

Nous avons choisi un système de coordonnées cartésien qui prend son origine dans le coin inférieur gauche de la filière analytique. Les caractéristiques sont décrites par la

fonction courant,

$$\psi(x, y) = 3y^3 \exp(x - 2)^3(1 - y), \quad (4.15)$$

et sont illustrées à la figure 4.6. La caractéristique associée à la surface libre est

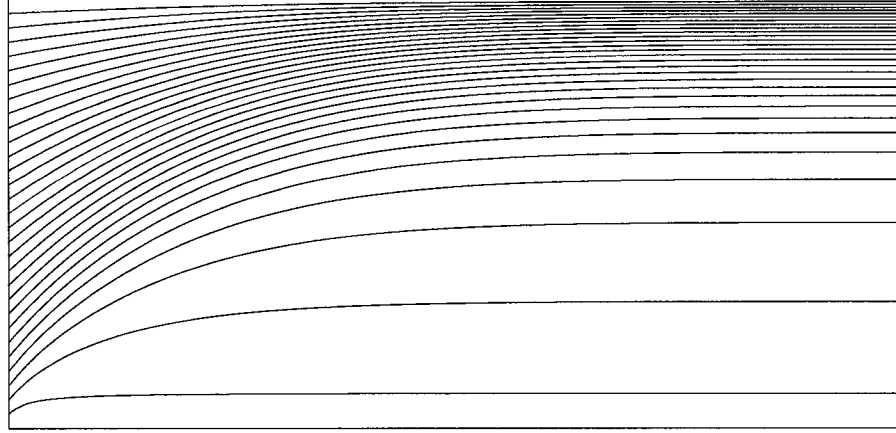


Figure 4.6 Caractéristiques associées au champ de vitesse analytique

simplement celle qui passe par le point $(0, 1/2)$ de la frontière Γ^- .

4.2.3 Calcul de la surface libre

Nous faisons maintenant agir l'équation de transport le long du champ de vitesse analytique. Ce champ analytique a été choisi délibérément pour faire passer la surface libre très près de la paroi de façon à tester les limites de l'équation de transport. Le problème provient des oscillations numériques qui se développent lors du transport d'une fonction de brusque variation telle que la pseudo-concentration. En effet, des problèmes de convergence de l'algorithme surviennent lorsque ces oscillations entrent en contact avec la paroi. Le moyen d'éviter cette situation est de raffiner le maillage dans la région de transition où se développent les oscillations. Un maillage plus grossier entraînerait une propagation des oscillations loin de l'interface.

Le type de maillage recherché est obtenu en adaptant en fonction de l'erreur estimée sur la vitesse, la pression et la pseudo-concentration. C'est la stratégie adaptative que nous avons choisie. Le maillage illustré à la figure 4.7 a été adapté de cette façon pour l'équation de transport, le long du champ de vitesse analytique. La région de transition est finement maillée et se détache de la paroi, ce qui est l'effet recherché. On donne également la position des isovaleurs 0.2, 0.5 et 0.8, la deuxième correspondant à la position de l'interface. On constate que le profil de la pseudo-concentration se resserre en avançant.

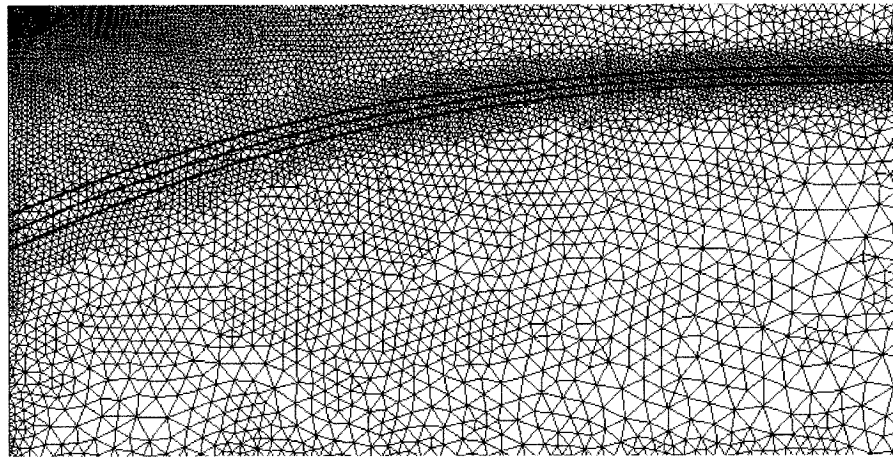


Figure 4.7 Maillage de 14655 éléments et isovaleurs de la pseudo-concentration ($F = 0, 2, 0, 5, 0, 8$), pour le champ de vitesse analytique

4.3 Vérification pour les écoulements multifluides

Nous allons faire usage d'une solution analytique décrite dans Han (1981) et qui est développée pour la coextrusion de deux fluides dans un canal rectangulaire. Les équations donnant les vitesses de l'écoulement sont reproduites ici pour des fluides newtoniens et pour un problème isotherme. Le canal est de hauteur h et le problème est posé de façon à négliger les effets transversaux de la géométrie. La figure 4.8 illustre une coupe du canal avec deux profils de vitesse.

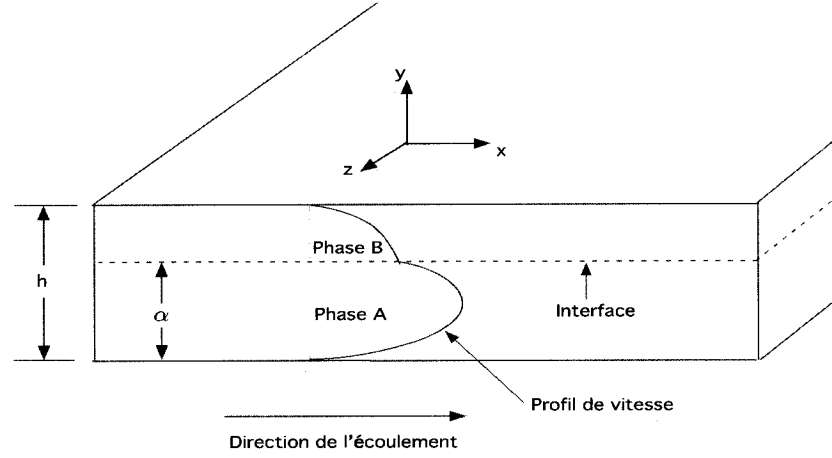


Figure 4.8 Coupe d'une filière plane

Il n'y a aucun mouvement vertical ou transversal et la vitesse horizontale ne dépend que de y ,

$$\mathbf{u} = (u, v) = (0, v(y)), \quad (4.16)$$

c'est-à-dire $u = 0$ et $\partial v / \partial x = \partial v / \partial z = 0$.

On obtient ainsi une équation du mouvement en une seule dimension,

$$-\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \frac{\partial^2 u^2}{\partial y^2} = 0. \quad (4.17)$$

La pression étant constante, $\partial p / \partial y = \zeta$, il est facile d'intégrer cette équation pour obtenir le profil des vitesses pour chacune des deux phases :

$$v_A = \frac{\zeta}{2\mu_A} [2\lambda y - y^2]; \quad (4.18)$$

$$v_B = \frac{\zeta}{2\mu_B} [(h - \lambda)^2 - (y - \lambda)^2], \quad (4.19)$$

où λ est une constante d'intégration qui reste à déterminer.

Il y a adhérence des fluides aux parois de sorte que $v_A(0) = 0$ et $v_B(h) = 0$.

Une troisième condition frontière est donnée par l'égalité des vitesses à l'interface,

$v_A(\alpha) = v_B(\alpha)$, ce qui devient,

$$\mu_A^{-1}[2\lambda\alpha - \alpha^2] = \mu_B^{-1}[(h - \lambda)^2 - (\alpha - \lambda)^2]. \quad (4.20)$$

Il en découle une expression pour le ratio des viscosités,

$$\frac{\mu_B}{\mu_A} = \frac{[2\lambda\alpha - \alpha^2]}{[(h - \lambda)^2 - (\alpha - \lambda)^2]}. \quad (4.21)$$

Finalement, une intégration sur Γ^- pour chaque phase, nous donne une expression adimensionnelle des débits :

$$Q_A = \frac{\zeta}{2\mu_A} \left[\lambda\alpha^2 - \frac{\alpha^3}{3} \right]; \quad (4.22)$$

$$Q_B = \frac{\zeta}{2\mu_B} \left[\frac{\alpha^3 - h^3}{3} - \lambda(\alpha^2 - h^2) + (2\lambda h - h^2)(\alpha - h) \right]. \quad (4.23)$$

L'expression qui nous intéresse est le ratio des débits,

$$\frac{Q_A}{Q_B} = \frac{\mu_B}{\mu_A} \cdot \frac{[\lambda\alpha^2 - \frac{\alpha^3}{3}]}{[\frac{\alpha^3 - h^3}{3} - \lambda(\alpha^2 - h^2) + (2\lambda h - h^2)(\alpha - h)]}. \quad (4.24)$$

Après avoir prescrit le ratio des débits Q_A/Q_B et des viscosités μ_B/μ_A , ce problème peut être complètement déterminé en résolvant les deux équations (4.21) et (4.24) pour les deux variables λ et α . Ceci est accompli par un processus itératif de Newton.

Cette solution est valable pour un écoulement complètement développé et nous présumons que c'est la situation retrouvée en sortie de la filière analytique de la figure 4.5.

Nous posons donc les conditions frontières

$$(\sigma_i \cdot n)_x = 0 \quad \text{et} \quad v_i = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma^+. \quad (4.25)$$

De plus, comme pour le problème analytique, il y a adhérence aux parois solides de sorte que

$$\mathbf{u} = (u, v) = (0, 0) \quad \text{sur} \quad \Gamma_0. \quad (4.26)$$

L'exercice de vérification consiste à modéliser cet écoulement sur le domaine de la filière analytique et à comparer la position de l'interface obtenue en sortie avec la valeur théorique calculée à partir des équations données plus haut.

Bilan des vérifications

Nous avons fait des vérifications pour plusieurs ratios de débits et de viscosités. Deux exemples sont présentés ici. Le premier considère un ratio de débits de

$$\frac{Q_A}{Q_B} = \frac{10}{1}, \quad (4.27)$$

avec un ratio unitaire pour la viscosité,

$$\frac{\mu_A}{\mu_B} = \frac{1}{1}. \quad (4.28)$$

La figure 4.9 illustre le maillage final utilisé pour cette simulation ainsi que la position de l'interface. Nous avons représenté le maillage pour démontrer que la région de transition de la pseudo-concentration est finement maillée et qu'elle se dégage de la paroi solide, même lorsque l'interface en est très près de celle-ci. En sortie de filière, l'interface numérique se situe à une hauteur de $\alpha = 0,18884396$ alors que la valeur théorique est de $\alpha = 0,18598987$.

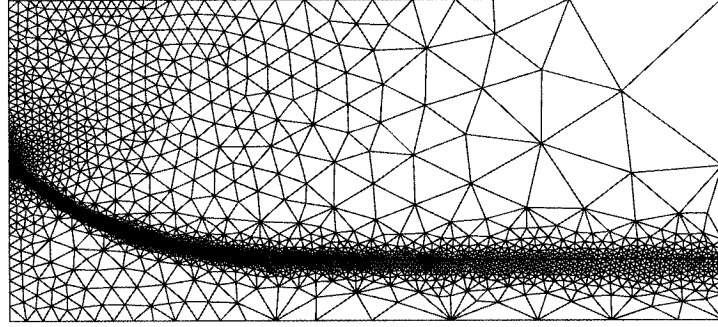


Figure 4.9 Maillage de 5952 éléments et interface pour un ratio des débits de $Q_A/Q_B = 10$

Pour le deuxième exemple, on choisit un ratio des débits unitaire,

$$\frac{Q_A}{Q_B} = \frac{1}{1}, \quad (4.29)$$

et un ratio des viscosités de

$$\frac{\mu_A}{\mu_B} = \frac{1}{10}. \quad (4.30)$$

La figure 4.10 nous montre le maillage final et la position de l'interface.

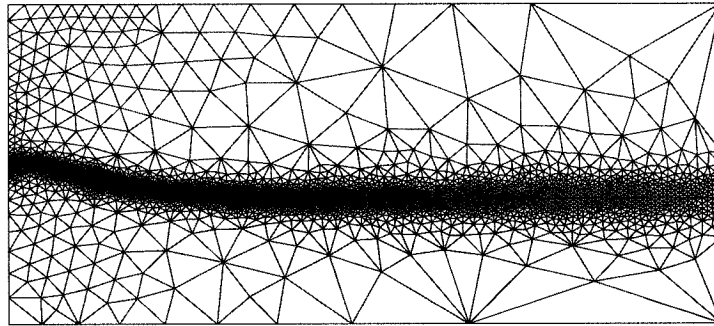


Figure 4.10 Maillage de 5959 éléments et interface pour un ratio des viscosités de $\mu_A/\mu_B = 0.1$

La valeur numérique de la hauteur de l'interface est de $\alpha = 0,39097701$ alors que la valeur théorique est de $\alpha = 0,38803729$.

La différence entre les valeurs numériques et théoriques sont donc de moins de 1%, ce qui nous permet d'affirmer que l'algorithme de calcul de la coextrusion est vérifié.

CHAPITRE 5

APPLICATIONS

Dans ce chapitre nous présentons deux problèmes d'écoulements multifluides, soient la coextrusion et le problème de jet libre. La sensibilité par rapport à plusieurs paramètres est ensuite calculée. Finalement, nous utilisons les sensibilités pour le calcul rapide de solutions voisines.

5.1 La coextrusion

Dans cette section nous appliquons le calcul des sensibilités à un problème d'écoulement stratifié. Ce type d'écoulement est rencontré dans les extrudeuses industrielles lorsque plusieurs polymères sont chauffés pour ensuite être combinés dans une même filière. Le but de ce procédé, appelé coextrusion, est d'obtenir en sortie de filière un produit formé de plusieurs couches et réunissant ainsi différentes propriétés se rapportant à chacun des polymères extrudés.

Un problème important lié à la coextrusion est d'obtenir une répartition optimale des produits en sortie de filière. La distribution finale des différents polymères dépend notamment des propriétés rhéologiques des fluides, de leurs débits respectif à l'entrée et de la géométrie de la filière.

5.1.1 Description du problème de l'écoulement

Les calculs sont effectués sur le domaine de la filière analytique déjà illustrée à la figure 4.5. Les conditions frontières de l'écoulement sont les mêmes que celles décrites à la

section 4.3 pour le problème de vérification des écoulements multiphases, c'est-à-dire l'adhérence des fluides aux parois,

$$\mathbf{u}_i = (0, 0) \quad \text{sur } \Gamma^0 \quad (5.1)$$

et un écoulement complètement développé en sortie de filière :

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \vec{n})_x &= 0; \\ u = \mathbf{u}_y &= 0, \end{aligned} \quad \text{sur } \Gamma^+. \quad (5.2)$$

De plus, un profil de vitesse parabolique est imposé en entrée de la filière pour chacune des deux phases, c'est-à-dire sur les deux segments Γ_i^- . Ceci détermine le débit de chaque fluide.

Pour sa part, la variable de pseudo-concentration n'est donnée qu'en amont de l'écoulement (Γ^-) puisqu'elle est résolue par une équation hyperbolique qui transporte sa valeur vers l'intérieur du domaine. Le profil de la pseudo-concentration est imposé en fixant sa valeur à 1 sur Γ_1^- pour la phase supérieure et 0 sur Γ_2^- pour la phase inférieure. Le saut de valeur entre ces deux segments est décrit par une courbe continue de degré trois de sorte que sa dérivée soit partout lisse et continue.

Ce problème ressemble donc en tout point au problème de vérification des écoulements multiphases de la section 4.3. La nouveauté vient du calcul des sensibilités, qui à notre connaissance n'a jamais été entrepris pour la position de l'interface.

5.1.1.1 Adimensionnalisation

A priori, les dimensions de la filière analytique sont sans unité physique. Néanmoins, notre étude comporte des choix de paramètres, et une adimensionnalisation du problème montre comment ces paramètres sont liés entre eux, et à la taille de la filière.

Notons que nous utiliserons la même adimensionnalisation pour le calcul des sensibilités. De plus, l'objet de ce calcul est l'étude du comportement de l'interface lors d'un changement dans le ratio des viscosités μ_1/μ_2 des deux phases, ou encore le ratio de leur débit d'entrée. Il convient donc de choisir des variables adimensionnelles qui témoignent du rapport entre les paramètres des deux phases. Nous choisissons donc les quantités de références suivantes :

- L_0 = la hauteur du canal en sortie de filière (h) ;
- ρ_0 = la densité de la phase supérieure (ρ_1) ;
- μ_0 = la viscosité de la phase supérieure (μ_1) ;
- u_0 = la vitesse maximale prescrite en entrée pour la phase supérieure ($u_{1,max}$) .

On obtient ainsi un nombre adimensionnel de Reynolds

$$Re = \frac{\rho_0 u_0 L_0}{\mu_0} = \frac{\rho_1 u_{1,max} h}{\mu_1}. \quad (5.3)$$

Les équations de conservation de masse et de mouvement deviennent alors

$$\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i = 0 \quad (5.4)$$

et

$$Re \tilde{\rho}_i (\tilde{\mathbf{u}}_i \cdot \tilde{\nabla}) \tilde{\mathbf{u}}_i = -Re \tilde{\nabla} \tilde{p} + \tilde{\nabla} \cdot [\tilde{\mu}_i (\tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{u}}_i + (\tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{u}}_i)^T)], \quad (5.5)$$

où le tilde identifie les variables adimensionnelles données par

$$\tilde{\mathbf{u}}_i = \frac{\mathbf{u}_i}{u_0}, \quad \tilde{\mu}_i = \frac{\mu_i}{\mu_0}, \quad \text{etc.} \quad (5.6)$$

5.1.2 Description du problème de sensibilités

Bien que le calcul des sensibilités soit effectué pour toutes les variables de l'écoulement, la nouveauté de ce projet réside dans le calcul de la sensibilité pour la variable de la pseudo-concentration. Nous voulons calculer l'influence d'un paramètre sur la position de l'interface entre les fluides coextrudés. Les paramètres considérés sont les viscosités et les débits d'entrée.

5.1.2.1 Conditions limites

Nous avons vu au chapitre 2 que les conditions limites du problème de sensibilités ne sont autres que la dérivée des conditions limites de l'écoulement par rapport au paramètre en question. Les conditions dépendent donc du paramètre.

Pour la sensibilité par rapport aux débits d'entrée, nous avons choisi de perturber l'amplitude du débit de la phase supérieure (sur Γ_1^-). La condition frontière sur Γ_1^- étant un profil parabolique $\mathbf{u}_1 = (u, v) = [a(-y^2 + 3/2y - 1/2), 0]$, il s'ensuit que la dérivée de la vitesse par rapport à l'amplitude a est à nouveau une parabole

$$S_{\mathbf{u}_1}^a = \left(\frac{\partial u}{\partial a}, \frac{\partial v}{\partial a} \right) = (-y^2 + 3/2y - 1/2, 0) \quad \text{sur } \Gamma_1^-. \quad (5.7)$$

Il n'y a aucune perturbation du débit de la phase inférieure de sorte que

$$S_{\mathbf{u}_2}^a = (0, 0) \quad \text{sur } \Gamma_2^-. \quad (5.8)$$

D'autre part, la condition d'adhérence aux parois tient pour toute valeur du débit, de sorte que

$$S_{\mathbf{u}_i}^a = (0, 0) \quad \text{sur } \Gamma^0. \quad (5.9)$$

Il en est de même pour la supposition d'un écoulement complètement développé en

sortie de filière :

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{n})_y = \left(\mu [\nabla \mathbf{s}_{\mathbf{u}_i} + (\nabla \mathbf{s}_{\mathbf{u}_i})^T] \cdot \mathbf{n} - s_p \cdot \mathbf{n} \right)_y &= 0; \\ S_{v_i}^a &= 0, \end{aligned} \quad \text{sur } \Gamma^+. \quad (5.10)$$

Pour sa part, la variable de pseudo-concentration F possède une condition frontière sur Γ^- qui dépend uniquement de la position des deux phases et non de leur débit, ainsi

$$S_F^a = \frac{\partial F}{\partial a} = 0 \quad \text{sur } \Gamma^- = \Gamma_1^- \cup \Gamma_2^-. \quad (5.11)$$

En ce qui concerne le calcul de la sensibilité par rapport à la viscosité, nous avons choisi de perturber la valeur de la viscosité de la phase inférieure que l'on peut écrire $\mu_2 = a\mu_{0,2}$. Ainsi nous devons maintenant inclure le terme

$$\mu'_2 = \frac{\partial \mu_2}{\partial a} = \mu_{0,2} \quad (5.12)$$

dans les équations de la sensibilité telles que développées au chapitre 2. Par contre il n'y a aucune perturbation des débits d'entrée. On obtient donc les conditions limites

$$S_{\mathbf{u}_i}^a = (0, 0) \quad \text{sur } \Gamma^- \text{ et } \Gamma^0, \quad (5.13)$$

et en aval de l'écoulement :

$$\begin{aligned} \left(\mu' [\nabla \mathbf{u}_i + (\nabla \mathbf{u}_i)^T] \cdot \mathbf{n} + \mu [\nabla \mathbf{s}_{\mathbf{u}_i} + (\nabla \mathbf{s}_{\mathbf{u}_i})^T] \cdot \mathbf{n} - s_p \cdot \mathbf{n} \right)_y &= 0; \\ S_{v_i}^a &= 0, \end{aligned} \quad \text{sur } \Gamma^+. \quad (5.14)$$

Les conditions limites pour la pseudo-concentration demeurent inchangées :

$$S_F^a = 0 \quad \text{sur } \Gamma^-. \quad (5.15)$$

5.1.2.2 Adimensionnalisation

Comme il a été mentionné à la section 5.1.1.1, on ne désire pas procéder à une nouvelle adimensionnalisation pour les équations des sensibilités. En effet, des variables de la forme $\tilde{S}_{u_i} = S_{u_i}/S_{u_0}$, $\tilde{\mu}'_i = \mu'_i/\mu'_0$ n'auraient aucun sens puisque les quantités de références telles que u_0 ou μ_0 sont des constantes fixées d'avance et qui sont insensibles aux changements des paramètres de sorte que $S_{u_0} = \frac{\partial u_0}{\partial a} = 0$ et $\mu'_0 = 0$.

On choisit donc la même adimensionnalisation pour les équations de l'écoulement et des sensibilités, c'est-à-dire

$$\tilde{S}_{u_i} = S_{u_i}/u_0, \tilde{\mu}'_i = \mu'_i/\mu_0, \text{ etc.} \quad (5.16)$$

Notons qu'en procédant de cette façon, les équations de l'écoulement se trouvent entièrement adimensionnalisées alors que les équations des sensibilités ne le sont pas. À titre d'exemple, les quantités μ'_i et μ_0 ne possèdent pas les mêmes unités. En fait, l'opération de différentiation par rapport à un paramètre a_0 fait apparaître les unités du paramètre a_0 au dénominateur. Ainsi, pour toutes les variables et les quantités physiques de l'équation, la sensibilité sera munie des unités a_0^{-1} .

5.1.2.3 Sensibilités normalisées

Par définition, une sensibilité représente l'influence d'un paramètre sur la solution de l'écoulement. Une analyse des sensibilités permet ainsi d'identifier les zones sensibles ou encore les paramètres qui sont dominants. Cette analyse consiste donc à résoudre l'équation de la sensibilité par rapport à plusieurs paramètres et à comparer les résultats. Cette comparaison est rendue difficile par notre choix d'adimensionnalisation puisque les sensibilités pour différents paramètres a_0 n'ont pas les mêmes unités, soit a_0^{-1} . Les sensibilités peuvent avoir des valeurs très différentes simplement à cause

de l'ordre de grandeur entre les différents paramètres. Pour cette raison, on utilisera plutôt les sensibilités dites *normalisées*, c'est-à-dire multipliées par la valeur nominale du paramètre en question :

$$S_{\mathbf{u},\text{norm}}^a = S_{\mathbf{u}}^a \cdot a_{\text{nom}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial a} \cdot a_{\text{nom}}. \quad (5.17)$$

Les sensibilités normalisées sont donc adimensionnelles, peu importe le paramètre. On peut dire en quelque sorte que l'opération de l'adimensionnalisation comporte une deuxième étape après la résolution des équations.

Il devient alors aisé de comparer les sensibilités normalisées puisqu'elles expriment la variation de la solution correspondant à un pourcentage de perturbation du paramètre. Pour voir ceci plus clairement, servons nous du développement de Taylor du premier ordre pour une variable de l'écoulement autour de la valeur nominale du paramètre :

$$\Delta \mathbf{u} = \mathbf{u}(x; a_{\text{nom}}) - \mathbf{u}(x; a = a_{\text{nom}} + \Delta a) = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial a} \cdot \Delta a + O(\Delta a^2). \quad (5.18)$$

Pour de petites perturbations du paramètre a , on peut écrire cette équation à l'aide de la sensibilité normalisée

$$\Delta \mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial a} \cdot a_{\text{nom}} \times \frac{\Delta a}{a_{\text{nom}}}. \quad (5.19)$$

De cette façon, une perturbation de 1% du paramètre ($\frac{\Delta a}{a_{\text{nom}}} = 0,01$) entraîne une variation de la vitesse de $S_{\mathbf{u},\text{norm}}^a \times 0,01$.

5.1.2.4 Solution de l'écoulement

Nous avons choisi de porter notre analyse de sensibilité sur un écoulement avec un rapport des viscosités de $\mu_1/\mu_2 = 10$ et un rapport des débits de $D_1/D_2 = 5$. La figure 5.1 illustre le comportement de cet écoulement.

On y voit les profils paraboliques de la composante u de la vitesse pour chacune des deux phases en entrée et la double parabole en sortie où l'on constate une discontinuité de la courbure au-dessus de l'interface. La composante v de la vitesse est évidemment bien plus faible puisque ce n'est pas la direction de l'écoulement. La variation de celle-ci se concentre surtout en entrée de filière où les deux phases se déforment pour occuper de nouvelles proportions du canal. À cet endroit, l'interface subit un fort déplacement pour prendre ensuite une position stable en sortie de filière.

À la figure 5.2, on représente le maillage final de 4026 éléments obtenu après 4 cycles adaptatifs, lors desquels on a imposé une réduction de l'erreur d'un facteur de 1.7 pour la pression et la norme de la vitesse, ainsi que pour leur sensibilité correspondante, et une réduction deux fois plus élevée pour la pseudo-concentration et sa sensibilité.

5.1.2.5 Analyse de sensibilité

On présente maintenant les sensibilités par rapport aux paramètres de viscosité et de débit pour les trois variables de l'écoulement, à savoir les deux composantes de la vitesse (u, v) et la pseudo-concentration F . On insistera sur la sensibilité de la pseudo-concentration S_F qui fait l'objet de notre étude.

À la figure 5.3, on remarque qu'en sortie de filière, les sensibilités de la composante u des deux phases, $S_{u_1}^D$ et $S_{u_2}^D$ par rapport au changement de débit, sont toutes les deux positives. Ceci exprime une accélération de l'écoulement pour un accroissement du débit. Par contre, les sensibilités $S_{u_1}^\mu$ et $S_{u_2}^\mu$ par rapport au changement de viscosité,

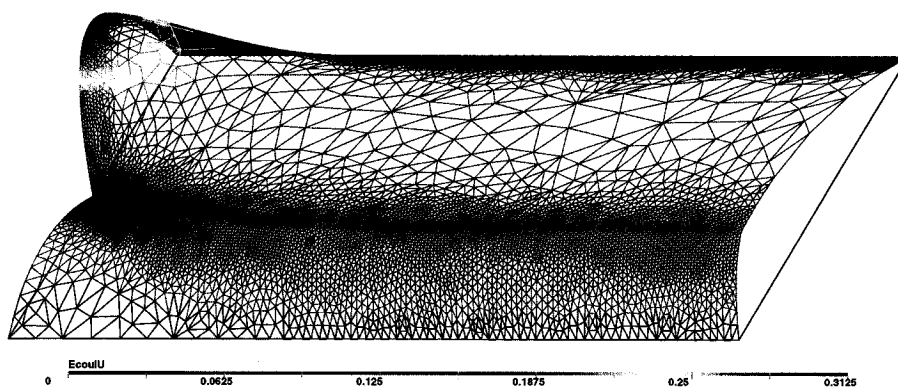
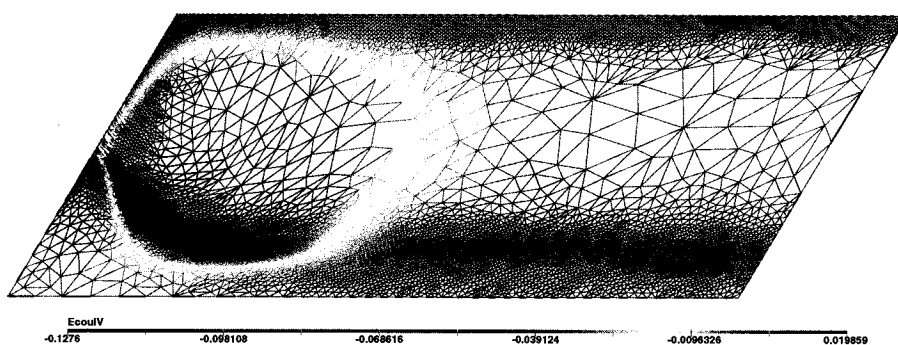
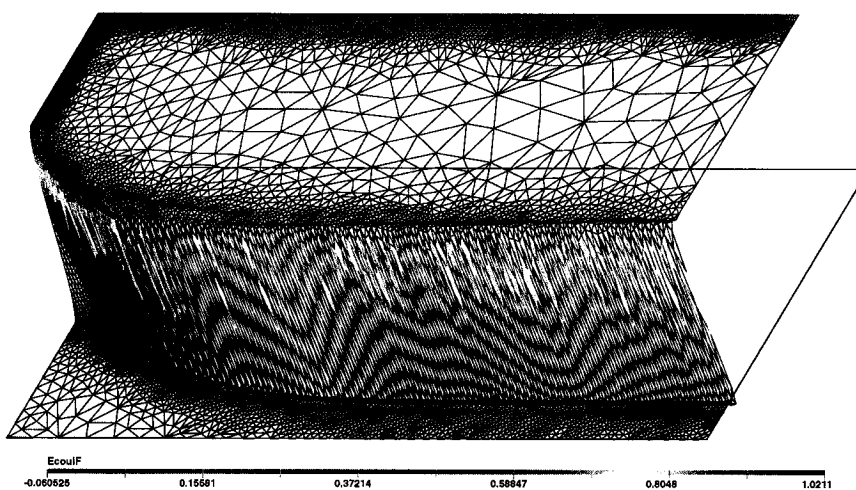
(a) composante u de la vitesse(b) composante v de la vitesse(c) pseudo-concentration F

Figure 5.1 Le problème de la coextrusion

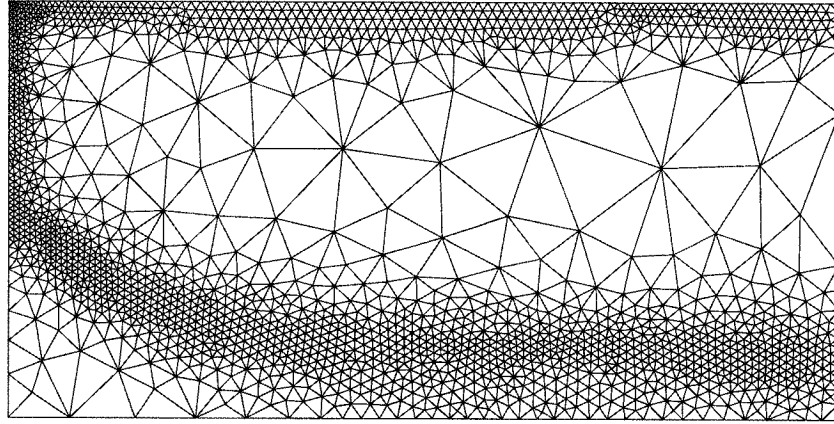
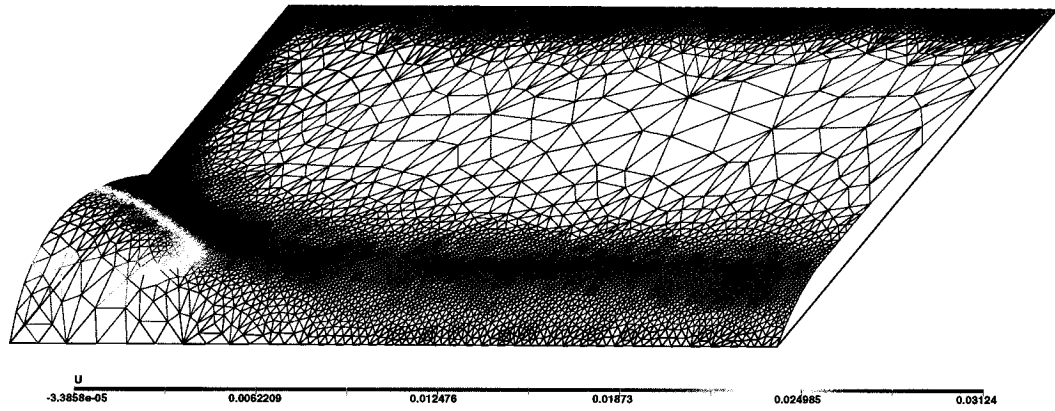
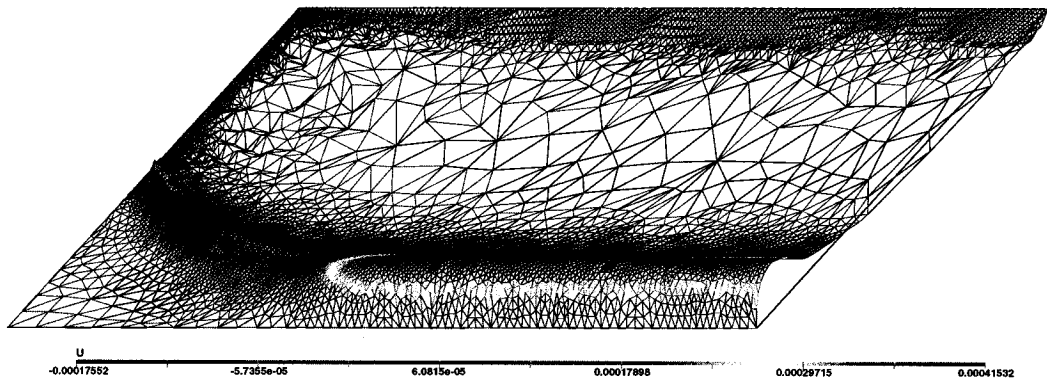


Figure 5.2 Maillage adapté pour l'interface et sa sensibilité (4026 éléments)

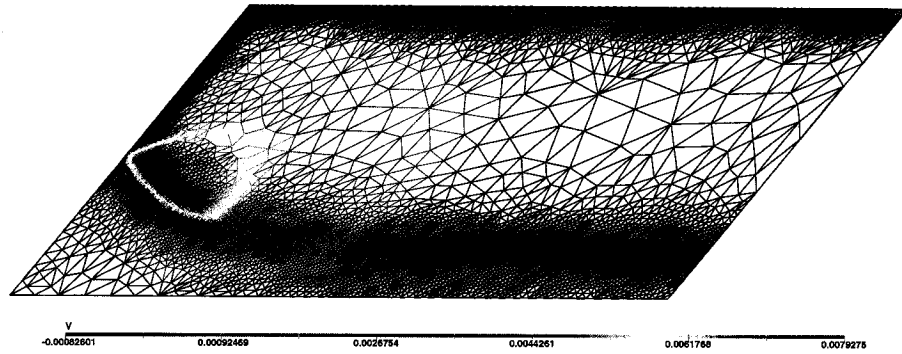
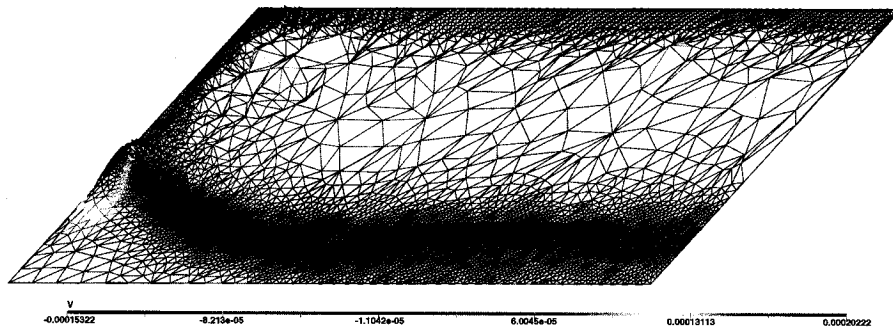
sont de signes opposés et en proportion inverse du changement dans le rapport des viscosités. Les sensibilités prévoient donc un ralentissement de la phase qui devient plus visqueuse et une accélération de la phase qui est maintenue à viscosité constante puisque celle-ci occupe moins de place dans le canal d'extrusion alors que son débit demeure le même. On obtient donc les résultats attendus pour ces deux paramètres.

Pour la composante v de la vitesse, on constate à la figure 5.4 que les sensibilités S_{v_1} et S_{v_2} sont plus grandes en entré de filière. Elles illustrent l'influence des viscosités et des débits sur la façon dont les fluides prennent leur place respectives dans le canal d'extrusion. On note un changement de signe de la sensibilité par rapport à la viscosité, S_v^μ . Ce phénomène s'explique bien en observant le comportement des sensibilités de la pseudo-concentration, S_F , à la figure 5.5.

La sensibilité de la pseudo-concentration exprime le taux de déplacement de l'interface. Une valeur positive de S_F indique un déplacement vers le bas de la filière et une valeur négative un déplacement vers le haut. La sensibilité par rapport au débit S_F^D , prévoit donc un élargissement de la région occupée par la phase dont le débit est croissant, ce qui est le résultat attendu.

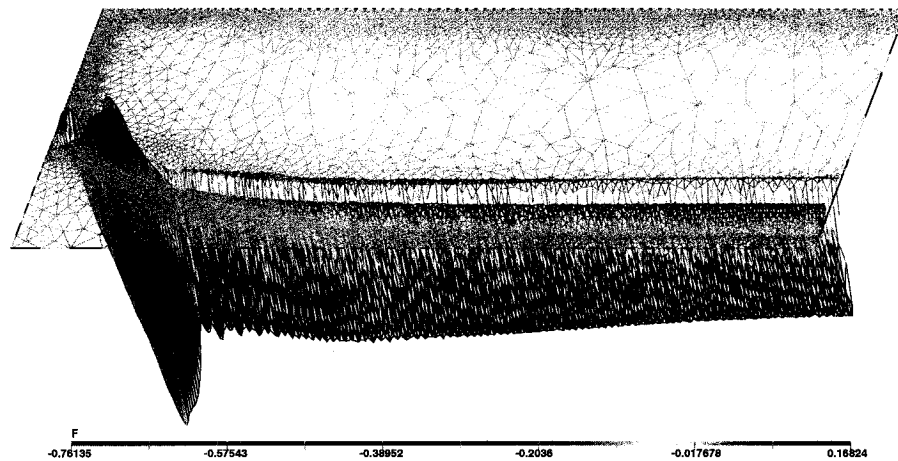
(a) composante S_u^D de la sensibilité(b) composante S_u^μ de la sensibilitéFigure 5.3 Sensibilité S_u par rapport au débit et à la viscosité

La sensibilité par rapport à la viscosité S_F^μ présente pour sa part un comportement plus complexe. En sortie de filière, cette sensibilité prévoit un élargissement de la région occupée par la phase qui subit un accroissement de sa viscosité, ce qui est encore une fois le résultat attendu. Par contre, en entrée de filière, la variable de sensibilité S_F^μ est de signe contraire et prévoit donc un rétrécissement de cette même phase. Nous nous expliquons ce comportement par le fait qu'en entrée de filière, les deux fluides doivent se déformer dans le sens perpendiculaire au sens de l'écoulement avant d'occuper la largeur du canal qui leur revient en sortie de filière. Une plus grande viscosité du fluide inhibe cette déformation de sorte qu'il prendra sa place plus loin

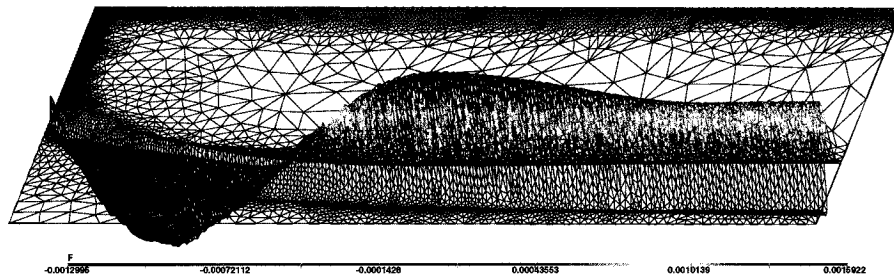
(a) composante S_v^D de la sensibilité(b) composante S_v^μ de la sensibilitéFigure 5.4 Sensibilité S_v par rapport au débit et à la viscosité

dans l'écoulement. Pour employer un vocabulaire que nous avons déjà utilisé, on peut dire que l'écoulement d'un fluide plus visqueux se développe plus lentement.

Une mesure intéressante est celle de la sensibilité de la pseudo-concentration à l'interface. La figure 5.6 trace la courbe de cette valeur pour les deux paramètres. À gauche on voit la sensibilité de la pseudo-concentration pour une variation des débits. On constate qu'elle est négative à l'exception d'un petit segment à l'entrée de la filière ce qui est dû à une forte oscillation de la sensibilité de la pseudo-concentration à cet endroit. À droite on voit la sensibilité de la pseudo-concentration pour une variation des viscosités. On observe bien sa valeur positive en entrée de filière, qui devient ensuite négative à la sortie, là où l'écoulement est complètement développé.

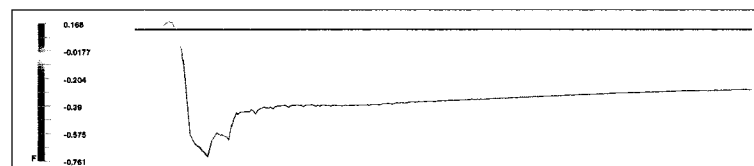


(a) composante S_F^D de la sensibilité

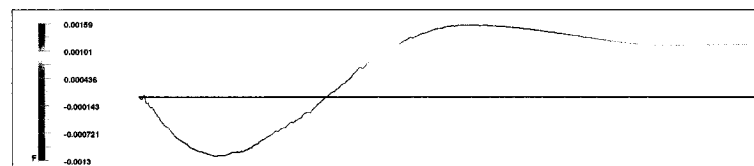


(b) composante S_F^μ de la sensibilité

Figure 5.5 Sensibilité S_F par rapport au débit et à la viscosité



(a) valeur de S_F^D à l'interface



(b) valeur de S_F^μ à l'interface

Figure 5.6 Valeur de S_F le long de l'interface (paramètres de débit et de viscosité)

5.1.3 Calcul de solutions voisines

Une des utilités des sensibilités est l'extrapolation vers des solutions voisines pour des valeurs voisines des paramètres de design $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n)$. Pour une faible perturbation $\Delta\mathbf{a} = (\Delta a_1, \Delta a_2, \dots, \Delta a_n)$ de ces paramètres, il est possible d'approximer le changement d'un champ de la solution par une série de Taylor du premier ordre,

$$\begin{aligned} u(x, y; \mathbf{a} + \Delta\mathbf{a}) &= u(x, y; \mathbf{a}) + \sum_i^n \frac{\partial u}{\partial a_i}(x, y; \mathbf{a}) \cdot \Delta a_i \\ &= u(x, y; \mathbf{a}) + \sum_i^n S_u^{a_i} \cdot \Delta a_i, \end{aligned} \quad (5.20)$$

où l'on remarque la présence des sensibilités.

Nous allons maintenant calculer de telles extrapolations d'une solution $u(x, y; \mathbf{a})$ obtenue en $\mathbf{a}$. Nous pourrions ensuite comparer ces extrapolations, obtenues rapidement et sans résolution numérique, avec les solutions des équations de l'écoulement calculées aux valeurs perturbées des paramètres $\mathbf{a} + \Delta\mathbf{a}$. Cette comparaison constitue ainsi une vérification supplémentaire du calcul des sensibilités.

Notre calcul porte sur la position de l'interface en sortie de filière. Nous avons choisi de perturber le débit de la phase inférieure D_2 . Les résultats obtenus sont représentés au tableau 5.1. La position de l'interface est affichée en fonction de la variation du rapport des débits D_1/D_2 . Chaque valeur de la colonne intitulée « Position perturbée » requiert une nouvelle résolution des équations de l'écoulement, alors que les valeurs de la colonne intitulée « Position extrapolée » ne nécessitent qu'une seule solution des équations de l'écoulement et des sensibilités.

On constate que l'extrapolation donne de bons résultats pour de faibles variations du débit, ce qui confirme la validité de notre solution pour les équations des sensibilités. La précision de l'extrapolation se dégrade rapidement pour des perturbations plus

Tableau 5.1 Position de l'interface pour des perturbations de la viscosité

Variation de D_1/D_2	Position perturbée	Position extrapolée	Erreur relative
0.00 %	0.18792345	—————	—————
0.033 %	0.18797999	0.18793432	0.000243
0.33 %	0.18884856	0.18803228	0.00240
3.33 %	0.19333789	0.18900339	0.02242
33.3 %	0.23459356	0.19782919	0.15673
333 %	0.42205917	0.27022867	0.35974
1000 %	0.48353187	0.1355189	0.720

fortes. Ceci est dû à la non linéarité du problème, mais également à la forme de la sensibilité de la pseudo-concentration. Rappelons que la sensibilité de la pseudo-concentration est nulle sur tout le domaine à l'exception d'un « pic », qui se trouve dans un voisinage de l'interface. Puisque l'extrapolation se fait par l'addition de ce « pic » à la pseudo-concentration, il est clair que ce calcul ne sera d'aucune utilité pour prévoir la position de l'interface si celle-ci se trouve à l'extérieur du voisinage. Ceci est vrai même si la position de l'interface est une fonction linéaire du rapport entre les débits, par exemple, lorsque les deux phases sont de même viscosité. La dernière perturbation listée au tableau est un exemple de cet effet. On remarque que l'extrapolation prédit un rétrécissement de la région occupée par la phase dont on a augmenté le débit.

5.2 Les jets libres

Nous reproduisons ici un écoulement de jet libre étudié dans Dufour (1999) pour en faire une analyse de sensibilité. Nous posons ce problème dans un système de coordonnées bidimensionnelles cartésien pour un jet symétrique. Il est important de noter que nous ne prenons pas en compte la force capillaire qui peut être non négligeable dans ce type d'application.

5.2.1 Description du problème de l'écoulement

Les calculs sont effectués sur le domaine illustré à la figure 5.7, qui représente la moitié symétrique de la tranche du jet. On doit supposer un conduit d'éjection suffisamment large pour négliger les effets du bord. L'écoulement se fait de gauche à droite et la taille adimensionnelle du conduit est de 2×1 unités alors que celle du milieu ambiant est de deux unités dans la direction verticale et d'une longueur suffisante pour permettre le développement complet de l'écoulement.

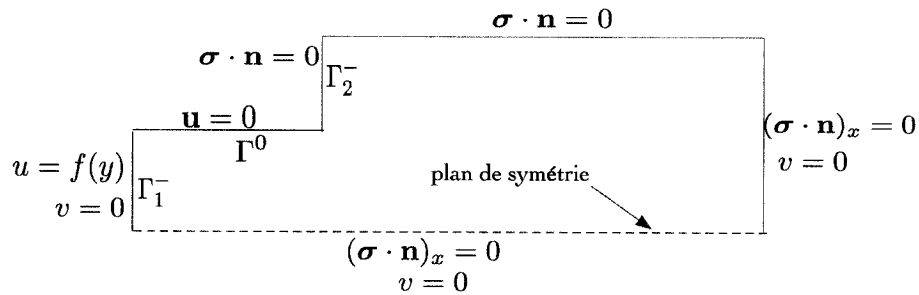


Figure 5.7 Jet libre : conditions frontières de l'écoulement

5.2.1.1 Conditions limites

Les conditions limites sont également données sur le schéma du domaine. Comme pour le problème de coextrusion, on a adhérence du fluide aux parois du conduit, à la différence qu'ici le domaine est symétrique, ce qui donne une condition nulle seulement pour la composante v de la vitesse, sur la frontière inférieure qui représente le plan de symétrie. Un profil de vitesse parabolique est imposé en entrée du conduit (sur Γ_1^-). Une condition frontière est imposée pour la pseudo-concentration sur $\Gamma^- = \Gamma_1^- \cup \Gamma_2^-$ de telle sorte que $F = 0$ sur Γ_2^- et $F = 1$ sur Γ_1^- ainsi que sur la paroi Γ_0 du conduit. Comme dans le problème de coextrusion, le saut entre ces deux valeurs est représenté par une courbe d'ordre trois qui prend la valeur $1/2$ au coin sortant du conduit.

5.2.1.2 Adimensionnalisation

Puisque nous ne tenons pas compte de la force capillaire, il est possible d'utiliser la même adimensionnalisation que celle présentée pour le problème de coextrusion. Les quantités de références choisies dans le cas présent sont :

$$\begin{aligned} L_0 &= \text{la hauteur du conduit } (2h); \\ \rho_0 &= \text{la densité du liquide } (\rho_1); \\ \mu_0 &= \text{la viscosité du liquide } (\mu_1); \\ u_0 &= \text{la vitesse moyenne imposée dans le conduit } (u_{1,moy}), \end{aligned}$$

et le nombre adimensionnel de Reynolds est défini par

$$Re = \frac{\rho_0 u_0 L_0}{\mu_0} = \frac{\rho_1 u_{1,moy} 2h}{\mu_1}. \quad (5.21)$$

Puisqu'il s'agit de l'écoulement d'un liquide dans un gaz, nous avons suivi la proposition faite par Fortin *et al.* (1992), qui définit la viscosité du milieu ambiant de façon à avoir $\mu_1 \gg \mu_2$ et $\rho_1 \gg \rho_2$. À cette fin nous avons imité la méthode de Fortin, qui utilise l'expression 3.17 sous la forme

$$\mu(F) = 10^{-3} + (\mu_1 - 10^3)F(x). \quad (5.22)$$

5.2.2 Description du problème des sensibilités

Pour les jets, nous allons effectuer une étude de sensibilité semblable à celle menée pour la coextrusion. De toutes les sensibilités calculées, ce sont celles de la pseudo-concentration qui nous intéressent particulièrement puisqu'elles traduisent l'influence d'un paramètre sur la position de l'interface. Les paramètres considérés sont la viscosité et le débit du liquide.

Les conditions frontières pour le problème de sensibilité dépendent du paramètre considéré et sont données à la figure 5.8 pour le paramètre de viscosité et à la figure 5.9 pour le paramètre de débit. On peut se référer à la section sur la coextrusion pour en retracer le développement.

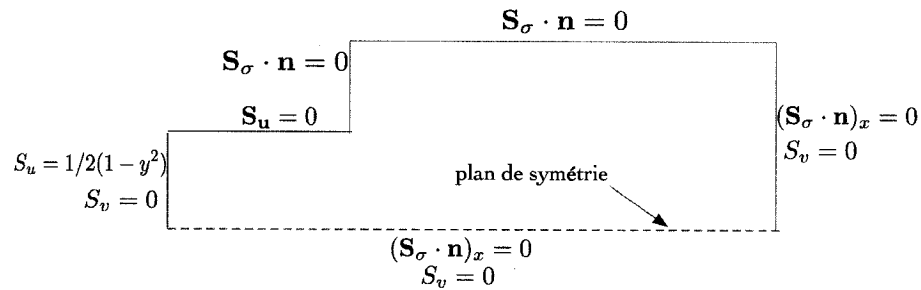


Figure 5.8 Jet libre : conditions frontières de la sensibilité (débit)

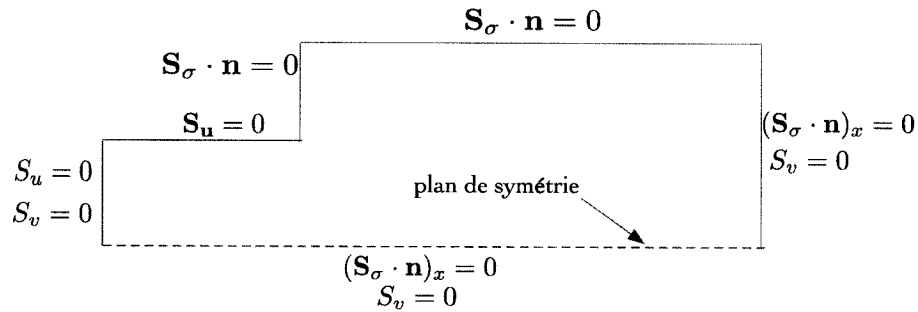


Figure 5.9 Jet libre : conditions frontières de la sensibilité (viscosité)

Nous faisons usage de l'adimensionnalisation des équations de l'écoulement, et une fois le calcul terminé, la comparaison des résultats se fait à l'aide des sensibilités normalisées. On se réfère à nouveau à la section sur la coextrusion pour en comprendre les raisons.

5.2.3 Solution de l'écoulement

Cet écoulement est une version en coordonnées cartésiennes de l'écoulement résolu et validé par Dufour (1999) en coordonnées axisymétriques, de sorte que l'on peut affir-

mer avec un bon degré de certitude que la solution que nous présentons ici est correcte. La figure 5.10 illustre le comportement de cet écoulement. À l'entrée du conduit, on

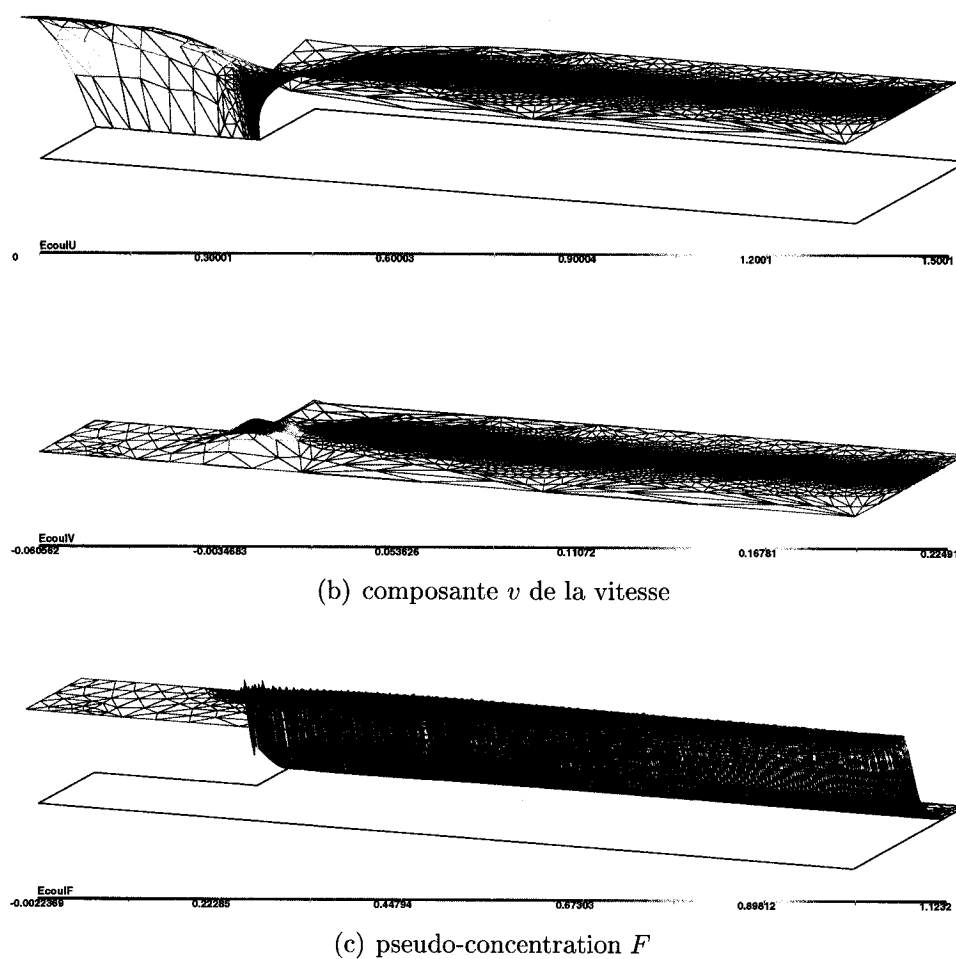


Figure 5.10 Écoulement du Jet

peut voir le profil parabolique de la composante u de la vitesse. On constate également la vitesse d'entraînement du milieu ambiant. La vitesse du jet devient rapidement uniforme après s'être dégagée du conduit et de la condition d'adhérence à la paroi. La composante v de la vitesse témoigne de ce réajustement de la vitesse. Le tracé de l'interface n'étant pas très visible, nous avons inclus sa position sur le maillage de la figure 5.11.

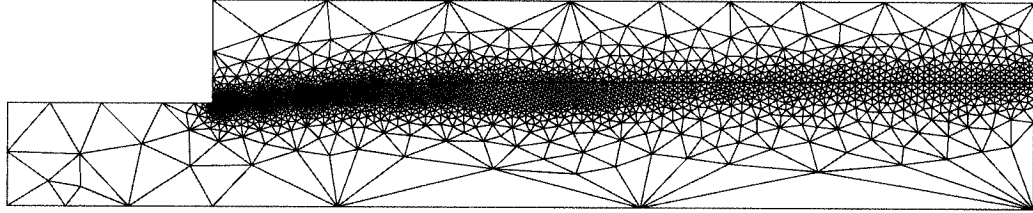


Figure 5.11 Maillage adapté pour la pseudo-concentration F et sa sensibilité S_F , (3247 éléments)

À la figure 5.11, on représente le maillage final de 3247 éléments obtenu après trois cycles adaptatifs lors desquels on a imposé une réduction de l'erreur d'un facteur de 1,7 pour la pression et la norme de la vitesse ainsi que pour leur sensibilité correspondante, et une réduction 1,7 fois plus élevée pour la pseudo-concentration et sa sensibilité. Le maillage serré en sortie du conduit est causé par un fort gradient de la pression à cet endroit.

5.2.3.1 Analyse de sensibilité

On présente maintenant les sensibilités par rapport aux paramètres de viscosité et de débit pour les trois variables de l'écoulement, à savoir les deux composantes de la vitesse (u, v) et la pseudo-concentration F . Une fois de plus, on insistera sur la sensibilité de la pseudo-concentration S_F qui fait l'objet de notre étude. Notons que nous n'allons pas, cette fois, comparer la proportion des sensibilités entre les deux phases puisque l'une d'entre elles n'a pas un débit fixe.

Les figures 5.12 et 5.13 illustrent le comportement des sensibilités en vitesse. Il existe une forte correspondance entre l'écoulement et la sensibilité par rapport au débit. Ceci est prévisible puisque le débit du jet est le moteur de cet écoulement.

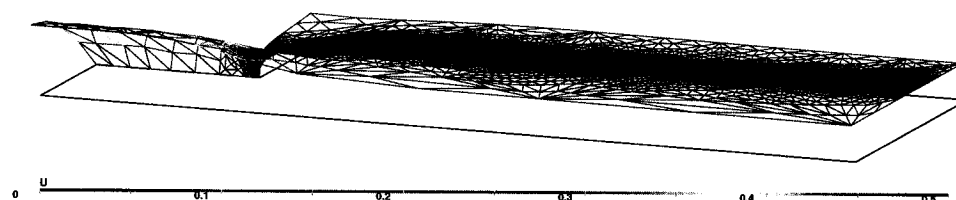
La sensibilité par rapport à la viscosité exhibe, pour sa part, un comportement très

différent. La composante S_u^μ change de signe et montre bien l'influence de la viscosité sur la distribution de la vitesse dans le jet. On constate qu'une augmentation de la viscosité entraîne une diminution de la vitesse au centre du jet alors que la vitesse augmente près de la paroi du conduit. Ceci montre que le profil parabolique de la vitesse est modifié. C'est le résultat attendu puisqu'une forte viscosité tend à limiter la courbure de ce profil. Qui plus est, ce comportement se poursuit lorsque le jet est dégagé du conduit et jusqu'à la sortie du domaine. Un examen de la sensibilité de la pseudo-concentration, S_F^μ , explique ce résultat.

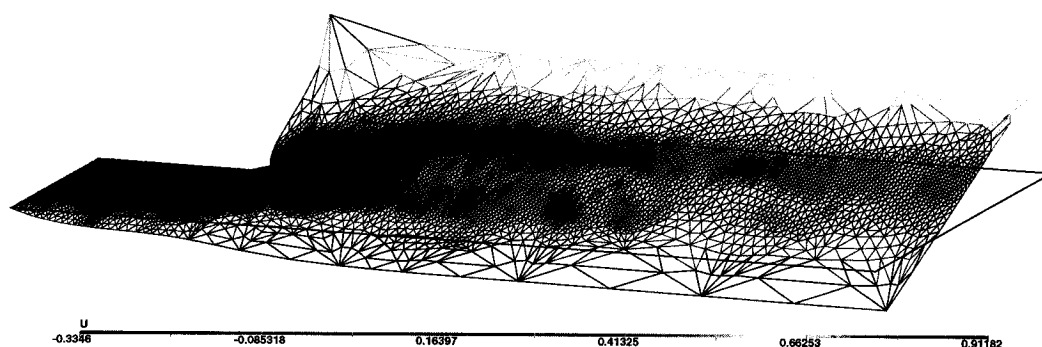
La figure 5.14 illustre la sensibilité de la pseudo-concentration. Une valeur positive de la variable S_F prédit un déplacement de l'interface vers le haut du domaine. On retrouve cette situation pour les deux sensibilités de la pseudo-concentration, S_F^D et S_F^μ , de sorte qu'un accroissement du débit ou de la viscosité a pour effet de gonfler le jet. On observe par contre une différence entre ces deux sensibilités. La sensibilité par rapport au débit, S_F^D , se stabilise alors que la sensibilité par rapport à la viscosité, S_F^μ , continue sa croissance jusqu'à la sortie du domaine. Ceci montre que le jet poursuit son gonflement d'une façon plus soutenue lors d'une augmentation de la viscosité. Le jet est donc encore en évolution à la sortie du domaine, ce qui explique que la composante S_u^μ de la sensibilité en vitesse n'est pas uniforme à cet endroit. On note d'ailleurs le même effet pour la variable S_u^D , mais à une échelle bien plus petite.

Remarquons par ailleurs que le calcul de la sensibilité par rapport à la viscosité, S_F^μ , s'est avéré plus ardu dans cette application qu'elle ne l'est pour la coextrusion. Le « pic » présenté par cette variable produit des oscillations numériques dans la zone entourant le coin sortant du conduit. La figure 5.16 illustre le maillage que nous avons utilisé pour résorber ces effets.

Pour finir, la figure 5.15 reproduit la mesure faite pour la coextrusion, à savoir la valeur de la sensibilité à son pic au-dessus de l'interface. On constate la croissance continue de la variable S_F^μ , alors que la variable S_F^D tend à se stabiliser vers la sortie du domaine.

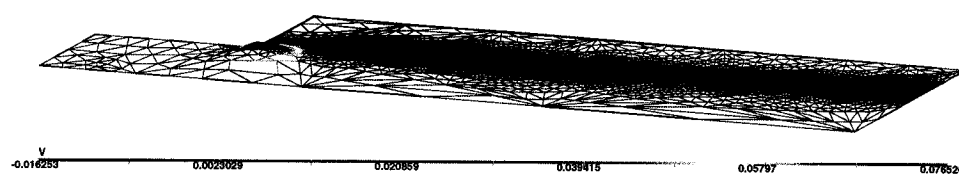


(a) composante S_u^D de la sensibilité

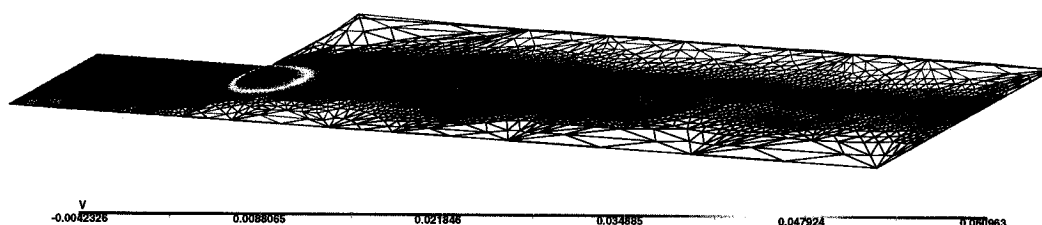


(b) composante S_u^μ de la sensibilité

Figure 5.12 Sensibilité S_u par rapport au débit et à la viscosité



(a) composante S_v^D de la sensibilité



(b) composante S_v^μ de la sensibilité

Figure 5.13 Sensibilité S_v par rapport au débit et à la viscosité

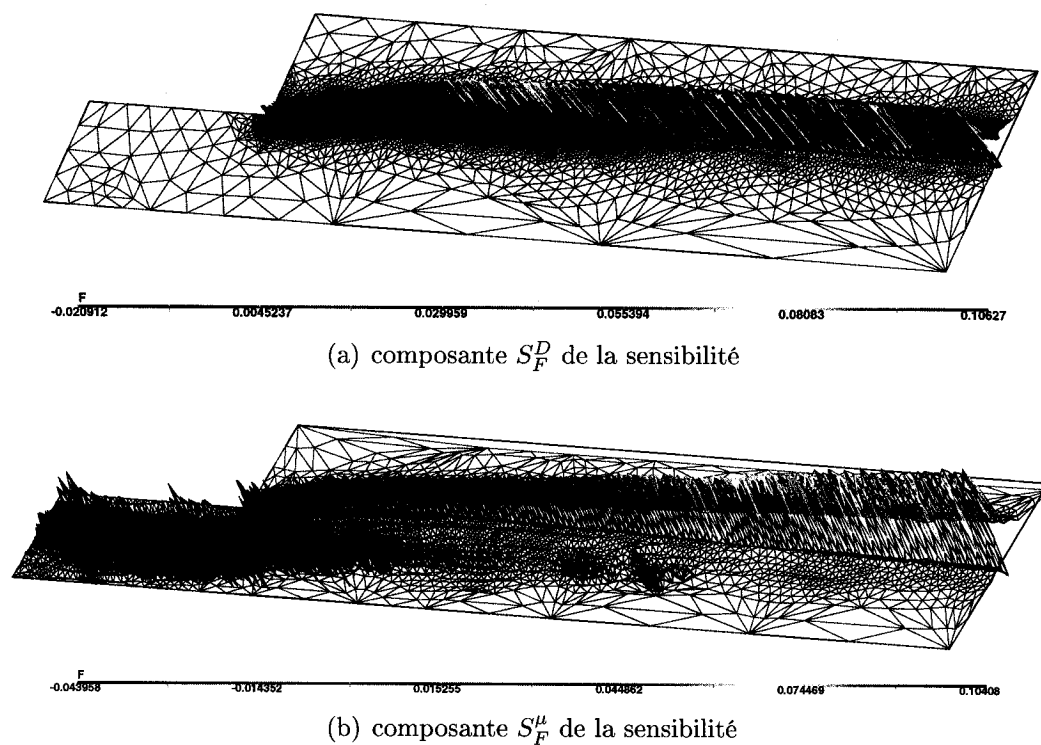


Figure 5.14 Sensibilité S_F par rapport au débit et à la viscosité

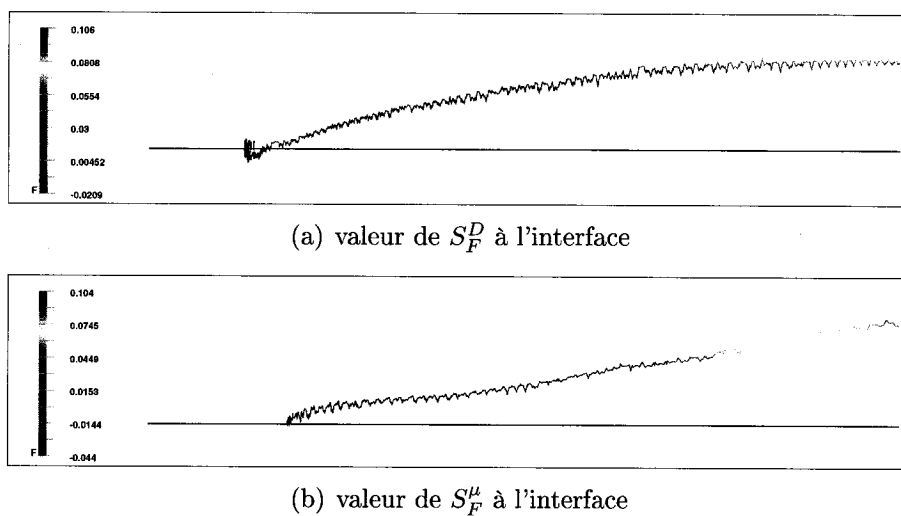


Figure 5.15 Valeur de S_F le long de l'interface (paramètres de débit et de viscosité)

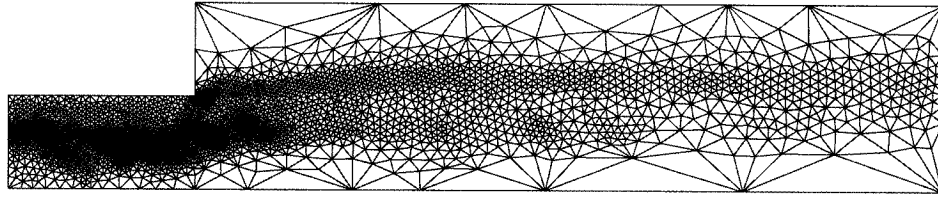


Figure 5.16 Maillage adapté pour la pseudo-concentration F et sa sensibilité par rapport à la viscosité (6183 éléments)

5.2.4 Calcul de solutions voisines

Nous reprenons dans cette section le calcul de solutions voisines qui a été fait pour la coextrusion à la section 5.1.3.

Nous avons calculé la position de l'interface à la sortie du domaine pour une valeur nominale adimensionnelle de la viscosité, c'est-à-dire $\tilde{\mu} = 1.00$ et pour des valeurs perturbées allant de $\tilde{\mu} = 1.01$ jusqu'à $\tilde{\mu} = 20.00$. Pour les valeurs perturbées, la position de l'interface a été obtenue d'abord en extrapolar la solution de la pseudo-concentration à l'aide des sensibilités selon la formule 5.20 et ensuite en résolvant à nouveau les équations de l'écoulement pour chaque valeur perturbée de la viscosité. Le tableau 5.2 présente les résultats obtenus pour ces deux méthodes.

On constate que l'extrapolation donne des valeurs très précises pour de faibles variations de la viscosité, ce qui confirme la fiabilité de la sensibilité de la pseudo-concentration par rapport à la viscosité. Comme on peut s'y attendre, la précision de l'extrapolation diminue pour de plus grandes variations de la viscosité. Toutefois, ces approximations restent encore bonnes pour de grandes variations de la viscosité, étant donné le peu d'influence qu'a celle-ci sur la position de l'interface.

Tableau 5.2 Position de l'interface pour des perturbations de la viscosité

Viscosité $\tilde{\mu}$	Perturbation	Position perturbée	Position extrapolée	Erreur relative
1.00	0%	1.22922754	—————	—————
1.01	1%	1.22939445	1.22939197	0.000002
1.02	2%	1.22955619	1.22955617	0.000001
1.05	5%	1.23001387	1.23004747	0.00004
1.10	10%	1.23069396	1.23086186	0.00014
1.20	20%	1.23179581	1.23247362	0.00055
1.50	50%	1.23378162	1.23716588	0.00274
2.00	100%	1.23514025	1.24447435	0.0076
5.00	400%	1.23591665	1.27492962	0.048
20.00	2000%	1.23906125	1.38814600	0.120

CONCLUSION

En conclusion de ce mémoire, nous pouvons affirmer que l'objectif principal que nous nous étions posé au départ a été atteint. En premier lieu, nous avons développé les équations générales des sensibilités pour des problèmes d'écoulements multiphases, visqueux et laminaires. À cette fin nous avons emprunté la méthode de la pseudo-concentration pour distinguer les fluides, ce qui nous a mené à un ensemble d'équations d'état composé des équations de Navier-Stokes et d'une équation de transport. Pour le calcul des sensibilités, nous avons suivi l'approche des sensibilités continues, selon laquelle les équations d'état ont d'abord subi une différentiation par rapport au paramètre de design pour ensuite être discrétisées. Cette méthode permet de traiter les paramètres de forme aussi facilement que les paramètres de valeur.

En deuxième lieu, nous avons implanté ces équations ainsi obtenues conformément à la méthode des éléments finis. Les équations de Navier-Stokes ont été discrétisées à l'aide des éléments de Crouzeix-Raviart, quadratiques en vitesse et linéaires discontinus en pression. L'équation de transport a été discrétisée par des éléments finis quadratiques. Nous avons utilisé la même discrétisation pour les équations d'états et leur sensibilité correspondante. Les méthodes de stabilisation déjà implantées pour les équations de l'écoulement se sont avérées adéquates pour le traitement des oscillations numériques des sensibilités. La technique de capture adaptative de l'interface est un atout pour le calcul de la sensibilité abrupte de l'équation de transport.

Le bon fonctionnement des différentes composantes du code a été établi par l'étude de problèmes de vérification. Une analyse de la régression de l'erreur en fonction du raffinement du maillage a été menée pour démontrer que l'ordre de précision de nos solutions sont en accord avec la théorie. Nous avons constaté une diminution de l'erreur en proportion du carré de la taille des éléments pour les variables de l'écoulement, comme pour celles de la sensibilité. Cette analyse d'erreur a été conduite en

comparaison avec des solutions analytiques, vérifiant ainsi l'adaptativité du maillage.

Cette étude a été suivie par la présentation de deux applications du calcul des sensibilités pour des écoulements multiphases. La première s'est penchée sur le comportement de l'interface entre deux phases liquides en coextrusion et la seconde sur l'écoulement d'un liquide dans un gaz dans le contexte des jets libres.

L'originalité de ce mémoire réside dans le calcul des sensibilités de l'équation de transport. Nous avons étendu le domaine d'application du code d'analyse de sensibilité déjà développé par Turgeon (2001) et Hristova (2003) pour inclure l'étude des écoulements multiphases. Par le fait même, nous avons démontré la possibilité d'appliquer la méthode des sensibilités à des problèmes qui ne présentent pas la continuité que l'on retrouve dans les écoulements étudiés précédemment. Une amélioration évidente du code proviendrait d'une meilleure reconstruction des dérivées de l'écoulement qui sont utilisées pour le calcul des sensibilités par rapport à un paramètre de forme. Une deuxième amélioration pourrait être une meilleure stabilisation de la sensibilité de la variable de la pseudo-concentration. Finalement, une étude de la sensibilité portant sur des paramètres supplémentaires serait une suite logique de cette recherche.

RÉFÉRENCES

- AGASSANT, J.-F., FORTIN, A. et DEMAY, Y. (1994). Prediction of stationary interfaces in coextrusion flows. *Polym. Eng. Sci.*, 34, 1101–1108.
- BATCHELOR, G.K. (1967). *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge.
- CROUZEIX, M. et RAVIART, P.A. (1973). Conforming and nonconforming finite element methodes for solving the stationary stokes equation. *R.A.I.R.O.*, 7, 33–76.
- DUFOUR, S. (1999). *Méthodes d'éléments finis adaptatives pour les écoulements multifluides*. Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal.
- FORTIN, A., DEMAY, Y. et AGASSANT, J.-F. (1992). Computation of stationary interface between generalized newtonian fluids. *Rev. Eur. Éléments Finis*, 1, 181–196.
- GUNZBURGER, M.D. (1997). Three lectures on flow optimization. *Applied Mathematics Report AM*, 97, 124–185.
- HAN, C.D. (1981). *Multiphase Flow in Polymer Processing*. Academic Press, New York.
- HÉTU, J.-F. et PELLETIER, D.H. (1992a). Adaptive remeshing for viscous incompressible flows. *AIAA J.*, 30, 1986–1992.
- HÉTU, J.-F. et PELLETIER, D.H. (1992b). Fast adaptive finite element scheme for viscous incompressible flows. *AIAA J.*, 30, 2677–2682.

- HRISTOVA, H. (2003). *Analyse de sensibilité d'écoulements instationnaires visqueux laminaires*. Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.
- JOHNSON, C. (1987). *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. Cambridge University Press, Cambridge.
- LANDAU, L.D. et LIFSHITZ, E.M. (1987). *Fluid Mechanics*. Pergamon Press, Oxford, deuxième édition.
- ROACHE, P.J. (1998). *Verification and Validation in Computational Science and Engineering*. Hermosa publishers, Albuquerque, New Mexico.
- SCHETZ, J.A. (1993). *Boundary Layer Analysis*. Prentice-Hall.
- STEWART, D.L. (1998). *Numerical Methods for Accurate Computation of Design Sensitivities*. Thèse de doctorat, Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, VA.
- THOMPSON, E. (1986). Use of pseudo-concentration to follow creeping viscous flows during transient analysis. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 115–123.
- TURGEON, E. (2001). *Méthodes d'éléments finis adaptatives pour la résolution des sensibilités d'écoulements*. Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal.
- ZIENKIEWICZ, O.C. et ZHU, J.Z. (1992a). The superconvergent patch recovery and *a posteriori* error estimates. part 1 : The recovery technique. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 33, 1331–1364.
- ZIENKIEWICZ, O.C. et ZHU, J.Z. (1992b). The superconvergent patch recovery and *a posteriori* error estimates. part 2 : Error estimates and adaptivity. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 33, 1365–1382.