POLYPUBLIE
Polytechnique Montréal

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
UNIVERSITÉ D'INGÉNIERIE

Titre: Title:	Méthodes d'éléments finis adaptatives pour les écoulements multifluides
Auteur: Author:	Steven Dufour
Date:	1999
Type:	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis
Référence: Citation:	Dufour, S. (1999). Méthodes d'éléments finis adaptatives pour les écoulements multifluides [Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/8606/

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: PolyPublie URL:	https://publications.polymtl.ca/8606/
Directeurs de recherche: Advisors:	Dominique Pelletier, & André Fortin
Programme: Program:	Non spécifié

Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie, le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal
This file has been downloaded from PolyPublie, the institutional repository of Polytechnique Montréal

https://publications.polymtl.ca

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MÉTHODES D'ÉLÉMENTS FINIS ADAPTATIVES POUR LES ÉCOULEMENTS MULTIFLUIDES

STEVEN DUFOUR
DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES ET DE GÉNIE INDUSTRIEL
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR (Ph.D.)
(MATHÉMATIQUES DE L'INGÉNIEUR)
AOÛT 1999

© Steven Dufour, 1999.

National Library of Canada
Bibliothèque nationale du Canada

Acquisitions and Bibliographic Services
Acquisitions et services bibliographiques

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

Our file Notre référence

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

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

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

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

0-612-48881-0

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée:

MÉTHODES D'ÉLÉMENTS FINIS ADAPTATIVES POUR LES ÉCOULEMENTS MULTIFLUIDES

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

M. SAVARD Gilles, Ph.D., président
M. PELLETIER Dominique, Ph.D., membre et directeur de recherche
M. FORTIN André, Ph.D., membre et codirecteur de recherche
M. GARON André, Ph.D., membre
M. FORTIN Michel, Doctorat d'État, membre

À Richard Courant et à Richard Stallman, pour leur vision.
À Jean-Louis Poiseuille, sans qui tout ça ne serait possible.

REMERCIEMENTS

Je tiens d'abord à remercier Monsieur Dominique Pelletier, qui a dirigé avec doigté ces travaux, pour m'avoir proposé un sujet de recherche passionnant et pour m'avoir désembourbé à maintes reprises par un commentaire éclairé ou une suggestion judicieuse. Mes remerciements se portent aussi vers Monsieur André Fortin, qui a participé à la direction de cette recherche, pour m'avoir accueilli au sein de son équipe de recherche et pour m'avoir permis de profiter de l'atmosphère de travail extraordinaire que l'on y retrouve.

De très sincères remerciements sont de mise pour Monsieur Gilles Savard, qui a accepté à pied levé de présider ce jury. Je suis également très heureux que Monsieur Michel Fortin, de l'Université Laval, ait accepté de juger ce travail. Sa réputation n'est plus à faire et j'espère que ma vision de la modélisation numérique des écoulements à surfaces libres saura l'intéresser. Je suis heureux que Monsieur André Garon puisse également juger le résultat de mes recherches. Il est connu que M. Garon a un sens critique très pointu et toujours à propos. Je suis certain que ses commentaires sauront m'être profitables pour mes travaux futurs.

Je suis également reconnaissant auprès de Monsieur Jean-François Hétu de l'Institut des matériaux industriels du Conseil national de recherche du Canada. En m'invitant pour un séjour de recherche à Boucherville, il a fait que ces travaux ont démarré sur un bon pied en supervisant mes premiers efforts dans la modélisation des écoulements à surfaces libres.

Au cours de ces années de travail en tant que candidat au doctorat, nous sommes amenés à faire la connaissance d'une foule de gens avec qui nous sommes appelés à travailler, ou tout simplement à côtoyer dans notre vie de tous les jours. J'espère ne pas trop en oublier. Si c'est le cas, considérez vous automatiquement salués.

Les membres de l'équipe de recherche de Dominique Pelletier, du Département de génie mécanique, m'ont été d'une aide précieuse lorsqu'est venu le temps de m'initier et de m'acclimater à leurs méthodes de travail. Je pense en particulier à Luminiţa

Ignat, à Florin Ilinca, à Simon Kakzor et surtout à Éric Turgeon qui m'a servi de tuteur à mes débuts et est devenu un collègue avec qui j'ai pu avoir maintes discussions très enrichissantes.

Les collègues étudiants du *Groupe de recherche en éléments finis* d'André Fortin, et du Département de mathématiques appliquées, ont été très nombreux et la complicité vécue, entre autres avec certains qui se sont retrouvés à l'autre bout de la planète, a sûrement contribué à rendre ce passage des plus agréable. Donc, un sincère salut à Aboubacar « Bass » Bagayogo, Alain « Kramer » Béliveau, Pascal « Capitaine » Cambot, Pierre « Nous sommes exploités! » Carrier, Éric « Allo Carl » Chamberland, Sylvain « Zambony » Chapleau, Gerardo « Gilberto » Da Ponte, Hugues « La grande ... » Delmaire, Marie-Claude « Leonov » Heuzey, Alain « Le barbu » Lioret, Jean-Philippe «10^{-15}» Marcotte, Donatien « Le tombeur » N'Dri, Mourad « Pas possible » Rajbaoui, Carl « Excellent » Robitaille, José « Le bug » Teixeira, Pierre « Yoda » Tran, Sabrina « La petite française » Venant-Valérie, Anne-Sophie « Bocal étudiant » Vintimiglia.

Je voudrais *profiter* de cette occasion pour offrir une bise à Anne-Marie, Nathalie, Annie, Louise, Suzanne, Diane, Ginette et à toutes les charmantes membres du personnel du département. Sans vous, ces dernières années auraient été bien mornes. Je m'en voudrais d'oublier Chantal « la tannante », qui devra se chercher une autre tête de Turc.

Mes travaux ont demandé un usage important des ressources informatiques. J'ai donc souvent eu à faire appel aux *spécialistes* de l'École en la matière. En espérant n'oublier personne, mes remerciements à Vincent Cavuotti, Jean-Marc Chevalier, Éloi Clément, Khamsing Douangboulom, Marc-Arthur Louis, Alain Robidoux et Claude Villeneuve. Je vais toujours me souvenir de nos dîners. Bien sur, je ne pourrais me pardonner d'oublier Benoît Forest, un accolite de tous les instants, que ce soit au laboratoire ou au *Zinc*.

J'aimerais aussi saluer les professeurs du Département de mathématiques appliquées, avec qui j'ai eu maintes conversations très intéressantes. J'aimerais particulièrement remercier Monsieur Marc Moore pour m'avoir fait connaître le département et le travail intéressant que l'on pouvait y faire.

J'ai aussi pu profiter de plusieurs discussions intéressantes et agréables avec les professeurs du Département de génie mécanique, spécialistes en calcul scientifique, soit Ricardo Camarero, Marcelo Reggio et Jean-Yves Trépanier.

Plusieurs autres personnes, la plupart associées au calcul scientifique, doivent s'ajouter à cette liste de remerciements pour une raison ou pour une autre. Dans l'ordre et dans le désordre, salut à Chantal Pic, François Guibeault, Paul Labbé, Richard Labrie, Roberto Marrano, Benoît Ozell et aux membres du personnel du CERCA.

J'aimerais aussi remercier mes proches amis thésards Marie-Claude Riopel et Alain Plante, qui ont su écouter et comprendre mes angoisses et interrogations, périodes de questionnement qui surgissent régulièrement dans la vie d'un étudiant au doctorat.

J'aimerais saluer la patience qu'a eue Brigite. Elle est, sans aucun doute, la personne qui a été la mieux placée pendant quelques mois pour connaître et surtout subir le quotidien et les « rush de travail » de la vie d'un étudiant aux cycles supérieurs.

Finalement, à mes parents, Lucette et Jean-Guy, qui m'ont soutenu matériellement et moralement et ce, de façon inconditionnelle, tout au long de cette aventure. Je ne saurais suffisamment les remercier. Ce n'est pas toujous évident, pour des gens qui ne sont pas passés par là, de comprendre où on va avec toutes ces années d'étude. Il faut dire qu'honnêtement il nous arrive, même à nous, de parfois nous demander ce que l'on fait là-dedans. Mais cette thèse constitue, en partie, une réponse à tous ces questionnements.

Oups, j'oubliais un petit clin d'oeil *discret* à cette douce Naïma...

RÉSUMÉ

Nous présentons une méthode d'éléments finis adaptative pour la modélisation des écoulements incompressibles, stationnaires, à surfaces libres. Nous sommes à la recherche d'une méthodologie simple à implémenter, précise, générale d'application et peu coûteuse. Des formulations variationnelles classique et décentrées sont utilisées pour discrétiser les équations aux dérivées partielles. Les interfaces sont capturées à l'aide d'une stratégie eulérienne. La tension superficielle est modélisée à l'aide d'un algorithme spécialisé, celui-ci étant inclu dans le modèle numérique afin d'étudier l'influence de la force capillaire sur la position des interfaces. Une méthodologie adaptative est utilisée pour obtenir une meilleure approximation des variables dépendantes, et pour aider à la localisation des surfaces libres. La méthodologie est vérifiée et validée à l'aide d'une série de problèmes. Sont étudiés le problème de Laplace, les écoulements stratifiés et la coextrusion, les jets libres et impactants et la dynamique de gouttelettes.

ABSTRACT

An adaptive finite element method for solving incompressible steady state free surface flow problems is presented. The principal characteristics looked for in the developed methodology are its simplicity of implementation, its accuracy, its generality and the cost effectiveness. Classical and stabilized finite element formulations are used to discretize the system of partial differential equations. Interfaces are captured using an Eulerian fixed mesh strategy. A specialized algorithm is used to include surface tension in the numerical model in order to study its influence on the topology of interfaces. Adaptive remeshing is applied to improve the accuracy of the computed solution, and to help capture free surfaces. The methodology is verified and validated by studying Laplace's problem, stratified and coextrusion flows, free and impinging jets and drop dynamics problems.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE iv

REMERCIEMENTS v

RÉSUMÉ viii

ABSTRACT ix

TABLE DES MATIÈRES x

LISTE DES TABLEAUX xvi

LISTE DES FIGURES xvii

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS xxii

INTRODUCTION 1

PARTIE I LE MODÈLE NUMÉRIQUE 4

CHAPITRE 1 LES ÉQUATIONS 5

1.1 La modélisation des écoulements incompressibles 5

1.2 Les écoulements multiphases et les conditions aux interfaces 8

1.3 La condition d'immiscibilité et la pseudo-concentration 10

1.4 Notes et bibliographie 11

CHAPITRE 2 LA DISCRÉTISATION DES ÉQUATIONS 12

2.1 Les formulations variationnelles 12

2.1.1 Les espaces fonctionnels 12

2.1.2 Les formes faibles 14

2.2 La méthode de Galerkin 15

2.3 Les méthodes stabilisées 17

2.3.1 Le problème des oscillations numériques 17

2.3.2 Les méthodes résiduelles 20

2.3.3 La méthode de Galerkin discontinue 23

2.3.4 Le traitement des oscillations numériques 25

2.4 Notes et bibliographie 28

CHAPITRE 3 LES MÉTHODES ADAPTATIVES 29

3.1 La méthodologie adaptative 30

3.1.1 Le mailleur 30

3.1.2 Le résoluteur par éléments finis 32

3.1.3 L'estimation d'erreur a posteriori 32

3.1.4 L'opérateur de transition 33

3.1.5 Le cycle adaptatif 35

3.2 L'estimation d'erreur pour les problèmes elliptiques 35

3.2.1 L'estimation d'erreur a posteriori par projection 36

3.2.2 L'estimation d'erreur par résolution de problèmes locaux . . 42

3.3 L'estimation d'erreur pour les problèmes hyperboliques 46

3.4 Notes et bibliographie 48

CHAPITRE 4 LA LOCALISATION D'INTERFACE 49

4.1 Les méthodes eulériennes 50

4.1.1 Les méthodes de fractions de volume 50

4.1.2 La méthode de la pseudo-concentration 53

4.1.3 La méthode des lignes de niveau 55

4.1.4 Conclusion 56

4.2 Les méthodes lagrangiennes 57

4.3 Les méthodes mixtes 58

4.3.1 La méthode ALE 59

4.3.2 Les méthodes de particules 59

4.4 Les méthodes adaptatives et la localisation d'interface 60

4.4.1 La capture adaptative d'interface 61

4.5 Les techniques de mise-à-jour 62

CHAPITRE 5 LA TENSION SUPERFICIELLE: MODÈLES 64

5.1 La tension superficielle 64

5.2 Les modèles numériques 66

5.2.1 La méthode CSF 67

5.2.2 L'approche du tenseur de pression capillaire 68

5.2.3 L'approche thermodynamique 69

5.3 Notes et bibliographie 69

CHAPITRE 6 LES STRATÉGIES NUMÉRIQUES 71

6.1 Considérations générales 71

6.2 L'approche découplée 73

6.3 L'approche couplée 75

6.4 La stratégie adaptative 77

PARTIE II LES SIMULATIONS NUMÉRIQUES 79

CHAPITRE 7 LA TENSION SUPERFICIELLE: VÉRIFICATIONS 80

7.1 Le problème de Laplace et le modèle CSF 80

7.1.1 Vérification du modèle CSF cartésien 82

7.1.2 Vérification du modèle CSF axisymétrique 85

7.2 Comparaison des différentes formulations 89

7.3 Notes et bibliographie 92

CHAPITRE 8 LES ÉCOULEMENTS STRATIFIÉS 93

8.1 Le procédé de coextrusion 93

8.2 La modélisation numérique 94

8.3 Vérification du modèle numérique 95

8.3.1 Écoulement stratifié avec un champ de vitesse analytique . . 96

8.3.2 Écoulement avec une solution analytique connue en aval . . 98

8.4 Adimensionnalisation 105

8.5 Modélisation d'écoulement dans une extrudeuse industrielle 106

8.6 Notes et bibliographie 109

CHAPITRE 9 LES JETS 110

9.1 Les écoulements de jet dans un contexte industriel 110

9.2 La modélisation numérique des écoulements de jet 112

9.3 Adimensionnalisation 112

9.4 La stratégie numérique 114

9.5 Les jets libres 117

9.5.1 Jet libre sans tension superficielle 118

9.5.2 Jet libre avec tension superficielle 120

9.5.3 Écoulement d'un jet libre avec inertie 122

9.6 Les jets impactants 123

9.7 Notes et bibliographie 126

CHAPITRE 10 LA DYNAMIQUE DE GOUTTELETTES 127

10.1 Le problème de Taylor 127

10.2 Adimensionnalisation 130

10.3 La modélisation numérique des écoulements de gouttelettes 132

10.4 Résultats numériques 134

10.4.1 Écoulements à fort ratio de viscosités 137

10.4.2 Écoulements à ratio de viscosités intermédiaire 138

10.4.3 Écoulements à faible ratio de viscosités 140

10.4.4 Écoulement élongationnel 141

10.5 Notes et bibliographie 143

CONCLUSION 146

BIBLIOGRAPHIE 150

INDEX 165

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 8.1 105

Tableau 8.2 107

Tableau 9.1 113

Tableau 10.1 130

Tableau 10.2 135

Tableau 10.3 137

Tableau 10.4 139

Tableau 10.5 141

LISTE DES FIGURES

1.1 Un écoulement multiphase 9

2.1 Une fonction test décentrée (cf. Christie et al., 1976) 19

2.2 La méthode de Galerkin discontinue 24

2.3 Résolution d'amont en aval par la méthode de Galerkin discontinue. La numérotation des éléments correspond à l'ordre avec lequel la résolution élément par élement pourrait se faire, d'amont en enval de l'écoulement ($\boldsymbol{u} = (1\,,0)$) 25

3.1 La méthodologie adaptative 30

3.2 La taille d'un élément 31

3.3 Un exemple de maillage de fond 32

3.4 Un exemple d'estimation d'erreur par projection 36

3.5 Une cellule d'éléments linéaires 39

3.6 Une cellule d'éléments quadratiques 40

3.7 Cellules pathologiques 42

3.8 Éléments utilisés pour discrétiser les problèmes locaux de l'erreur . . . 45

4.1 Divers algorithmes de reconstruction d'interface dans le cadre de l'utilisation des méthodes de fractions de volume 52

4.2 Capture de deux interfaces à l'aide de la pseudo-concentration 54

5.1 La tension superficielle 65

5.2 Le modèle CSF 67

6.1 L'élément de Crouzeix-Raviart 72

6.2 Élément utilisé pour la discrétisation de la température (T) 72

6.3 L'approche découplée 74

6.4 Élément utilisé pour la discrétisation de la pseudo-concentration (F) avec la méthode de Galerkin discontinue 75

6.5 La stratégie adaptative couplée 78

7.1 Conditions limites, initiales et maillage type utilisés pour la modélisation du problème de Laplace 81

7.2 Coupes pour le problème de Laplace cartésien 83

7.3 Champ de force capillaire pour le problème de Laplace cartésien 84

7.4 Graphe de la pression pour le problème de Laplace cartésien 85

7.5 Courbure numérique pour le problème de Laplace cartésien 85

7.6 Rayons de courbure dans un repère axisymétrique 86

7.7 Coupes pour le problème de Laplace axisymétrique 87

7.8 Coupes en pression en $\theta = \frac{\pi}{2}$ pour différentes régions de transition, à différents cycles adaptatifs 88

7.9 Les isolignes du saut en pression pour le problème de Laplace 89

7.10 Courants parasites résultant de l'utilisation de la formulation de Lafaurie et al. 90

7.11 Les isolignes en pression calculées à l'aide de la formulation de Lafaurie et al., pour différentes régions de transition 91

8.1 Géométrie utilisée pour la vérification des algorithmes de modélisation des écoulements stratifiés 95

8.2 Caractéristiques associées à un champ de vitesse analytique pour la vérification de l'algorithme de suivi d'interface 97

8.3 Lignes de courant et interface calculées à l'aide de l'approche couplée . 98

8.4 Maillage et interface obtenus de l'approche couplée (3682 éléments) . . 98

8.5 Dimensions d'une filière annulaire 100

8.6 Maillage obtenu de l'approche découplée pour la simulation d'un écoulement avec un ratio de viscosités non unitaire (6524 éléments) 101

8.7 Coupes en Γ^+ pour l'écoulement stratifié avec un ratio de viscosités non unitaire, résolu avec l'approche découplée 102

8.8 Maillage obtenu de l'approche couplée pour la simulation d'un écoulement avec un ratio de débits non unitaire (7307 éléments) 102

8.9 Coupes en Γ^+ pour l'écoulement stratifié avec un ratio de débits non unitaire, résolu avec l'approche couplée 103

8.10 Dimensions d'une filière annulaire industrielle 106

8.11 Maillage discrétisant la filière annulaire industrielle 108

8.12 Maillage et interface à la sortie de la filière annulaire industrielle . . . 108

8.13 Interface numérique dans la filière annulaire industrielle 109

9.1 Les lignes de courant associées à un jet libre 116

9.2 Le problème de l'initialisation de F en aval du tube 116

9.3 Le jet libre 117

9.4 Les conditions limites pour le problème de jet libre 118

9.5 Maillage de 5693 éléments utilisé pour l'étude numérique du problème de jet proposé par Nickell et al. ($Re = 0$, $Ca = 0$) 118

9.6 Maillage raffiné à la sortie du tube pour l'étude numérique du problème de jet proposé par Nickell et al. ($Re = 0$, $Ca = 0$) 119

9.7 Jet libre numérique et mesures expérimentales de Nickell et al. ($Re = 0$, $Ca = 0$) 119

9.8 Saut de la pseudo-concentration F pour le problème de jet libre de Nickell et al. ($Re = 0$, $Ca = 0$) 120

9.9 Interface numérique pour le problème de jet libre proposé par Reddy et Tanner ($Re = 0$, $Ca = 1$) 121

9.10 Jet libre numérique avec inertie ($Re = 24$) 122

9.11 Le jet normal 123

9.12 Les conditions limites pour le problème du jet impactant 124

9.13 Maillages utilisés pour la modélisation du jet impactant 125

9.14 Interfaces numériques pour le problème du jet impactant 125

9.15 Distribution de pression pour le problème du jet impactant 126

10.1 Le montage de Taylor 129

10.2 La définition du paramètre de déformation 131

10.3 Résolution de la surface libre à différents cycles adaptatifs 135

10.4 Lignes de courant des écoulements générés par le montage de Taylor . 136

10.5 La courbe de déformation pour le problème de Taylor, pour un ratio de viscosités de $\lambda = 27{,}3$ ($\beta = 0{,}2$) 138

10.6 La courbe de déformation pour le problème de Taylor, pour un ratio de viscosités de $\lambda = 1{,}58$ ($\beta = 0{,}4$) 139

10.7 Gouttelettes numériques, pour différents nombres capillaires, pour un ratio de viscosités intermédiaire de $\lambda = 1{,}58$ ($\beta = 0{,}4$) 140

10.8 Gouttelettes numériques, pour différents nombres capillaires, pour un faible ratio de viscosités de $\lambda = 1{,}08 \times 10^{-3}$ ($\beta = 0{,}8$) 142

10.9 Maillages obtenus aux différents cycles de la stratégie de remaillage adaptatif, pour la modélisation de la dynamique d'une gouttelette soumise à un écoulement élongationnel 144

10.10 Isolignes calculées dans le cadre de la modélisation de la dynamique d'une bulle soumise à un écoulement élongationnel 145

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

La convention, quant à la notation, est d'utiliser une lettre romaine ou grecque pour représenter un scalaire (a , α), une lettre romaine en caractère gras pour ce qui est d'un vecteur ($\boldsymbol{a}$) et une lettre grecque en caractère gras pour un tenseur ($\boldsymbol{\alpha}$). Une description succinte des symboles se retrouvant dans cette thèse, ainsi que la page où on retrouve leur définition ou leur première utilisation, sont classées par thèmes.

Indices:

i	:	identité du fluide	5
D$\boldsymbol{u}$	:	condition de Dirichlet en vitesse	7
N$\boldsymbol{u}$	:	condition de Neumann en vitesse	7
DT	:	condition de Dirichlet en température	7
NT	:	condition de Neumann en température	7
Σ	:	quantité évaluée à une interface	8
n	:	dimension d'un espace	13
h	:	quantité discrète	15
K	:	quantité évaluée sur un élément	17
S	:	quantité évaluée sur l'arête d'un élément	23
Ω	:	quantité évaluée sur tout le domaine	33
$-$	:	quantité en amont de l'écoulement	11
$+$	:	quantité en aval de l'écoulement	23
min	:	minimum d'une quantité	27
max	:	maximum d'une quantité	27
$\tilde{}$	:	projection continue d'une quantité dicrète	37
r , z	:	quantités radiale et axiale	99
moy	:	quantité moyenne	105 , 113
$\bar{}$	:	quantité adimensionnelle	106

Quantités géométriques:

Ω	:	domaine de calcul	7
Ω_i	:	partie du domaine de calcul occupée par le fluide i	8
$\partial\Omega$	:	frontière du domaine de calcul	7
Γ	:	frontière du domaine de calcul	7
Γ_{Du}	:	domaine de définition des conditions de Dirichlet en vitesse	7
Γ_{Nu}	:	domaine de définition des conditions de Neumann en vitesse	7
Γ_{DT}	:	domaine de définition des conditions de Dirichlet en T	8
Γ_{NT}	:	domaine de définition des conditions de Neumann en T	8
Γ_0	:	paroi solide	9
$\Gamma^-(\Omega)$	:	partie amont de l'écoulement	11
$\Gamma_i^-(\Omega)$	:	partie amont de l'écoulement du fluide i	96
$\Gamma^+(\Omega)$	:	partie aval de l'écoulement	24
Σ	:	surface libre	8
$\mathbf{n}$	:	normale extérieure à Γ	7
$\mathbf{n}_\Sigma$	:	vecteur normal à la surface libre	8 , 68
$\mathbf{t}_\Sigma$	:	vecteur tangent à la surface libre	8
$\boldsymbol{u}_\Sigma$	:	vitesse de la surface libre	9
κ	:	courbure locale de la surface libre	9 , 66 , 85
$\boldsymbol{x}$	:	coordonnées géométriques, sous forme vectorielle	10
x, y	:	coordonnées cartésiennes	96
r, z	:	coordonnées axisymétriques	99
F	:	pseudo-concentration	10, 53
F_{Γ^-}	:	condition de Dirichlet sur F en amont de l'écoulement	11
$\delta_{\boldsymbol{x}}$	:	delta de Dirac défini pour $\boldsymbol{x}$	24 , 68
$\phi(\boldsymbol{x})$	:	fonction distance	55
R_1, R_2	:	rayons de courbure principaux d'une surface libre	66
ΔS	:	unité de surface	67
ΔV	:	région de transition volumique	67
R_{zr}	:	rayon de courbure d'une surface libre dans le plan z-r	86
R_θ	:	rayon de courbure d'une surface libre dans le plan θ	86
ε	:	largeur de la région de transition de F	86
d	:	hauteur de la surface libre en sortie de filière	96

D	:	diamètre d'un canal	105 , 114
R_0	:	rayon du tube pour le problème de jet	114
R_∞	:	hauteur du jet	114
B	:	demi petit-axe de l'ellipse formée par une bulle déformée	131
L	:	demi grand-axe de l'ellipse formée par une bulle déformée	131
a	:	rayon d'une goutte au repos	130 , 135
θ_e	:	angle formé par la ligne de courant sortante	136

Quantités physiques:

$\boldsymbol{u}_i$	:	vitesse du fluide i	6
p_i	:	pression du fluide i	6
T_i	:	température du fluide i	6
$\boldsymbol{\sigma}_i$	:	tenseur de Cauchy du fluide i	6
$\boldsymbol{\tau}_i$	:	tenseur des extra-contraintes du fluide i	6
$\dot{\boldsymbol{\gamma}}_i$	:	tenseur vitesse-de-déformation du fluide i	6
ρ_i	:	densité du fluide i	5
μ_i	:	viscosité du fluide i	6
$\boldsymbol{f}_i$	:	force volumique du fluide i	6
c_{p_i}	:	chaleur massique du fluide i	6
k_i	:	conductivité thermique du fluide i	6
g_i	:	source de chaleur appliquée au fluide i	6
μ_0	:	viscosité de référence	6
λ, n	:	paramètres adimensionnels pour les modèles rhéologiques	7
α_T	:	facteur de glissement du modèle d'Arrhénius	7
E	:	énergie d'activation	7
R	:	constante des gaz parfaits	7
μ_T	:	viscosité thermodépendante	7
$\boldsymbol{u}_{\mathrm{Du}}$	:	conditions de Dirichlet en vitesse	7
$\boldsymbol{t}_{\mathrm{Nu}}$	:	conditions de Neumann en vitesse	7
T_{DT}	:	conditions de Dirichlet en température	7
q_{NT}	:	conditions de Neumann en température	7
α	:	coefficient de tension superficielle	9, 65
$\boldsymbol{f}_{\mathrm{S}}$	:	force capillaire interfaciale	67

$\boldsymbol{f}_V$	:	force capillaire volumique	67
$\boldsymbol{\Upsilon}$	:	tenseur de pression capillaire	68
H	:	énergie libre de Helmholtz	69
Q_i	:	débit du fluide i	99
β	:	paramètre décrivant le type d'écoulement linéaire	128

Quantités discrètes:

h	:	taille d'un élément	17
K	:	un élément	23
∂K	:	le bord d'un élément	23
S	:	arête commune à deux élément	23
Γ^-(K)	:	la partie amont d'un élément	23
Γ^+(K)	:	la partie aval d'un élément	23
$\mathbf{n}_K$	:	normale à un élément	24, 43
$\boldsymbol{u}_h$	:	approximation discrète de la vitesse	15
p_h	:	approximation discrète de la pression	16
Ω_h	:	discrétisation du domaine de calcul (un maillage)	16
$V_h(\Omega)$	:	espace discret contenant l'interpolant en vitesse	15
$Q_h(\Omega)$	:	espace discret contenant l'interpolant en pression	15
$W_h(\Omega)$	:	espace discret contenant l'interpolant en température	15
$\Phi_h(\Omega)$	:	espace discret contenant l'interpolant de F	15 , 23
$\mathcal{P}_k$(K)	:	polynômes de degré k définis sur un élément	23
$\boldsymbol{u}_j$	:	valeur de la vitesse à un noeud du maillage	16
$\boldsymbol{\phi}_j(\boldsymbol{x})$	:	fonction d'interpolation d'un espace discret	16
$\delta(\boldsymbol{x})$	:	fonction de taille	31
δ_0	:	taille initiale	31
e_h	:	estimation de l'erreur de la solution discrète	33
N_e	:	nombre d'éléments d'un maillage	33
N	:	nombre de noeuds d'un maillage	38
$\mathcal{V}_h(\Omega)$	:	sous-espace discret générique de $H^1(\Omega)$	37
d	:	dimension de $\mathcal{V}_h(\Omega)$	38
m	:	nombre d'éléments dans une cellule	41
ℓ	:	nombre de points d'échantillonage par élément	41

$\mathcal{V}_h^{\perp}(\mathrm{K})$	:	complément orthogonal de $\mathcal{V}_h(\mathrm{K})$	44
$\mathcal{E}_h$	:	espace contenant l'erreur discrète	44
λ_i	:	coordonnées barycentriques	45
P_2^+–P_1	:	élément de Crouzeix-Raviart	71
δ_{K}^u	:	distribution de taille en vitesse	77
δ_{K}^p	:	distribution de taille en pression	77
δ_{K}^T	:	distribution de taille en température	77
δ_{K}^F	:	distribution de taille en pseudo-concentration	77
δ_Σ	:	distribution de taille des éléments à l'interface	61 , 77
δ_{K}	:	distribution de taille globale	77

Espaces :

$\mathbb{R}$	:	espace des réels	12
$\mathbb{R}^n$	:	version vectorielle de $\mathbb{R}$	12
$L^2(\Omega)$	:	fonctions de carré intégrable sur Ω	12
$L^2(\Omega)^n$	:	version vectorielle de $L^2(\Omega)$	13
$H^1(\Omega)$	:	espace de Sobolev défini sur Ω	13
$H^1(\Omega)^n$	:	version vectorielle de $H^1(\Omega)$	13
$H^1_{\mathrm{D}u}(\Omega)^n$	:	fonctions de $H^1(\Omega)^n$ à valeurs nulles sur $\Gamma_{\mathrm{D}u}$	13
$H^1_{\mathrm{D}T}(\Omega)$	:	fonctions de $H^1(\Omega)$ à valeurs nulles sur $\Gamma_{\mathrm{D}T}$	13
$H^{-1}(\Omega)$	:	espace dual de $H^1(\Omega)$	13
$H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_0)$	:	restriction de $H^1(\Omega)$ au bord Γ_0	13
$H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma_0)$	:	espace dual de $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_0)$	13
$\Phi(\Omega)$	:	espace de base pour l'étude des problèmes de transport	14
$L^2_u(\Gamma)$	:	espace défini au bord de Ω pour les problèmes de transport	14
$\Phi_{\Gamma_-}(\Omega)$	:	fonctions de $\Phi(\Omega)$ à valeurs nulles sur $\Gamma^-(\Omega)$	14
$\mathcal{V}(\mathrm{K})$	:	version élémentaire de $H^1(\Omega)$	44

Produits :

$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})_{0,\Omega}$	:	produit scalaire dans $L^2(\Omega)^n$	13
$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})_{1,\Omega}$	:	produit scalaire dans $H^1(\Omega)^n$	13

$\langle \varphi , \psi \rangle_{0,\Gamma}$	:	produit scalaire dans $L^2_u(\Gamma)$	14
$\langle \boldsymbol{u} , \boldsymbol{v} \rangle_{H^{-\frac{1}{2}},H^{\frac{1}{2}}}$	:	produit de dualité entre $H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma_0)$ et $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_0)$	14

Quantités mathématiques:

κ	:	terme de diffusion d'une équation de convection-diffusion	17
κ'	:	terme de diffusion artificielle	18
$\mathcal{R}$	:	résidu d'une équation de convection-diffusion	18
$\overline{\psi}$	:	fonction test modifiée pour les méthodes stabilisées	20 , 22
τ	:	paramètre de stabilisation d'une méthode stabilisée	21
A	:	terme d'absorption non linéaire	27
$\overline{\overline{\psi}}$	:	fonction test modifiée pour la capture de discontinuité	28
$\boldsymbol{u}_r$	:	direction pour la capture de discontinuité	28
τ_r , λ	:	paramètres pour la capture de discontinuité	28
e_T	:	erreur admissible totale	33
ξ	:	facteur de réduction de l'erreur	33 , 61
$\bar{e}$	:	erreur admissible locale	33
γ	:	taux de convergence d'une discrétisation	34
e	:	erreur de la solution éléments finis	43
δF	:	correction en pseudo-concentration	81
F_n	:	pseudo-concentration à l'itération de point-fixe n	81
ω	:	paramètre associé à la matrice masse $\omega\,\delta F$	81
$\psi(x,y)$	:	fonction de courant	96

Matrices :

$\mathbf{C}$	:	matrice de convection	16
$\mathbf{A}$	:	matrice de diffusion visqueuse	16
$\mathbf{B}$	:	matrice divergence	16
$\mathbf{D}$	:	matrice de convection thermique	16
$\mathbf{E}$	:	matrice de diffusion thermique	16
$\mathbf{K}$	:	matrice de transport de la pseudo-concentration	16
$\vec{\mathbf{U}}$	:	vecteur des composantes discrètes en vitesse	16
$\vec{\mathbf{P}}$	:	vecteur des composantes discrètes en pression	16

$\vec{\mathbf{T}}$	:	vecteur des composantes discrètes en température	16
$\vec{\mathbf{F}}$	:	vecteur des composantes discrètes de la pseudo-concentration	16
$\mathbf{X}$	:	vecteur des coordonnées des noeuds d'un maillage	38

Quantités de référence et nombres adimensionnels:

L_0	:	longueur de référence	105, 113, 130
u_0	:	vitesse de référence	105, 113, 130
ρ_0	:	densité de référence	105, 113, 130
μ_0	:	viscosité de référence	105, 113, 130
T_0, T_1	:	températures de référence	7, 105
c_{p0}	:	chaleur massique de référence	105
k_0	:	conductivité thermique de référence	105
Re	:	nombre de Reynolds	77, 105, 113, 130
Pe	:	nombre de Péclet	17 , 105
Ca	:	nombre capillaire	113, 130
We	:	nombre de Weber	113
S	:	paramètre de tension superficielle	114
χ	:	gonflement	114
λ	:	ratio de viscosités	131
κ	:	ratio de densités	131
D	:	paramètre de déformation	131
$\widehat{D}$	:	paramètre de déformation alternatif	131
Ca_{cr}	:	nombre capillaire critique	134

Autres sigles:

∇	:	opérateur gradient	5
$\mathbf{I}$	:	tenseur identité	6
$\|\ \|$	:	norme vectorielle ou tensorielle	6
$[\ ]$	:	saut d'une quantité sur une arête	23
$\|\ \|_{1,K}$	:	semi-norme de $H^1(K)$	37
$[\ ]_M$	:	moyenne d'une quantité sur une arête	23

Abréviations:

LBB	:	condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi	71
SU	:	streamline upwind	19
SUPG	:	streamline upwind/Petrov-Galerkin	20
GLS	:	Galerkin/least-squares	21
MAC	:	marker and cell	51
SLIC	:	simple line interface calculation	51
VOF	:	volume of fluid	52
PLIC	:	piecewise linear interface calculation	53
ALE	:	arbitrary Lagrangian-Eulerian	59
PIC	:	particle in cell	60
AMR	:	adaptive mesh refinement	60
CSF	:	continuum surface force	66
LU	:	factorisation matricielle	73
TPO	:	élastomère thermoplastique	107
PA	:	polyamide	107

INTRODUCTION

L'objet de cette thèse est la simulation numérique, par méthodes d'éléments finis adaptatives, d'écoulements à surfaces libres. Les écoulements multiphases sont omniprésents dans la nature, ainsi que dans plusieurs procédés industriels. Une « prédictivité » numérique de ces phénomènes peut mener à une optimisation de ces procédés, ce qui peut se traduire par des économies de coûts substancielles. On s'intéresse particulièrement à la position et à la topologie des surfaces libres. Puisque les fluides en écoulement présentent différentes propriétés physiques ou valeurs économiques, il est important de pouvoir déterminer des conditions d'opération permettant d'obtenir un produit final avec les caractéristiques voulues et à prix minimal. D'autant plus qu'un contrôle déficient de la distribution des différents produits en écoulement peut mener à des défauts de fabrication, rendant le produit sans valeur.

La difficulté principale rencontrée lors de la simulation numérique d'écoulements multifluides est que la position de la surface libre entre deux fluides est inconnue a priori. La connaissance précise de la position de cette interface est un problème difficile puisque celle-ci influence le champ de vitesse des fluides, et vice-versa. Les surfaces libres peuvent également subir d'importantes déformations, rendant encore plus difficile la détermination précise de leur position. De plus, une modélisation précise de la physique interfaciale est délicate puisque les caractéristiques physiques, telles la densité, la viscosité et la pression des différents fluides, sont souvent discontinues aux interfaces. Un autre comportement interfacial délicat à modéliser est la tension superficielle. Celle-ci contribue également à influencer la dynamique des surfaces libres.

L'idée directrice qui nous a guidés tout au long de ces travaux a été le développement d'une méthodologie numérique *simple*, *précise*, *générale* et *peu coûteuse*. Le but est de modéliser avec une seule et même stratégie numérique une diversité d'écoulements à surfaces libres tels les écoulements stratifiés, les jets, la dynamique de gouttelettes, le moulage par injection, etc. Mais nous avons aussi en vue les pro-

blèmes complexes combinant plusieurs des écoulements précédemment mentionnés. On peut penser, par exemple, au bris de fibres, réunion des problèmes de jets et de gouttelettes, au moulage par injection de mousses où des bulles font partie du fluide de remplissage, etc. Nous voulons aussi être en mesure d'étudier éventuellement la dynamique d'interfaces dans le cadre d'écoulements plus complexes, où la compressibilité ou la turbulence des fluides serait non négligeable. Mais il est clair que ce programme est beaucoup trop ambitieux pour une thèse. Même si nous ne nous attaquerons pas à tous ces problèmes, nous jugeons qu'il est important d'établir une base solide qui nous permettra éventuellement de s'y intéresser.

Ce qui caractérise la littérature traitant de la modélisation numérique d'écoulements à surfaces libres est que des méthodes spécifiques sont souvent utilisées pour faire la simulation de problèmes bien précis, dans des conditions particulières. Il est connu que les écoulements de jets sont « plus faciles » à modéliser à l'aide d'une approche lagrangienne, étant donné la représentation précise de l'interface en sortie du tube. Les écoulements de gouttelettes sont, en général, modélisés à l'aide d'une approche eulérienne à cause du traitement facile des interfaces multiples, même si cette approche est connue pour être moins précise. Certains « osent » utiliser l'approche mixte lagrangienne-eulérienne pour ce type de problème, mais ils ne peuvent s'attaquer aux cas de coalescence et de bris de gouttelettes. Nous considérons que la généralité et la simplicité de l'approche passe nécessairement par l'utilisation d'une stratégie eulérienne de capture d'interface. Cette façon de procéder est malheureusement connue pour être imprécise. Nous tenterons de suppléer à ces limitations en utilisant une stratégie adaptative. Nous espérons ainsi obtenir une précision acceptable en raffinant le maillage pour aider à la modélisation de la physique interfaciale et de faire malgré tout des économies de calcul en déraffinant le maillage en des régions où l'écoulement ne nécessiterait pas une telle résolution. Afin de simplifier la présentation de la méthodologie adaptative, nous nous concentrerons sur les écoulements stationnaires. Le tout se fera dans le cadre de la méthode des éléments finis, la seule méthode de discrétisation des E.D.P. nous donnant la flexibilité nécessaire pour satisfaire toutes nos contraintes.

Puisque plusieurs composantes entrent dans la modélisation numérique par méthodes d'éléments finis adaptatives d'écoulements multifluides, nous avons décidé

de scinder la thèse en deux grandes parties et de consacrer les premiers chapitres à la description de ces composantes. En deuxième partie, plusieurs problèmes physiques, de nature assez diverse, ont été résolus à l'aide de la méthodologie proposée. Rappelons qu'un des buts de ces travaux est de montrer la généralité de la méthodologie numérique. Trois séries de problèmes ont donc été étudiés, chacun faisant ressortir une facette de la stratégie numérique. L'étude des écoulements stratifiés permettra de valider les algorithmes numériques pour la modélisation d'écoulements multiphases et en particulier les écoulements à fort ratio de viscosités. L'étude de jets permettra de vérifier le comportement de la méthodologie pour des écoulements avec de forte variation de densité, et pour les écoulements à hauts nombres de Reynolds. Dans un troisième temps, l'étude de la dynamique de gouttelettes permet d'étudier les écoulements où la tension superficielle est dominante. Il sera donc important de présenter brièvement la physique impliquée dans chaque écoulement, afin d'être en mesure de bien poser le problème numérique. Finalement, un but que nous nous sommes donné bien humblement lors de la rédaction de cette thèse a été de tenter de faire de ce document un outil de référence pour les futurs étudiants aux grades supérieurs s'intéressant à la modélisation numérique des écoulements à surfaces libres. Comme les thèses de mes collègues qui sont passés par Polytechnique ont été des plus enrichissantes, un effort particulier a été fait pour rendre le même service à ceux qui suivront. Le sujet est loin d'être épuisé, son étude est très intéressante et ses implications industrielles sont importantes. Donc, en plus de tenter d'être le plus complet possible dans la revue de littérature, ceci a aussi justifié la création d'un index, ainsi que d'une liste des sigles et abréviations *utile*, qui fera sûrement le bonheur de tout représentant du doyen.

PREMIÈRE PARTIE

LES COMPOSANTES ENTRANT DANS LA MODÉLISATION NUMÉRIQUE DES ÉCOULEMENTS MULTIFLUIDES

CHAPITRE 1

LES ÉQUATIONS RÉGISSANT LES ÉCOULEMENTS MULTIFLUIDES

Ce chapitre traite des équations utilisées dans la modélisation des écoulements laminaires, incompressibles, stationnaires, à surfaces libres. Les équations de Navier-Stokes, ainsi que l'équation de conservation de l'énergie, sont d'abord présentées. Les modèles rhéologiques utilisés dans cette recherche sont également exposés. Les conditions limites aux parois solides, ainsi que les conditions aux interfaces, sont décrites. La condition d'immiscibilité est finalement étudiée plus en détail.

1.1 La modélisation des écoulements incompressibles

La modélisation des écoulements multiphases de fluides incompressibles en régime laminaire nécessite la résolution, pour chaque fluide, de l'*équation de conservation de la masse*,

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u}_i = 0\,, \tag{1.1}$$

de l'*équation de conservation de la quantité de mouvement*,

$$\rho_i(\boldsymbol{u}_i \cdot \nabla)\boldsymbol{u}_i = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_i + \boldsymbol{f}_i\,, \tag{1.2}$$

ainsi que de l'*équation de conservation de l'énergie*,

$$\rho_i c_{p_i}(\boldsymbol{u}_i \cdot \nabla T_i) = \nabla \cdot (k_i \nabla T_i) + g_i\,, \tag{1.3}$$

lorsque l'écoulement étudié ne peut être considéré comme isotherme. Nous négligeons le terme de *dissipation visqueuse*, ce phénomène n'étant pas présent dans les écoulements thermodépendants étudiés. La *densité* du fluide i est notée ρ_i, la *force*

volumique appliquée est $\boldsymbol{f}_i$ et $\boldsymbol{\sigma}_i$ est le *tenseur de Cauchy*, défini comme

$$\boldsymbol{\sigma}_i = -p_i \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_i \,.$$

Le *tenseur des extra-contraintes* $\boldsymbol{\tau}_i$ est relié au champ de vitesse $\boldsymbol{u}_i$ via la relation

$$\boldsymbol{\tau}_i = 2\,\mu_i\left(\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}_i(\boldsymbol{u}_i)\|\right)\dot{\boldsymbol{\gamma}}_i(\boldsymbol{u}_i)\,,$$

où μ_i est la *viscosité* du fluide i, qui peut dépendre de la norme du *tenseur vitesse-de-déformation*,

$$\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}_i\| = \sqrt{2\,\dot{\boldsymbol{\gamma}}_i : \dot{\boldsymbol{\gamma}}_i}\,,$$

le tenseur étant défini comme

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}}_i(\boldsymbol{u}_i) = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}_i + (\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}_i)^T\right).$$

Les variables dépendantes de ce système d'équations aux dérivées partielles sont la *vitesse* du fluide i, $\boldsymbol{u}_i$, la *pression* p_i et la *température* T_i. Finalement, on retrouve dans l'équation de conservation de l'énergie (1.3) la *chaleur massique* c_{p_i}, la *conductivité thermique* k_i et une *source de chaleur* g_i.

Les différents modèles rhéologiques utilisés dans cette recherche sont les suivants. Pour les écoulements de fluides dits *newtoniens*, le *modèle de Newton*,

$$\mu(\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|) = \mu_0\,,$$

où μ_0 est constante, est utilisé. Pour les fluides *newtoniens généralisés*, les modèles de *Norton-Hoff* (modèle de loi-de-puissance),

$$\mu(\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|) = \mu_0\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|^{n-1}, \quad \text{pour } 0 \leq n \leq 1, \tag{1.4}$$

et de *Carreau*,

$$\mu(\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|) = \mu_0\left(1 + \lambda^2\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|^2\right)^{\frac{n-1}{2}}, \tag{1.5}$$

sont considérés. Dans ces modèles, μ_0 est une *viscosité de référence*, et les constantes λ et n sont des paramètres adimensionnels. Selon les fluides étudiés, nous pouvons être amenés à considérer des modèles rhéologiques variant en fonction de la température obtenue de l'équation de conservation de l'énergie (1.3). C'est entre autres le cas pour les polymères. Ceci nous amènera alors à considérer des modèles rhéologiques qui dépendent de la vitesse du fluide ainsi que de sa température, soit

$$\mu = \mathcal{F}(\|\dot{\gamma}\|, T).$$

Il est courant de relier la viscosité à la température à l'aide du *modèle d'Arrhénius*, via un *facteur de glissement*

$$\alpha_T = \exp \frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right), \tag{1.6}$$

où E est l'*énergie d'activation*, R est la *constante des gaz parfaits*, et où T et T_0 sont respectivement la température du fluide et une température de référence. Pour relier cette thermodépendance aux modèles (1.4) et (1.5), il s'agit d'appliquer le *principe de superposition*, observé expérimentalement, afin d'obtenir des lois de comportement de la forme

$$\mu_T(\|\dot{\gamma}\|, T) = \alpha_T\, \mu(\|\dot{\gamma}\|).$$

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

$$\begin{cases} \boldsymbol{u}_i = \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}u} & \text{sur } \Gamma_{\mathrm{D}u}; \quad (1.7a) \\ \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{t}_{\mathrm{N}u} & \text{sur } \Gamma_{\mathrm{N}u}; \quad (1.7b) \\ T_i = T_{\mathrm{D}T} & \text{sur } \Gamma_{\mathrm{D}T}; \quad (1.7c) \\ -k\nabla T_i \cdot \mathbf{n} = q_{\mathrm{N}T} & \text{sur } \Gamma_{\mathrm{N}T}; \quad (1.7d) \end{cases}$$

où $\mathbf{n}$ est la normale extérieure à la frontière $\Gamma = \partial\Omega$ du domaine de calcul Ω. Les ensembles $\Gamma_{\mathrm{D}u}$ et $\Gamma_{\mathrm{N}u}$ sont les domaines de définition des conditions de Dirichlet et

de Neumann en vitesse, et satisfont:

$$\begin{cases} \Gamma_{D\boldsymbol{u}} \cup \Gamma_{N\boldsymbol{u}} = \partial\Omega; \\ \Gamma_{D\boldsymbol{u}} \cap \Gamma_{N\boldsymbol{u}} = \emptyset. \end{cases}$$

Et de façon similaire pour la température, on a:

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

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 de même phase, mais de propriétés différentes. Nous ne considérons que les interfaces fluide-fluide et fluide-gaz.

Lors de l'étude de problèmes à surfaces libres, des conditions limites aux interfaces doivent être considérées pour que le problème soit bien posé. Soit la situation illustrée à la figure 1.1, où les fluides 1 et 2 sont de part et d'autre de l'interface Σ, dans les régions identifiées par Ω_1 et Ω_2, et le domaine de définition des équations peut être exprimé comme $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ puisque les fluides étudiés dans cette recherche seront immiscibles. Cette interface peut être en contact avec une paroi solide. Ce ne sera pas le cas des écoulements étudiés dans cette recherche, cette situation menant à une problématique bien particulière. La normale à l'interface est notée $\mathbf{n}_\Sigma$, et $\mathbf{t}_\Sigma$ est sa tangente.

Les conditions à l'interface sont alors (Batchelor, 1967; Landau et Lifshitz, 1987): la continuité de la vitesse normale,

$$\boldsymbol{u}_1 \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \boldsymbol{u}_2 \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \boldsymbol{u}_\Sigma \cdot \mathbf{n}_\Sigma \,, \tag{1.8}$$

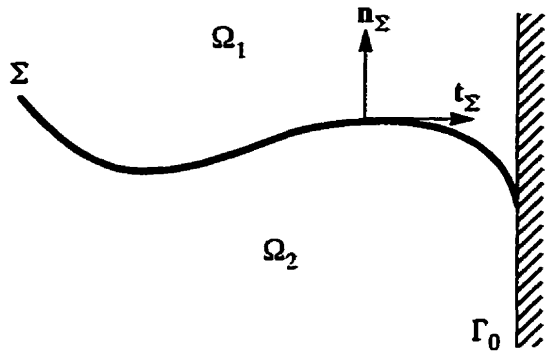


Figure 1.1 Un écoulement multiphase

où $\boldsymbol{u}_\Sigma$ est la vitesse de l'interface; la continuité de la vitesse tangentielle,

$$\boldsymbol{u}_1 \cdot \mathbf{t}_\Sigma = \boldsymbol{u}_2 \cdot \mathbf{t}_\Sigma \,; \tag{1.9}$$

et l'équilibre des forces à l'interface,

$$(\boldsymbol{\sigma}_2 - \boldsymbol{\sigma}_1) \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \alpha \kappa \, \mathbf{n}_\Sigma \,, \tag{1.10}$$

où α est le coefficient de tension superficielle des fluides 1 et 2, et κ est la courbure locale de la surface libre. Dans cette recherche, seuls les écoulements de deux fluides immiscibles seront étudiés, ceci se traduisant dans l'équation (1.10) par un coefficient de tension superficielle $\alpha > 0$. De plus, sans perte de généralité, nous supposons que $\mathbf{n}_\Sigma$ pointe dans la direction du fluide 1 et que le rayon de courbure est positif si le centre de courbure se trouve dans le fluide 1. Cette situation est illustrée à la figure 1.1.

Lorsque les phénomènes thermiques sont pris en considération, deux conditions supplémentaires à l'interface doivent être considérées, soit la continuité de la température,

$$T_1 = T_2 \,,$$

ainsi que la continuité du flux de chaleur,

$$k_1\, \mathbf{n}_\Sigma \cdot \nabla T_1 = k_2\, \mathbf{n}_\Sigma \cdot \nabla T_2 \,. \tag{1.11}$$

Si $k_1 \neq k_2$, la condition (1.11) implique une discontinuité du gradient de température $\mathbf{n}_\Sigma \cdot \nabla T$ à l'interface. Dans les écoulements thermiques pour lesquels la manifestation de la tension superficielle est non négligeable, le coefficient de tension superficielle varie inversement en fonction de la température. Le terme $\nabla \alpha$ doit alors être ajouté à l'expression (1.10). D'autres facteurs peuvent aussi influer sur le coefficient de tension superficielle. Cette situation ne sera pas rencontrée dans les problèmes étudiés.

1.3 La condition d'immiscibilité et la pseudo-concentration

Puisque seuls les écoulements de fluides non miscibles sont étudiés, la condition à l'interface (1.8) peut être interprétée, dans le cas d'un écoulement stationnaire, comme une condition d'immiscibilité entre deux fluides, et s'écrire

$$\boldsymbol{u}_\Sigma \cdot \mathbf{n}_\Sigma = 0. \tag{1.12}$$

Cette condition, qui n'est définie qu'à l'interface, est difficile à utiliser en pratique puisque nous ne savons pas, a priori, où se trouve la surface libre. Il est cependant possible, en considérant l'hypothèse d'immiscibilité, d'obtenir une condition équivalente à l'expression (1.12), mais définie sur tout le domaine Ω.

Définissons la fonction

$$F(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \boldsymbol{x} \in \Omega_1 \,; \\ 0 & \text{si } \boldsymbol{x} \in \Omega_2 \,. \end{cases} \tag{1.13}$$

Cette fonction est connue comme étant la *pseudo-concentration* des fluides 1 et 2 dans Ω (Thompson, 1986). La position de l'interface est donnée par le saut de la fonction de pseudo-concentration, *i.e.* par l'ensemble des points pour lesquels F est égale à l'isovaleur $\frac{1}{2}$.

À l'aide de la pseudo-concentration, il est possible d'obtenir une expression équivalente, au sens des distributions, à la condition d'immiscibilité (1.12), sous la forme d'une équation de transport (Agassant et al., 1994),

$$\boldsymbol{u}_i \cdot \nabla F = 0, \quad \forall \boldsymbol{x} \in \Omega, \tag{1.14}$$

qui a l'avantage d'être définie sur tout Ω. Avec des conditions limites appropriées, le saut de F, obtenu de la solution de l'équation (1.14), donnera la position de la surface libre dans Ω. En fait, puisque l'équation de transport (1.14) est hyperbolique, une condition limite ne doit être imposée qu'en amont de l'écoulement,

$$\Gamma^-(\Omega) = \{\boldsymbol{x} \in \partial\Omega \,|\, \boldsymbol{u}_i \cdot \mathbf{n} < 0\}, \tag{1.15}$$

soit

$$F = F_{\Gamma^-} \quad \text{sur } \Gamma^-(\Omega)\,. \tag{1.16}$$

Ceci complète la description du problème d'écoulement à surface libre.

1.4 Notes et bibliographie

Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sont choses communes en mécanique des fluides. La plupart des livres de mécanique des fluides font un rappel de ces équations, et ce dans plusieurs systèmes de coordonnées. Récemment, plusieurs livres ont été publiés sur les écoulements multiphases (Middleman, 1995; Sadhal et al., 1997). On y trouve, en plus des équations de conservation, la description analytique de plusieurs problèmes à surfaces libres, qui sont souvent utiles pour la vérification de l'implémentation des algorithmes utilisés.

CHAPITRE 2

LA DISCRÉTISATION DES ÉQUATIONS

Pour discrétiser les équations de conservation présentées au chapitre 1, nous nous plaçons dans le formalisme de la méthode des éléments finis. Elle est très appropriée, entre autres, pour l'étude des écoulements industriels dans les géométries complexes. Il est aussi plus facile de concentrer les efforts de calcul en des régions où une plus grande précision est nécessaire. Ce chapitre présente les différentes discrétisations par éléments finis utilisées pour résoudre les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et l'équation de transport. Puisque les équations étudiées sont de différentes natures, certaines discrétisations seront plus appropriées que d'autres dans certaines situations.

Les formulations variationnelles des équations aux dérivées partielles étudiées sont d'abord exposées. La méthode de Galerkin est ensuite présentée brièvement. Les discrétisations disponibles pour la résolution de l'équation de transport, soit les méthodes stabilisées et la méthode de Galerkin discontinue, sont finalement décrites.

2.1 Les formulations variationnelles

2.1.1 Les espaces fonctionnels

Définissons d'abord quelques espaces fonctionnels auxquels nous ferons référence par la suite. Soit

$$L^2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \to \mathbb{R} \mid \int_\Omega v^2 \, d\Omega < \infty \right\},$$

l'espace des fonctions de carré intégrable, muni du produit scalaire

$$(u\,,v)_{0,\Omega} = \int_\Omega u\,v \, d\Omega\,.$$

Dans le cas de la version vectorielle de l'espace $L^2(\Omega)$,

$$L^2(\Omega)^n = \left\{ \boldsymbol{v} : \Omega \to \mathbb{R}^n \mid \int_\Omega \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} \, d\Omega < \infty \right\},$$

on généralise la définition du produit scalaire pour obtenir

$$(\boldsymbol{u}\,, \boldsymbol{v})_{0,\Omega} = \int_\Omega \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} \, d\Omega,$$

et de façon similaire pour les fonctions de $\Omega \to \mathbb{R}^{n \times n}$, où le produit $\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v}$ est simplement remplacé par la double contraction $\boldsymbol{\nu} : \boldsymbol{\nu} := \nu_{ij}\, \nu_{ji}$.

L'espace de Sobolev $H^1(\Omega)$, fondamental à l'étude des formulations variationnelles des équations aux dérivées partielles, est défini comme

$$H^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) \mid \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\Omega)\ , 1 \leq i \leq n \right\},$$

et est muni du produit scalaire

$$(u\,, v)_{1,\Omega} = (u\,, v)_{0,\Omega} + \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial u}{\partial x_i}, \frac{\partial v}{\partial x_i} \right)_{0,\Omega}.$$

De façon similaire à ce qui a été fait avec l'espace $L^2(\Omega)$, l'espace $H^1(\Omega)^n$ ainsi que le produit scalaire s'obtiennent naturellement des définitions précédentes. Un espace dérivé de $H^1(\Omega)$, nécessaire à l'étude de la formulation variationnelle de l'équation de conservation de la quantité de mouvement, est défini comme

$$H^1_{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}(\Omega)^n = \left\{ \boldsymbol{v} \in H^1(\Omega)^n \mid \boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \text{ sur } \Gamma_{\mathrm{D}\boldsymbol{u}} \right\},$$

et de façon similaire pour les problèmes thermiques, nous utiliserons

$$H^1_{\mathrm{D}T}(\Omega) = \left\{ w \in H^1(\Omega) \mid w = 0 \text{ sur } \Gamma_{\mathrm{D}T} \right\},$$

où $\Gamma_{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}$ et $\Gamma_{\mathrm{D}T}$ sont définis à la page 8. L'espace dual $H^{-1}(\Omega)$ est formé des fonctionnelles bornées sur $H^1(\Omega)$. Finalement, l'espace $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_0)$ est l'ensemble des fonctions définies sur une partie du bord de Ω, *i.e.* $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$, et formé de la restriction au bord des fonctions de $H^1(\Omega)$. L'espace $H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma_0)$ est son dual.

Pour les problèmes à surfaces libres, l'espace de base est une variante de l'espace de Sobolev, approprié à l'étude des problèmes de transport,

$$\Phi(\Omega) = \{\varphi \in L^2(\Omega) \mid \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\varphi \in L^2(\Omega) \text{ et } \varphi|_{\Gamma^-} \in L^2_{\boldsymbol{u}}(\Gamma^-)\},$$

où

$$L^2_{\boldsymbol{u}}(\Gamma) = \{\varphi \mid \int_\Gamma |\boldsymbol{u} \cdot \mathbf{n}|\, \varphi^2 \, d\Gamma < \infty\},$$

et où Γ^- a été défini en (1.15). Nous aurons aussi besoin du produit scalaire associé à $L^2_{\boldsymbol{u}}(\Gamma)$, soit

$$\langle \varphi \,, \psi \rangle_{0,\Gamma} = \int_\Gamma (\boldsymbol{u} \cdot \mathbf{n})\, \varphi\, \psi \, d\Gamma.$$

Pour exprimer la forme faible de l'équation de transport, nous ferons appel à l'espace

$$\Phi_{\Gamma^-}(\Omega) = \{\varphi \in \Phi(\Omega) \mid \varphi = 0 \text{ sur } \Gamma^-\}.$$

2.1.2 Les formes faibles

Les formulations variationnelles des équations (1.1), (1.2), (1.3) et (1.14) sont obtenues en multipliant d'abord ces équations par une fonction test prise dans un espace fonctionnel approprié, puis en intégrant le résultat par parties, lorsqu'indiqué, sur tout le domaine Ω. Nous obtenons ainsi la forme faible de l'équation de conservation de la masse,

$$(\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u} \,, q)_{0,\Omega} = 0, \quad \forall q \in L^2(\Omega). \tag{2.1}$$

En considérant $\boldsymbol{f}$ comme étant élément de $L^2(\Omega)^n$, $\boldsymbol{u}_{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}$ élément de $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_{\mathrm{D}\boldsymbol{u}})^n$ et $\boldsymbol{t}_{\mathrm{N}\boldsymbol{u}} \in H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma_{\mathrm{N}\boldsymbol{u}})^n$, la forme faible de l'équation de conservation de la quantité de mouvement devient

$$\begin{aligned}(\rho(\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u} \,, \boldsymbol{v})_{0,\Omega} + (\boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{u}) \,, \dot{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{v}))_{0,\Omega} - (p \,, \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{v})_{0,\Omega} \\ = (\boldsymbol{f} \,, \boldsymbol{v})_{0,\Omega} + \langle \boldsymbol{t}_{\mathrm{N}\boldsymbol{u}} \,, \boldsymbol{v} \rangle_{H^{-\frac{1}{2}}, H^{\frac{1}{2}}}, \quad \forall \boldsymbol{v} \in H^1_{\mathrm{D}\boldsymbol{u}}(\Omega)^n.\end{aligned} \tag{2.2}$$

Notons que dans le cas où $\Gamma_{Du} = \Gamma$, nous aurions plutôt considéré $\boldsymbol{f} \in H^{-1}(\Omega)^n$. Le problème de base est donc de trouver $\boldsymbol{u} \in H^1(\Omega)^n$ et $p \in L^2(\Omega)$ satisfaisant les formes faibles (2.1) et (2.2). À l'aide du théorème de Lax-Milgram et d'un relèvement approprié, on réussit à montrer l'existence et l'unicité de cette solution, sur un certain domaine des valeurs des propriétés physiques (Girault et Raviart, 1986).

Quand l'équation de conservation de l'énergie doit être résolue, sa formulation variationnelle associée est donnée par

$$\begin{aligned}(\rho\, c_p\, \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla} T\,, w)_{0,\Omega} + (k\, \boldsymbol{\nabla} T\,, \boldsymbol{\nabla} w)_{0,\Omega} \\ = (g\,, w)_{0,\Omega} + \langle q_{NT}\,, w\rangle_{H^{-\frac{1}{2}},H^{\frac{1}{2}}}\,, \quad \forall w \in H^1_{DT}(\Omega),\end{aligned} \tag{2.3}$$

où $g \in L^2(\Omega)$, $T_{DT} \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_{DT})$, et $q_{NT} \in H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma_{NT})$, et nous obtenons existence et unicité de $T \in H^1(\Omega)$.

Il reste à présenter la forme faible de l'équation de transport, soit

$$(\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla} F\,, \varphi)_{0,\Omega} = 0, \quad \forall \varphi \in \Phi_{\Gamma^-}(\Omega). \tag{2.4}$$

Le problème fort formé de l'équation (1.14), et de la condition limite en amont de l'écoulement (1.16), possède une solution unique $F \in \Phi(\Omega)$ si F_{Γ^-} est élément de $L^2_{\boldsymbol{u}}(\Gamma^-)$ (Raviart, Notes de cours de DEA, cité dans Leborgne, 1992).

2.2 La méthode de Galerkin

Il s'agit maintenant de discrétiser les formes variationnelles (2.1), (2.2), (2.3) et (2.4). Les espaces fonctionnels discrets $V_h \subset H^1(\Omega)^n$, $Q_h \subset L^2(\Omega)$, $W_h \subset H^1(\Omega)$ et $\Phi_h \subset \Phi(\Omega)$, qui sont de dimension finie, sont construits afin de permettre la discrétisation de la vitesse, la pression, la température et la pseudo-concentration. Les variables dépendantes sont donc approximées par un élément de ces espaces discrets. Par exemple, pour l'approximation en vitesse, la vitesse discrète $\boldsymbol{u}_h$ est exprimée

comme

$$u_h(x) = \sum_{j=1}^{m} u_j \phi_j(x),$$

où u_j est la valeur de la vitesse au j^e noeud d'un élément du maillage Ω_h discrétisant le domaine Ω, et où la fonction d'interpolation $\phi_j(x)$ est une des m fonctions formant la base de V_h. Nous choisissons ensuite, comme fonctions tests, les éléments de la base des espaces discrets. C'est la *méthode de Galerkin*.

Le choix des espaces V_h et Q_h ne peut se faire de façon indépendante. Ils doivent respecter la condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi (LBB) (Brezzi, 1974), qui assure l'existence et l'unicité de la solution (u_h, p_h) du problème discret, ainsi que la convergence de la solution discrète vers (u, p).

Ce qui caractérise la méthode de Galerkin est que les fonctions d'interpolation et les fonctions tests sont prises dans le même espace fonctionnel. Nous verrons plus loin que ce choix n'est pas toujours judicieux. Après avoir remplacé les approximations discrètes des variables dépendantes et les fonctions tests discrètes dans les formes faibles (2.1), (2.2), (2.3) et (2.4), nous obtenons un système d'équations matricielles de la forme:

$$\begin{array}{lclclcl}
\mathbf{C}(\vec{\mathbf{U}}) \cdot \vec{\mathbf{U}} & + & \mathbf{A}(\mu) \cdot \vec{\mathbf{U}} & + & \mathbf{B}^T \cdot \vec{\mathbf{P}} & = & \vec{\mathbf{G}}; \\
 & & \mathbf{B} \cdot \vec{\mathbf{U}} & & & = & \vec{\mathbf{0}}; \\
\mathbf{D}(\vec{\mathbf{U}}) \cdot \vec{\mathbf{T}} & + & \mathbf{E} \cdot \vec{\mathbf{T}} & + & & = & \vec{\mathbf{H}}; \\
\mathbf{K}(\vec{\mathbf{U}}) \cdot \vec{\mathbf{F}} & & & & & = & \vec{\mathbf{0}}.
\end{array}$$

Dans ce système, on retrouve la matrice de convection $\mathbf{C}$, la matrice de diffusion visqueuse $\mathbf{A}$, la matrice divergence $\mathbf{B}$, la matrice de convection thermique $\mathbf{D}$, la matrice de diffusion thermique $\mathbf{E}$, et la matrice de transport de la pseudo-concentration $\mathbf{K}$. Les vecteurs contenant les composantes de la vitesse, de la pression, de la température et de la pseudo-concentration aux noeuds sont notés dans l'ordre $\vec{\mathbf{U}}$, $\vec{\mathbf{P}}$, $\vec{\mathbf{T}}$ et $\vec{\mathbf{F}}$. Il faut remarquer le fort couplage entre ces équations. De plus, nous verrons au chapitre 6 que plusieurs des matrices pourront dépendre de $\vec{\mathbf{F}}$, qui peut contenir un saut, ajoutant ainsi à la non-linéarité du système. La stratégie de résolution uti-

lisée pour résoudre ce système d'équations algébriques non linéaires peut avoir des conséquences pratiques non négligeables. Ce point sera traité en détail au chapitre 6.

2.3 Les méthodes stabilisées

2.3.1 Le problème des oscillations numériques

La nature des équations étudiées est diverse. L'équation de conservation de la quantité de mouvement est à dominante soit elliptique, soit hyperbolique. Le terme de convection apporte le caractère hyperbolique à l'équation, alors que le terme visqueux est de nature elliptique. La même observation peut être faite au sujet de l'équation de conservation de l'énergie. L'équation de transport est purement hyperbolique. Une conséquence pratique de cette diversité est que la solution discrète obtenue de la méthode de Galerkin n'est pas précise en toutes circonstances. C'est entre autre le cas lorsque le terme convectif de l'équation discrétisée, jumelé à une condition limite contenant une brusque variation, est prépondérant. On observe alors la présence d'oscillations non physiques dans la solution numérique (Johnson, 1987). Il est donc nécessaire d'utiliser une discrétisation mieux adaptée au problème à résoudre.

Afin d'illustrer les différentes options qui s'offrent à nous, considérons l'équation de convection-diffusion générique,

$$\boldsymbol{u} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot (\kappa \nabla \phi) = f, \tag{2.5}$$

avec des conditions limites essentielles sur $\partial\Omega$, afin de simplifier la présentation. Il est observé en pratique que des oscillations non physiques apparaissent lorsque le *nombre de Péclet élémentaire*, défini comme

$$Pe_{\mathrm{K}} = \frac{\|\boldsymbol{u}_{\mathrm{K}}\| \, h}{2\,\kappa},$$

est grand. Le nombre de Péclet exprime l'équilibre convection-diffusion. Donc, si

$Pe_K \gg 1$, le problème est localement à dominante convective. Il s'agit de l'élément déclencheur des oscillations numériques.

Une première tentative, pour faire disparaître ces oscillations numériques, pourrait être de raffiner le maillage utilisé afin de *mieux* discrétiser le domaine de calcul dans les régions où les effets convectifs sont dominants, ou autrement dit de réduire le nombre de Péclet élémentaire via h. Les fortes variations présentes dans la solution analytique seraient alors capturées numériquement. Les méthodes adaptatives seront présentées en détail au chapitre 3. Il faut cependant mentionner que pour les équations purement hyperboliques, avec une condition aux limites discontinue, il est impossible de raffiner suffisamment un maillage pour éliminer les oscillations numériques et donc pour bien capturer un tel saut.

Une autre possibilité est d'atténuer les oscillations en ajoutant un terme de *diffusion artificielle* à l'équation (2.5),

$$-\nabla \cdot (\kappa' \nabla \phi),$$

où κ' est choisi de telle sorte que l'équation modifiée soit à caractère « plus elliptique », ou en des termes plus précis, que κ' soit choisi de telle sorte que $Pe_K < 1$. Il reste alors à discrétiser cette nouvelle équation à l'aide de la méthode de Galerkin. Cette façon de procéder a le désavantage de ne pas faire disparaître que les oscillations parasites, mais aussi les fortes variations présentes dans la solution analytique. C'est le problème de la *diffusion numérique*. De plus, la solution du problème modifié ne satisfait pas l'équation initiale. On dit alors que la méthode n'est pas *résiduelle*, *i.e.* on ne peut pas écrire la forme faible de l'équation étudiée sous la forme

$$\int_\Omega \mathcal{R}(\phi)\, \psi \, d\Omega = 0,$$

où $\mathcal{R}(\phi)$ est le résidu de l'équation à résoudre et où ψ est une fonction test. On utilise l'expression « consistent method » dans la littérature anglo-saxonne.

Une autre façon d'attaquer le problème, approche développée dans le contexte des méthodes de différences finies décentrées, consiste à donner plus de poids à la dis-

crétisation en amont de l'écoulement en utilisant une différence arrière. On parle d'« upwinding » dans le langage de tous les jours du numéricien. Cette approche a été adaptée à la méthode des éléments finis en modifiant les fonctions tests de telle sorte qu'un poids plus grand soit donné à la discrétisation en amont de l'écoulement, résultant en une discrétisation de type *Petrov-Galerkin*. Un exemple d'une telle fonction test est illustré à la figure 2.1. Les premiers efforts pour modéliser les

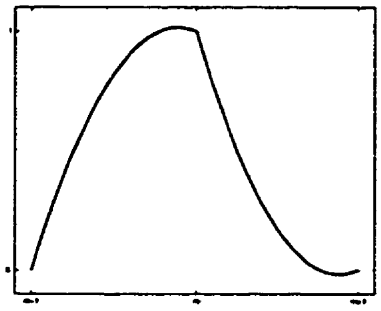


Figure 2.1 Une fonction test décentrée (cf. Christie et al., 1976)

écoulements à convection dominante à l'aide de cette approche peuvent être trouvés dans les travaux de Blackburn (1976), de Christie et al. (1976) et de Heinrich et al. (1977). Mais quoique cette approche permet de faire disparaître les oscillations non physiques à l'aide d'une formulation résiduelle, en pratique, on observe toujours des problèmes de diffusion excessive.

Une approche ultérieure, introduite par Raithby (1976) dans le contexte des différences finies, fût de considérer un terme de diffusion qui n'agit que dans le sens des lignes de courant, laissant à peu près intactes les discontinuités pouvant être présentes perpendiculairement aux caractéristiques. Ce choix est judicieux puisque, en pratique, les discontinuités sont transportées le long des lignes de courant. Cette nouvelle approche permit de résoudre les équations à convection dominante, sans avoir les problèmes de diffusion excessive communs aux méthodes classiques de décentrage. Hughes et Brooks (1979) ont adapté cette stratégie à la méthode des éléments finis. La méthode « *streamline upwind* » (SU) consiste à modifier la fonction test du terme de convection. La forme faible de l'équation (2.5) devient

$$(\boldsymbol{u} \cdot \nabla \phi, \overline{\psi})_{0,\Omega} + (\kappa \nabla \phi, \nabla \psi)_{0,\Omega} = (f, \psi)_{0,\Omega}, \tag{2.6}$$

où

$$\overline{\psi} = \psi + \tau\, \boldsymbol{u} \cdot \nabla \psi. \tag{2.7}$$

On comprend mieux les implications de ce choix lorsque la forme faible (2.6) est exprimée comme

$$(\boldsymbol{u} \cdot \nabla \phi\,, \psi)_{0,\Omega} + (\tau\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T \nabla \phi\,, \nabla \psi)_{0,\Omega} + (\kappa\, \nabla \phi\,, \nabla \psi)_{0,\Omega} = (f\,, \psi)_{0,\Omega}\,.$$

Le tenseur $\tau\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T$ est le terme de diffusion artificielle dans le sens des lignes de courant. Les propriétés de ce tenseur deviennent claires lorsqu'on observe que le vecteur propre associé à la valeur propre non nulle est $\boldsymbol{u}$. Les vecteurs propres associés à la valeur propre nulle étant perpendiculaires aux lignes de courant, la diffusion artificielle n'aura d'effet que dans la direction des caractéristiques. Même si cette méthode n'est toujours pas résiduelle, elle reste populaire et semble efficace pour la modélisation des écoulements viscoélastiques (Marchal et Crochet, 1987). Elle est reconnue pour être trop diffusive lorsqu'un terme source est présent.

2.3.2 Les méthodes résiduelles

Pour des raisons évidentes, une propriété que nous voulons retrouver dans une méthode d'éléments finis stabilisée est qu'elle soit résiduelle. Une façon directe d'y arriver est d'appliquer la fonction test modifiée $\overline{\psi}$ de la méthode SU à tous les termes de la forme faible de l'équation de convection-diffusion. On obtient ainsi la forme faible associée à la méthode « *streamline upwind/Petrov-Galerkin* » (SUPG) (Brooks et Hughes, 1982),

$$(\boldsymbol{u} \cdot \nabla \phi\,, \overline{\psi})_{0,\Omega} + (\kappa\, \nabla \phi\,, \nabla \overline{\psi})_{0,\Omega} = (f\,, \overline{\psi})_{0,\Omega}\,,$$

où $\overline{\psi}$ a été défini en (2.7). Mais en pratique, on retrouve plutôt la formulation SUPG

exprimée sous la forme

$$(\boldsymbol{u}\cdot\nabla\phi\,,\psi)_{0,\Omega}+(\kappa\,\nabla\phi\,,\nabla\psi)_{0,\Omega}+\sum_{\mathrm{K}}(\boldsymbol{u}\cdot\nabla\phi-\nabla\cdot(\kappa\nabla\phi)\,,\tau\,\boldsymbol{u}\cdot\nabla\psi)_{0,\mathrm{K}}$$
$$=(f\,,\psi)_{0,\Omega}+\sum_{\mathrm{K}}(f\,,\tau\,\boldsymbol{u}\cdot\nabla\psi)_{0,\mathrm{K}}\,. \quad (2.8)$$

On retrouve la forme faible de la méthode de Galerkin, plus le résidu de l'équation de convection-diffusion multiplié à la partie modifiée de la fonction test, soit $\tau\,\boldsymbol{u}\cdot\nabla\,\psi$. La partie stabilisée de la formulation variationnelle n'est définie qu'élément par élément étant donné la discontinuité interélément engendrée par la présence de la dérivée seconde. Si l'espace discret est linéaire, le terme d'ordre deux est nul, et on retombre sur la méthode SU, au terme source prêt. Pour les interpolants quadratiques, on conserve le terme d'ordre deux, mais on observe en pratique que ceci ne cause pas de problème sérieux.

Depuis l'introduction de la méthode SUPG, développée à partir d'idées intuitives, une analyse mathématique plus poussée du concept de décentrage a été entreprise par plusieurs chercheurs. Les propriétés de stabilisation de la méthode ont été analysées dans le contexte de l'étude des écoulements à haut nombre de Péclet pour l'équation de convection-diffusion, et à nombre de Reynolds élevé pour les équations de Navier-Stokes. Ces analyses ont aussi levé l'arbitraire associé au *paramètre de stabilisation* τ, qui était choisi de façon plus ou moins éclairée jusqu'à lors. On a remarqué que les propriétés stabilisatrices des méthodes décentrées s'étendaient au problème de Stokes, permettant de choisir des interpolants en vitesse-pression qui ne respectent pas la condition LBB, tout en obtenant une approximation stable. Il reste que nous ne pouvons obtenir un ordre de convergence optimal qu'avec une combinaison d'éléments qui satisfait la condition LBB.

Un aboutissement de ces travaux a d'abord mené à la populaire méthode « *Galerkin/least-squares* » (GLS) de Hughes et al. (1989), puis à la formulation stabilisée pour les équations de Stokes proposée par Douglas Jr. et Wang (1989), et généralisée par la suite aux équations de convection-diffusion (Franca et al., 1992) et de Navier-Stokes (Franca et Frey, 1992). Pour notre équation de convection-diffusion

générique, la formulation variationnelle stabilisée de Douglas-Wang est donnée par

$$(\boldsymbol{u}\cdot\nabla\phi\,,\psi)_{0,\Omega}+(\kappa\,\nabla\phi\,,\nabla\psi)_{0,\Omega}+$$
$$\sum_{\mathrm{K}}\left((\boldsymbol{u}\cdot\nabla\phi-\nabla\cdot(\kappa\nabla\phi))\,,\tau\,(\boldsymbol{u}\cdot\nabla\psi+\nabla\cdot(\kappa\nabla\psi))\right)_{0,\mathrm{K}}$$
$$=(f\,,\psi)_{0,\Omega}+\sum_{\mathrm{K}}\left(f\,,\tau\,(\boldsymbol{u}\cdot\nabla\psi+\nabla\cdot(\kappa\nabla\psi))\right)_{0,\mathrm{K}}. \quad (2.9)$$

Cette formulation est très similaire à la formulation GLS de Hughes et al., la seule différence provenant du signe « + » devant le terme d'ordre 2 de la partie stabilisatrice de la fonction test,

$$\overline{\psi}=\psi+\tau\,(\boldsymbol{u}\cdot\nabla\psi+\nabla\cdot(\kappa\nabla\psi)),$$

alors qu'avec la formulation GLS, cette fonction test est

$$\overline{\psi}=\psi+\tau\,(\boldsymbol{u}\cdot\nabla\psi-\nabla\cdot(\kappa\nabla\psi)),$$

cette dernière menant à la forme faible du résidu de l'équation de convection-diffusion

$$\int_{\Omega}\mathcal{R}(\phi)\,\psi\,d\Omega+\sum_{\mathrm{K}}\int_{\mathrm{K}}\mathcal{R}(\phi)\,\tau\,\mathcal{R}(\psi)\,d\mathrm{K}=0.$$

Cette modification, d'apparence mineure, apportée par la formulation de Douglas-Wang permet d'obtenir des résultats plus précis lorsque des interpolants de degré élevé (≥ 2) sont utilisés (Franca et al., 1992). Cette formulation devrait donc permettre d'obtenir un taux de convergence optimal avec un élément de Crouzeix-Raviart. Il s'agissait d'une limitation bien connue des formulations SUPG et GLS. Cependant, comme il sera discuté plus en détail au chapitre 6, nous ne planifions pas de résoudre les équations de Navier-Stokes avec une formulation stabilisée. Mais dans l'éventualité où un problème le nécessiterait, cette formulation est conseillée. Pour ce qui est de l'équation de transport, toutes ces formulations reviennent à la méthode SUPG. On peut retrouver une expression pour le paramètre de stabilisation τ dans (Franca et al., 1992). Le développement de paramètres optimaux demeure un sujet de recherche actif (Codina et al., 1992; Oñate et al., 1997).

2.3.3 La méthode de Galerkin discontinue

Une autre façon d'adapter le concept de décentrage à la méthode des éléments finis a été introduite de façon indépendante par Reed et Hill (1973) et par Lesaint et Raviart (1974). Elle consiste à résoudre l'équation de transport (1.14) élément par élément, en commençant par les éléments en amont de l'écoulement. Il s'agit de la méthode de *Galerkin discontinue.* Cette méthode ne s'applique qu'aux équations hyperboliques du premier ordre,

$$\phi + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\phi = f.$$

L'information liée à la variable dépendante est transportée par le champ de vitesse du fluide le long des caractéristiques, ce qui suggère la résolution élément par élément, d'amont en aval de l'écoulement. Aucune continuité n'étant exigée à l'intersection des éléments, les dérivées en espace présentes dans l'équation de transport sont calculées au sens des distributions.

L'espace discret

$$\Phi_h(\Omega) = \left\{\psi \in \Phi(\Omega) \mid \phi|_{\mathrm{K}} \in \mathcal{P}_k(\mathrm{K}), \mathrm{K} \in \Omega_h\right\},$$

où $\mathcal{P}_k(\mathrm{K})$ est l'ensemble des polynômes de degré k définis sur un élément K, est à la base de la méthode. Puisque la résolution de l'équation de transport ne se fera que sur un élément à la fois, nous avons besoin de l'analogue élémentaire de la partie entrante de la frontière (1.15), *i.e.*

$$\Gamma^-(\mathrm{K}) = \{\boldsymbol{x} \in \partial\mathrm{K} \,|\, \boldsymbol{u} \cdot \mathbf{n}_{\mathrm{K}} < 0\}, \tag{2.10}$$

et du même coup, nous définissons $\Gamma^+(\mathrm{K}) = \partial\mathrm{K} - \Gamma^-(\mathrm{K})$, tel qu'illustré à la figure 2.2. Pour exprimer $\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\phi$ au sens des distributions, nous devons définir le saut de ϕ sur une frontière commune à deux éléments, notée S, comme

$$[\phi_{\mathrm{S}}] = \phi^-(\boldsymbol{x}_{\mathrm{S}}) - \phi^+(\boldsymbol{x}_{\mathrm{S}}), \quad \forall \boldsymbol{x}_{\mathrm{S}} \in \mathrm{S},$$

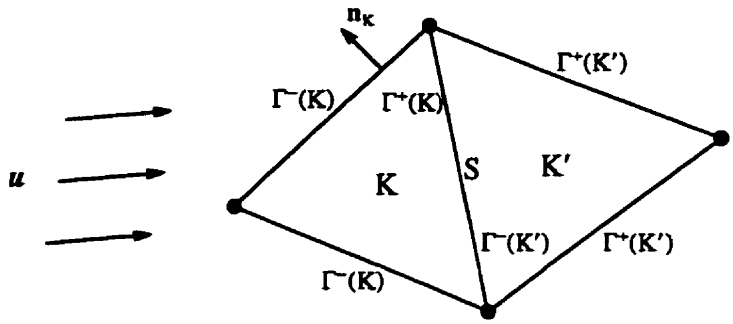


Figure 2.2 La méthode de Galerkin discontinue

où on définit:

$$\begin{cases} \phi^-(\boldsymbol{x}_S) = \lim\limits_{\beta \to 0^-} \phi(\boldsymbol{x}_S + \beta \boldsymbol{u}); \\ \phi^+(\boldsymbol{x}_S) = \lim\limits_{\beta \to 0^+} \phi(\boldsymbol{x}_S + \beta \boldsymbol{u}). \end{cases}$$

Donc, en prenant en ligne de compte que les fluides étudiés sont incompressibles,

$$\boldsymbol{u} \cdot \nabla \phi_{\text{distribution}} = \boldsymbol{u} \cdot \nabla \phi|_K + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_S) \cdot \mathbf{n}_K \, [\phi_S] \, \delta_{\boldsymbol{x}_S},$$

et la forme faible de la méthode de Galerkin discontinue, pour l'équation de transport (1.14), s'exprime comme

$$(\boldsymbol{u} \cdot \nabla \phi \, , \psi)_{0,K} - \langle \phi^+, \psi \rangle_{0,\Gamma^-(K)} = - \langle \phi^-, \psi \rangle_{0,\Gamma^-(K)}, \quad \forall \psi \in \Phi_h(\Omega).$$

La solution discrète ϕ_h se trouve dans $\Phi_h(\Omega)$.

Puisque la résolution se fait élément par élément, il est nécessaire de connaître ϕ sur $\Gamma^-(K)$ avant d'obtenir ϕ sur K. Il s'agit donc de traiter en premier lieu les éléments adjacents à $\Gamma^-(\Omega)$, puis les éléments voisins à ceux-ci et ainsi de suite jusqu'à ce que les éléments voisins à $\Gamma^+(\Omega)$ soient traités (cf. figure 2.3). Plusieurs algorithmes sont disponibles pour déterminer l'ordre de résolution élémentaire (Touzani, 1988; Zaki, 1993; Hétu et al., 1995).

La méthode de Galerkin discontinue possède plusieurs avantages sur la méthode SUPG. D'abord, la résolution se fait élément par élément, ce qui fait que nous

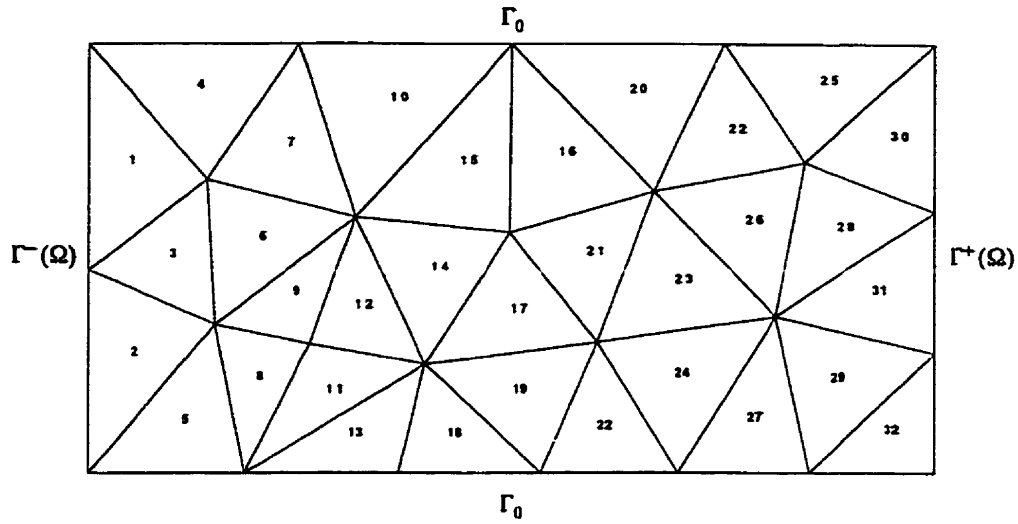


Figure 2.3 Résolution d'amont en aval par la méthode de Galerkin discontinue. La numérotation des éléments correspond à l'ordre avec lequel la résolution élément par élement pourrait se faire, d'amont en enval de l'écoulement ($\boldsymbol{u} = (1\,,0)$)

n'avons à résoudre que des systèmes linéaires de petite taille pour chaque élément. Cette façon de procéder réduit considérablement l'espace mémoire requis, de même que le temps de calcul nécessaire pour obtenir ϕ sur tout le domaine. Cette propriété est d'autant plus importante lors de simulation tridimensionnelle. Cependant, cette particularité fait qu'il est nécessaire de résoudre les équations de conservation et l'équation de transport de façon découplée. Avec les méthodes stabilisées, il est possible de résoudre le système d'E.D.P. de façon entièrement couplée, ce qui pourrait sembler une mauvaise idée d'un point de vue pratique. Mais puisque les méthodes itératives de résolution de système linéaire sont de plus en plus robustes et qu'elles nécessitent beaucoup moins d'espace de stockage que les méthodes directes, ce choix devient de plus en plus intéressant. Surtout que cette approche semble plus performante du point de vue de la convergence globale. Ce point sera traité plus en détail au chapitre 6.

2.3.4 Le traitement des oscillations numériques

Comme il a été mentionné au chapitre 1, l'équation de transport (1.14) servira à propager l'identité de chaque fluide dans le domaine de calcul. Mais comme la

pseudo-concentration est discontinue par définition, on peut s'attendre à avoir des oscillations non physiques dans la solution discrète. Même si une discrétisation décentrée est utilisée, de petites oscillations persisteront et pourront causer des difficultés lors de l'évaluation de paramètres physiques à l'interface.

Une façon d'éviter ces oscillations est de contourner le problème en redéfinissant le saut de la pseudo-concentration comme une région de transition régulière, d'une largeur prédéfinie. Cette approche est même justifiée d'un point vue physique, puisqu'il est connu qu'une petite région de mélange existe entre deux fluides immiscibles. Par contre, lorsque l'écoulement est tel que les lignes de courant convergent de part et d'autre de la surface libre, la région de transition de la variable transportée redevient abrupte et des oscillations apparaissent. On retrouve ce comportement pour les problèmes de coextrusion et de jets. On doit alors faire appel à des algorithmes spécialisés qui permettent d'éliminer ces oscillations indésirables.

Une approche pour réinitialiser cette région de transition régulière consiste à appliquer à la pseudo-concentration un produit de convolution d'un noyau choisi de façon judicieuse (Williams et al., 1998). Cette approche est populaire chez les utilisateurs des méthodes de différences finies. Il n'est pas clair si les éléments finis pourraient profiter de cette approche. Des tests préliminaires effectués au sein de notre équipe de recherche n'ont pas été concluants.

Une approche naturelle, dans le cadre de la méthodes des éléments finis, est de travailler au niveau des fonctions d'interpolation. On peut espérer être en mesure de construire une discrétisation qui fera que la solution éléments-finis sera libre de toute oscillation parasite. Un exemple de cette approche est illustré par l'algorithme « *Cell Discretization* » de Greenstadt (1995), qui est calqué sur la méthode de Galerkin, sauf pour ce qui est de l'assemblage où plus de flexibilité est donnée au niveau des fonctions de base. Ceci est rendu possible en construisant une approximation élémentaire faiblement continue sur les côtés des éléments. La méthode semble donner de bons résultats sur des problèmes de nature académique, avec des maillages quadrangulaires. Il reste à voir si elle pourrait être confrontée à des problèmes appliqués. Sacco et Stynes (1998) généralisent les fonctions de base exponentielles utilisées pour les problèmes 1-D, aux éléments triangulaires bidimensionnels. Ils ob-

tiennent une base à divergence nulle qu'ils utilisent avec diverses formulations de type Petrov-Galerkin.

Layton et Polman (1996) proposent d'ajouter une forme de terme de pénalisation aux formulations variationnelles provenant des méthodes de Galerkin ou stabilisées, sous la forme d'un terme d' « absorption » non linéaire $(A(\phi_h)\,,\psi)_{0,\Omega}$, où A est défini comme

$$A(\phi(\boldsymbol{x})) = \rho^{-1}\left[\min\{\phi(\boldsymbol{x}) - \phi_{\min}\,,0\} + \max\{\phi(\boldsymbol{x}) - \phi_{\max}\,,0\}\right],$$

où ρ « est un petit paramètre », qui doit probablement être choisi de la même façon qu'un paramètre de pénalisation. Dans le cas de la pseudo-concentration, $\phi_{\min}$ serait égale à 0 et $\phi_{\max}$ serait égale à 1. Ils proposent aussi une série de raffinements à leur technique, incluant une méthode de post-traitement. L'approche semble être intéressante pour nos problèmes, et mérite d'être étudiée plus en détail, ce que nous n'avons pas eu la chance de faire. Dans le même ordre d'idée, Béliveau (1997) a conçu une méthode de Galerkin discontinue qui conserve la monotonicité, basée sur les idées des méthodes de différences finies TVD et ENO. Malheureusement, notre cadre de travail fait surtout usage des méthodes stabilisées et adapter la méthodologie de Béliveau aux méthodes stabilisées ne semble pas possible.

Puisque nous travaillons surtout dans le contexte des discrétisations stabilisées, il semble naturel de faire appel à une technique développée dans ce cadre pour la capture de chocs et de couches limites présents dans les écoulements compressibles. Nous allons donc nous référer aux travaux de Hughes et al. (1986), ainsi qu'à certains raffinements ultérieurs apportés à cette technique (Galeão et do Carmo, 1988; Codina, 1993).

L'idée est d'ajouter un terme de diffusion, qui agit de façon perpendiculaire aux lignes de courant, dans la forme faible de l'équation de transport discrète stabilisée. Ce terme additionnel contrôle les variations des dérivées de la variable dépendante dans la direction des gradients de la solution. La fonction test de la méthode SUPG,

$$\overline{\psi} = \psi + \tau\,\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi$$

devient alors

$$\overline{\overline{\psi}} = \psi + \tau \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\psi + \tau_r \boldsymbol{u}_r \cdot \boldsymbol{\nabla}\psi$$

où

$$\boldsymbol{u}_r = \frac{\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\phi}{\|\boldsymbol{\nabla}\phi\|^2} \boldsymbol{\nabla}\phi$$

et

$$\tau_r = \frac{\lambda h_K}{2\,\|\boldsymbol{u}_r\|},$$

où h_K est la taille de l'élément K et $\lambda = 0{,}35$, tel que proposé par Codina (1993). Cette façon de procéder est simple à implémenter et notre expérience nous permet d'affirmer qu'elle est efficace. La fonction test modifiée ajoute une non-linéarité à l'équation à résoudre, sans que cela nous cause de problèmes particuliers.

2.4 Notes et bibliographie

D'un point de vu historique, il faut noter que le concept de méthode d'éléments finis stabilisée n'est pas nouveau. En effet, un commentaire de Richard Courant (Courant, 1943), dans son article qui posa les bases mathématiques de la méthode des éléments finis, propose d'utiliser une formulation de type Petrov-Galerkin pour stabiliser la discrétisation.

D'autres approches numériques sont disponibles pour résoudre l'équation de transport. Les méthodes de caractéristiques (voir par exemple Ferziger, 1981) et les méthodes hybrides caractéristiques-éléments finis (Bermejo, 1995; Arbogast et Wheeler, 1995) n'introduisent pratiquement aucune diffusion numérique, d'où leur intérêt. Cette propriété vient du fait que ces méthodes sont construites de telle sorte que l'information n'est traitée que le long des caractéristiques. Elles paraissent cependant plus difficile à implémenter dans un contexte général.

CHAPITRE 3

LES MÉTHODES D'ÉLÉMENTS FINIS ADAPTATIVES

Deux composantes sont à la base de la discrétisation d'équations aux dérivées partielles à l'aide de la méthode des éléments finis. Primo, un maillage d'éléments triangulaires ou quadrangulaires discrétise le domaine de définition, bidimensionnel dans notre cas, des variables dépendantes. Ces éléments contiennent les noeuds, locations géométriques où sont approximées les variables dépendantes. Les fonctions d'interpolation, *i.e.* les éléments des espaces discrets décrits à la section 2.2, forment la deuxième composante de la discrétisation. Le type de discrétisation utilisé par le numéricien dépend de facteurs tels le type de problème à résoudre et les moyens de calcul mis à sa disposition. Les décisions à prendre ne sont pas toujours évidentes, surtout lorsque vient le temps de construire un maillage bien adapté au problème à résoudre.

Les méthodes d'éléments finis adaptatives lèvent l'arbitraire quant au choix de la discrétisation. Elles offrent un procédé automatique qui, se basant sur la solution calculée à l'aide d'une discrétisation non optimale, permet d'obtenir une discrétisation mieux adaptée au problème à résoudre et fournissent une solution dont la précision est préétablie, le tout à un coût raisonnable. Seule l'adaptivité des maillages est étudiée (les méthodes h). L'adaptativité sur les fonctions d'interpolation (les méthodes p) et les méthodes adaptatives mixtes (les méthodes h-p) ne seront pas exposées.

Une présentation générale de la méthodologie adaptative utilisée est d'abord faite. Les différents estimateurs d'erreur a posteriori utilisés dans cette recherche sont ensuite décrits. Quelques travaux traitant des problèmes de convection sont aussi exposés.

3.1 La méthodologie adaptative

La méthodologie adaptative est somme toute assez simple. Elle peut être résumée à l'aide du diagramme de la figure 3.1. Les composantes présentes dans ce diagramme sont décrites dans les sous-sections qui suivent.

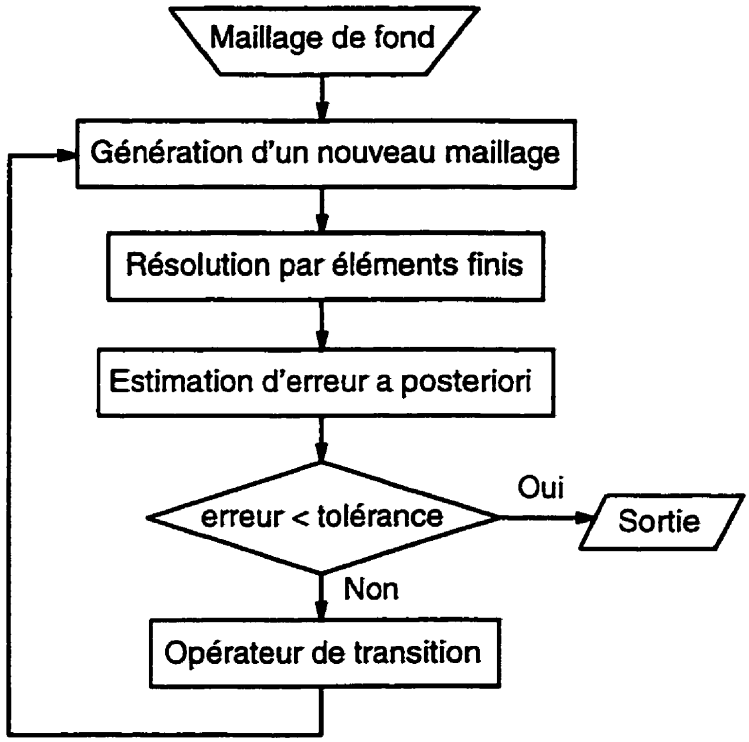


Figure 3.1 La méthodologie adaptative

3.1.1 Le mailleur

Une stratégie de *remaillage*, plutôt que de *raffinement local*, est utilisée. Quoique moins coûteuse, cette dernière approche a le désavantage de demander un effort d'implémentation plus important. Cependant, cette stratégie semble maintenant bien maîtrisée et plusieurs librairies sont disponibles, gracieuseté de spécialistes sur le sujet. Nous optons plutôt pour la stratégie de remaillage, qui n'a pas pour but d'améliorer le maillage existant, mais plutôt de générer un nouveau maillage,

« meilleur » que le précédent. Cette technique permet des variations rapides et régulières de la taille et de la forme des éléments. La flexibilité de cette méthode permet également de converger plus rapidement vers le *maillage optimal* (Hétu, 1991), *i.e.* vers le maillage qui, pour un nombre donné de noeuds, minimise l'erreur globale de la solution discrète. La notion d'optimalité des maillages sera exposée plus en détail lorsque l'opérateur de transition sera introduit.

Un générateur de maillage non structuré à progression de front (Peraire et al., 1987) est utilisé. Les éléments créés sont des triangles isotropes, *i.e.* chaque triangle sera le plus équilatéral possible. L'utilisation de triangles simplifie la génération des maillages pour les domaines géométriquement complexes. Ces éléments permettent aussi de raffiner facilement un maillage en des régions spécifiques.

Avant que le mailleur ne puisse discrétiser la géométrie d'un domaine de calcul, il doit avoir accès à une *distribution de taille* lui indiquant la taille que devront avoir les éléments en diverses régions. Une *fonction de taille* $\delta(\boldsymbol{x})$, ou carte de taille, est donc définie à cette fin. Cette distribution de taille est communiquée au mailleur à l'aide d'un maillage d'éléments linéaires, qui peut être grossier. Il s'agit du *maillage de fond*. À chaque noeud du maillage de fond est associé une taille δ_0 que devrait avoir un élément du maillage subséquent à cet endroit. Dans le cas présent, la taille d'un élément est définie comme étant la plus grande distance, calculée parallèlement aux axes de coordonnées, entre deux sommets d'un élément (cf. figure 3.2). Un

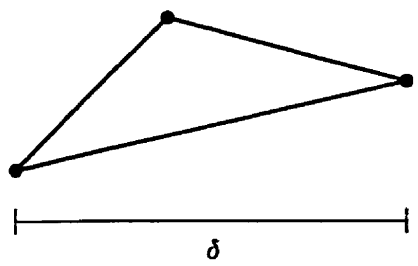


Figure 3.2 La taille d'un élément

maillage de fond est donc créé à chaque cycle adaptatif et les valeurs de la fonction de taille sont obtenues par interpolation linéaire. Le maillage de fond initial doit être fourni par l'usager, mais celui-ci peut être aussi simple que le maillage illustré

à la figure 3.3, où on veut mailler une « contraction » avec des mailles plus fines en aval de l'écoulement. Une fois le maillage de fond et les valeurs nodales de la

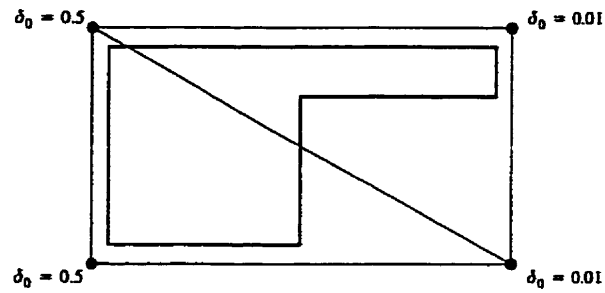


Figure 3.3 Un exemple de maillage de fond

fonction de taille connues, le mailleur discrétise la géométrie en tenant compte de ces informations.

3.1.2 Le résoluteur par éléments finis

Une fois en possession d'un « meilleur » maillage, les équations sont résolues à l'aide d'une méthode d'éléments finis. Les divers espaces discrets ont été présentés au chapitre 2. Notons que le résoluteur n'a pas à être modifié pour être utilisé dans la stratégie adaptative. Il n'en est qu'une des composantes.

3.1.3 L'estimation d'erreur a posteriori

L'*estimation d'erreur a posteriori* est la composante centrale des méthodes d'éléments finis adaptatives. Elle consiste à déduire, à partir de la solution discrète obtenue de la résolution des équations aux dérivées partielles, une approximation de l'erreur commise. Les estimateurs d'erreur constituent aussi un outil de visualisation intéressant, permettant à l'utilisateur d'avoir une idée de la précision de la solution qu'il vient de calculer. Étant à la base de la stratégie adaptative, la section 3.2 sera consacrée aux estimateurs d'erreur.

3.1.4 L'opérateur de transition

L'*opérateur de transition* fait le lien entre l'approximation de l'erreur aux noeuds, calculée par une technique d'estimation d'erreur a posteriori et la taille que devront avoir les éléments lors du prochain cycle adaptatif. L'opérateur de transition utilisé dans cette recherche est calqué sur l'opérateur de Zienkiewicz et Taylor (1989).

Le concept de maillage optimal est à la base de l'opérateur de transition utilisé. Un maillage est dit optimal si la norme de l'erreur élémentaire est égale à une seule et même constante, *i.e.*

$$\|e_h\|_K = C, \quad \forall K \in \Omega_h.$$

C'est le principe de l'*équidistribution de l'erreur*. Il a été démontré par différents auteurs (voir Hétu (1991) et Zaki (1993) pour une liste de ceux-ci) que pour un nombre de degrés de liberté fixé, un maillage optimal minimise l'erreur globale de la solution discrète d'un problème elliptique. C'est le maillage vers lequel nous voulons tendre.

En s'aidant de ce concept, nous sommes en mesure de construire l'opérateur de transition que nous utiliserons. Soit e_T l'*erreur totale admissible*, *i.e.* une mesure globale de l'erreur que l'on cherche à atteindre. Nous cherchons à obtenir une distribution de taille $\delta(\boldsymbol{x})$ qui produira une solution dont l'erreur sera réduite d'un facteur ξ à chaque cycle adaptatif. Par exemple, on peut vouloir réduire l'erreur de moitié à chaque cycle. L'erreur totale admissible s'exprime alors comme

$$e_T = \xi \|e_h\|_\Omega. \tag{3.1}$$

On en déduit l'*erreur admissible locale*,

$$\bar{e} = \frac{e_T}{\sqrt{N_e}}, \tag{3.2}$$

où N_e est le nombre d'éléments du maillage. Puisqu'on cherche à s'approcher d'un maillage optimal, la constante $\bar{e}$ est associée au principe de l'équidistribution de

l'erreur en cherchant à avoir

$$\|e_h\|_{\mathrm{K}} = \bar{e}, \quad \forall \mathrm{K} \in \Omega_h.$$

L'erreur élémentaire peut être reliée à la longueur d'un élément. En effet, une analyse d'erreur a priori (Ciarlet, 1978) nous permet d'affirmer que

$$\|e_h\|_{\mathrm{K}} \simeq C h_{\mathrm{K}}^{\gamma}, \tag{3.3}$$

où h_{K} est la taille de l'élément K, et γ est le taux de convergence de la discrétisation utilisée. De façon similaire, l'erreur admissible locale est reliée à la taille d'un élément via la relation

$$\bar{e} \simeq C \delta_{\mathrm{K}}^{\gamma}. \tag{3.4}$$

On obtient, des expressions (3.3) et (3.4), que

$$\delta_{\mathrm{K}} = \left(\frac{\bar{e}}{\|e_h\|_{\mathrm{K}}} \right)^{\frac{1}{\gamma}} h_{\mathrm{K}}. \tag{3.5}$$

En insérant l'expression (3.2) dans cette dernière équation, on obtient

$$\delta_{\mathrm{K}} = \left(\frac{e_{\mathrm{T}}}{\sqrt{N_e} \|e_h\|_{\mathrm{K}}} \right)^{\frac{1}{\gamma}} h_{\mathrm{K}}. \tag{3.6}$$

Finalement, on obtient l'opérateur de transition recherché des équations (3.1) et (3.6), soit

$$\delta_{\mathrm{K}} = \left(\frac{\xi \|e_h\|_{\Omega}}{\sqrt{N_e} \|e_h\|_{\mathrm{K}}} \right)^{\frac{1}{\gamma}} h_{\mathrm{K}}.$$

On a donc une expression constante par élément de la fonction de taille qui, une fois projetée sur un espace continu, servira à produire le maillage de fond pour le prochain cycle adaptatif.

3.1.5 Le cycle adaptatif

Une fois qu'une nouvelle distribution de taille $\delta(\boldsymbol{x})$ est calculée à l'aide de l'opérateur de transition, le mailleur discrétise à nouveau le domaine de calcul en se basant sur cette information. Le nouveau maillage, mieux adapté au problème à résoudre, est utilisé par le résoluteur pour calculer une nouvelle solution discrète. Une estimation de l'erreur est à nouveau faite et on la confronte à la tolérance préétablie. Si la qualité de la solution discrète est jugée satisfaisante, le processus adaptatif s'arrête. Sinon, on calcule une nouvelle distribution de taille, puis un nouveau maillage est construit et ainsi de suite.

3.2 L'estimation d'erreur a posteriori pour les problèmes elliptiques

Comme il a été mentionné plus haut, l'estimation d'erreur a posteriori est la composante centrale d'une stratégie adaptative. Elle est responsable de la détermination des régions où le maillage devra être raffiné et de celles où on pourrait se permettre d'utiliser des mailles plus grossières. Les gains de précision et les économies de coût de calcul seront donc surtout attribuables à la qualité des estimateurs d'erreur utilisés.

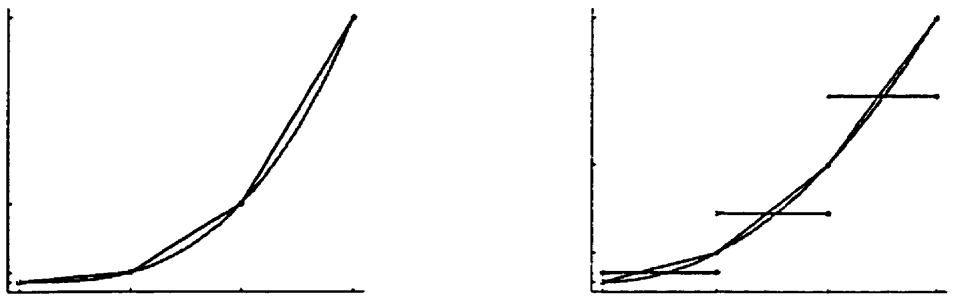
Beaucoup de travaux ont été faits sur l'estimation d'erreur a posteriori depuis les premiers efforts de Babuška et Rheinbolt (1978a,b). Plusieurs directions intéressantes ont été explorées pour estimer l'erreur de solutions provenant de discrétisations par éléments finis. Il en a résulté une assez grande quantité d'estimateurs d'erreur. Les nouveaux développements semblent toutefois plus rares, ce qui semble indiquer que ce domaine de recherche est à maturité. On retrouve maintenant surtout des résultats de travaux traitant de la robustesse de ces estimateurs d'erreur (Ainsworth et Oden, 1997).

De notre côté, nous nous intéressons à un sous-ensemble de ces estimateurs d'erreur, notre choix étant basé sur notre expérience pratique et sur quelques études critiques des différentes approches que l'on peut retrouver dans les thèses de Hétu (1991), Zaki (1993) et Ilinca (1996).

3.2.1 L'estimation d'erreur a posteriori par projection

L'*estimation d'erreur a posteriori par projection* consiste à projeter une variable discrète discontinue, telle la dérivée de la vitesse ou la pression dans le cas où un interpolant discontinu est utilisé, dans un espace de fonctions continues. Cette nouvelle représentation de la variable discrète devrait être, en général, « plus près » de sa valeur analytique. On considère donc cette variable projetée comme la valeur analytique et on la compare à la valeur discrète. Une norme appropriée de la différence de ces deux quantités constituera une estimation de l'erreur.

La figure 3.4 illustre un exemple simple d'estimation d'erreur par projection. La



(a) Discrétisation de $u(x) = x^3$ (b) Projection continue de $u'_h(x)$

Figure 3.4 Un exemple d'estimation d'erreur par projection

fonction $u(x) = x^3$ est discrétisée à l'aide d'un maillage d'éléments linéaires, illustré à la figure 3.4(a). On considère donc la dérivée discrète de x^3, qui est constante par élément (cf. figure 3.4(b)). Il reste à comparer les valeurs aux noeuds de cette dérivée discrète à celles de la dérivée projetée sur les fonctions d'interpolation de la solution discrète continue.

Zienkiewicz et Zhu (1987) ont initialement proposé cette technique en calculant une projection globale sur Ω_h. Une version locale (Zienkiewicz et Zhu, 1992a,b), qui possède plusieurs propriétés intéressantes, fût ensuite proposée. Nous présenterons donc brièvement la version globale, ainsi que la version locale un peu plus en détail.

L'estimation d'erreur par projection L^2 (projection globale)

Afin d'illustrer la technique d'estimation d'erreur par projection L^2, considérons à nouveau notre équation de convection-diffusion générique du chapitre 2, *i.e.*

$$\boldsymbol{u} \cdot \nabla\phi - \nabla \cdot (\kappa \nabla \phi) = f.$$

Nous voulons estimer l'erreur commise sur la variable discrète ϕ_h, qui est élément d'un sous-espace discret $\mathcal{V}_h$ de $H^1(\Omega)$, ce qui fait que les dérivées $\frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}$ sont éléments de $L^2(\Omega)$ et ce qui veut dire en pratique que les dérivées sont en général discontinues aux interfaces des éléments. On veut projeter ces dérivées discrètes dans un espace de fonctions continues. L'option la plus simple est de faire cette projection dans $\mathcal{V}_h$. On approxime ainsi la dérivée du problème fort $\frac{\partial \phi}{\partial x_k}$, élément de $H^1(\Omega)$, par la dérivée discrète projetée $\widetilde{\frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}}$. On obtient ainsi une approximation de la dérivée de l'erreur:

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_h}{\partial x_k} &= \frac{\partial \phi}{\partial x_k} - \frac{\partial \phi_h}{\partial x_k} \\ &\simeq \widetilde{\frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}} - \frac{\partial \phi_h}{\partial x_k} = \widetilde{\frac{\partial e_h}{\partial x_k}}. \end{aligned} \tag{3.7}$$

Une fois en possession de cette approximation de la dérivée de l'erreur, il reste à utiliser une norme appropriée pour quantifier l'erreur sur la variable dépendante ϕ. Dans le cas de notre exemple, la semi-norme élémentaire de $H^1(\mathrm{K})$,

$$|e_h|_{1,\mathrm{K}} = \left\{ \int_{\mathrm{K}} \sum_{k=1}^{n} \left(\widetilde{\frac{\partial e_h}{\partial x_k}} \right)^2 d\mathrm{K} \right\}^{\frac{1}{2}},$$

est toute indiquée. Dans le cas de la vitesse, on opterait plutôt pour la norme énergie. En fait nous n'obtenons pas une approximation de l'erreur, mais plutôt une approximation de la dérivée de l'erreur.

On projette donc les dérivées discrètes sur les fonctions d'interpolation formant la base de $\mathcal{V}_h$, *i.e.*

$$\widetilde{\frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{d} \widetilde{\frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}}(\boldsymbol{x}_j)\, \varphi_j(\boldsymbol{x}), \tag{3.8}$$

où d est la dimension de $\mathcal{V}_h$, les φ_j sont les fonctions d'interpolation et les $\boldsymbol{x}_j$ sont les coordonnées des noeuds de l'élément courant. Si la solution discrète est de qualité ($e_h \simeq 0$) on aura, en s'appuyant sur les expressions (3.7) et (3.8), que

$$0 \simeq \int_{\Omega} \frac{\partial e_h}{\partial x_k} \varphi_i \, d\Omega \simeq \sum_{\mathrm{K}} \int_{\mathrm{K}} \left(\sum_{j=1}^{d} \widetilde{\frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}}(\boldsymbol{x}_j)\, \varphi_j - \frac{\partial \phi_h}{\partial x_k} \right) \varphi_i \, d\mathrm{K}, \quad i = 1, \ldots, d.$$

Nous obtenons donc le système d'équations linéaires

$$\sum_{\mathrm{K}} \sum_{j=1}^{d} \left(\int_{\mathrm{K}} \varphi_j \, \varphi_i \, d\mathrm{K} \right) \left\{ \widetilde{\frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}}(\boldsymbol{x}_j) \right\} = \sum_{\mathrm{K}} \int_{\mathrm{K}} \frac{\partial \phi_h}{\partial x_k} \varphi_i \, d\mathrm{K}, \quad i = 1, \ldots, d$$

$$\Leftrightarrow$$

$$\mathbf{A} \left\{ \widetilde{\frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}}(\mathbf{X}) \right\} = \mathbf{b},$$

où $\mathbf{A}$ est une matrice de dimension $N \times N$, N étant le nombre total de noeuds du maillage, et $\mathbf{X}$ est le vecteur de longueur N des coordonnées des noeuds du maillage. On a donc un tel système à résoudre pour chaque variable dépendante pour lesquelles nous voulons estimer l'erreur, à l'exception de la vitesse où il faut en résoudre un par dimension. Notons cependant que la matrice $\mathbf{A}$ ne doit être factorisée qu'une seule fois.

Le problème avec l'estimation d'erreur par projection globale est qu'il est nécessaire de factoriser une matrice dont la taille est du même ordre de grandeur que celle provenant de la méthode de Galerkin. La méthode de projection L^2 est aussi reconnue pour sous-estimer l'erreur globale (Zienkiewicz et Zhu, 1991).

L'estimation d'erreur par projection locale au sens des moindres carrés

La *méthode de projection locale* est une variante de la méthode globale, aussi introduite par Zienkiewicz et Zhu (1992a,b). L'idée de base est toujours de projeter les variables discrètes sur un espace de fonctions continues. La différence est que la projection se fait sur des *cellules* de quelques éléments, ce qui fait qu'on n'a à résoudre que de petits systèmes linéaires, ceci menant à une technique d'estimation d'erreur moins coûteuse. De plus, les projections sont faites en utilisant des points d'échantillonnage choisis comme étant les points de *superconvergence* des éléments (Barlow, 1976; Hinton et Campbell, 1974; Zienkiewicz et Zhu, 1992a). On peut donc espérer retrouver un taux de convergence supérieur.

Pour chaque noeud du maillage courant, on construit la cellule contenant les éléments adjacents à ce noeud, tel qu'illustré à la figure 3.5. La projection continue de

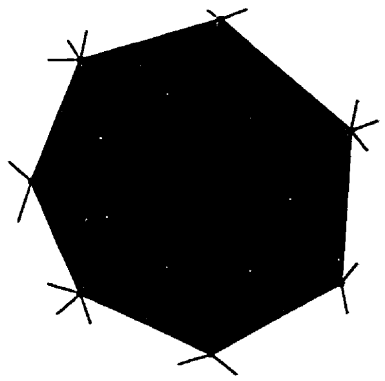


Figure 3.5 Une cellule d'éléments linéaires

la variable discrète est obtenue au noeud central de la cellule (◉) à l'aide des valeurs prises par la variable discrète aux points d'échantillonnage (△), soit les points de superconvergence de chaque triangle. Dans le cas du triangle linéaire, le barycentre (un point de Gauss) est un point de superconvergence (Zienkiewicz et Zhu, 1992a). Pour ce qui est du triangle quadratique, illustré à la figure 3.6, on obtient la valeur de la variable projetée aux noeuds intérieurs de la cellule (◉) en évaluant la variable discrète aux points d'échantillonnage (△), qui sont au nombre de trois par élément. Dans le cas du triangle quadratique, les points de superconvergence n'ont pas encore été identifiés formellement. Zienkiewicz et Zhu utilisent des points dits

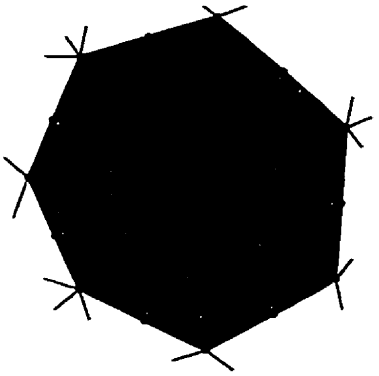


Figure 3.6 Une cellule d'éléments quadratiques

optimaux, qui sont des points de Gauss. Ceux-ci sont localisés au centre des côtés des éléments et offrent un ordre de convergence supérieur aux points de superconvergence. On qualifie ces points d'*ultraconvergent*. Ce comportement a été observé numériquement par Zienkiewicz et Zhu (1992a) et une justification n'a toujours pas été portée à notre attention.

On projette toujours les valeurs nodales de la variable discontinue discrète sur les fonctions d'interpolation à l'aide de l'équation (3.8),

$$\widetilde{\frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{d} a_j \, \varphi_j(\boldsymbol{x}). \tag{3.9}$$

Une fois les points d'échantillonnage identifiés, on y compare la dérivée discrète à la dérivée projetée, au sens des moindres carrés, *i.e.*

$$\begin{aligned}
\mathcal{F} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m\ell} \left\{ \frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}(\boldsymbol{x}_i) - \frac{\partial \phi}{\partial x_k}(\boldsymbol{x}_i) \right\}^2 \\
&\simeq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m\ell} \left\{ \frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}(\boldsymbol{x}_i) - \sum_{j=1}^{d} a_j \, \varphi_j(\boldsymbol{x}_i) \right\}^2 \\
&= \frac{1}{2} \left\| \frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}(\boldsymbol{X}) - \boldsymbol{P}\boldsymbol{a} \right\|^2 \\
&= \frac{1}{2} \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{P} \boldsymbol{a} - \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{P}^T \frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}(\boldsymbol{X}) + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}(\boldsymbol{X}) \right\}^T \left\{ \frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}(\boldsymbol{X}) \right\},
\end{aligned}$$

où m est le nombre d'éléments de la cellule, ℓ est le nombre de points d'échantillonnage par élément, $\mathbf{P}$ est la matrice formée des vecteurs lignes contenant les fonctions d'interpolation évaluées aux points d'échantillonnage,

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} - & \varphi^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}_1) & - \\ - & \varphi^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}_2) & - \\ & \vdots & \\ - & \varphi^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}_{m\ell}) & - \end{pmatrix},$$

et $\boldsymbol{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_d)^T$. Les $\boldsymbol{x}_i$ sont les coordonnées des mk points d'échantillonnage que l'on écrit sous forme vectorielle comme $\boldsymbol{X}$.

La valeur de $\boldsymbol{a}$ pour laquelle l'optimum de $\mathcal{F}$ est atteint satisfait l'équation

$$\frac{\partial \mathcal{F}(\boldsymbol{a})}{\partial \boldsymbol{a}} = \boldsymbol{P}^T \boldsymbol{P} \boldsymbol{a} - \boldsymbol{P}^T \frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}(\boldsymbol{X}) = 0$$

$$\Leftrightarrow$$

$$\boldsymbol{P}^T \boldsymbol{P} \boldsymbol{a} = \boldsymbol{P}^T \frac{\partial \phi_h}{\partial x_k}(\boldsymbol{X}). \tag{3.10}$$

Pour des raisons pratiques, il est préférable d'exprimer la matrice $\boldsymbol{P}^T \boldsymbol{P}$ comme

$$\boldsymbol{P}^T \boldsymbol{P} = \sum_{i=1}^{m\ell} \varphi(\boldsymbol{x}_i) \varphi^T(\boldsymbol{x}_i).$$

Après avoir obtenu les coefficients $\boldsymbol{a}$ associés à une cellule, de la résolution du système linéaire (3.10), on est en mesure d'évaluer la projection de la dérivée aux noeuds intérieurs de cette cellule à l'aide de l'expression (3.9).

Les systèmes linéaires à résoudre sont de taille $d \times d$. Il y a N tels systèmes à résoudre. Et comme pour la méthode de projection globale, la matrice du membre de gauche de l'équation (3.10) demeure inchangée à l'intérieur d'une cellule, quelque soit la quantité projetée. Ceci fait donc de l'estimation d'erreur par projection locale une approche beaucoup moins coûteuse que la version globale.

Pour que nous puissions utiliser les moindres carrés, l'inégalité $m\ell \geq d$ doit être respectée. Ceci entraîne que les cellules devront contenir un minimum de trois tri-

angles. Les cellules situées aux frontières du domaine de calcul peuvent donc poser des problèmes (cf. figure 3.7). Labbé et Garon (1995) proposent d'utiliser comme

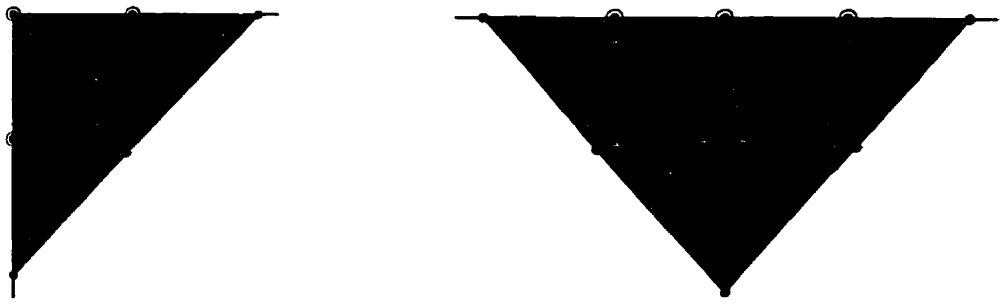


Figure 3.7 Cellules pathologiques

points d'échantillonnage des cellules à un ou deux éléments, des points de Gauss en nombre égal à la dimension de l'espace des fonctions d'interpolation. Cette façon de procéder nous fera cependant perdre la propriété de superconvergence aux noeuds de ces cellules frontières. Dans le cas des éléments quadratiques, les valeurs aux noeuds situés au milieu des segments des éléments seront approximées par plusieurs cellules. Zienkiewicz et Zhu (1992a) conseillent donc de prendre la moyenne des différentes approximations.

3.2.2 L'estimation d'erreur par résolution de problèmes locaux

L'*estimation d'erreur par résolution de problèmes locaux* consiste à résoudre, élément par élément, un problème variationnel local de l'erreur. Différentes versions de la méthode ont été développées. Nous utilisons une formulation inspirée des travaux de Bank et Weiser (1985), de Strouboulis et Oden (1990) et de Hétu (1991).

Contrairement à l'estimation d'erreur par projection, qui se fait au niveau des variables, l'estimation d'erreur par résolution de problèmes locaux est directement reliée au type d'équation résolue. Les premiers efforts furent consacrés aux équations elliptiques. Donc, afin de présenter la méthodologie utilisée, considérons l'équation

elliptique dérivée de notre équation de convection-diffusion générique, *i.e.*

$$-\nabla \cdot (\kappa \nabla \phi) = f, \tag{3.11}$$

toujours avec des conditions essentielles sur $\partial\Omega$ pour simplifier la présentation. La méthode d'estimation d'erreur par résolution de problèmes locaux est connue pour donner de mauvais résultats lorsqu'étendue aux équations de convection-diffusion (Strouboulis et Oden, 1990; Hétu, 1991). Il faudra donc avoir recours à des estimateurs d'erreur spécifiques à ce type de problème. Les développements présentés sont aussi valides pour les équations de Stokes, à quelques détails près.

On sait que la forme faible associée au problème (3.11) est: trouver $\phi \in H_0^1(\Omega)$ tel que

$$(\kappa \nabla \phi \,, \nabla \varphi)_{0,\Omega} = (f \,, \varphi)_{0,\Omega} \,, \quad \forall \varphi \in H_0^1(\Omega) \,, \tag{3.12}$$

alors que sous sa forme discrète, le problème devient: trouver $\phi_h \in \mathcal{V}_h(\Omega) \subset H_0^1(\Omega)$ tel que

$$(\kappa \nabla \phi_h \,, \nabla \varphi_h)_{0,\Omega} = (f \,, \varphi_h)_{0,\Omega} \,, \quad \forall \varphi_h \in \mathcal{V}_h(\Omega) \,. \tag{3.13}$$

La première étape consiste à écrire le problème variationnel global (3.12) comme une série de problèmes variationnels locaux. Nous obtenons ainsi les formes faibles

$$\sum_{\mathrm{K}} (\kappa \nabla \phi \,, \nabla \varphi)_{0,\mathrm{K}} = \sum_{\mathrm{K}} (f \,, \varphi)_{0,\mathrm{K}} + \sum_{\mathrm{K}} (\kappa \, \nabla \phi \cdot \mathbf{n}_{\mathrm{K}} \,, \varphi)_{0,\partial \mathrm{K} - \partial\Omega} \,, \tag{3.14}$$

$\forall \varphi \in H^1(\mathrm{K})$, où $\phi \in H^1(\mathrm{K})$ et où $\mathbf{n}_{\mathrm{K}}$ est la normale extérieure à l'élément K. Les formes faibles locales discrètes deviennent

$$\sum_{\mathrm{K}} (\kappa \nabla \phi_h \,, \nabla \varphi_h)_{0,\mathrm{K}} = \sum_{\mathrm{K}} (f \,, \varphi_h)_{0,\mathrm{K}} + \sum_{\mathrm{K}} (\kappa \, \nabla \phi \cdot \mathbf{n}_{\mathrm{K}} \,, \varphi_h)_{0,\partial \mathrm{K} - \partial\Omega} \,, \tag{3.15}$$

$\forall \varphi_h \in \mathcal{V}_h(\mathrm{K})$, où $\phi \in \mathcal{V}_h(\mathrm{K})$. Il s'agit de remplacer, par la suite,

$$\phi = \phi_h + e$$

dans l'équation (3.14) pour obtenir l'*équation variationnelle de l'erreur*

$$(\kappa\nabla e\,,\nabla\varphi)_{0,\mathrm{K}} = (f\,,\varphi)_{0,\mathrm{K}} - (\kappa\nabla\phi_h\,,\nabla\varphi)_{0,\mathrm{K}} + (\kappa\,\nabla\phi\cdot\mathbf{n}_\mathrm{K}\,,\varphi)_{0,\partial\mathrm{K}-\partial\Omega}\,, \qquad (3.16)$$

où $\phi \in \mathcal{V}(\mathrm{K}) := H^1(\mathrm{K})$, et $\phi_h \in \mathcal{V}_h(\mathrm{K}) \subset \mathcal{V}(\mathrm{K})$. Il reste à préciser les espaces auxquels appartiennent e et φ. Il s'agit de remarquer, des équations (3.15) et (3.16), que

$$(\kappa\,\nabla e\,,\nabla\varphi_h)_{0,\mathrm{K}} = 0. \qquad (3.17)$$

On en conclut que e est orthogonale aux éléments de $\mathcal{V}_h(\mathrm{K})$, par rapport à la norme énergie associée à la forme faible (3.12), et est donc élément du complément orthogonal $\mathcal{V}_h^\perp(\mathrm{K})$. Puisque ϕ, élément de l'espace de Hilbert $\mathcal{V}(\mathrm{K})$, s'écrit comme la somme d'éléments des sous-espaces $\mathcal{V}_h(\mathrm{K})$ et $\mathcal{V}_h^\perp(\mathrm{K})$, un résultat d'analyse fonctionnelle nous assure que l'on peut exprimer tout ϕ de $\mathcal{V}(\mathrm{K})$ comme la somme d'un unique élément de $\mathcal{V}_h(\mathrm{K})$ et de $\mathcal{V}_h^\perp(\mathrm{K})$, ou autrement dit

$$\mathcal{V}(\mathrm{K}) = \mathcal{V}_h(\mathrm{K}) \oplus \mathcal{V}_h^\perp(\mathrm{K}).$$

L'erreur e est donc élément de $\mathcal{V}_h^\perp(\mathrm{K})$. Le problème variationnel de l'erreur (3.16) devient donc: trouver $e \in \mathcal{V}_h^\perp(\mathrm{K})$ tel que l'équation (3.16) est satisfaite, pour tout $\varphi \in \mathcal{V}_h^\perp(\mathrm{K})$, puisque e est orthogonale aux éléments de $\mathcal{V}_h$.

Il reste à discrétiser ce problème variationnel. D'abord, l'intégrale au bord est approximée par

$$(\kappa\,\nabla\phi\cdot\mathbf{n}_\mathrm{K}\,,\varphi)_{0,\partial\mathrm{K}-\partial\Omega} \simeq ([\kappa\,\nabla\phi_h\cdot\mathbf{n}_\mathrm{K}]_\mathrm{M}\,,\varphi)_{0,\partial\mathrm{K}-\partial\Omega},$$

où $[\kappa\,\nabla\phi_h\cdot\mathbf{n}_\mathrm{K}]_\mathrm{M}$ est la moyenne des valeurs que prend $\kappa\,\nabla\phi_h\cdot\mathbf{n}_\mathrm{K}$ de part et d'autre d'un côté d'élément. Ensuite, nous devons opter pour un espace fonctionnel discret $\mathcal{E}_h(\mathrm{K}) \subset \mathcal{V}_h^\perp(\mathrm{K})$. L'erreur discrète e_h en sera élément. Pour une variable dépendante discrétisée à l'aide d'un élément quadratique, Hétu (1991) propose d'utiliser comme

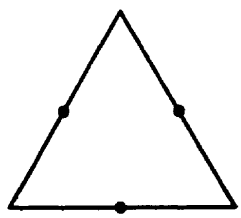
base de l'espace $\mathcal{E}_h$:

$$\begin{cases} \psi_1 = (4\,\lambda_1\lambda_2)^2\,; \\ \psi_2 = (4\,\lambda_2\lambda_3)^2\,; \\ \psi_3 = (4\,\lambda_3\lambda_1)^2\,. \end{cases}$$

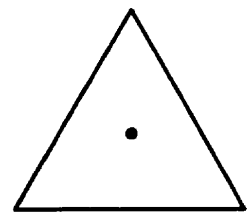
Cet espace peut être utilisé autant pour l'équation de diffusion que pour le champ de vitesse du problème de Stokes. Pour les équations de Navier-Stokes et de l'énergie, Hétu (1991) propose de ne pas tenir compte des termes convectifs, étant donné les pauvres performances de l'estimateur lorsque ceux-ci sont considérés. Ceci ne portera pas vraiment à conséquence étant donné que nous nous concentrons sur les écoulements rampants. Pour ce qui est de la discrétisation de l'erreur en pression, la fonction d'interpolation

$$\psi_1 = 2 - 3\,(\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2)$$

constitue la base de l'espace discret orthogonal aux fonctions d'interpolation de l'élément linéaire discontinu utilisé dans cette recherche pour discrétiser la pression. Ces éléments sont illustrés à la figure 3.8. Le problème discret à résoudre est donc:



(a) Discrétisation de l'erreur en u et T



(b) Discrétisation de l'erreur en p

Figure 3.8 Éléments utilisés pour discrétiser les problèmes locaux de l'erreur

trouver $e_h \in \mathcal{E}_h(\mathrm{K})$ tel que

$$(\kappa\nabla e_h\,,\,\nabla\varphi)_{0,\mathrm{K}} = (f\,,\varphi)_{0,\mathrm{K}} - (\kappa\nabla\phi_h\,,\,\nabla\varphi_h)_{0,\mathrm{K}} + ([\kappa\,\nabla\phi_h\cdot\mathbf{n}_\mathrm{K}\,,\varphi_h]_\mathrm{M})_{0,\partial\mathrm{K}-\partial\Omega}\,,$$

où les fonctions tests sont prises dans l'espace $\mathcal{E}_h(\mathrm{K})$.

Nous obtenons donc une approximation de l'erreur continue par élément. Comme pour la méthode de projection locale, nous n'avons à résoudre que de petits systèmes linéaires. Et cette façon d'estimer l'erreur prend en ligne de compte les composantes des équations et par conséquent les paramètres physiques qui y sont représentés, telle la viscosité. Les bases théoriques de cette approche sont également plus étoffées.

3.3 L'estimation d'erreur a posteriori pour les problèmes hyperboliques

La méthodologie adaptative utilisée dans cette recherche pour traiter l'équation de transport (1.14) est basée sur l'estimateur d'erreur par projection locale, appliqué à la pseudo-concentration. La technique est simple, efficace et s'applique à toutes les équations étudiées. Quelques limitations ont été notées pour certains écoulements, mais une composante a été ajoutée à la stratégie de capture d'interface pour régler le problème (cf. section 4.4.1).

D'autres approches ont été proposées dans la littérature, surtout ces dernières années, pour traiter les problèmes à convection dominante. Nous n'avons pas pu opter pour ces approches puisque plusieurs de ces développements sont récents. De plus, les méthodes proposées ne sont pas compatibles avec notre cadre de travail général, *i.e. le développement d'une stratégie simple et générale.*

Plusieurs approches intéressantes ont toutefois été développées. Il pourrait être intéressant d'en tester quelques-unes dans un cadre de travail appliqué. Il a donc été décidé d'inclure une brève revue de ce qui a été porté à notre attention, puisqu'il pourrait être intéressant d'implémenter certaines de ces idées dans le futur.

La plupart des études portent sur l'équation de convection-diffusion, où le terme de diffusion est très petit devant le terme convectif, mais non nul. Peu de techniques s'attaquent directement à l'équation de transport. Ceci est dû au fait que l'analyse est beaucoup simplifiée si le terme diffusif est présent. On peut ainsi se rapporter aux résultats disponibles pour les problèmes elliptiques. Dans ce cadre, on retrouve des développements de Johnson (1990), de Papastavrou et Verfürth (1998) et de

Achchab (1998) dans le cadre des méthodes stabilisées. Johnson et Papastavrou et Verfürth illustrent quelques tests numériques où le raffinement souffre de diffusion, tout comme la variable transportée, étant donné le paramètre de diffusion non nul.

Quelques auteurs s'attaquent directement au problème de convection pure. Süli et Houston (1996) développent une méthodologie pour, entre autres, estimer l'erreur des équations hyperboliques scalaires. Comme cas test, ils transportent une discontinuité à angle dans un carré. L'estimation d'erreur mène à un maillage bien raffiné, avec très peu de diffusion. Rannacher (1998) développe un estimateur dans le cadre des méthodes stabilisées. Il n'étudie malheureusement pas de cas test.

Almeida et Galeão (1996) modélisent les écoulements avec chocs en résolvant les équations d'Euler et de Navier-Stokes avec une formulation stabilisée. Pour aider à leur capture, ils utilisent une procédure adaptative similaire à la capture adaptative d'interface proposée dans cette recherche. Ils utilisent comme estimateur d'erreur la direction de variation maximale de la densité. De plus, ils étirent les éléments dans la direction du choc. Les résultats illustrés dans l'article montrent une interface qui n'est pas très bien maillée à notre sens. Le maillage contient des « trous de raffinement » à l'emplacement du choc.

Inspirés des estimateurs d'erreur par résolution de problèmes locaux des problèmes elliptiques, Strouboulis et Oden (1990) et Zaki (1993) (voir aussi Pelletier et al., 1994) utilisent la même astuce pour les équations hyperboliques, à l'aide de la méthode de Galerkin discontinue. L'estimation de l'erreur revient donc à transporter l'erreur commise en amont de l'écoulement. Cette approche semble particulièrement naturelle lorsqu'on utilise déjà cette discrétisation pour résoudre l'équation de transport. Dans notre cas, cette approche impose l'implémentation d'un autre résoluteur d'équation hyperbolique.

Le développement de cet estimateur d'erreur est similaire à celui présenté à la section 3.2.2. Dans ce cas, on veut résoudre le problème:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u} \cdot \nabla F &= 0 \qquad \text{dans } \Omega\,; \\ F &= F_{\Gamma_-} \quad \text{sur } \Gamma_-\,. \end{aligned}$$

De façon similaire à ce qui a été fait précédemment, on considère la forme faible obtenue de la méthode de Galerkin discontinue. On y remplace l'expression $F = F_h + e$ et on discrétise la forme faible résultante pour obtenir

$$(\boldsymbol{u} \cdot \nabla e_h \,, \varphi_h)_{0,\mathrm{K}} - ((\boldsymbol{u} \cdot \mathbf{n}_\mathrm{K})\, e_h^+ \,, \varphi_h)_{0,\Gamma_-(\mathrm{K})} =$$

$$-(\boldsymbol{u} \cdot \nabla F_h \,, \varphi_h)_{0,\mathrm{K}} + ((\boldsymbol{u} \cdot \mathbf{n}_\mathrm{K})\,(F_h^+ - F_h^-)\,, \varphi_h)_{0,\Gamma_-(\mathrm{K})} - ((\boldsymbol{u} \cdot \mathbf{n}_\mathrm{K})\, e_h^- \,, \varphi_h)_{0,\Gamma_-(\mathrm{K})}\,,$$

où e_h et les fonctions tests φ_h sont éléments de

$$\mathcal{E}_h(\Omega) = \left\{\varphi \in L^2(\Omega) \mid \boldsymbol{u} \cdot \nabla\varphi|_\mathrm{K} \in L^2(\Omega) \text{ et } \varphi|_\mathrm{K} \in \mathcal{P}_k(\mathrm{K})\,, \mathrm{K} \in \Omega_h\right\}.$$

3.4 Notes et bibliographie

Une partie de la revue de littérature de ce chapitre est basée sur les travaux de Hétu (1991), qui fait une revue exhaustive des recherches faites sur les méthodes adaptatives et sur ceux de Zaki (1993) qui s'est concentré sur les méthodes adaptatives pour la résolution de l'équations de transport.

Ainsworth et Oden (1997) ont récemment fait une revue de l'état des connaissances sur l'estimation d'erreur a posteriori. On y fait remarquer que la recherche sur les estimateurs d'erreur a posteriori est à maturité et que les travaux se portent maintenant vers la stabilisation des connaissances établies. On en est également rendu à faire ressortir les parallèles entre les différents estimateurs d'erreur (Zhu, 1997).

Quoique basée sur une idée intuitive, l'estimation d'erreur par projection a été appuyée par une série d'études théoriques, donnant une base mathématique plus solide à la technique (Ainsworth et al., 1989; Zhang et Zhu, 1995, 1998).

CHAPITRE 4

LES ALGORITHMES DE LOCALISATION D'INTERFACE

Il est bien connu que les écoulements multifluides se retrouvent dans plusieurs applications industrielles. Leur modélisation demande l'utilisation d'algorithmes spécialisés pour trouver de façon précise la position, inconnue a priori, des surfaces libres. Les approches utilisées sont diverses, comme en font foi les articles de synthèse de Floryan et Rasmussen (1989), de Benson (1992), ainsi que la série de communications de Kothe et Rider (Kothe et Rider, 1995a,b; Rider et Kothe, 1995b; Kothe, 1997), qui font une revue critique de la vaste littérature sur le sujet. La modélisation numérique des écoulements à surfaces libres est cependant loin d'être maîtrisée. On peut aussi constater que la majorité des simulations d'écoulements à surfaces libres se font dans le cadre des méthodes de différences finies et de volumes finis.

Plusieurs difficultés peuvent survenir lors de la modélisation d'écoulements multiphases. Les équations qui régissent les écoulements incompressibles sont souvent non linéaires. Les conditions aux limites à l'interface sont aussi non linéaires et font intervenir le tenseur des contraintes. Le domaine occupé par chaque fluide est irrégulier et sa topologie évolue dans le temps. Celui-ci peut être simplement connexe, non simplement connexe, ou passer d'un état à l'autre. Une bonne précision quant à la position et à la définition de la surface libre est nécessaire pour modéliser la tension superficielle, ou tout autre phénomène physique localisé à l'interface. La discrétisation doit être assez fine à l'interface pour être en mesure de bien y évaluer les paramètres physiques, quantités qui sont souvent discontinues. La vorticité de l'écoulement près d'une interface peut être importante. Les instabilités de Rayleigh-Taylor et de Richtmeyer-Meshkov sont des exemples classiques de tels écoulements. Un contact entre interfaces peut causer des problèmes de modélisation. Quoique l'état des connaissances de la physique interfaciale n'est pas encore complet et que les conditions d'existence et d'unicité des solutions de problème à surface libre ne sont pas claires, plusieurs solutions numériques ont été trouvées, ce qui porte à croire que ces problèmes sont bien posés (Floryan et Rasmussen, 1989).

Les différentes techniques de recherche d'interface peuvent être classées en trois grandes familles, soit les méthodes eulériennes, les méthodes lagrangiennes et les méthodes mixtes. Le champ d'étude étant trop vaste pour être en mesure d'en faire une revue exhaustive, un survol des pricipales stratégies est présenté. Un effort est fait afin de faire ressortir les avantages et inconvénients des différentes approches. Sont aussi abordés les quelques travaux traitant de l'adaptativité et des algorithmes de mise-à-jour d'interface.

4.1 Les méthodes eulériennes

Ce qui caractérise l'approche eulérienne est que l'interface est *capturée* sur un maillage fixe, ou sur un maillage se déplaçant indépendamment du fluide. La discontinuité qu'est la surface libre est remplacée par une région de transition qui, on le souhaite, sera de l'ordre de $\mathcal{O}(h)$. Les méthodes eulériennes furent les premières à être utilisées pour modéliser les écoulements multifluides et sont donc plus éprouvées. Ce sont encore les plus utilisées. Les principales techniques de capture d'interface sont présentées dans les sous-sections qui suivent, en tentant de faire ressortir l'évolution qui a mené aux approches populaires utilisées aujourd'hui.

4.1.1 Les méthodes de fractions de volume

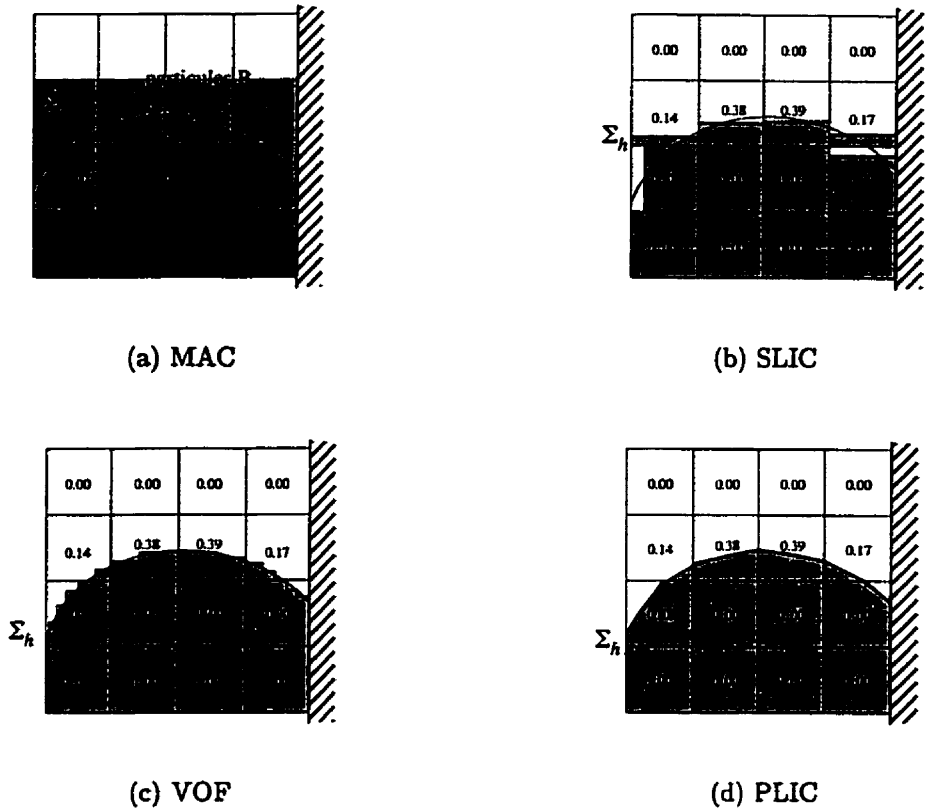
Les *méthodes de fractions de volume* (« fraction of a cell ») procèdent en reconstruisant l'interface, élément par élément, en se basant sur la valeur de la fraction de volume occupée par un fluide dans l'élément courant. La fraction de volume est égale à 1 si l'élément est rempli du fluide en question, elle est égale à 0 si l'élément ne contient pas ce fluide et prend une valeur entre 0 et 1 si une interface est présente dans cet élément.

La procédure pour propager une surface libre dans un domaine de calcul se résume comme suit. Connaissant la position initiale de l'interface, les fractions de volume de chaque élément sont calculées et leur position à l'intérieur de chaque élément est déterminée. On délaisse donc la connaissance de la position exacte de l'interface

pour l'information sur les fractions de volume. Les volumes de fluide évoluent alors d'un élément à l'autre, transportés par le champ de vitesse obtenu de la résolution des équations de conservation. Ceci est fait à l'aide d'une méthode de volumes finis, où la résolution de l'équation de transport se fait sous forme conservative. Le but est d'obtenir une méthode *conservant la masse de la façon la plus précise possible.* Lorsque la position de l'interface doit être déterminée de façon explicite, on interrompt le transport des volumes de fluide. Un algorithme de reconstruction parcourt alors les éléments contenant l'interface ($0 <$ volume < 1) et détermine où sera positionnée la surface libre dans l'élément à l'aide de l'information sur sa fraction de volume. L'interface résultante, qui n'est pas nécessairement continue, dépend de l'algorithme de reconstruction choisi. C'est surtout au niveau des algorithmes de reconstruction que les méthodes de fractions de volume se différentient.

La *méthode MAC* (« marker and cell ») (Harlow et Welch, 1965) peut être vue comme l'algorithme de reconstruction le plus rudimentaire que l'on peut rencontrer. Cette méthode n'est cependant pas une méthode fraction de volume. Nous en reparlerons plus en détail à la section 4.3.2. Il reste qu'elle semble naturelle, étant donné l'analogie moléculaire. Des particules numériques associées à chaque fluide sont initialement distribuées dans le domaine de calcul et sont transportées par le champ de vitesse de chaque fluide. L'interface est reconstruite en considérant les éléments qui contiennent des particules et qui sont voisins à des éléments qui n'en contiennent pas. L'interface est donc l'union de ces éléments, tel qu'illustré à la figure 4.1(a). L'interface théorique se trouve quelque part dans cette interface grossière. Mais comme il sera mentionné plus en détail plus loin, les méthodes de particules sont coûteuses. C'est pourquoi on leur préfère le concept de fractions de volume, beaucoup plus abordable d'un point de vue du coût de calcul.

La *méthode SLIC* (« simple line interface calculation ») (Noh et Woodward, 1976) utilise le concept de fractions de volume, avec un algorithme de reconstruction d'interface rudimentaire. Le but de Noh et Woodward était de construire un outil numérique pour traiter facilement les écoulements multifluides, à faibles coûts. Grosso modo, l'interface élémentaire est reconstruite à l'aide de droites parallèles aux côtés des éléments et normales à la direction de transport des volumes de fluide. Certains post-traitements peuvent être faits selon la « saveur » de l'implémentation.



(a) MAC

(b) SLIC

(c) VOF

(d) PLIC

Figure 4.1 Divers algorithmes de reconstruction d'interface dans le cadre de l'utilisation des méthodes de fractions de volume

Une situation où une interface numérique a été reconstruite à l'aide de l'algorithme SLIC, ainsi que les fractions de volume de fluide de chaque élément, sont illustrées à la figure 4.1(b).

Malgré l'imprécision apparente induite par cet algorithme de reconstruction, la méthode est toujours très populaire (Kothe et Rider, 1995a), surtout à cause de son faible coût. Mais pour des problèmes demandant une meilleure définition de la surface libre, des alternatives ont été proposées. Une des plus connue est la *méthode VOF* (« volume of fluid ») de Hirt et Nichols (1981), qui proposent un algorithme de reconstruction plus évolué. Il est intéressant de noter que même si la méthode VOF est une technique de capture d'interface bien précise, l'acronyme VOF est souvent associé à toute la famille des méthodes de fractions de volume de fluide et même aux méthodes eulériennes en général. Plutôt que de construire une

structure de données contenant les fractions de volume de chaque élément, Hirt et Nichols définissent plutôt une variable, définie sur tout le domaine de calcul, qui représente le volume de fluide présent dans chaque élément. Cette façon de procéder a l'avantage de permettre d'identifier l'orientation de l'interface. L'algorithme de reconstruction produit toujours une interface avec des segments parallèles aux axes de référence, mais permet des changements de direction dans un élément, ce qui donne une surface libre en forme d'escalier, tel qu'illustré à la igure 4.1(c). On observe donc une meilleure définition de la surface ibre qu'avec la méthode SLIC. Mashayek et Ashgriz (1995b) ont utilisé la méthode VOF vec une discrétisation par éléments finis des équations de conservation.

« Au sommet de la pyramide » des méthodes de fractions de volume, on retrouve la méthode PLIC (« piecewise linear interface calculation ») introduite par Youngs (1982). L'algorithme de reconstruction utilise des segments linéaires par élément, tel qu'illustré à la figure 4.1(d). La position de chaque segment de droite est déterminée en se basant sur la géométrie de l'élément, sur le gradient de sa fraction de volume et sur des considérations de conservation de la matière. Étant donné la grande précision de la méthode, elle est rapidement devenue très populaire. Elle a été généralisée pour des maillages non structurés tridimensionnels (Kothe et al., 1994). Il reste que cet algorithme de reconstruction est le plus complexe de ceux qui ont été présentés dans cette section et la méthode est par conséquent la plus difficile à implémenter.

4.1.2 La méthode de la pseudo-concentration

La reconstruction d'interface, dans le cadre des méthodes de fractions de volume, n'est pas triviale à implémenter étant donné la grande quantité de cas particuliers à traiter. Afin d'éviter ces efforts d'implémentation que nous jugeons trop importants, il semble intéressant de laisser tomber le concept de fraction de volume, pour considérer plutôt une variable générique F, inspirée de la fonction servant à obtenir les fractions de volume de la méthode VOF. Il s'agit de la *pseudo-concentration*. La *méthode de la pseudo-concentration* (Thompson, 1986), plutôt que de reconstruire la surface libre de façon explicite, se base sur une isovaleur de la pseudo-

concentration F pour capturer une interface. Donc, dans le cas de la méthode des éléments finis, les fonctions d'interpolation servent à déterminer la géométrie de l'interface, ainsi que sa position dans le domaine de calcul.

La méthode, présentée brièvement à la section 1.3, consiste donc à définir une variable générique, la pseudo-concentration F, qui servira à déterminer où se trouve chaque fluide dans le domaine de calcul. Les discontinuités de F permettent alors d'identifier la position des surfaces libres. Par exemple, dans le cas d'un écoulement triphasique, on définirait la pseudo-concentration comme:

$$F(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \boldsymbol{x} \in \text{fluide } 1\,; \\ \frac{1}{2} & \text{si } \boldsymbol{x} \in \text{fluide } 2\,; \\ 0 & \text{si } \boldsymbol{x} \in \text{fluide } 3\,. \end{cases}$$

L'équation de transport de la pseudo-concentration est résolue sur le domaine de calcul afin d'y propager l'*identité* des différents fluides en écoulement. L'utilisation d'une méthode d'éléments finis appropriée, telle une méthode stabilisée ou une méthode de Galerkin discontinue, est nécessaire étant donné la nature hyperbolique de l'équation de transport. Les surfaces libres sont alors capturées en identifiant les valeurs de $\boldsymbol{x}$ pour lesquelles $F(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{4}$ et $F(\boldsymbol{x}) = \frac{3}{4}$, soit les valeurs prises par la pseudo-concentration au centre des discontinuités (cf. figure 4.2). Au lieu que

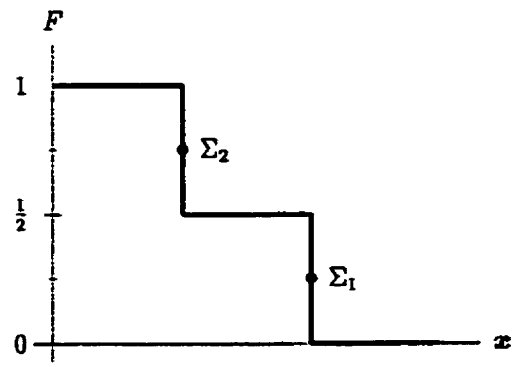


Figure 4.2 Capture de deux interfaces à l'aide de la pseudo-concentration

ce soit le résoluteur qui capture explicitement les surfaces libres, on utilise plutôt les capacités du programme de visualisation, qui soutire cette information de la solution de l'équation de transport en F.

La méthode de la pseudo-concentration a l'avantage de nous permettre d'utiliser la méthodologie des éléments finis, qui est générale et bien maîtrisée. La qualité de la représentation géométrique de l'interface dépend du type d'élément utilisé. Des éléments quadratiques nous permettent d'avoir une interface régulière. L'utilisation de maillages non structurés ne complique pas l'algorithme, qui reste exactement le même, contrairement aux méthodes de fractions de volume. Le transport d'une fonction discontinue cause plusieurs problèmes numériques tels les oscillations non physiques et la diffusion de la zone de transition. De plus, si aucun post-traitement approprié n'est appliqué, la méthode de conserve pas la matière.

4.1.3 La méthode des lignes de niveau (« Level Set Method »)

L'interface étant une région de discontinuité des propriétés physiques entre deux fluides, certains auteurs ont tenté d'utiliser des shémas de capture de choc pour localiser cette discontinuité qu'est la surface libre. Les limiteurs de flux, qui servent à préserver la monotonicité et qui sont présents dans les méthodes de différences finies décentrées, créent beaucoup de diffusion numérique, ce qui entraîne que l'interface n'est pas définie de façon précise (Rider et Kothe, 1995b; Kothe et Rider, 1995b). Une tentative pour remédier à ce problème a été proposée par Sussman et al. (1994) sous la forme de la *méthode des lignes de niveau* (« level set method »).

Une fonction distance signée ϕ est définie:

$$\phi(\boldsymbol{x}) \begin{cases} < 0 & \text{si } \boldsymbol{x} \in \text{fluide } 1\,; \\ = 0 & \text{si } \boldsymbol{x} \in \text{interface}\,; \\ > 0 & \text{si } \boldsymbol{x} \in \text{fluide } 2\,. \end{cases}$$

Les valeurs prises par la fonction distance sont toujours transportées par une équation de transport, en ϕ dans le cas présent, que Sussman et al. résolvent avec un shéma de type Godunov, qui préserve la monotonicité. Après quelques pas de temps, ϕ n'est plus une fonction distance, *i.e.* $\|\nabla\phi\| \neq 1$. L'idée est donc de réini-

tialiser ϕ de telle sorte que:

$$\begin{cases} \|\nabla\phi\| = 1 \text{ et } \phi > 0 & \text{dans le fluide 2}\,; \\ \phi = 0 & \text{à l'interface}\,. \end{cases} \tag{4.1}$$

Cette mise-à-jour a pour but de faire disparaître la diffusion numérique introduite par le limiteur de flux. Un développement simple nous permet de voir que le respect de la condition (4.1) peut être obtenu par la résolution du problème de transport

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \boldsymbol{\omega}\cdot\nabla\phi = \mathrm{Sgn}(\phi^{n-1}),$$

où

$$\boldsymbol{\omega} = \mathrm{Sgn}(\phi^{n-1})\frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|},$$

avec la condition $\phi = 0$ sur Γ_-, qui se trouve à être la surface libre. Cette équation est cependant difficile à résoudre à l'aide de nos méthodes d'éléments finis. Il a été observé par Rider et Kothe (1995b) que la méthode des lignes de niveau, avec ce procédé de réinitialisation, souffrait de gains ou de pertes de matière pouvant atteindre 10% de la masse totale. D'autres algorithmes de mise-à-jour ont récemment été proposés, mais une étude récente de Keck (1998) a démontré qu'aucun de ceux-ci ne fait vraiment mieux. Il propose cependant une approche géométrique simple de mise-à-jour d'interface, qui semble donner de bons résultats.

Hétu (1999) utilise la méthode des lignes de niveau dans le cadre de la méthode des éléments finis pour modéliser le remplissage de moule. Il utilise un procédé de mise-à-jour local, qui semble similaire à celui proposé par Keck (1998).

4.1.4 Conclusion

L'approche eulérienne, relativement simple à implémenter, permet de modéliser facilement les écoulements multifluides et tridimensionnels. Elle permet de bien modéliser les grandes déformations dans la topologie des surfaces libres. Les écoulements à interfaces multiples, incluant les bris et la coalescence, n'impliquent pas le

traitement de cas particulier. Il est cependant difficile de bien identifier la position précise de la surface libre étant donné l'incertitude reliée à la région de transition. Les conditions à l'interface, comme la tension superficielle, ne peuvent être imposées directement. L'utilisation d'algorithmes spéciaux est nécessaire. Certains auteurs suggèrent l'utilisation d'une méthodologie adaptative pour les problèmes qui demandent une grande précision quant à la position des surfaces libres, tels les problèmes pour lesquels la tension superficielle doit être modélisée (Floryan et Rasmussen, 1989; Kothe et al., 1994). Mais très peu de travaux utilisant les avantages de l'adaptativité des maillages peuvent être retracés dans la littérature. Nous étudierons cette question plus en détail à la section 4.4.1.

4.2 Les méthodes lagrangiennes

L'*approche lagrangienne* est caractérisée par une discrétisation qui évolue avec les fluides en écoulement. Un maillage initial est construit sur le domaine de calcul. Une « couleur » est associée à chaque noeud du maillage afin de pouvoir identifier la position de chaque fluide et par conséquent celle de l'interface. Les équations de conservation sont résolues pour chaque fluide. Puisque nous nous situons dans un référentiel lagrangien, les termes de convection des équations de Navier-Stokes (1.2) ne sont pas pris en ligne de compte et seules les conditions naturelles sont prescrites à l'interface, *i.e.* l'équilibre des forces. Une fois le champ de vitesse $\boldsymbol{u}$ calculé, la position de chaque noeud du maillage évolue selon l'expression

$$\boldsymbol{x}^{n+1} = \boldsymbol{x}^n + \Delta t\, \boldsymbol{u}^n. \tag{4.2}$$

Puis on résout à nouveau les équations de conservation sur le nouveau maillage et ainsi de suite. Certains utilisent une représentation paramétrique de l'interface, se limitant ainsi à des écoulements spécifiques.

L'utilisation de méthodes lagrangiennes pour la modélisation des écoulements multiphases est assez récente. Un des avantages de cette stratégie est l'imposition facile et directe des conditions à l'interface, telle la tension superficielle. Un autre avantage est que les équations de conservation sont résolues pour chaque fluide, ce qui

n'entraîne aucune incertitude dans l'évaluation des propriétés physiques près de l'interface. Aucune diffusion numérique n'est induite par cette stratégie. La méthode est très précise lorsque la surface libre n'est soumise qu'à de petits déplacements. D'un autre côté, la méthode nécessite plus de ressources, surtout pour les écoulements complexes. Une lourdeur d'implémentation accompagne l'utilisation de cette stratégie, surtout si on veut développer une méthodologie générale. Un résoluteur par éléments finis flexible est nécessaire pour résoudre les équations de conservation sur des maillages arbitraires. Certains écoulements entraînant de grandes déformations de l'interface peuvent être modélisés de façon imprécise. Le traitement d'une surface libre venant en contact avec une paroi solide est délicat. De plus, les écoulements qui forcent les surfaces libres à s'entrecouper, ou à se scinder, sont très difficiles, sinon impossibles à modéliser. Le déplacement des noeuds cause une dégradation du maillage, avec une apparition d'éléments pathologiques si aucun mécanisme de mise-à-jour n'est utilisé. Une alternative permettant de solutionner ce problème est proposée par les méthodes mixtes lagrangiennes-eulériennes, exposées à la section 4.3.1. Ces dernières étant plus robustes que les méthodes lagrangiennes « pures », elles sont plus populaires, ce qui fait qu'on ne retrouve pas beaucoup d'exemples de leur utilisation dans la littérature. Des exemples d'application de cette approche, utilisée dans le cadre de la modélisation numérique de remplissage de moule, peuvent être trouvés dans les travaux de Bach et Hassager (1985) et de Elkaïm et al. (1992).

4.3 Les méthodes mixtes

Les *méthodes mixtes lagrangiennes-eulériennes* prennent plusieurs formes. L'idée de base derrière ces méthodes est toutefois toujours la même, *i.e.* l'utilisation de deux discrétisations, soit une eulérienne (un maillage fixe) et une lagrangienne (un maillage mobile). Le maillage eulérien est utilisé pour discrétiser le champ de vitesse. La représentation lagrangienne sert à transporter l'identité de chaque fluide. Les deux formes les plus « populaires » sont probablement les méthodes de type ALE et les méthodes de particules.

4.3.1 La méthode ALE

Les méthodes basées sur la *stratégie ALE* (« arbitrary Lagrangian-Eulerian ») résolvent le problème de la déformation des éléments des méthodes purement lagrangiennes en remaillant la phase lagrangienne au besoin. L'information du vieux maillage est interpolée sur le nouveau maillage plus régulier, puis les noeuds du nouveau maillage sont transportés à leur tour par le champ de vitesse.

On retrouve dans cette approche les avantages des méthodes lagrangiennes, sans avoir des éléments très déformés puisque nous pouvons, à la limite, mettre à jour le maillage lagrangien à chaque pas de temps. Cependant l'interpolation, souvent linéaire pour simplifier le processus, introduit de la diffusion numérique. Des implémentations classiques de cette approche sont présentées dans les travaux de Ramaswamy (1990), de Bellet et Chenot (1993) et de Soulaïmani et al. (1991) pour ce qui est des problèmes tridimensionnels.

Une implémetation particulière de l'approche ALE a été introduite par Unverdi et Tryggvason (1992b,a), dans le cadre de la simulation de la dynamique des bulles et des gouttelettes. Le champ de vitesse est calculé sur un maillage régulier eulérien, alors que la position de la surface libre est représentée par un maillage lagrangien d'une dimension inférieure au maillage eulérien. Dans le cas d'une simulation tridimensionnelle, le maillage de référence est constitué d'éléments volumiques, alors que le maillage de la surface libre est représenté par des éléments surfaciques.

4.3.2 Les méthodes de particules

La stratégie des *méthodes de particules* consiste à représenter chaque fluide de l'écoulement par un ensemble de particules numériques. Ces particules, convectées par le champ de vitesse du fluide, transportent l'identité de chaque fluide. On détermine d'abord, de façon arbitraire, la quantité et la position initiale des particules dans le domaine de calcul. L'information rattachée à chaque particule est interpolée sur un maillage eulérien, utilisé pour résoudre les équations de conservation afin d'obtenir le champ de vitesse de chaque fluide. Les particules sont transportées

à l'aide de l'expression (4.2). Puis on interpole à nouveau les informations sur le maillage eulérien, puis on résout les équations de conservation. Les méthodes MAC (Harlow et Welch, 1965) et PIC (« particle in cell ») (voir Harlow, 1988, pour ce qui est de l'évolution de la méthode PIC) sont les plus connues. Des développements récents peuvent être trouvés dans Brackbill (1988) et Rider et Kothe (1995a).

La phase d'initialisation de la méthode contient une part d'arbitraire. La grande quantité de particules à transporter en fait une méthode coûteuse, mais elle nous permet d'obtenir une précision arbitrairement grande. Certains auteurs utilisent le résultat obtenu d'une méthode de particules comme solution de référence, ou solution « quasi-analytique » (Rider et Kothe, 1995b). Selon les caractéristiques de l'écoulement, les particules peuvent s'accumuler dans certaines régions du domaine, entraînant une perte de précision dans les régions mal représentées.

4.4 Les méthodes adaptatives et la localisation d'interface

Même si les avantages que pourraient amener les méthodes adaptatives aux écoulements multiphases sont reconnus (Floryan et Rasmussen, 1989; Kothe et al., 1994), peu de résultat sont disponibles. Parmi les quelques rares exemples que l'on retrouve dans la littérature, Puckett et Saltzman (1992) utilisent la méthode PLIC avec l'approche AMR (« adaptive mesh refinement »), couramment utilisée en différences finies. Jeong et Yang (1998) utilisent aussi la technique AMR avec la méthode VOF, où les équations de conservation sont résolues avec la méthode des éléments finis.

Pour ce qui est de la méthode des éléments finis, la plupart des travaux sur l'adaptativité des maillages se retrouve de façon implicite dans le cadre des méthodes lagrangiennes. Une redisposition des noeuds à proximité de l'interface permet de mieux localiser la discontinuité. Une technique de raffinement local (subdividion d'éléments) peut être jointe à cette stratégie (Tsiveriotis et Brown, 1993). Une autre approche est d'adapter le maillage par rapport aux variations de vitesse et de pression, afin d'avoir une meilleure approximation du champ de vitesse et par conséquent un transport plus précis (Zienkiewicz et Huang, 1989).

4.4.1 La capture adaptative d'interface

La méthodologie adaptative présentée au chapitre 3 ne raffine pas toujours adéquatement les maillages pour le calcul de la physique interfaciale. Il peut arriver que l'on se retrouve avec des éléments qui ne sont pas de taille uniforme le long des surfaces libres, résultant en de la diffusion numérique non désirée. Cette diffusion est aussi la cause de ces problèmes de déraffinement. Ce comportement est caractéristique des écoulements allant d'amont en aval du domaine de calcul. Plus on s'éloigne de l'amont de l'écoulement, plus le raffinement est diffus. Les écoulements concernés sont donc ceux pour lesquels les interfaces ne sont pas refermées, que l'on retrouve dans les problèmes de coextrusion ou de jet.

Nous proposons donc, en complément à la méthodologie adaptative classique, une procédure de raffinement à l'interface qui ne souffre pas, ou peu, de diffusion numérique. C'est ce que nous appelons la *capture adaptative d'interface*, puisque seul le saut en pseudo-concentration sert à déterminer la région où le maillage a besoin d'être raffiné.

À chaque cycle adaptatif, une taille prédéterminée δ_Σ est imposée dans la région de transition de la variable transportée définissant la surface libre, alors qu'une valeur arbitrairement grande est spécifiée ailleurs. Cette distribution de taille est considérée au même titre que les autres lorsque viendra le temps de déterminer la distribution de taille globale (cf. section 6.4). Une stratégie qui semble toujours bien fonctionner est de prendre comme taille à l'interface au cycle adaptatif $(n+1)$, la taille utilisée au cycle n multipliée au taux de réduction de l'erreur ξ utilisé avec l'opérateur de transition (cf. section 3.1.4). Mais on pourrait utiliser n'importe quel facteur de réduction.

On obtient ainsi un maillage bien raffiné dans la région de transition de la pseudo-concentration, sans « poche » ni « trou », ce qu'on peut voir avec plusieurs estimateurs d'erreur conçus pour les problèmes de transport. Le coût d'une telle technique est négligeable.

4.5 Les techniques de mise-à-jour

Il est relativement facile de concevoir une méthode lagrangienne conservant la quantité de matière transportée. Il en est de même pour les méthodes de fractions de volume. Ce n'est malheureusement pas le cas pour les méthodes eulériennes basées sur une variable transportée, telles les méthodes des lignes de niveau et de pseudo-concentration. Donc rien, a priori, ne peut nous assurer que chaque fluide, en début de simulation, va être présent en même quantité en fin de simulation. Il faut donc faire appel à des algorithmes de mise-à-jour d'interface qui s'assureront que la matière est conservée.

Malheureusement, ces algorithmes sont peu nombreux, même si les problèmes de mise-à-jour d'interface sont bien connus chez les utilisateurs de la méthode des éléments finis (Thompson, 1986; Dhatt et al., 1990; Codina et al., 1994; Hétu et al., 1995). À la limite, si on fait exception des méthodes de fractions de volume, les utilisateurs des différences finies font face aux mêmes difficultés.

Thompson (1986) propose une méthode qui a été implémentée par différents auteurs, sans grand succès (cf. les auteurs cités au paragraphe précédent). Elle consiste à réinitialiser, à chaque pas de temps, la pseudo-concentration à l'aide de l'expression

$$F(\boldsymbol{x}) = F_c + AL(\boldsymbol{x}),$$

où F_c est l'isovaleur déterminant la position de la surface libre, soit $\frac{1}{2}$ dans notre cas, A est la pente de la région de transition reconstruite, et L est la distance entre le point où $F = F_c$ et les extrémités de la région de transition. Cette région de transition reconstruite sera donc linéaire. Cette façon de procéder n'a pas pour but de s'assurer que la matière est conservée, mais sert plutôt à limiter la déformation de la fonction de pseudo-concentration, ce qui est d'intérêt plus limité.

Les seules autres techniques de mise-à-jour que nous connaissons sont celles développées pour la méthode des lignes de niveau, décrites à la section 4.1.3.

On peut donc conclure qu'il y a un réel besoin pour de tels algorithmes et qu'il serait important pour les utilisateurs des méthodes basées sur le transport d'une variable générique de se sensibiliser à cette problématique. Car, dans l'état actuel de la situation, on ne peut que constater de façon passive si notre suivi d'interface, pour un problème donné, a conservé ou non la matière. Mais les techniques de Keck ou de Hétu, citées à la section 4.1.3, semblent assez facile à implémenter, ce qui nous permet de dire qu'on devrait s'y intéresser.

CHAPITRE 5

LA MODÉLISATION NUMÉRIQUE DE LA TENSION SUPERFICIELLE

Parmi les conditions à l'interface décrites à la section 1.2, on retrouve l'équilibre des forces (1.10), qui tient compte de la manifestation de la tension superficielle. Les méthodes lagrangiennes sont populaires pour modéliser les écoulements multiphases sujets à l'influence de la tension superficielle puisque l'imposition de l'équilibre des forces à l'interface est directe. Cependant, peu de travaux ont été faits pour ce type d'écoulement dans un contexte eulérien, à l'aide de la méthode des éléments finis. Mais étant donné les nombreux avantages associés à l'utilisation d'une stratégie de capture d'interface pour modéliser les écoulements multifluides complexes, il semble justifié de déployer les efforts requis pour modéliser correctement la force capillaire.

Après un bref rappel de la physique associée à la tension superficielle, les différentes formulations candidates pour modéliser numériquement la force capillaire sont présentées.

5.1 La tension superficielle

L'écoulement de deux fluides non miscibles peut être influencé par un comportement interfacial qui peut être comparé à la présence d'une membrane élastique séparant ces fluides. Ce comportement est causé par l'attraction intermoléculaire entre les molécules de même nature, soit les forces de van der Waals, et est connu sous le nom de *tension superficielle*. Un exemple classique auquel *on a tous été confronté* est celui de l'huile et de l'eau. Comme il est illustré à a figure 5.1, la tension superficielle a pour effet d'incurver la surface libre, ceci s'accompagnant d'un saut en pression, celle-ci étant plus élevée du côté concave de la surface libre. Il s'agit de la emphpression capillaire. La force responsable de la tension superficielle est connue sous le nom de *force capillaire* et agit en direction normale à la surface libre.

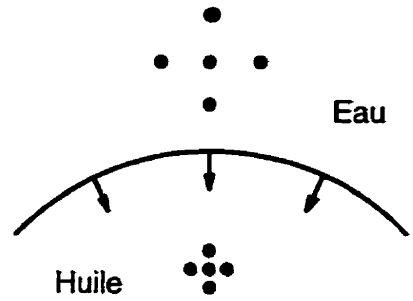


Figure 5.1 La tension superficielle

Une foule d'écoulements est régie par la tension superficielle. Que ce soit le ménisque formé par un fluide dans une éprouvette, ou une goutte d'eau qui repose sur une surface solide, les effets de la force capillaire nous entourent. Puisque la tension superficielle a pour effet de modifier la topologie des surfaces libres, sa manifestation peut aussi avoir un impact sur les écoulements industriels. Si nous négligeons la tension superficielle dans un modèle numérique et que nous nous basons sur ces résultats pour prendre des décisions au niveau des paramètres d'opération, on risque de se retrouver avec des pièces qui ne sont pas produites selon les spécifications, ou pire, qui souffrent de défauts de fabrication. Et c'est sans parler des procédés industriels qui dépendent de la tension superficielle, tels les procédés de couchage ou l'impression à jets d'encre.

À chaque paire de fluides immiscibles est associé un *coefficient de tension superficielle*, que nous noterons α et qui a comme unités une force par unité de longueur. Il caractérise l'amplitude de la force capillaire entre ces fluides. Une expression, due à Laplace[1], permet de relier le coefficient de tension superficielle au saut de pression lorsque l'écoulement est au repos. En effet, soit une goutte d'un fluide, dans un autre fluide au repos. Comme l'énergie superficielle est proportionnelle à l'aire de la surface, la force capillaire engendrera un écoulement qui aura pour effet d'amener la goutte à se contracter et à prendre une forme qui minimisera l'aire, soit une sphère. À l'état tationnaire, nous devrions retrouver la *loi de Laplace*,

$$p_1 - p_2 = \alpha\,\kappa, \tag{5.1}$$

1. Ou à Young et Laplace chez les anglo-saxons.

où κ est la courbure de la surface libre, qui peut être exprimée comme

$$\kappa = \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right),$$

où R_1 et R_2 sont les rayons de courbure principaux de la surface libre. L'expression (5.1) sera à la base de nos efforts de vérification de la méthodologie numérique utilisée pour modéliser la tension superficielle. Les résultats seront présentés au chapitre 7.

5.2 Les modèles numériques

Il a été mentionné au chapitre 4 que l'imposition de l'équilibre des forces (1.10) et par conséquent la modélisation de la tension superficielle, n'est pas aussi « simple » dans un contexte eulérien que lagrangien. Ceci est dû au fait que la position de l'interface n'est pas connue de façon explicite, mais via les valeurs prises par une variable transportant l'identité des fluides. Qu'il s'agisse de volumes de fluide, d'une fonction distance ou d'une fonction de pseudo-concentration, la surface libre est comprise dans une région de transition dans laquelle la physique interfaciale agit. Considérer l'interface comme une région de transition n'est pas irréaliste d'un point de vue physique. En effet, on sait que les caractéristiques physiques des fluides varient dans une petite zone de mélange de l'ordre de 100 nm ou moins (Probstein, 1989).

Brackbill et al. (1992) ont proposé de considérer la force capillaire, qui est un phénomène surfacique, comme une force volumique agissant dans la région de transition héritée de la méthode de capture d'interface. Il s'agit de la méthode « continuum surface force » (CSF), développée dans le cadre des méthodes de fractions de volume. Quelques variantes ont récemment été proposées. Ces dernières semblent plus intéressantes du point de vue des éléments finis puisqu'il est possible de réduire l'ordre des dérivées présentes dans la forme faible du terme de force capillaire volumique par intégration par parties.

5.2.1 La méthode CSF

Tel que mentionné précédemment, la méthode CSF consiste à approximer la force capillaire interfaciale $\boldsymbol{f}_{\mathrm{S}}$, définie sur une unité de surface $\Delta\mathrm{S}$, par une force capillaire volumique $\boldsymbol{f}_{\mathrm{V}}$, dans une région de transition volumique $\Delta\mathrm{V}$. Cette force volumique est définie de telle sorte que lorsque la taille des mailles devient très petite, on récupère la force interfaciale (cf. figure 5.2), ou formellement

$$\lim_{h\to 0}\int_{\Delta\mathrm{V}} \boldsymbol{f}_{\mathrm{V}}\, d\mathrm{V} = \int_{\Delta\mathrm{S}} \boldsymbol{f}_{\mathrm{S}}\, d\mathrm{S}.$$

La force capillaire volumique $\boldsymbol{f}_{\mathrm{V}}$ peut alors être incluse dans les équations de

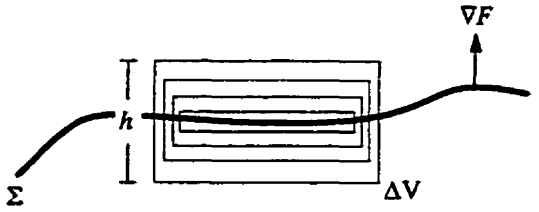


Figure 5.2 Le modèle CSF

Navier-Stokes (1.2) pour donner

$$\rho(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{f}_{\mathrm{V}}.$$

L'influence de la force capillaire,

$$\boldsymbol{f}_{\mathrm{S}}(\boldsymbol{x}) = \alpha\,\kappa\,\mathbf{n}_{\Sigma}\,\delta_{\mathrm{S}},$$

est alors étendue à la région de transition $\Delta\mathrm{V}$ pour donner le terme de force volumique $\boldsymbol{f}_{\mathrm{V}}$ proposé par Brackbill et al.,

$$\boldsymbol{f}_{\mathrm{V}}(\boldsymbol{x}) = \alpha\,\kappa(F)\,\boldsymbol{\nabla}F(\boldsymbol{x}), \tag{5.2}$$

où la définition de la normale à l'interface est étendue à la région de transition à

l'aide de la pseudo-concentration,

$$\mathbf{n}_\Sigma \simeq \frac{\nabla F}{\|\nabla F\|}.$$

Il en est de même pour le delta de Dirac à l'interface δ_S qui est approximé par $\|\nabla F\|$. La courbure locale de la surface libre est approximée à l'aide de l'expression (Weatherburn, 1927)

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n}_\Sigma \simeq -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla F}{\|\nabla F\|} \right). \tag{5.3}$$

D'un point de vue numérique, l'évaluation de la courbure, à l'aide de l'expression (5.3), est délicate. En effet, celle-ci fait intervenir le calcul de dérivées secondes. Mais il n'est pas possible de réduire l'ordre de ces dérivées en intégrant par parties la forme faible du terme de force capillaire volumique. Des précautions particulières devront donc être prises.

5.2.2 L'approche du tenseur de pression capillaire

Lafaurie et al. (1994) ont développé, toujours dans le cadre des méthodes de fractions de volume, une formulation équivalente à l'expression (5.2). En définissant le *tenseur de pression capillaire*

$$\boldsymbol{\Upsilon} = -\alpha \left(\mathbf{I} - \mathbf{n}_\Sigma \otimes \mathbf{n}_\Sigma \right) \delta_S,$$

ils montrent que le terme de force capillaire $\boldsymbol{f}_S$ peut être écrit comme

$$\boldsymbol{f}_S(\boldsymbol{x}) = \alpha \kappa \mathbf{n}_\Sigma \delta_S = -\nabla \cdot \boldsymbol{\Upsilon}.$$

Pour obtenir la force volumique il reste, comme pour la méthode CSF, à étendre la définition de $\boldsymbol{f}_S$ à ΔV pour obtenir

$$\boldsymbol{f}_V(\boldsymbol{x}) = \nabla \cdot \left[\alpha \left(\mathbf{I} - \frac{\nabla F}{\|\nabla F\|} \otimes \frac{\nabla F}{\|\nabla F\|} \right) \|\nabla F\| \right]. \tag{5.4}$$

Du point de vue de la méthode des éléments finis, cette approche nous permettra d'intégrer par parties la forme faible du terme de force capillaire volumique, nous permettant ainsi d'abaisser l'ordre des dérivées à calculer.

5.2.3 L'approche thermodynamique

Jacqmin (1996) propose une formulation alternative à la méthode CSF, en se basant sur une argumentation thermodynamique. Plutôt que de regarder le problème du point de vue de la force capillaire, il considère l'approche équivalente qui consiste à réécrire le coefficient de tension superficielle, qui peut être exprimé comme

$$\alpha = \frac{\partial H}{\partial A},$$

i.e. comme la variation de l'*énergie libre de Helmholtz* H en fonction d'une unité d'aire de la surface libre. Mais en pratique, la formulation de Jacqmin se réduit au résultat de Lafaurie et al. (5.4). En effet,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{f}_{\mathrm{V}}(\boldsymbol{x}) = & \ \nabla \cdot \left[\alpha \left(\mathbf{I} - \frac{\nabla F}{\|\nabla F\|} \otimes \frac{\nabla F}{\|\nabla F\|} \right) \|\nabla F\| \right] \\ = & -\nabla \cdot \left[\alpha \left(\frac{\nabla F \otimes \nabla F}{\|\nabla F\|} - \|\nabla F\| \mathbf{I} \right) \right], \end{aligned} \tag{5.5}$$

qui est aussi l'expression développée de façon indépendante par Béliveau et al. (1998) dans le but d'être utilisée dans le contexte des éléments finis. Comme pour la formulation de Lafaurie et al., il est possible d'abaisser l'ordre des dérivées de la forme faible par intégration par parties.

5.3 Notes et bibliographie

L'idée derrière la méthode CSF de Brackbill et al. n'est pas nouvelle. En effet, Peskin (1977) modélise numériquement le mouvement des membranes cardiaques, dans un contexte lagrangien-eulérien, en approximant la physique aux parois comme

des phénomènes volumiques. Cette technique est connue sous le nom de « *immersed boundaries method* » .

CHAPITRE 6

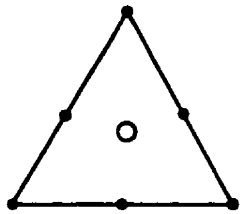
LES STRATÉGIES NUMÉRIQUES

Les différentes stratégies numériques utilisées pour modéliser les écoulements à surfaces libres sont présentées. Dans un premier temps, des considérations générales, inhérentes à l'utilisation d'une stratégie de capture d'interface dans le contexte des éléments finis, sont mentionnées. Suit une présentation de la méthode de résolution découplée des équations modélisant les écoulements à surfaces libres, qui permet l'utilisation de la méthode de Galerkin discontinue pour la résolution de l'équation de transport. Une présentation de l'approche couplée, où les discrétisations stabilisées sont utilisées, est ensuite faite. L'inclusion de la stratégie adaptative dans la méthodologie proposée est finalement présentée.

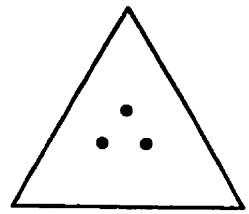
6.1 Considérations générales

Un des buts de cette recherche est l'étude de l'écoulement de polymère dans un contexte industriel. Les polymères étant des fluides incompressibles, ceci mène à la résolution des équations de Navier-Stokes (1.1) et (1.2) pour modéliser leur écoulement. Les effets de la thermique sont étudiés pour les écoulements stratifiés (cf. chapitre 8), ce qui nous amène dans ce cas à résoudre l'équation de conservation de l'énergie (1.3). La résolution se fait en fonction des variables primitives $(\boldsymbol{u}, p, T)$, avec les conditions aux frontières (1.7).

La discrétisation de la vitesse et de la pression, pour tous les problèmes étudiés, se fait à l'aide de l'élément de *Crouzeix-Raviart*, aussi connu comme la combinaison d'éléments P_2^+–P_1. Cette combinaison, illustrée à la figure 6.1, est caractérisée par un champ de vitesse quadratique enrichi d'une bulle et par un interpolant en pression linéaire discontinu. Cet élément est précis d'ordre $\mathcal{O}(h^2)$ et stable, *i.e.* qu'il respecte la condition LBB présentée brièvement à la section 2.2. Il est aussi possible d'opérer une condensation statique de la bulle, ce qui permet d'avoir moins de degrés de



(a) Interpolant en vitesse ($\boldsymbol{u}$)



(b) Interpolant en pression (p)

Figure 6.1 L'élément de Crouzeix-Raviart

liberté dans le système global, sans qu'il y ait perte de précision ou de stabilité. Pour les problèmes thermodépendants, on utilise un élément quadratique continu, illustré à la figure 6.2.

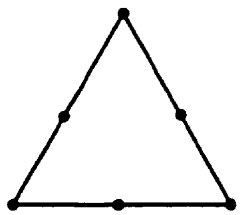


Figure 6.2 Élément utilisé pour la discrétisation de la température (T)

Même si nous modélisons des écoulements multiphases, un seul ensemble d'équation de conservation est résolu sur tout le domaine de calcul discret Ω_h. Ceci est rendu possible grâce à la pseudo-concentration F, qui est utilisée pour évaluer les quantités physiques discontinues à l'interface. Les stratégies entourant le calcul de la pseudo-concentration sont présentées dans les sections qui suivent. Donc, une fois que les régions occupées par chaque fluide sont identifiées à l'aide de la pseudo-concentration F, l'expression

$$\mu(F) = \mu_2 + (\mu_1 - \mu_2)F(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \Omega, \tag{6.1}$$

est utilisée pour évaluer la viscosité, par exemple. On procède de la même façon pour la densité ρ, pour les différents paramètres apparaissant dans les lois de comportement, pour la chaleur massique c_p et pour la conductivité thermique k. Cette

approche a aussi l'avantage de satisfaire implicitement les conditions à l'interface. La continuité de la vitesse tangentielle (1.9) est satisfaite par l'utilisation d'un interpolant en vitesse qui est élément de $H^1(\Omega)$. L'équilibre des forces (1.10), en l'absence de tension superficielle, est satisfaite faiblement via la condition naturelle de l'équation de conservation de la quantité de mouvement de chaque fluide. Si la tension superficielle fait partie du modèle numérique, l'équilibre à l'interface est satisfait faiblement grâce au modèle CSF, présenté à la section 5.2.1. Les mêmes commentaires peuvent être faits au sujet des conditions à l'interface associées à l'équation de l'énergie. Finalement, il a déjà été mentionné à la section 1.3 que la condition d'immiscibilité des fluides en écoulement (1.12) est faiblement équivalente à l'équation de transport (1.14), *i.e.*

$$(\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla} F\,, \varphi)_{0,\Omega} = (\boldsymbol{u} \cdot \mathbf{n}_\Sigma\,, \varphi)_{0,\Sigma} = 0,$$

qui est satisfaite lorsque la résolution de l'équation de transport se fait de façon couplée avec les équations de conservation sur Ω.

La contrainte d'incompressibilité (1.1) est satisfaite par une méthode de *lagrangien augmenté*, à l'aide d'une généralisation de l'*algorithme d'Uzawa* (Fortin et Fortin, 1985). Les méthodes de point-fixe et de Newton sont utilisées pour linéariser le système algébrique d'équations non linéaires résultant de la discrétisation. Les systèmes linéaires obtenus sont résolus à l'aide d'une factorisation LU.

6.2 L'approche découplée

Deux approches sont utilisées dans cette recherche pour coupler la résolution des équations de conservation à la résolution de l'équation de transport. La première, que nous n'avons utilisée que pour modéliser les écoulements stratifiés sans tension superficielle, est l'*approche découplée* popularisée par Fortin (Fortin et al., 1992; Agassant et al., 1994). Les grandes étapes de cette approche sont illustrées sur le diagramme de la figure 6.3. La pseudo-concentration F doit initialement être initialisée sur Ω_h. On évalue ensuite les différents paramètres physiques de chaque fluide à l'aide d'une expression similaire à l'équation (6.1). En pratique, on introduit plutôt

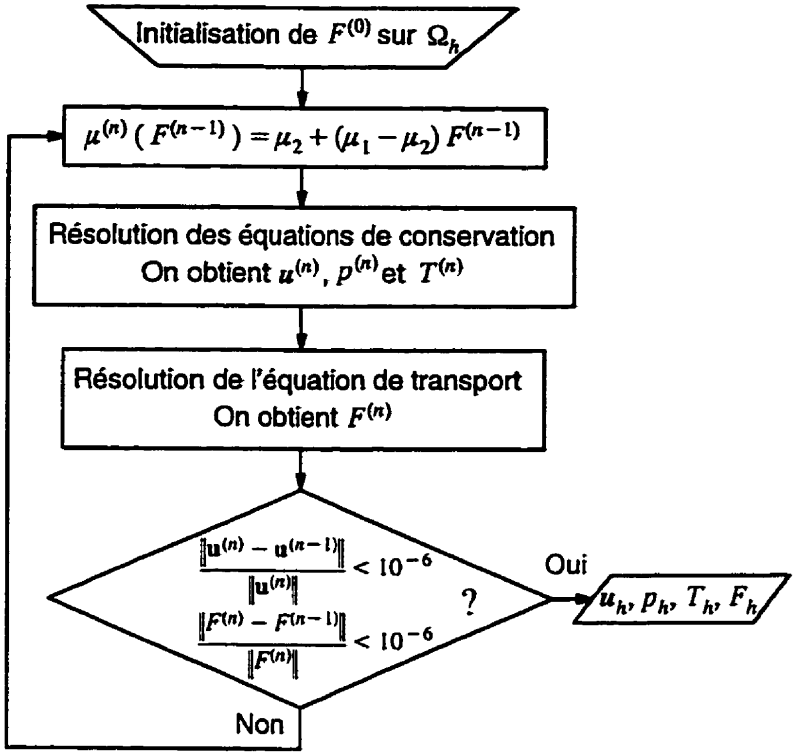


Figure 6.3 L'approche découplée

l'expression (6.1) directement dans les équations de conservation pour la discrétisation. À cette étape, il est important de veiller à ne pas introduire des valeurs non physiques dans cette expression. Nous savons que la pseudo-concentration peut souffrir d'oscillations numériques parasites (cf. section 2.3.1). Certaines techniques utilisées pour éviter ces oscillations numériques ont été présentées à la section 2.3.4. Cependant il peut toujours être nécessaire de faire un « micro-ajustement » pour, par exemple, éviter des viscosités négatives. Une fois en possession du champ de vitesse $\boldsymbol{u}$, de la résolution des équations de conservation à l'aide de la méthode de Galerkin, l'équation de transport est résolue à l'aide de la méthode de Galerkin discontinu, ce qui nous permet d'obtenir la pseudo-concentration sur le domaine de calcul. On approxime alors l'erreur relative sur le champ de vitesse et sur la pseudo-concentration. Si on est en dessous d'une tolérance préétablie, l'algorithme itératif s'arrête et on a une approximation précise des variables dépendantes. Sinon,

on évalue à nouveau les différents paramètres physiques à l'aide de la nouvelle pseudo-concentration, puis on résout les équations de conservation, puis l'équation de transport avec le nouveau champ de vitesse et ainsi de suite, jusqu'à convergence.

Un élément quadratique discontinu est donc utilisé pour discrétiser la pseudo-concentration étant donné l'utilisation de la méthode de Galerkin discontinue (cf. figure 6.4).

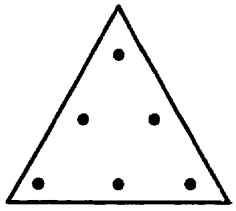


Figure 6.4 Élément utilisé pour la discrétisation de la pseudo-concentration (F) avec la méthode de Galerkin discontinue

À l'époque où nous étudiions cette approche, nous étions des utilisateurs de l'estimateur d'erreur par résolution de problèmes locaux (cf. section 3.2.2), qui fût utilisé pour estimer l'erreur des variables dépendantes $\boldsymbol{u}$, p et T pour certains résultats du chapitre 8. La capture adaptative d'interface a été utilisée pour aider au suivi des surfaces libres.

6.3 L'approche couplée

L'*approche couplée* est conceptuellement beaucoup plus simple. Il s'agit de discrétiser toutes les équations, *i.e.* les équations de conservation et l'équation de transport, en un seul système global. La discrétisation se fait avec une méthode d'éléments finis appropriée, soit une méthode de Galerkin ou une méthode stabilisée pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement, et une méthode stabilisée est absolument nécessaire pour discrétiser l'équation de transport. Pour ce qui est du reste de la stratégie, l'approche est tout à fait similaire à ce qui est illustré au diagramme de la figure 6.3, avec une étape en moins.

Les avantages de cette approche sont, d'abord du point de vue de l'implémentation, qu'à la limite une seule méthode d'éléments finis ne doit être implémentée. Ensuite, les fonctions d'interpolation de la pseudo-concentration sont continues, ce qui simplifie un peu l'implémentation des algorithmes de modélisation de la tension superficielle. L'élément utilisé pour la pseudo-concentration F est le même que l'élément utilisé pour la température, *i.e.* un interpolant quadratique continu. Pour profiter de cet état de fait, la région de transition de la pseudo-concentration a été choisie comme variant de façon régulière, plutôt que de façon discontinue, telle que définie en (1.13). Une simple spline quadratique a été utilisée à cette fin. Nous espérons ainsi simplifier le calcul des diverses composantes entrant dans la modélisation de la tension superficielle, soit les normales à la surface libre, sa courbure et les composantes de la force capillaire. Troisièmement, malgré la non-linéarité importante présente dans le système d'équations algébriques global, nous espérons avoir une convergence plus rapide qu'avec l'approche découplée, où au lieu de résoudre une série de problèmes approchés, nous résolvons immédiatement le système original. Cette question est étudiée d'un point de vue pratique au chapitre 8, où les deux approches sont utilisées. Le point faible évident de cette approche est celui du coût, où la construction des *immenses* systèmes linéaires est rébarbative. Surtout que nous sommes toujours utilisateurs de méthode directe. Mais dans le contexte actuel, où beaucoup de travaux se font sur les méthodes itératives et où de plus en plus de librairies numériques de qualité sont mises à la disposition des scientifiques via l'internet, on peut espérer pouvoir résoudre facilement les systèmes résultant de cette approche, à une fraction du coût. Mais les méthodes itératives semblent souvent avoir du mal à « digérer » les systèmes calculés sur des maillages fortement raffinés. Espérons que nos travaux futurs sauront éclaircir ce point.

Bien que nous ayons accès à diverses méthodes stabilisées pour les équations de conservation, nous avons plutôt opté pour résoudre ces équations à l'aide d'une méthode de Galerkin classique. Étant donné la robustesse de l'élément de Crouzeix-Raviart, il aurait été difficile de justifier l'utilisation d'un élément incompatible selon la condition LBB, mais rendu stable par l'utilisation d'une méthode stabilisée, puisque que nous n'aurions pas été en mesure d'obtenir un aussi bon ordre de convergence. Et l'utilisation des méthodes stabilisées pour les équations de conservation n'aurait rien apporté d'intéressant puisque presque tous les écoulements étudiés

sont rempants ($Re \to 0$), à l'exception du jet impactant. De plus, les formulations stabilisées introduisent une non-linéarité additionnelle dont on peut se passer, spécialement lors de la simulation d'écoulement avec tension superficielle. Nous avons quand même vérifié que la résolution couplée, avec les discrétisations stabilisées pour toutes les équations, fonctionnait bien.

Avec cette stratégie, l'estimation d'erreur par projections locales est utilisée pour toutes les variables dépendantes, soit $\boldsymbol{u}$, p et F. Pour certains problèmes, la capture adaptative d'interface s'avère nécessaire.

6.4 La stratégie adaptative

Les composantes de la méthodologie adaptative ont été présentées au chapitre 3. Mais aucune mention n'a été faite au sujet du couplage des différentes estimations d'erreur calculées pour chaque variable. Deux options sont disponibles. Une option est de construire des normes combinant les normes en $\boldsymbol{u}$, p, T et F. Le problème avec cette façon de procéder est qu'il est difficile de bien pondérer chaque norme. On peut alors se retrouver dans une situation où le maillage ne sera pas raffiné en un endroit clef parce que l'estimation d'erreur reliée à une des variables dépendantes est plus petite qu'avec les autres. Il serait donc possible qu'un comportement physique important, nécessitant une plus grande résolution en une région particulière, ne soit pas identifié par la méthodologie adaptative à cause de l'ordre de grandeur trop grand des autres variables dépendantes.

Nous optons plutôt pour agir directement sur les distributions de taille. Nous calculons donc l'estimation d'erreur pour chaque variable dépendante, ainsi que les distributions de taille associées, *i.e.* $\delta_{\mathrm{K}}^{\boldsymbol{u}}$, δ_{K}^{p}, δ_{K}^{T} et δ_{K}^{F}. Afin d'éviter des régions où le maillage ne serait pas raffiné malgré une estimation d'erreur associée à une variable qui le nécessite, on définit la distribution de taille globale comme étant

$$\delta_{\mathrm{K}} = \min\left\{\delta_{\mathrm{K}}^{\boldsymbol{u}}, \delta_{\mathrm{K}}^{p}, \delta_{\mathrm{K}}^{T}, \delta_{\mathrm{K}}^{F}\right\}. \tag{6.2}$$

Pour certains problèmes, la capture adaptative d'interface, présentée à la section 4.4.1, sera nécessaire. La distribution de taille δ_{Σ} obtenue de cette tech-

nique est tout simplement incluse dans l'expression (6.2) pour aider à raffiner le maillage à l'interface. C'est donc en se basant sur la distribution de taille globale obtenue de l'expression (6.2) que le prochain maillage sera construit.

La méthodologie générale proposée dans cette thèse pourrait être illustrée à l'aide d'une fusion du diagramme de la figure 3.1 et d'une simple modification de celui de la figure 6.3. On peut donc illustrer la stratégie générale à l'aide du diagramme de la figure 6.5.

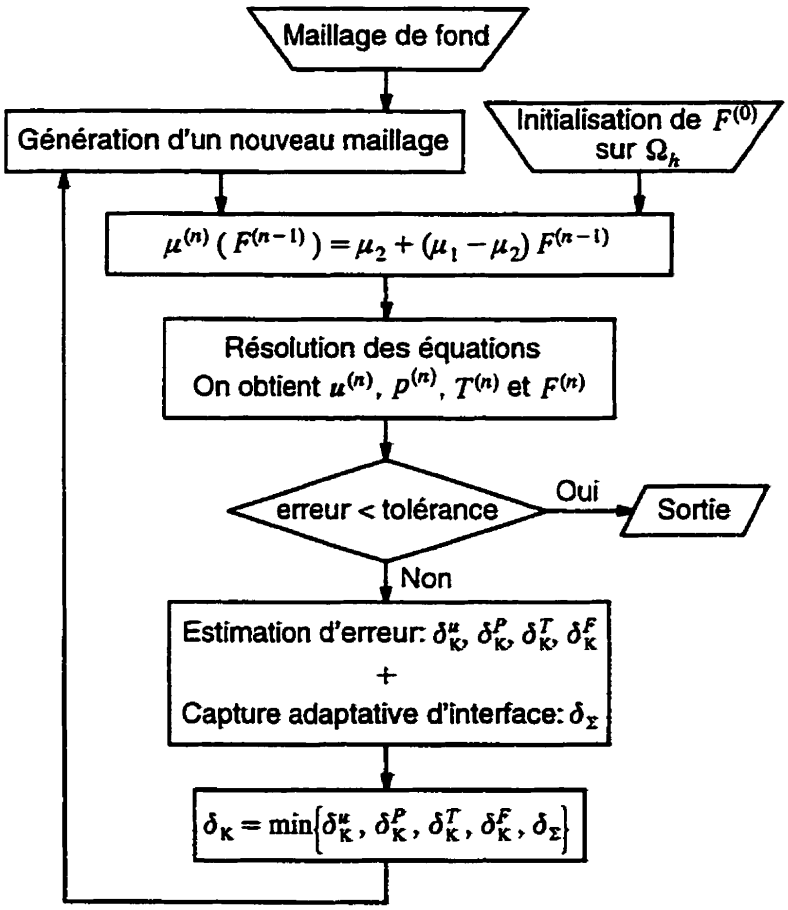


Figure 6.5 La stratégie adaptative couplée

DEUXIÈME PARTIE

LA SIMULATION NUMÉRIQUE DES ÉCOULEMENTS MULTIFLUIDES

CHAPITRE 7

VÉRIFICATION DE LA MODÉLISATION NUMÉRIQUE DE LA TENSION SUPERFICIELLE

Quelques modèles numériques pour la simulation de la tension superficielle dans un contexte eulérien ont été présentés au chapitre 5. Le présent chapitre traite de la vérification de notre implémentation de ces modèles et de la comparaison de ceux-ci. À cette fin, le problème de Laplace est étudié.

7.1 Le problème de Laplace et le modèle CSF

Rappelons rapidement que le problème de Laplace consiste à placer une goutte de fluide de forme quelconque dans un autre fluide au repos. La tension superficielle aura pour effet d'engendrer un écoulement qui fera que la goutte atteindra une topologie minimisant l'énergie, soit une sphère en trois dimensions.

Procédons d'abord à la vérification du modèle CSF en coordonnées cartésiennes. Considérons deux fluides newtoniens ayant la même viscosité et la même densité, avec un coefficient de tension superficielle $\alpha = 2$. La goutte initiale a un rayon de $1/\kappa = 2$. Selon la loi de Laplace (5.1), le saut en pression devrait être égal à 1. C'est ce saut en pression qui nous servira de valeur clef pour les vérifications.

Les conditions aux frontières, ainsi que la condition initiale en F utilisée pour entreprendre la résolution itérative du système non linéaire d'équations, sont illustrées sur un maillage caractéristique de ces simulations à la figure 7.1. On ne représente que le quart du domaine de calcul, soit le quadrant $[3,6] \times [3,6]$. Nous avons vérifié que les calculs pouvaient se faire soit sur le domaine complet, soit sur le domaine complet subdivisé en quatre zones de calcul, soit sur un seul quadrant en profitant de la symétrie axiale, en obtenant les mêmes résultats.

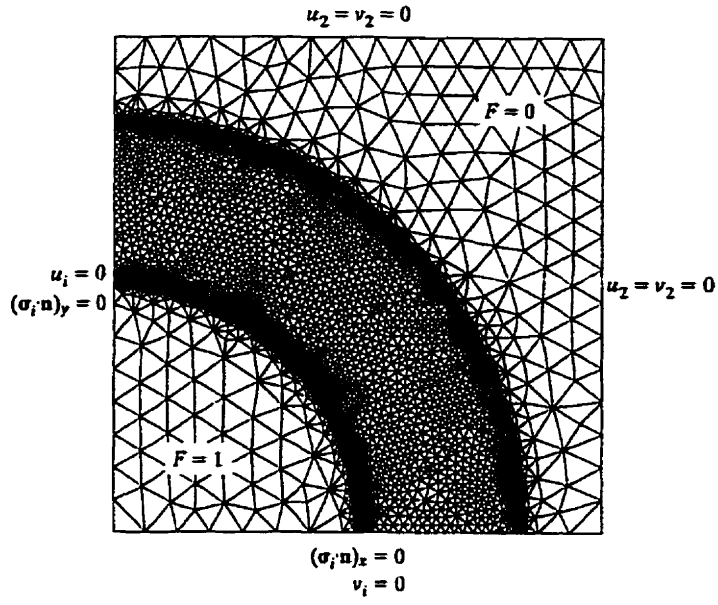


Figure 7.1 Conditions limites, initiales et maillage type utilisés pour la modélisation du problème de Laplace

Bien que d'un point de vue physique le problème de Laplace semble être un phénomène stationnaire, un problème fondamental s'est présenté lors de l'étude numérique. En effet, lorsque le système tend vers l'état stationnaire, le champ de vitesse $\boldsymbol{u} \to 0$ et l'équation de transport devient

$$0 \simeq 0.$$

Il a donc été décidé d'ajouter une matrice masse à l'équation de transport pour lever cette indétermination. Puisque le code d'éléments finis que nous utilisons est écrit en fonction des équations non linéaires, la résolution est faite *en correction*, *i.e.* qu'à chaque itération de point-fixe ou de Newton, on ne cherche pas F, mais plutôt une série de corrections $\delta F = F_{n+1} - F_n$ à une estimation initiale F_0. Dans ce cadre, l'équation de transport originale (1.14) devient

$$\boldsymbol{u} \cdot \nabla \delta F = -\boldsymbol{u} \cdot \nabla F_n.$$

C'est à l'équation de transport écrite en correction qu'est ajoutée la matrice masse,

pour mener à l'équation de transport modifiée que nous utiliserons,

$$\omega\,\delta F + \boldsymbol{u}\cdot\nabla\delta F = -\boldsymbol{u}\cdot\nabla F_n. \tag{7.1}$$

Cette astuce lève d'abord l'indétermination causée par un champ de vitesse devenant nul. L'équation de transport devient $\delta F = 0$, ce qui est la solution à notre équation de transport modifiée. L'ajout de la matrice masse dans cette équation en correction n'est pas innocente. En effet, en développant l'expression (7.1) on obtient

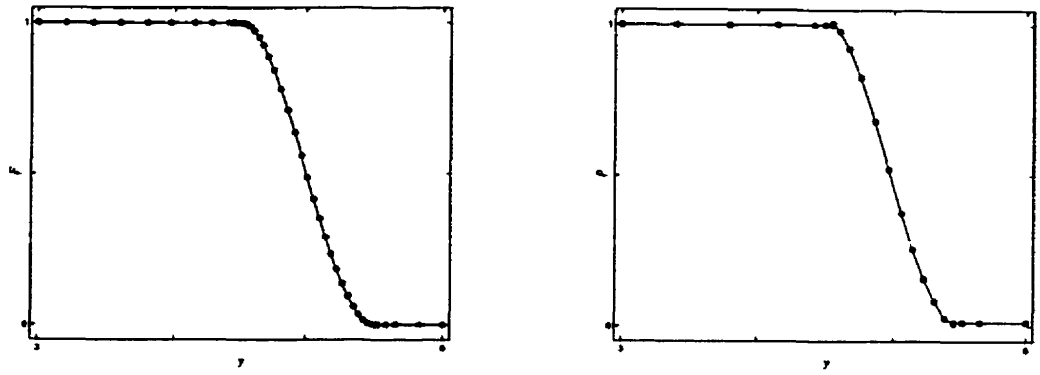
$$\omega\,(F_{n+1} - F_n) + \boldsymbol{u}\cdot\nabla F_{n+1} = 0,$$

qui a la forme d'une équation de transport transitoire intégrée en temps. On se retrouve donc à faire une résolution « pseudo-transitoire » de l'équation de transport, au travers de l'algorithme de point-fixe.

Cette façon de faire nous a permis de faire un « bout de chemin ». Toutefois, nous ne proposons pas cette approche comme une méthode définitive pour modéliser les écoulements stationnaires avec tension superficielle. Cette matrice masse nous a permis de lever l'indétermination soulevée plus tôt. Mais la convergence n'était pas facile à obtenir. Il a quand même été possible d'obtenir, pour le problème de Laplace, des résidus globaux de l'ordre de $\mathcal{O}(10^{-7})$ avec le raffinement. De plus, la détermination du paramètre ω n'est appuyée par aucune analyse théorique. La seule option « sérieuse » est de faire ces simulations avec les équations de conservation et l'équation de transport sous forme transitoire. En fait, c'est ce que tous les auteurs font, souvent sans le dire. Même si ces écoulements semblent être à régime permanent, on se rend compte dans les faits que ce n'est pas le cas. Mais comme on s'est donné comme but de ne modéliser que des écoulements stationnaires, on s'en est tenu à cette astuce.

7.1.1 Vérification du modèle CSF cartésien

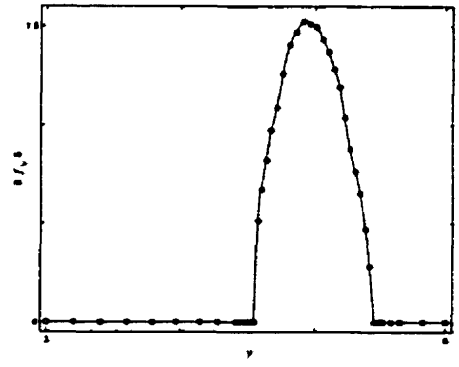
D'abord, à l'instar des résultats illustrés par Brackbill et al. (1992), des coupes des composantes nécessaires à l'évaluation de la force capillaire volumique, en $x = 3$, sont illustrées à la figure 7.2. On remarque la zone de transition de la pseudo-



(a) Pseudo-concentration (F)

(b) Pression (p)

(c) Courbure (κ)



(d) Force capillaire ($\|\boldsymbol{f}_V\|$)

Figure 7.2 Coupes pour le problème de Laplace cartésien

concentration qui a été choisie comme étant de largeur $\frac{1}{2}$. Le saut en pression correspond à ce que la loi de Laplace prescrit. La pression avait préalablement été initialisée à 0 sur tout le domaine de calcul. La courbure est bien égale à $\frac{1}{2}$ au centre de la région de transition, *i.e.* en $r = 2$, le rayon de la goutte. La force capillaire est limitée à la région de transition.

Le calcul précis de chaque composante entrant dans l'évaluation du terme de force capillaire, soit les normales et la courbure, est de la plus grande importance. En effet, des oscillations parasites apparaissent aux pourtours de la région de transition, ceci étant le résultat de divisions par de petites quantités. Le remède est de s'assurer qu'aucune valeur non nulle n'est prise par les différentes quantités cal-

culées aux noeuds hors de la région de transition. De plus, puisque des dérivées d'ordre 1 et d'ordre 2 sont calculées, celles-ci sont discontinues et même constantes par élément. Nous avons remarqué que la plus grande régularité possible est nécessaire à l'évaluation des diverses composantes entrant dans la modélisation de la tension superficielle. Diverses projections continues de ces quantités ont donc été effectuées afin d'avoir une représentation régulière de ces composantes. Dans les présents travaux, un algorithme de projection simple a temporairement été implanté. Cette partie de la stratégie numérique profiterait de l'utilisation de projections plus « évoluées », similaires à celle présentée à la section 3.2.1.

Donc, si des précautions ne sont pas prises, ces oscillations parasites se traduiront par un champ de force capillaire qui contiendra des vecteurs parasites. La figure 7.3 illustre le champ de force capillaire pour le présent problème. On observe que les

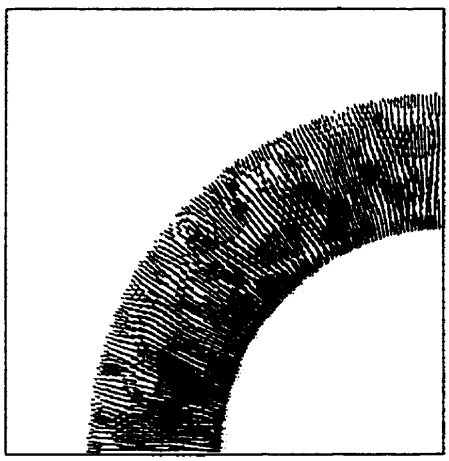


Figure 7.3 Champ de force capillaire pour le problème de Laplace cartésien

précautions prises nous permettent d'obtenir un champ de vecteur régulier, sans présence de vecteur parasite. La pression numérique résultante est régulière, tel qu'illustré à la figure 7.4. Mais malgré toutes ces précautions, certaines quantités sont toujours très délicates à évaluer numériquement, telle la courbure, illustrée à la figure 7.5.

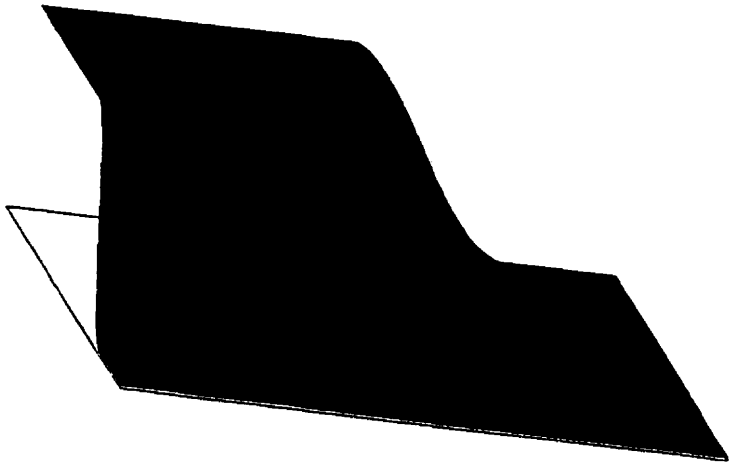


Figure 7.4 Graphe de la pression pour le problème de Laplace cartésien

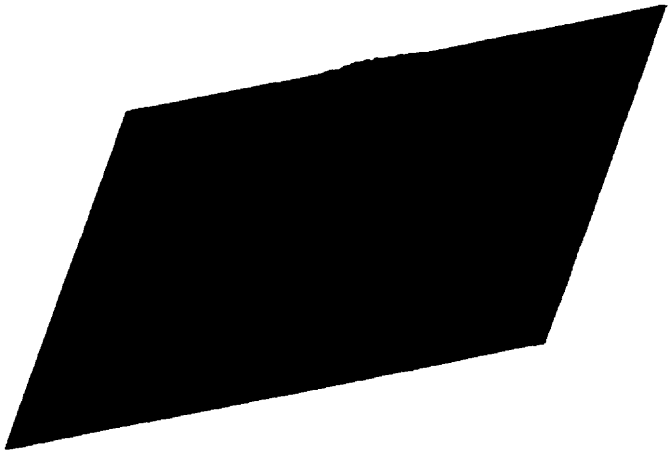


Figure 7.5 Courbure numérique pour le problème de Laplace cartésien

7.1.2 Vérification du modèle CSF axisymétrique

La vérification du modèle CSF en coordonnées axisymétriques est similaire au cas cartésien. Les seules différences sont que la goutte est centrée en (0,0) et qu'un rayon de courbure additionnel doit être considéré. En effet, la courbure s'exprime alors comme

$$\kappa = \left(\frac{1}{R_{zr}} + \frac{1}{R_\theta}\right),$$

où R_{zr} est le rayon de courbure local de la surface libre dans le plan z-r et R_θ dans le plan θ, tels qu'illustrés à la figure 7.6. Nous considérons toujours deux

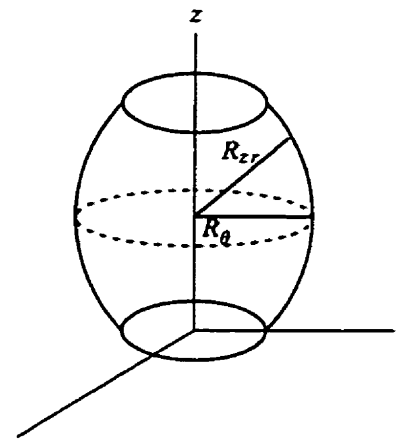
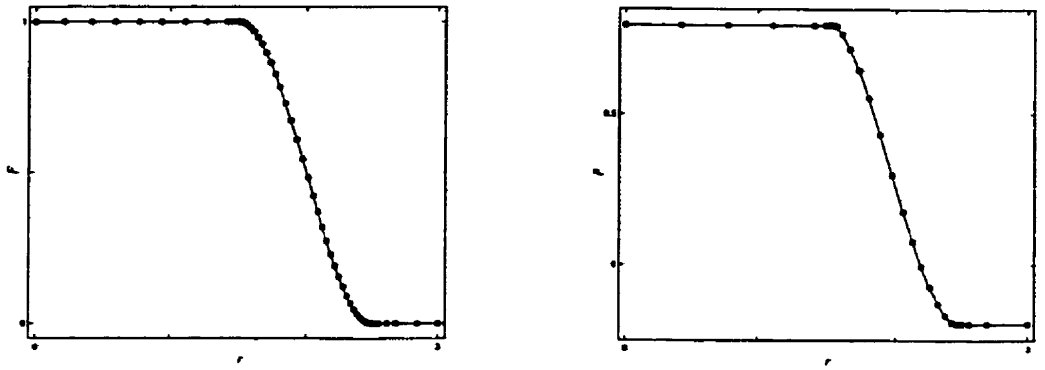


Figure 7.6 Rayons de courbure dans un repère axisymétrique

fluides newtoniens ayant la même viscosité et la même densité, avec un coefficient de tension superficielle de $\alpha = 1$. Avec une goutte initiale de rayon 2, le saut en pression devrait être égal à 1 puisque $\kappa = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$. Dans le cas axisymétrique, la simulation est exécutée pour $r \geq 0$, sur un domaine de calcul de dimensions 6×3 unités de longueur adimensionnelle.

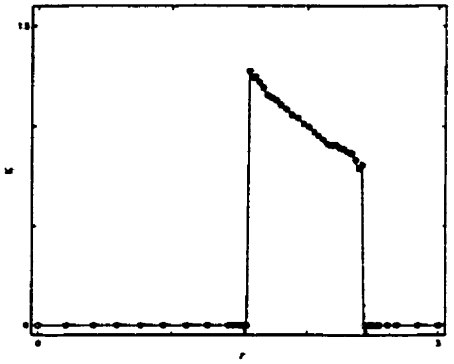
Les maillages obtenus étant similaires à celui présenté pour la vérification du cas cartésien, ils ne seront pas illustrés. Les conditions limites et initiales sont analogues. Des coupes de la pseudo-concentration, de la pression, de la courbure et de la force capillaire, en $\theta = \pi/2$, sont illustrées à la figure 7.7. On remarque que le saut en pression est bien ce que la loi de Laplace prescrit. La courbure numérique, au centre de la région de transition, semble bien être égale à 1. La force capillaire n'est bien définie que dans la région de transition, avec un maximum en $r = 2$.

La largeur de la région de transition a été choisie comme étant égale à $\varepsilon = \frac{1}{2}$. Ce choix est arbitraire et cette valeur a été déterminée après avoir fait quelques essais numériques. Quelques exemples des différents essais sont illustrés à la figure 7.8. On y retrouve le saut en pression, pour différentes régions de transition, à différents cycles adaptatifs. L'idée est d'éviter une zone de transition trop étroite, qui a pour effet de produire une variation de pseudo-concentration trop brusque et des oscilla-

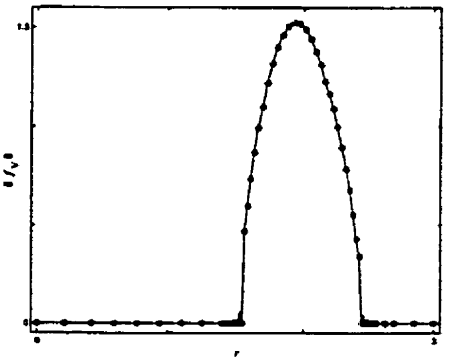


(a) Pseudo-concentration (F)

(b) Pression (p)



(c) Courbure (κ)



(d) Force capillaire ($\|\boldsymbol{f}_{\mathrm{V}}\|$)

Figure 7.7 Coupes pour le problème de Laplace axisymétrique

tions numériques malgré le raffinement, tel qu'illustré à la figure 7.8(c). Utiliser une région de transition trop large a pour effet d'introduire des imprécisions numériques dans le calcul des composantes définies à l'interface. De plus, on peut remarquer à la figure 7.8(i) que l'algorithme de modélisation de la tension superficielle « resserre » le saut en pression. Mais quelque soit la région de transition, le saut en pression est calculé de façon précise et semble donc indépendant de celle-ci. Cette façon de procéder est cependant loin d'être idéale et certaines des options proposées en conclusion contribueraient à améliorer de façon notable notre stratrégie de modélisation des écoulements à surfaces libres.

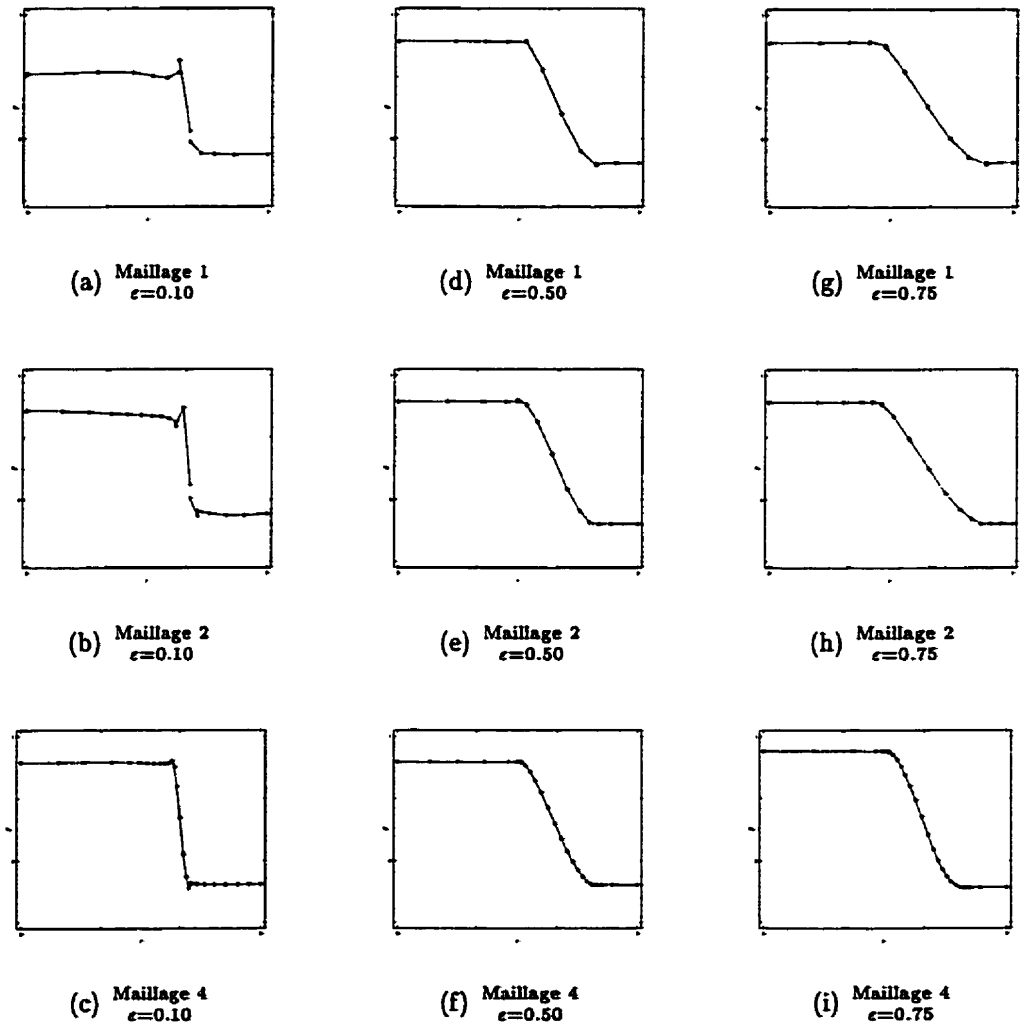
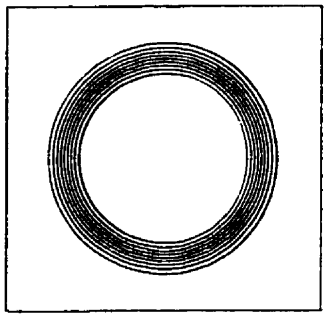


Figure 7.8 Coupes en pression en $\theta = \frac{\pi}{2}$ pour différentes régions de transition, à différents cycles adaptatifs

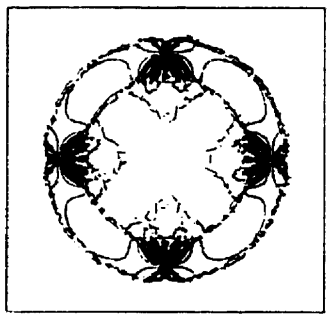
7.2 Comparaison des différentes formulations

Différentes formulations, pour modéliser la tension superficielle, ont été présentées à la section 5.2. L'objet de cette section est de reprendre la simulation numérique du problème de Laplace avec ces formulations, afin de choisir un modèle qui se prête bien au contexte dans lequel nous devons exécuter nos simulations. Mais dans les faits, il ne sera pas nécessaire de faire toutes ces comparaisons.

Comparons donc le comportement des formulations CSF et de Lafaurie et al. pour la modélisation du problème de Laplace. La figure 7.9 illustre déjà bien ce qui orientera notre choix. Le saut en pression calculé par le modèle CSF, quoique celui-ci fasse



(a) Formulation CSF



(b) Formulation de Lafaurie

Figure 7.9 Les isolignes du saut en pression pour le problème de Laplace

intervenir le calcul de dérivées secondes, semble bien nous donner ce à quoi on s'attend, soit une variation régulière de la pression, semblable à la zone de transition de la pseudo-concentration. Pour ce qui est de la formulation de Lafaurie et al., bien que l'on ait pu profiter de l'intégration par parties du terme de force capillaire, la pression calculée oscille fortement, avec le résultat que le saut en pression n'est pas calculé adéquatement. Ce comportement peut être attribué à un problème qui a déjà été documenté dans la littérature (Lafaurie et al., 1994; Williams et al., 1998), soit celui des *courants parasites* que l'on retrouve dans le champ de vitesse provenant de la modélisation de la tension superficielle. Ce phénomène est illustré à la figure 7.10. Il est caractérisé par la formation d'une série de tourbillons non physiques autour de la surface libre et dont l'amplitude n'est pas réduite avec le raffinement du maillage.

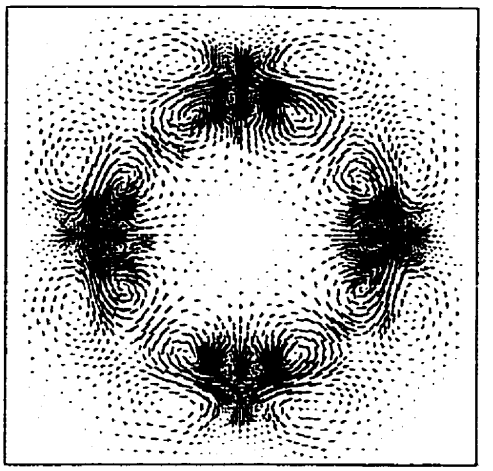


Figure 7.10 Courants parasites résultant de l'utilisation de la formulation de Lafaurie et al.

En fait, l'ampleur du phénomène a même tendance à s'amplifier en $\theta = 0, \frac{\pi}{2}, \pi$ et $\frac{3\pi}{2}$. Précisons que la structure géométrique du phénomène, illustrée aux figures 7.9(b) et 7.10, n'est pas due à l'utilisation d'un maillage structuré.

La cause principale du phénomène semble être due à l'élimination par soustraction des chiffres significatifs. En effet, on retrouve dans la forme faible de l'expression (5.4) les termes

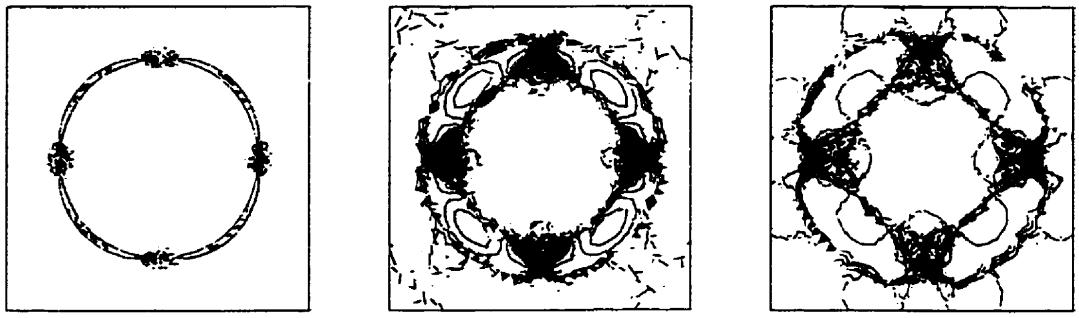
$$1 - \frac{(\frac{\partial F}{\partial x})^2}{(\frac{\partial F}{\partial x})^2 + (\frac{\partial F}{\partial y})^2} \tag{7.2}$$

et

$$1 - \frac{(\frac{\partial F}{\partial y})^2}{(\frac{\partial F}{\partial x})^2 + (\frac{\partial F}{\partial y})^2}, \tag{7.3}$$

où le membre de droite de chaque différence devient presqu'égal à 1 lorsque $\frac{\partial F}{\partial x}$ ou $\frac{\partial F}{\partial y}$ sont petits. Par exemple, lorsque $\frac{\partial F}{\partial y} \to 0$, l'expression (7.2) vaudra $1 - (1 - \varepsilon)$, situation bien connue pour mener à une élimination non désirée des chiffres significatifs. La même situation se produit pour l'expression (7.3), lorsque $\frac{\partial F}{\partial x} \to 0$, d'où la raison pourquoi les perturbations du champ de vitesse, et donc de la pression, se produisent en $\theta = 0, \frac{\pi}{2}, \pi$ et $\frac{3\pi}{2}$. Ce comportement s'observe autant avec la formulation de Lafaurie et al., que celle de Jacqmin ou de Béliveau et al.

Il a aussi été vérifié que ce comportement ne dépend pas de la région de transition. En effet, on observe à la figure 7.11 que quelque soit la « largeur » de la région de transition, le comportement reste le même.



(a) $\varepsilon = 0.1$ (b) $\varepsilon = 0.5$ (c) $\varepsilon = 0.75$

Figure 7.11 Les isolignes en pression calculées à l'aide de la formulation de Lafaurie et al., pour différentes régions de transition

Béliveau et al. ont également observé ce comportement erratique de la pression. Ils ont réussi à obtenir une approximation précise de cette variable en modélisant le problème transitoire, comme le font la plupart des auteurs d'ailleurs. Après plusieurs pas de temps, la pression se stabilise et une approximation précise est obtenue. Mais comme notre cadre de travail consistait à modéliser des écoulements à surfaces libres stationnaires dans le but de mettre l'emphase sur la méthodologie adaptative, nous nous sommes limités à l'approche présentée plus tôt. Mais la simulation stationnaire de problème à surfaces libres avec tension superficielle n'étant pas une mince tâche, ceci a fait ressortir la fragilité de la formulation de Lafaurie et al. Ceci ne veut pas dire de ne pas considérer cette formulation. Plusieurs résultats de simulation transitoire ont été publiés. Les résultats de vérification présentés constituent plutôt une mise en garde aux utilisateurs de ces méthodes qu'un grand soin doit être pris lors de l'évaluation des composantes qui entrent dans la modélisation numérique de la tension superficielle. Le rapport de Williams et al. (1998) constitue un premier effort dans cette direction. Mais nous croyons, à la lumière des résultats illustrés à la figure 7.9, qu'il devrait être plus facile d'atteindre l'état stationnaire avec le modèle CSF, ceci menant à des simulations transitoires moins coûteuses.

7.3 Notes et bibliographie

Plusieurs composantes entrant dans la stratégie numérique proposée n'ont pas été vérifiées de façon explicite puisqu'elles ont déjà fait l'objet de tests. Il en est ainsi pour la méthodologie adaptative, dont on peut retrouver des résultats de vérification dans les thèses de Hétu (1991) et Ilinca (1996). L'implémentation des méthodes stabilisées a aussi été vérifiée par Ilinca. Turgeon (1997) a testé l'implémentation de la plupart de ces routines en coordonnées axisymétriques.

L'implémentation du résoluteur de Galerkin discontinu est validé dans le cadre de l'étude des écoulements stratifiés, au chapitre 8. Il en est de même pour notre stratégie adaptative générale et pour les stratégies de résolution couplée et découplée. La capture de discontinuité est vérifiée au chapitre 9, via la modélisation des problèmes de jets.

La présente vérification de la modélisation de la tension superficielle a déjà été présentée dans les articles de conférence suivants: (Dufour et Pelletier, 1998b) dans le cas cartésien et (Dufour et Pelletier, 1999a) dans le cas axisymétrique.

CHAPITRE 8

ÉCOULEMENTS STRATIFIÉS ET COEXTRUSION

Ce chapitre traite de la simulation numérique des écoulements stratifiés et en particulier d'un procédé industriel de mise en forme des matériaux connu sous le nom de coextrusion. Dans un premier temps, le procédé est décrit brièvement. La méthodologie numérique, présentée au chapitre 6, est ensuite utilisée pour résoudre divers problèmes d'écoulement stratifié afin de vérifier l'approche numérique. L'adimensionnalisation utilisée pour ce type d'écoulement est alors présentée. Finalement, l'écoulement de polymères dans une extrudeuse industrielle annulaire est étudié numériquement.

8.1 Le procédé de coextrusion

L'*extrusion* et sa version multifluide, la *coextrusion*, sont des procédés continus de mise en forme des polymères, les plus importants dans l'industrie du plastique (Agassant et al., 1996). Nous nous concentrons sur la coextrusion qui consiste à chauffer individuellement plusieurs polymères, pour les rendre fluides, et à les combiner dans une même filière. On obtient, en sortie de filière, un produit multimatière possédant les propriétés des différents polymères extrudés. Celles-ci sont, entre autres, la couleur et l'aspect final, le coût, l'imperméabilité, l'isolation électrique, thermique et chimique, etc. Ce sont ces caractéristiques et les propriétés du produit final qui intéressent les industriels. La production de film multicouche, de cable, de tube et de fibre sont des exemples de produits fabriqués en industrie à l'aide de la coextrusion.

Une difficulté importante, rencontrée chez les concepteurs de filière, est d'obtenir une répartition optimale des produits extrudés à sa sortie. Cette distribution dépend des paramètres géométriques de l'extrudeuse, des propriétés des fluides en écoulement et des paramètres d'opération. Généralement, l'opérateur doit se fier à ses

connaissances empiriques pour obtenir des paramètres optimaux, tels la température des polymères extrudés et les débits imposés en entrée de filière. Les propriétés rhéologiques des fluides, qui influencent également la distribution finale des produits, sont la viscosité et l'élasticité. Les simulations numériques permettront d'optimiser le design et l'utilisation des extrudeuses dans le but d'obtenir un rythme de production maximal, tout en minimisant les coûts. Ainsi, on peut réduire notre dépendance de l'expérience pratique des opérateurs et des concepteurs. Il faut noter qu'il est pratiquement impossible de connaître la topologie de la surface libre séparant les polymères dans la filière. Avec les données numériques, cette information est disponible et permettra de prévoir la distribution des différents produits en sortie de filière.

8.2 La modélisation numérique

Dheur et Crochet (1987) furent parmi les premiers à utiliser la méthode des éléments finis pour étudier les écoulements stratifiés. Ils favorisent une approche lagrangienne, où la surface libre est représentée de façon paramétrique. Cette discrétisation est inclue dans celle des équations de Stokes via la condition d'équilibre des forces à l'interface (1.10). Un interpolant discontinu en pression est utilisé pour modéliser la discontinuité de la pression à l'interface. Une approche utilisant une technique de noeuds doubles à l'interface est aussi considérée. Dheur et Crochet utilisent aussi cette approche pour modéliser les écoulements stratifiés de fluides viscoélastiques (Dheur et Crochet, 1989). Mavridis et al. (1987) utilisent une approche similaire. Ils ont, entre autres, modélisé des problèmes de coextrusion en filière annulaire (Mitsoulis et Heng, 1987) et en filière plane tridimensionnelle (Karagiannis et al., 1990).

Fortin et al. (1992) ont plutôt opté, toujours dans le cadre de des éléments finis, pour une approche eulérienne, utilisant la technique de la pseudo-concentration. La stratégie numérique utilisée est celle décrite à la section 6.2, et utilise une méthode de Galerkin pour résoudre les équations de Navier-Stokes et une méthode de Galerkin discontinue pour l'équation de transport. Nous ferons usage de cette stratégie. Nous utiliserons également l'approche couplée, présentée à la section 6.3.

Nous étudierons l'apparence du produit final, *i.e.* la position et la topologie de l'interface, dans le cadre de la coextrusion bimatière. La modélisation de la coextrusion multimatière est une généralisation immédiate (Fortin et al., 1995). Nous allons d'abord étudier quelques problèmes pour vérifier l'implémentation des différentes stratégies numériques. Ceci permettra de vérifier l'efficacité de notre algorithme de suivi adaptatif d'interface. Ensuite, nous étudierons l'écoulement de polymères dans une extrudeuse industrielle annulaire, dont les dimensions ont été fournies par l'*Institut des matériaux industriels* (IMI), un laboratoire du *Conseil national de recherche du Canada.*

8.3 Vérification du modèle numérique

Les stratégies numériques utilisées pour modéliser les écoulements stratifiés sont confrontées à quelques problèmes tests. Ces écoulements seront vérifiés à l'aide de la *filière analytique* illustrée à la figure 8.1, dont les dimensions sont 2×1 unités de longueur adimensionnelles. Les composantes de l'écoulement multiphase générique,

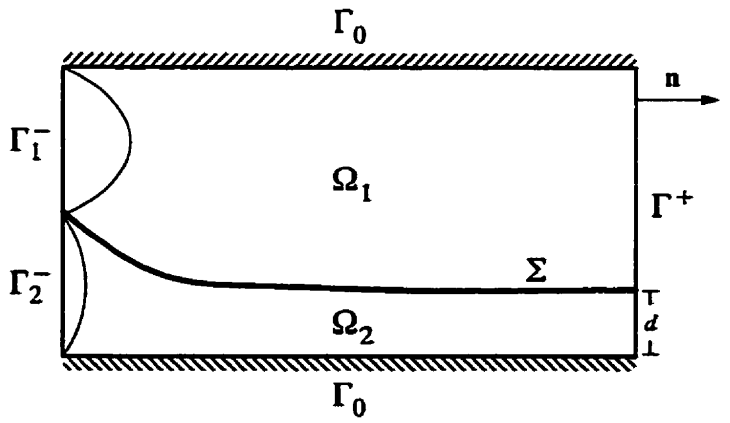


Figure 8.1 Géométrie utilisée pour la vérification des algorithmes de modélisation des écoulements stratifiés

illustrées à la figure 1.1, sont également présentes dans l'écoulement stratifié, soit les différents fluides occupant les régions Ω_i, la surface libre Σ et les parois solides Γ_0. De plus, la partie amont de l'écoulement est notée Γ^- et en particulier la partie

du domaine où entre le fluide i est identifiée par Γ_i^-. Les fluides s'écoulent vers la partie aval du domaine, qui est notée Γ^+.

La première vérification consistera à imposer un champ de vitesse analytique cartésien sur Ω et à étudier le comportement de l'algorithme de suivi d'interface de façon qualitative. Le second problème test considère un écoulement stratifié « simple » et cherche à déterminer la position de la surface libre en aval de l'écoulement, *i.e.* lorsque celui-ci est complètement développé. Nous chercherons donc à déterminer la « hauteur » de la surface libre, identifiée par d à la figure 8.1. Celle-ci peut être calculée de façon analytique, ce qui nous permettra de valider notre algorithme.

8.3.1 Écoulement stratifié avec un champ de vitesse analytique

Un champ de vitesse analytique a été construit sur le domaine de calcul de la filière analytique de la figure 8.1. Le but est d'obtenir un champ de vitesse similaire à ceux que l'on retrouve dans les écoulements stratifiés, mais qui poussera les algorithmes de suivi d'interface à la limite. Comme le champ analytique est complètement connu, il sera plus facile de déterminer si l'algorithme de suivi d'interface suit correctement ses caractéristiques.

Le champ de vitesse, exprimé dans un système de coordonnées cartésien,

$$\begin{cases} u(x,y) = [3y^2 - (x-2)^3 y^3] e^{(x-2)^3(1-y)}, \\ v(x,y) = 3y^3 (x-2)^2 (1-y) e^{(x-2)^3(1-y)}, \end{cases} \tag{8.1}$$

possède la fonction de courant suivante,

$$\psi(x,y) = y^3 \, e^{(2-x)^3(y-1)}$$

et dont les caractéristiques sont illustrées à la figure 8.2. De là, il est possible d'identifier la caractéristique associée à la surface libre, *i.e.* celle ayant son origine au point $(0\,,\frac{1}{2})$ sur la géométrie de la figure 8.1. Cette caractéristique passe à proximité de la paroi solide. Cette situation cause des problèmes à la méthode de pseudo-concentration puisque la région de transition vient près d'entrer en contact

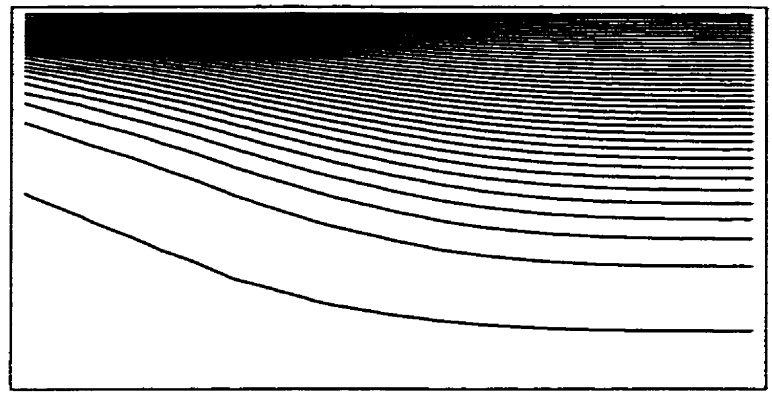


Figure 8.2 Caractéristiques associées à un champ de vitesse analytique pour la vérification de l'algorithme de suivi d'interface

avec la paroi solide, ce qui mène à une perte de convergence. Un algorithme particulier serait nécessaire pour traiter ce cas. On cherchera donc à vérifier si l'interface est transportée en accord avec les caractéristiques de l'écoulement analytique. Les approches découplées et couplées, décrites aux sections 6.2 et 6.3, sont confrontées pour ce champ de vitesse. La stratégie adaptative proposée à la section 6.4 est aussi utilisée.

Dans un premier temps, l'approche découplée est vérifiée. Mais comme il a été mentionné au paragraphe précédent, le transport de la pseudo-concentration discontinue par la méthode de Galerkin discontinue cause un problème. La région de transition, formée des oscillations numériques qui accompagnent le transport de la fonction discontinue, entre en contact et interagit avec la paroi solide, ce qui entrave la convergence de l'algorithme découplé. Il aurait été nécessaire de raffiner beaucoup plus le maillage à l'interface pour contourner cette difficulté. Cependant, nous avons décidé de conserver les mêmes paramètres d'adaptativité pour les deux stratégies.

Dans un second temps, le même problème est étudié avec l'approche couplée. Les lignes de courant numériques, illustrées à la figure 8.3, peuvent être comparées aux caractéristiques analytiques de la figure 8.2. Le maillage, adapté en fonction de la vitesse et de la pression, et l'interface capturée de façon adaptative, sont illustrés à la figure 8.4. La stratégie de capture adaptative d'interface fait en sorte que les mailles fines englobent la région de transition de la pseudo-concentration. C'est le type de

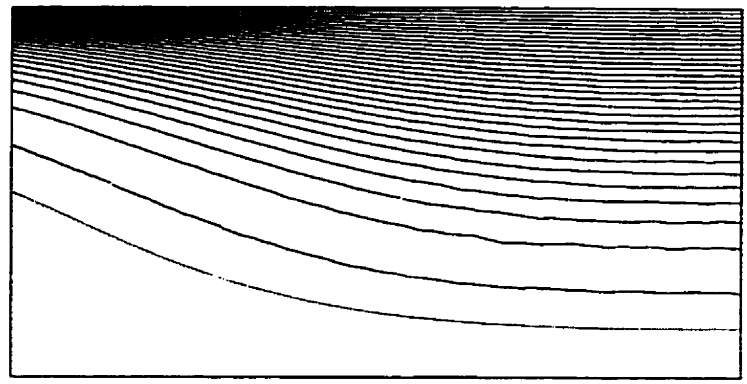


Figure 8.3 Lignes de courant et interface calculées à l'aide de l'approche couplée

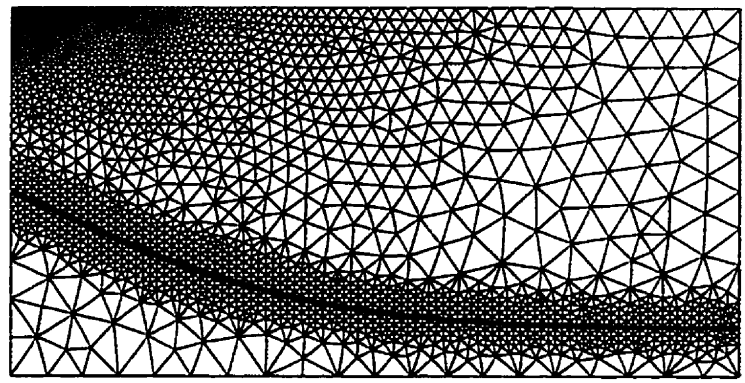


Figure 8.4 Maillage et interface obtenus de l'approche couplée (3682 éléments)

maillage que l'on recherche pour les écoulements à surfaces libres. Une région de transition régulière aide à confiner la zone de variation de la pseudo-concentration et évite une perte de convergence, même si la surface libre se retrouve à proximité de la paroi solide.

8.3.2 Écoulement stratifié avec une solution analytique connue en aval de l'écoulement

Une solution quasi-analytique, similaire à celles que l'on retrouve dans (Han, 1981), a été développée pour le problème d'écoulement stratifié de la figure 8.1, dans un système de coordonnées axisymétrique. L'écoulement est newtonien et isotherme pour simplifier la vérification. Dans ce repère, on considère que la filière analytique

a comme dimensions $1 \leq r \leq 2$ et $0 \leq z \leq 2$. Étant donnés les ratios de débits et de viscosités des fluides, il est possible de calculer la « hauteur » d de la surface libre lorsque l'écoulement est complètement développé en aval. Les détails des calculs peuvent être obtenus des résultats analytiques de Han (1981).

Les conditions aux frontières de ce problème sont caractérisées par l'adhérence des fluides aux parois,

$$\boldsymbol{u}_i = (0\,,0) \quad \text{sur } \Gamma_0 \ ,$$

et on s'attend à avoir un écoulement complètement développé en sortie de filière, *i.e.*

$$\begin{cases} (\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{n})_z = 0; \\ u_{r,i} \qquad = 0; \end{cases} \qquad \text{sur } \Gamma^+.$$

On impose les débits en entrée de filière Γ^-, ce qui est courant dans la littérature traitant d'extrusion. De là, on obtient les profils de vitesse en Γ_i^-,

$$u_{z,i} = \frac{\Delta p_i \, R_i^2}{4\,\mu_i} \left\{ \left(\frac{r}{R_i}\right)^2 + \frac{\kappa_i^2 - 1}{\ln\left(\frac{1}{\kappa_i}\right)} \ln\left(\frac{r}{R_i}\right) - 1 \right\},$$

où l'expression pour Δp_i est donnée par

$$\frac{2\,\mu_i\,Q_i}{\pi\,R_i^2} \left\{ \frac{R_i^2\,(1-\kappa_i^4)}{4} + \frac{(\kappa_i^2-1)}{\ln\left(\frac{1}{\kappa_i}\right)} \left(\frac{R_i^2\,(\kappa_i^2-1)}{4} - \frac{\kappa_i^2\,R_i^2\,\ln(\kappa_i)}{2} \right) + \frac{R_i^2\,(\kappa_i^2-1)}{2} \right\}^{-1}$$

et où Q_i est le débit imposé en Γ_i^-, μ_i est la viscosité du fluide i, R_i est le rayon maximal en Γ_i^- et κ_i est tel que $\kappa_i R_i$ est le rayon minimal en Γ_i^- (cf. figure 8.5). Pour l'exemple de la figure 8.1, $R_1 = 2{,}0$, $R_2 = 1{,}5$, $\kappa_1 = 0{,}75$ et $\kappa_2 = 0{,}67$. Les conditions d'opération sont donc complètement déterminées par le ratio des débits $\frac{Q_1}{Q_2}$ et le ratio de viscosités $\frac{\mu_1}{\mu_2}$.

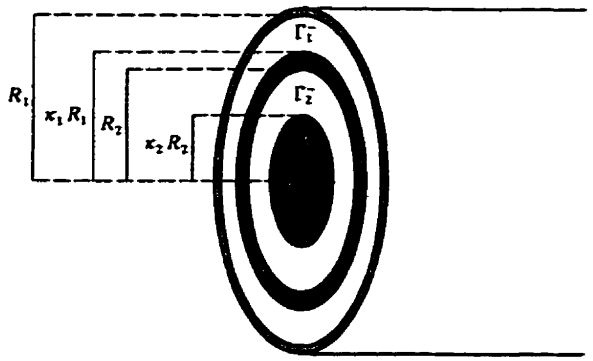


Figure 8.5 Dimensions d'une filière annulaire

Vérification de l'approche découplée

Le premier cas étudié est celui d'un écoulement caractérisé par un ratio de débits de

$$\frac{Q_1}{Q_2} = \frac{1}{1},$$

et un ratio de viscosités de

$$\frac{\mu_1}{\mu_2} = \frac{1}{10}.$$

Nous exécuterons cette simulation à l'aide de l'approche découplée, transportant la pseudo-concentration discontinue à l'aide de la méthode de Galerkin discontinue. On illustre, à la figure 8.6, le maillage final utilisé pour cette simulation. On observe d'abord que la capture adaptative d'interface a bien raffiné les éléments dans la région de discontinuité de la pseudo-concentration. De plus, l'estimateur d'erreur par résolution de problèmes variationnels locaux a raffiné le maillage au point de jonction des régions Γ_1^- et Γ_2^-, où on retrouve une discontinuité dans les variables dépendantes. On remarque aussi que le maillage est raffiné en aval de Γ_2^-, l'estimateur d'erreur ayant réagi à la viscosité plus importante dans cette région.

Les coupes de la pseudo-concentration et de la vitesse axiale en sortie de filière Γ^+ sont illustrées à la figure 8.7. On y remarque que les noeuds du maillage, représentés par des (o), sont concentrés à l'interface afin d'aider à sa capture. On remarque à

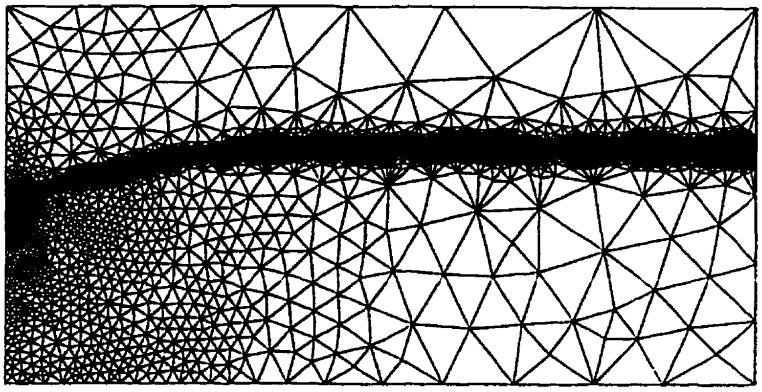


Figure 8.6 Maillage obtenu de l'approche découplée pour la simulation d'un écoulement avec un ratio de viscosités non unitaire (6524 éléments)

la figure 8.7(a) que la discontinuité de la variable transportée est accompagnée des oscillations numériques caractéristiques. Ces oscillations doivent être traitées au moment de l'évaluation de la viscosité. Si aucun traitement n'est appliqué, nous risquons de retrouver des viscosités non physiques. La figure 8.7(b) illustre le profil de vitesse caractéristique d'un écoulement bifluide avec un ratio de viscosités non unitaire.

Vérification de l'approche couplée

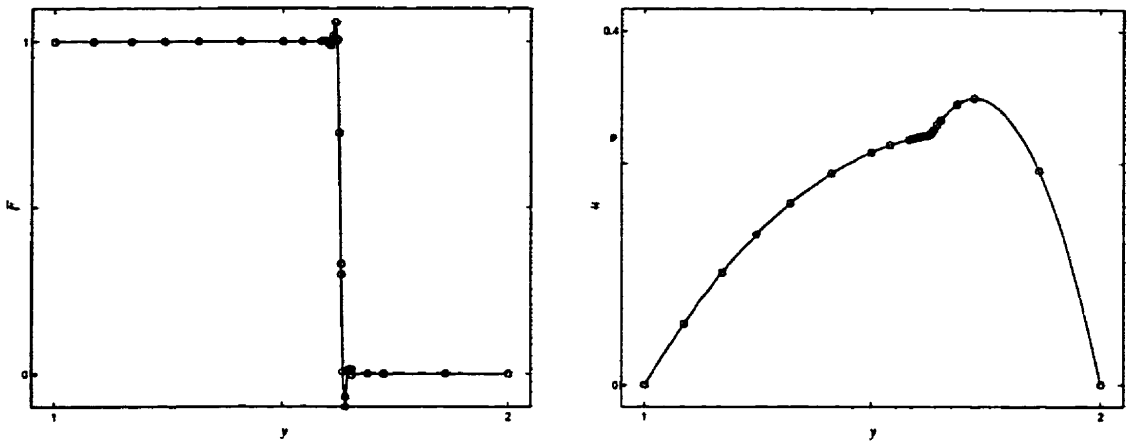
Pour vérifier l'approche couplée, nous considérons un ratio de débits de

$$\frac{Q_1}{Q_2} = \frac{10}{1},$$

et un ratio de viscosités unitaire,

$$\frac{\mu_1}{\mu_2} = \frac{1}{1}.$$

Tel que mentionné à la section 6.3, nous remplaçons le saut en pseudo-concentration par une région de transition régulière. Les conditions sur F en Γ_i^- sont modifiées en conséquence. Un fort ratio de débits entraîne une plus grande déformation de la surface libre qu'un grand ratio de viscosités. Cette situation ajoute plus de non-linéarité aux équations et mène donc à un problème qui nécessite plus d'itérations



(a) Pseudo-concentration (F) (b) Vitesse axiale (u_z)

Figure 8.7 Coupes en Γ^+ pour l'écoulement stratifié avec un ratio de viscosités non unitaire, résolu avec l'approche découplée

pour obtenir la convergence. Même si on ne présente qu'un cas par approche, nous avons testé plusieurs combinaisons de ratios de débits et de viscosités, pour obtenir des résultats similaires.

La figure 8.8 illustre le maillage final utilisé pour cette simulation. On remarque

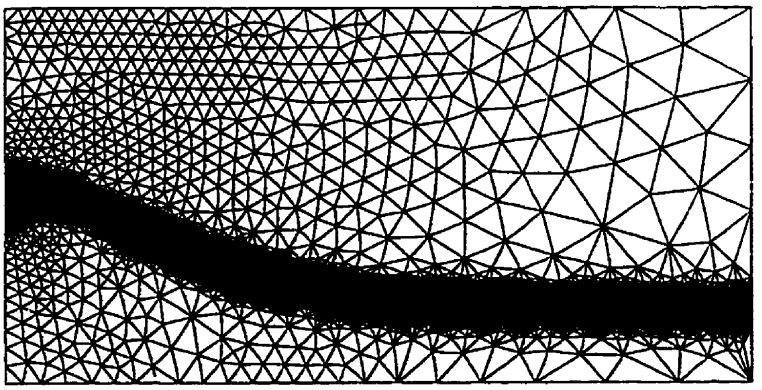
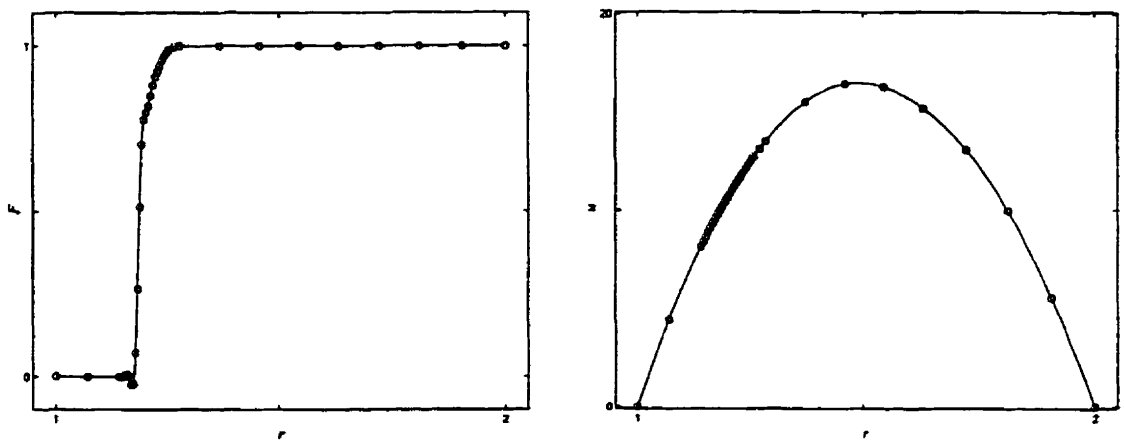


Figure 8.8 Maillage obtenu de l'approche couplée pour la simulation d'un écoulement avec un ratio de débits non unitaire (7307 éléments)

que la bande d'éléments raffinés utilisée pour la capture de l'interface est plus large qu'avec la stratégie découplée. Ceci est dû à la zone de transition régulière de F.

L'estimation d'erreur par projections locales raffine le maillage au point de rencontre des profils de vitesse imposés le long de Γ_i^-. Le maillage est également plus adapté en amont qu'en aval de l'écoulement, pour donner une meilleure définition de ces profils de vitesse.

Des coupes de la pseudo-concentration et du profil de vitesse en aval de l'écoulement sont illustrées à la figure 8.9. On remarque que les noeuds sont toujours concentrés



(a) Pseudo-concentration (F)

(b) Vitesse axiale (u_z)

Figure 8.9 Coupes en Γ^+ pour l'écoulement stratifié avec un ratio de débits non unitaire, résolu avec l'approche couplée

à l'interface. Il est particulièrement intéressant de remarquer le comportement de la pseudo-concentration à la figure 8.9(a). Comme on a défini une zone de transition régulière de F en amont de l'écoulement, on s'attendrait à obtenir la même variation en aval. Mais on remarque que ce n'est pas le cas, une oscillation étant présente dans la région de la zone de transition la plus près de l'axe de symétrie. Mais comme on peut le remarquer sur le maillage de la figure 8.8, la stratégie de capture adaptative d'interface a eu du mal à mailler la région de transition. On remarque que la bande d'éléments raffinés est plus fine dans une petite région en amont de l'écoulement. Ceci a pour effet de générer une oscillation numérique qui est transportée jusqu'en aval de l'écoulement, et illustre l'importance de s'assurer que la stratégie adaptative générera un maillage raffiné qui couvrira *toute* la largeur de la région de transition.

Bilan des vérifications

En comparant la hauteur de la surface libre d calculée numériquement à l'aide des deux approches étudiées, avec sa valeur analytique obtenue du développement de Han (1981), on remarque que les interfaces numériques sont à moins de 1% de la valeur analytique. Par exemple, pour le cas test résolu avec la stratégie découplée, on obtient une interface numérique de hauteur $d \approx 1{,}6265$, alors que la valeur analytique est de $d = 1{,}6274$. On s'est aussi assuré qu'il y a conservation de la masse pour chaque fluide extrudé, avec une précision comparable à celle obtenue pour le calcul de la position de la surface libre. Ces observations ont été vérifiées pour une variété de ratios de débits et de viscosités et ce, tant en coordonnées cartésiennes qu'axisymétriques. Nous avons aussi vérifié nos résultats pour un modèle de loi-de-puissance, encore une fois avec la même précision. Les coupes présentées aux figures 8.7 et 8.9 sont similaires à celles que l'on retrouve dans (Fortin et al., 1992; Agassant et al., 1994).

Une dernière comparaison entre les deux stratégies a été effectuée au niveau de la vitesse de convergence. Nous avons repris la simulation de l'écoulement stratifié avec un ratio de viscosités de 1:10, en utilisant l'approche couplée. Nous savons qu'il y a une non-linéarité induite par ce ratio de viscosités qui implique que les algorithmes ont un peu de mal à converger. L'idée est de voir si la résolution complètement couplée du système d'équations non linéaire nous amène plus rapidement vers la solution que la résolution d'une série de problèmes approchés obtenus de l'approche découplée. Nous avons établi les divers critères d'arrêt à 10^{-6} pour les deux approches. Avec la stratégie couplée, 14 itérations ont été nécessaires pour obtenir la convergence. Avec l'approche découplée, 12 itérations globales de point-fixe, chacune nécessitant quelques résolutions des équations de conservation, ont dû être exécutées. On peut négliger le temps requis par la méthode de Galerkin discontinue pour transporter la pseudo-concentration, celui-ci étant négligeable lorsque comparé à la résolution des équations de conservation. Au total, l'approche découplée a nécessité la résolution de 35 systèmes discrets. L'approche couplée s'avère donc efficace.

8.4 Adimensionnalisation

Les écoulements rencontrés en coextrusion sont d'abord caractérisés par le fait que des fluides de différentes natures sont en écoulement dans une même géométrie. En pratique, d'un point de vue rhéologique, il est courant de voir des fluides extrudés dont la viscosité diffère de plusieurs ordres de grandeur. Ces facteurs font que les équations de conservation écrites sous une forme adimensionnelle appropriée, en plus de faire ressortir la physique dominante du problème étudié, « faciliteront » la résolution numérique.

En considérant les quantités de référence du tableau 8.1, et les nombres adimen-

Tableau 8.1

L_0	diamètre du canal en sortie de filière (D)
u_0	vitesse moyenne prescrite en entrée de filière (u_{moy})
ρ_0	densité du fluide 1 (ρ_1)
μ_0	viscosité de référence du fluide 1 ($\mu_{0,1}$)
$T_0\,, T_1$	températures de références
c_{p_0}	chaleur massique du fluide 1 (c_{p_1})
k_0	conductivité thermique du fluide 1 (k_1)

sionnels de *Reynolds*,

$$Re = \frac{\rho_0\, u_0\, L_0}{\mu_0} = \frac{\rho_1\, u_{\text{moy}}\, D}{\mu_{0,1}},$$

et de *Péclet*,

$$Pe = \frac{\rho_0\, c_{p_0}\, u_0\, L_0}{k_0} = \frac{\rho_1\, c_{p_1}\, u_{\text{moy}}\, D}{k_1},$$

les équations de conservation de la quantité de la masse (1.1), de mouvement (1.2) et de l'énergie (1.3) deviennent

$$\tilde{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \tilde{\boldsymbol{u}}_i = 0,$$

$$Re\, \tilde{\rho}_i (\tilde{\boldsymbol{u}}_i \cdot \tilde{\boldsymbol{\nabla}}) \tilde{\boldsymbol{u}}_i = \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_i + Re\, \tilde{\rho}_i\, \tilde{\boldsymbol{f}}_i$$

et

$$(\tilde{u}_i \cdot \tilde{\nabla}\tilde{T}_i) = \frac{1}{Pe}\tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\nabla}\tilde{T}_i).$$

Les quantités surmontées d'un "$\tilde{}$" sont adimensionnelles, *i.e.*

$$\tilde{u}_i = \frac{u_i}{u_0}, \tilde{\rho} = \frac{\rho}{\rho_0}, \text{ etc.}$$

Par la suite, les quantités adimensionnelles $\tilde{u}_i$, $\tilde{p}_i$, $\tilde{\rho}$, ... sont écrites sans les «$\tilde{}$» pour alléger la notation.

8.5 Modélisation de l'écoulement de polymères dans une extrudeuse industrielle

Le but de cette étude est la modélisation de l'écoulement de polymères dans une filière annulaire d'une extrudeuse industrielle. Les dimensions de la filière nous ont été fournies par l'*Institut des matériaux industriels* et celle-ci est schématisée à la figure 8.10. Le projet devait ensuite consister en une phase de validation. Des orifices

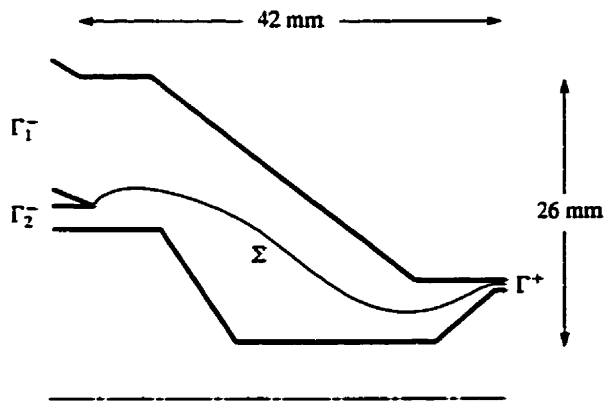


Figure 8.10 Dimensions d'une filière annulaire industrielle

devaient être perforés dans la filière afin d'y introduire des senseurs, qui devaient permettre d'observer la topologie de la surface libre à l'intérieur de la filière. Il aurait alors été possible de valider les résultats numériques avec ces observations. Le projet n'a cependant pas pu être mené à terme.

Nous avons effectué des simulations avec quelques paires de polymères compatibles pour la coextrusion. Nous présentons ici les résultats obtenus avec les paramètres physiques d'un *élastomère thermoplastique* (TPO) et d'un *polyamide* (PA). Les propriétés des polymères sont énumérées au tableau 8.2. Le PA est un fluide new-

Tableau 8.2

		PA	TPO
n_i	(nondim.)	1,0	0,3
λ_i	(s)	-	1,62
$\mu_{0,i}$	(g/mm s)	4000	3600
ρ_i	(g/mm^3)	$0{,}81 \times 10^{-3}$	$1{,}09 \times 10^{-3}$
c_{p_i}	(J/g °C)	1,672	2,5
k_i	(W/mm °C)	$0{,}25 \times 10^{-3}$	$0{,}16 \times 10^{-3}$
α_i	(°C^{-1})	-	$0{,}93 \times 10^{-2}$

tonien. Les paramètres n_i, λ_i et $\mu_{0,i}$ apparaissent dans le modèle de Carreau (1.5) thermodépendant

$$\mu_i(\|\dot{\gamma}_i\|) = e^{-\alpha_i T_i}\, \mu_{0,i} \left(1 + \lambda_i^2 \|\dot{\gamma}_i\|^2\right)^{\frac{n_i - 1}{2}}.$$

On a donc un écoulement dont le ratio de viscosités est de 40:36, avec le PA qui est un fluide newtonien.

Pour des raisons techniques nous n'avons pu nous permettre de considérer la thermique qu'avec l'approche découplée, la résolution couplée des équations modélisant les écoulements thermodépendants allant au-delà des ressources informatiques à notre disposition. L'équation de conservation de l'énergie n'a donc été résolue que dans ce cas. La température initiale du TPO est de 230°C alors que celle du PA est de 280°C. On suppose que les canaux qui mènent les polymères à la filière sont isolés, *i.e.* $\frac{\partial T}{\partial n} = 0$, alors que la température de la filière est maintenue à 255°C. Avec la stratégie couplée, nous nous sommes limités aux écoulements isothermes.

Pour ce qui est des conditions limites en vitesse, on suppose qu'il y a adhérence aux parois et que l'écoulement est complètement développé en Γ^+. Un ratio de débits approprié est imposé en Γ_i^- afin d'obtenir une distribution adéquate des produits en sortie de filière. Le TPO entre en filière en Γ_1^- et le PA entre en Γ_2^-.

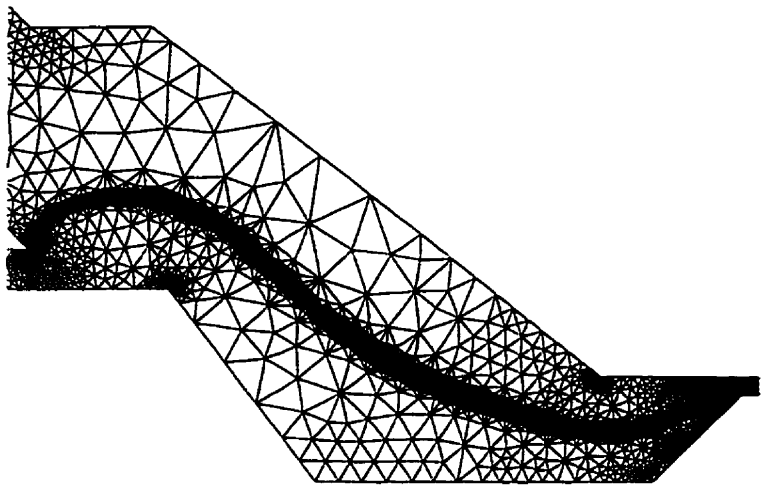


Figure 8.11 Maillage discrétisant la filière annulaire industrielle

La figure 8.11 illustre un maillage caractéristique de ces simulations. On remarque d'abord les éléments raffinés à la surface libre grâce à la capture adaptative d'interface. De plus, l'estimation a posteriori de l'erreur sur les variables dépendantes raffine le maillage aux diverses singularités de la géométrie, ainsi qu'à un endroit névralgique, *i.e.* à la contraction en sortie de filière, là où le fluide accélère (cf. figure 8.12). La modélisation de l'écoulement s'avère y être très délicate, étant donné

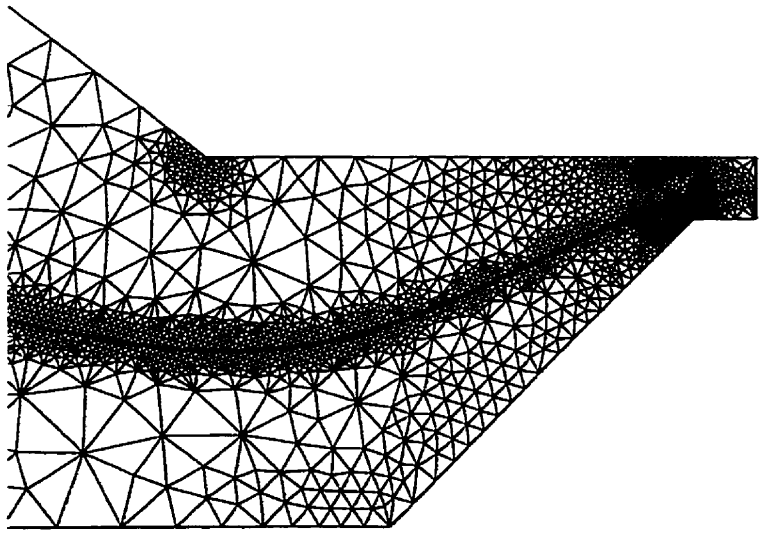


Figure 8.12 Maillage et interface à la sortie de la filière annulaire industrielle

l'importante variation dans les dimensions de la géométrie de la filière. Il a été vérifié que la quantité de matière de chaque fluide extrudé était conservée. Il peut paraître surprenant de constater, malgré la géométrie complexe et l'écoulement hautement non linéaire, que la matière est conservée à environ 1% près. Mais la finesse du maillage illustré à la figure 8.12 explique ce bon comportement.

La figure 8.13 illustre la topologie de l'interface résultante de l'utilisation de ce maillage pour la modélisation numérique. On remarque l'importante courbure à l'intérieure de la filière.

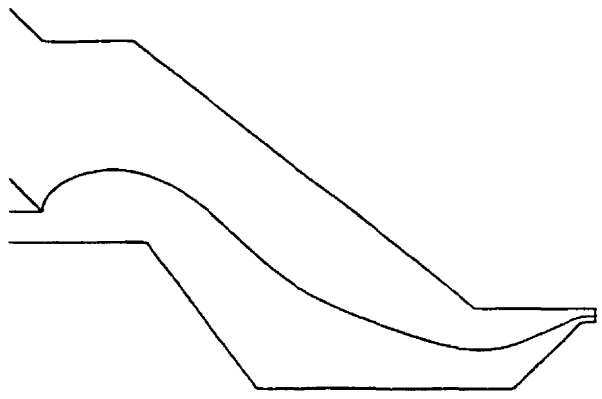


Figure 8.13 Interface numérique dans la filière annulaire industrielle

8.6 Notes et bibliographie

Les travaux sur la modélisation des problèmes de coextrusion, à l'aide de méthode adaptative, ont été initiés lors d'un séjour à l'*Institut des matériaux industriels*, et ont fait l'objet d'un rapport interne (Dufour, 1995) et de quelques communications scientifiques (Dufour et al., 1996; Dufour et Pelletier, 1998a).

CHAPITRE 9

LES JETS

Nous allons maintenant porter notre attention vers les écoulements de jet laminaire liquide dans un milieu ambiant gazeux. Le but sera toujours de déterminer de façon la plus précise possible la position de la surface libre. Nous verrons que ces problèmes sont intéressants autant d'un point de vue pratique que numérique. Il sera toutefois nécessaire de surmonter quelques difficultés techniques additionnelles inhérentes à l'utilisation d'une stratégie eulérienne pour modéliser numériquement ce type d'écoulement.

Après avoir présenté les écoulements de jet et décrit quelques efforts qui ont été faits pour les modéliser numériquement, quelques modifications sont apportées à notre méthodologie numérique générale afin de traiter correctement ces écoulements. La vérification et la validation de l'approche proposée, à l'aide de la modélisation de divers écoulements de jet libre, sont présentées. Des résultats préliminaires traitant de la modélisation de l'écoulement d'un jet impactant terminent ce volet de notre étude.

9.1 Les écoulements de jet dans un contexte industriel

Un jet permet d'obtenir d'important transfert thermique, ce qui en fait un procédé intéressant pour les opérations industrielles de refroidissement, de chauffage et de séchage. La peinture à air comprimé, le séchage du papier et des textiles, le traitement thermique du verre, des feuilles métalliques et les systèmes à décollage vertical pour les aéronefs sont quelques exemples d'application des jets.

L'étude des jets est aussi intéressante d'un point de vue numérique, étant donné la diversité des comportements que l'on retrouve dans ce type d'écoulement. On observe une discontinuité dans les conditions aux frontières, où la vitesse du fluide

est nulle à la paroi pour devenir brusquement prescrite à l'interface, en aval du tube. La position de cette interface est influencée par l'écoulement et par la tension superficielle, qui a un rôle non négligeable à jouer en sortie du tube, puisque c'est souvent à cet endroit que la courbure de la surface libre est la plus importante.

D'un point de vue pratique, il est important de bien identifier les différentes parties de l'écoulement, étant donné les caractéristiques particulières qui leurs sont associées. Par exemple, dans le cas d'un système de refroidissement, un ressaut hydraulique est souvent présent en aval de la région d'impact du jet. La région sous-critique du jet, où le fluide ralenti, perd ses propriétés de transfert thermique. Il est donc important de pouvoir identifier numériquement de façon précise ce type de région afin d'être en mesure d'optimiser le design des systèmes. La modélisation numérique peut être rendue plus délicate par la présence de la tension superficielle, qui influence la topologie de la surface libre et par conséquent les caractéristiques thermiques de l'écoulement (Liu et Lienhard V, 1993).

Puisque la turbulence joue un rôle important dans une grande quantité d'écoulements de jet, on retrouve beaucoup plus d'études sur ce type de jet. Les jets impactants, laminaires et axisymétriques sont toutefois couramment rencontrés dans les applications industrielles (Aihara et al., 1990), d'où notre intérêt pour ceux-ci. D'autant plus que la tension superficielle est plus importante à bas nombre de Reynolds. Nous nous intéressons donc pas aux écoulements turbulents.

Nous allons d'abord modéliser les écoulements de jet libre. Ceux-ci nous permettront de vérifier et de valider notre méthodologie numérique à l'aide de résultats expérimentaux et numériques disponibles dans la littérature. Il ne faut pas négliger la place des jets libres dans les applications industrielles. On n'a qu'à penser à l'écoulement de polymère en capillaire, utilisé en coextrusion, dans la fabrication de fibre ou dans le moulage.

9.2 La modélisation numérique des écoulements de jet

Nickell et al. (1974) furent les premiers à modéliser numériquement les jets à l'aide de la méthode des éléments finis, qui est naturelle pour traiter ce type d'écoulement. Une série de noeuds discrétise la surface libre. Leur position est mise à jour à l'aide du champ de vitesse provenant de la résolution des équations de conservation sur le maillage lagrangien, ainsi que d'une condition d'équilibre à l'interface. Les équations ne sont donc résolues que pour le fluide. Les pours et les contres de cette approche sont présentés à la section 4.2. Le suivi d'interface est efficace et précis pour ce type de problème et est relativement simple à implémenter. En fait, la plupart des efforts pour modéliser les jets sont faits dans ce contexte lagrangien (Reddy et Tanner, 1978; Omodei, 1980).

Toujours dans le but d'offrir une méthodologie générale pour la modélisation des écoulements à surfaces libres, nous optons pour l'approche eulérienne. Nous espérons que la méthodologie adaptative puisse compenser pour les limitations de la stratégie eulérienne pour ce type d'écoulement. Nous nous basons donc sur l'approche développée par Fortin et al. (1992) pour l'étude de la coextrusion et du gonflement en sortie de filière. L'approche est similaire à celle utilisée au chapitre 8. Quelques particularités associées à ces écoulements font que des difficultés numériques supplémentaires doivent être considérées, telles la satisfaction de la condition d'équilibre à l'interface, les forts ratios de densités et les écoulements à nombre de Reynolds élevé.

9.3 Adimensionnalisation

Afin d'aider à identifier les caractéristiques physiques des écoulements de jet, les équations à résoudre sont adimensionnalisées. D'un point de vue numérique, l'adimensionnalisation sert également à *préconditionner* le système d'équations aux dérivées partielles, permettant aux méthodes numériques de mieux fonctionner. En utilisant les quantités de référence décrites au tableau 9.1, l'équation de conservation

Tableau 9.1

L_0	diamètre du tube ($D = 2R_0$)
u_0	vitesse moyenne imposée dans le tube (u_{moy})
ρ_0	densité du liquide (ρ_1)
μ_0	viscosité du liquide (μ_1)
α	coefficient de tension superficielle

de la masse (1.1) demeure inchangée,

$$\tilde{\nabla} \cdot \tilde{u}_i = 0.$$

Les équations de conservation de la quantité de mouvement (1.2) deviennent soit

$$Re\, \tilde{\rho}_i (\tilde{u}_i \cdot \tilde{\nabla}) \tilde{u}_i = \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\sigma}_i + Re\, \tilde{\rho}_i\, \tilde{f}_i + Ca\, \tilde{\kappa}\, \tilde{\nabla} F,$$

soit

$$\tilde{\rho}_i (\tilde{u}_i \cdot \tilde{\nabla}) \tilde{u}_i = \frac{1}{Re} \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\sigma}_i + \tilde{\rho}_i\, \tilde{f}_i + \frac{1}{We} \tilde{\kappa}\, \tilde{\nabla} F,$$

la forme utilisée dépendant de l'ordre de grandeur du *nombre de Reynolds*, qui est défini comme

$$Re = \frac{\rho_0\, u_0\, L_0}{\mu_0} = \frac{2\, \rho_1\, u_{\text{moy}}\, R_0}{\mu_1}.$$

Le *nombre capillaire*, tel qu'on le retrouve dans la littérature sur les écoulements de jet, est défini comme

$$Ca = \frac{\alpha}{\mu_0\, u_0} = \frac{\alpha}{\mu_1\, u_{\text{moy}}},$$

et le *nombre de Weber* comme,

$$We = \frac{\rho_0\, u_0^2\, L_0}{\alpha} = \frac{2\, \rho_1\, u_{\text{moy}}^2\, R_0}{\alpha},$$

où Ca et We mesurent l'importance relative entre les forces visqueuses qui causent la déformation et la force capillaire qui résiste à cette déformation. On retrouve

aussi souvent, dans la littérature sur les écoulements de jet, le *paramètre de tension superficielle*

$$S = \frac{Re\,Ca}{2} = \frac{\rho_0\,\alpha\,L_0}{\mu_0^2} = \frac{\rho_1\,\alpha\,R_0}{\mu_1^2},$$

qui est souvent préféré au nombre de Weber lorsque l'écoulement n'est pas rempant, puisqu'il est indépendant de la vitesse du jet. Notons qu'une précision doit être apportée concernant le choix de la longueur de référence. En consultant la littérature sur les jets, on peut remarquer que les auteurs utilisent soit le diamètre du tube $D = 2R_0$, soit son rayon R_0 et ce, dans un même article! Pour les fins de comparaison, nous avons tenté de suivre la « tendance » utilisée par les auteurs consultés. Il ne faut donc pas être surpris si nous passons d'une définition à l'autre dans ce chapitre. Nous avons un tel exemple dans la définition du paramètre de tension superficielle S, où la longueur de référence utilisée est R_0 et non D. Un autre nombre adimensionnel, utile pour l'étude quantitative des problèmes de jet, est le *gonflement*,

$$\chi = \frac{R_\infty}{R_0},$$

où R_0 est le rayon du tube et R_∞ est la « hauteur » de la surface libre lorsque l'écoulement est complètement développé.

9.4 La stratégie numérique

Les fluides sous étude sont toujours incompressibles et immiscibles. Nous ne traitons que les écoulements isothermes. Nous négligeons l'effet de la gravité afin de pouvoir comparer nos résultats avec ceux que l'on retrouve dans la littérature. Les simulations sont faites dans un système de coordonnées axisymétrique, en accord avec la physique des écoulements étudiés. Nous n'utilisons que la stratégie couplée, résolvant les équations de conservation avec la méthode de Galerkin et l'équation de transport avec la méthode SUPG.

Comme pour les écoulements stratifiés, il a été nécessaire de faire appel à la technique de capture adaptative d'interface pour éviter une trop grande diffusion dans la taille des éléments à la surface libre, en aval de l'écoulement.

En plus de la méthodologie générale présentée au chapitre 6, des considérations particulières s'appliquent aux écoulements de jet. Puisque nous étudions l'écoulement d'un jet liquide dans un gaz, nous avons que $\rho_1 \gg \rho_2$. Ceci implique que l'on peut négliger le terme convectif dans les équations de Navier-Stokes pour $\boldsymbol{x} \in \Omega_2$, ce qui nous donne un écoulement rampant dans le milieu ambiant. La condition d'équilibre à l'interface, pour les jets, est donnée par

$$-\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \alpha \kappa \mathbf{n}_\Sigma . \tag{9.1}$$

Tel que proposé par Fortin et al. (1992), la viscosité du milieu ambiant est « artificiellement » définie de telle sorte que $\mu_1 \gg \mu_2$, ce qui nous permet de respecter la condition d'équilibre (9.1) à l'aide de la condition d'équilibre des forces à l'interface (1.10). En pratique, nous utiliserons l'expression (6.1) sous la forme

$$\mu(F) = 10^{-3} + (\mu_1 - 10^{-3})F(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \Omega,$$

afin de respecter la condition (9.1). On utilise une expression similaire pour la densité.

Puisque l'écoulement d'un jet libre est tel que ses lignes de courant convergent de part et d'autre de la surface libre, tel qu'illustré à la figure 9.1, il est difficile de conserver une région de transition de la pseudo-concentration qui soit régulière et de largeur contrôlée. La régularité de la zone de transition, qui n'était pas critique pour les problèmes de coextrusion, devient ici fondamentale puisque nous voulons calculer les différentes composantes entrant dans l'évaluation de la tension superficielle. Si l'écoulement a pour effet de réduire la largeur de la région de transition, des oscillations numériques apparaissent, tout spécialement en aval de l'écoulement et il devient impossible d'évaluer la force capillaire de façon précise. Pour maintenir la région de transition régulière, nous avons opté pour l'utilisation d'une technique de capture de discontinuité, présentée à la section 2.3.4. L'utilisation de cette ap-

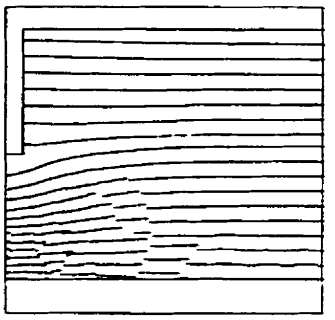


Figure 9.1 Les lignes de courant associées à un jet libre

proche est naturelle dans notre contexte puisque nous travaillons dans le cadre des méthodes d'éléments finis stabilisées.

La dernière précaution a trait à l'initialisation de la pseudo-concentration en Γ^-. Il semble naturel de définir $F = 1$ à l'entrée du tube et $F = 0$ ailleurs. Mais puisque l'isovaleur $\frac{1}{2}$ détermine la position de la surface libre, on se retrouvera avec une interface numérique qui n'est pas définie sur le coin aval du tube, mais dans la région en haut de celui-ci. Cette situation ne correspond pas à la physique du problème puisque le fluide se trouve « à entrer au-dessus du tube ». Cette erreur de modélisation cause une sur-évaluation du gonflement. Il a donc été décidé d'élargir la région de définition de Γ^- d'une longueur égale à la moitié de la zone de transition de la pseudo-concentration (cf. figure 9.2). Ainsi, on impose directement la valeur $\frac{1}{2}$

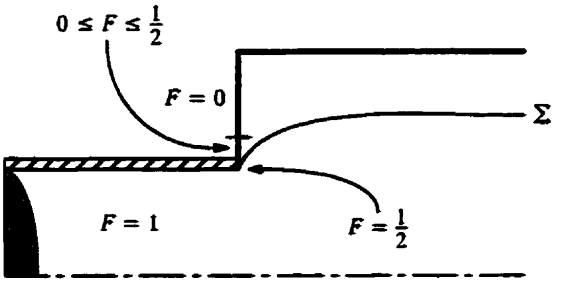


Figure 9.2 Le problème de l'initialisation de F en aval du tube

à la sortie du tube et la zone de transition de F se poursuit au-dessus du tube. À l'aide d'un résoluteur de Galerkin discontinu, il ne semble pas possible de définir la pseudo-concentration à $F = \frac{1}{2}$ sur le coin sortant du tube. Celle-ci doit absolument être égale à 1 en Γ^- et par conséquent sur le coin sortant.

9.5 Les jets libres

Le *jet libre*, illustré à la figure 9.3, consiste en un fluide qui sort d'un tube dans un milieu ambiant gazeux. On observe que ce fluide occupe soit plus, soit moins de

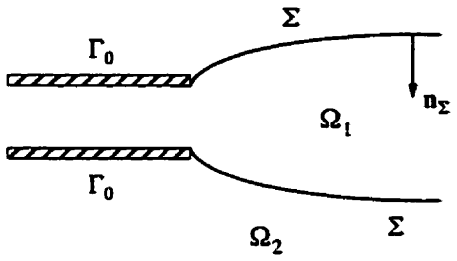


Figure 9.3 Le jet libre

volume à sa sortie du tube, tout dépendant des caractéristiques du système. Dans le premier cas, on parle de *gonflement en sortie de filière*. On observe un retrait du jet pour de plus grands nombres de Reynolds. Le comportement de l'interface en sortie de filière est directement relié à l'inertie de l'écoulement. La tension superficielle est également connue pour avoir une influence sur la topologie de l'interface d'un jet libre, inhibant le déplacement de celle-ci. Dans le présent travail, l'étude des jets libres constitue une étape de vérification et de validation avant de s'attaquer à l'étude des jets impactants, qui introduisent des difficultés numériques additionnelles.

Pour ce qui est de la modélisation numérique des problèmes de jet libre, les coordonnées axisymétriques sont utilisées, ceci nous permettant de profiter de la symétrie axiale du problème et de n'avoir à discrétiser qu'une fraction du domaine. Les dimensions adimensionnelles du demi-tube sont de 2×1 unités, alors que le milieu ambiant numérique est « haut » de 2 unités. Pour ce qui est de sa longueur, elle est choisie de telle sorte que l'écoulement puisse être complètement développé. Les conditions limites associées à ce problème sont illustrées à la figure 9.4. La vitesse axiale imposée dans le tube est donnée par

$$u_z = 2\,u_{\text{moy}}\left(1 - \frac{r^2}{R_0^2}\right).$$

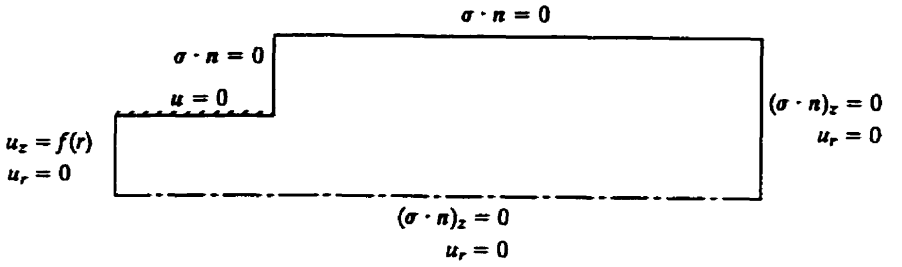


Figure 9.4 Les conditions limites pour le problème de jet libre

9.5.1 Écoulement rempant d'un jet libre, sans tension superficielle

Le premier écoulement étudié est un problème classique, d'abord modélisé par Nickell et al. (1974), soit celui de l'écoulement rempant d'un jet libre, sans présence de gravité ou de tension superficielle. La modélisation de l'écoulement sera validée en comparant le gonflement de jet observé expérimentalement avec celui calculé numériquement. Dans le cas axisymétrique, on observe un gonflement d'environ $\chi = 13\%$.

Nous avons exécuté trois cycles adaptatifs pour obtenir le maillage de la figure 9.5. Il est clair qu'un maillage aussi fin n'est pas absolument nécessaire pour obtenir

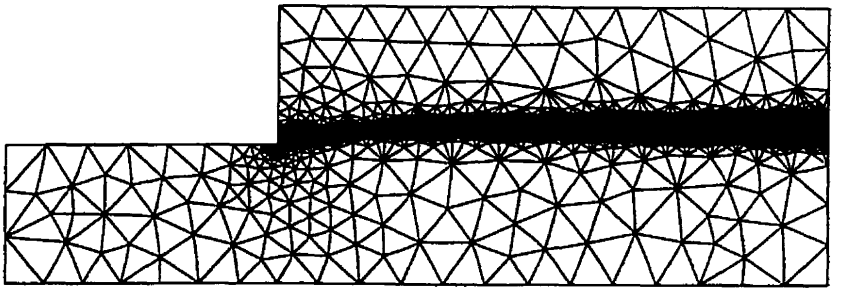


Figure 9.5 Maillage de 5693 éléments utilisé pour l'étude numérique du problème de jet proposé par Nickell et al. ($Re = 0$, $Ca = 0$)

des résultats jugés précis. Le but est de montrer qu'il est possible de raffiner le maillage à l'interface tant que cela est nécessaire. Le maillage du deuxième cycle adaptatif, qui est formé d'environ 2400 éléments, aurait tout aussi bien pu faire l'affaire. Nous avons tout de même utilisé le maillage de la figure 9.5 pour calculer les approximations numériques qui sont présentées dans cette section. Précisons

que le raffinement à l'interface est surtout dû à la capture adaptative d'interface. Les résultats de l'estimation d'erreur a posteriori sur les variables dépendantes sont également apparents sur le coin aval du tube, où le maillage raffiné est important pour aider à la capture de la discontinuité. Ceci permet aussi de modéliser de façon précise la position de l'interface dès sa sortie du tube. On peut voir de plus près le maillage en sortie du tube à la figure 9.6.

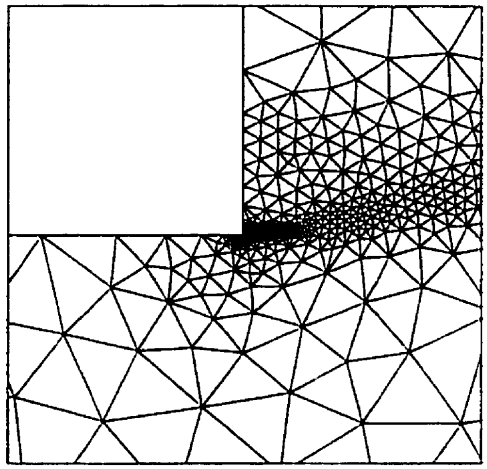


Figure 9.6 Maillage raffiné à la sortie du tube pour l'étude numérique du problème de jet proposé par Nickell et al. ($Re = 0$, $Ca = 0$)

La figure 9.7 illustre la position de la surface libre calculée numériquement, avec les données expérimentales de Nickell et al. (1974). On remarque la concordance entre

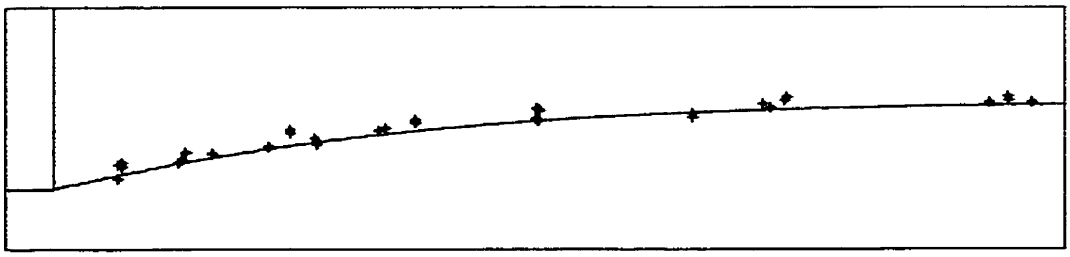


Figure 9.7 Jet libre numérique et mesures expérimentales de Nickell et al. ($Re = 0$, $Ca = 0$)

l'approximation numérique et les données expérimentales. Le gonflement numérique calculé est de $\chi = 13.5\%$, ce qui correspond *exactement* à la régression non linéaire des données expérimentales calculée par Nickell et al.

On peut observer à la figure 9.8 le saut de la pseudo-concentration, avec la zone de transition étroite, mais rendue régulière grâce à l'algorithme de capture de discontinuité.

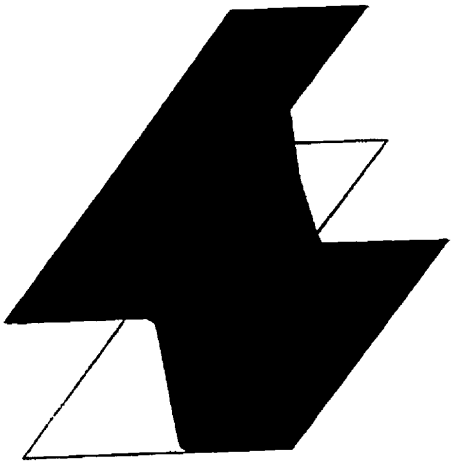


Figure 9.8 Saut de la pseudo-concentration F pour le problème de jet libre de Nickell et al. ($Re = 0$, $Ca = 0$)

9.5.2 Écoulement rempant d'un jet libre, avec tension superficielle

On reprend la simulation de la section précédente, mais en ajoutant la tension superficielle. Reddy et Tanner (1978) ont étudié cet écoulement pour un nombre capillaire de $Ca = 1$ et ont observé numériquement une réduction du gonflement de l'ordre de 4% par rapport au cas sans tension superficielle. Nous nous baserons sur ce résultat pour vérifier notre algorithme.

La modélisation des écoulements de jet avec tension superficielle nécessite une procédure particulière. Nous démarrons la résolution sans tension superficielle, afin d'avoir accès à une interface initiale. Lorsque la surface libre est établie, nous avons l'information nécessaire au calcul des composantes qui entrent dans l'évaluation de la tension superficielle. On enclenche alors ces calculs supplémentaires afin d'ajouter les effets de la force capillaire pour corriger la position de la surface libre.

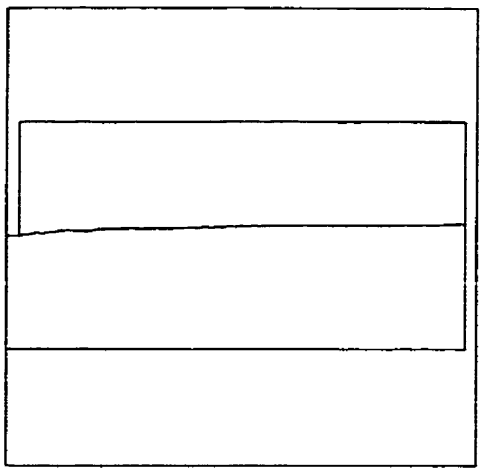


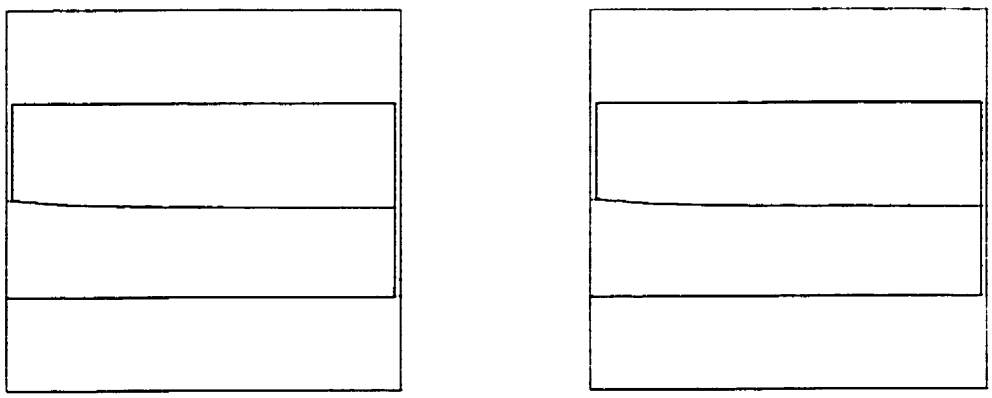
Figure 9.9 Interface numérique pour le problème de jet libre proposé par Reddy et Tanner ($Re = 0$, $Ca = 1$)

L'interface résultante de cette simulation est illustrée à la figure 9.9. On observe un gonflement moins important que pour le cas $Ca = 0$. En fait, on obtient une réduction du gonflement d'environ 2,5%, ce qui donne un gonflement de $\chi = 1{,}107$. Nous sommes donc en dessous de ce qu'obtiennent numériquement Reddy et Tanner. Nous attribuons cet écart à deux causes. Premièrement, la discontinuité en aval du tube est la cause de plusieurs difficultés numériques. La pression contient une importante discontinuité à ce point. Et nous avons déjà soulevé le point que l'approximation en pression est directement reliée à l'évaluation de la force capillaire. Donc, une approximation imprécise de la pression a pour effet de rendre la modélisation numérique de la tension superficielle périlleuse. L'algorithme de suivi d'interface souffre aussi de cette discontinuité. Même si on a en partie contourné le problème en étendant la définition de la région de transition de la pseudo-concentration « en haut » du tube pour avoir une variation régulière pour $0 \leq F \leq \frac{1}{2}$. Il reste que F varie brusquement de $\frac{1}{2}$ à 1 à la paroi du tube. Ce « demi-saut » en pseudo-concentration étant inévitable, le calcul des normales et de la courbure devient imprécis. Ceci entraîne donc une mauvaise évaluation de la force capillaire en sortie du tube. Finalement, l'algorithme pseudo-transitoire, avec l'utilisation d'une matrice masse, est loin d'être idéal et nous en observons peut-être une des conséquences. De plus, la convergence est beaucoup plus difficile à atteindre pour ce type de problème que pour le problème de Laplace. On doit plutôt se fier à des considérations de conservation de la matière pour nous aider à identifier la solution du problème.

9.5.3 Écoulement d'un jet libre avec inertie

La dernière étape de validation que nous étudions est celle d'un jet libre, avec tension superficielle, qui est influencé par l'inertie de l'écoulement. Il est connu que le gonflement d'un jet est réduit lorsque le nombre de Reynolds augmente. On observe également que la tension superficielle influence moins la topologie de la surface libre. Passé un nombre de Reynolds critique, de l'ordre de 14,4 pour un écoulement axisymétrique (Goren et Wronski, 1966), il y a inversion dans la courbure de la surface libre et on observe un gonflement négatif.

Nous allons donc considérer l'écoulement d'un jet libre caractérisé par les nombres adimensionnels $Re = 24$ et $S = 0{,}3$. On utilise la même procédure numérique qu'à la section précédente. Pour le cas $S = 0$, on obtient ce qui est observé qualitativement en pratique, soit un gonflement négatif d'environ $-7{,}5\%$ dans ce cas (cf. figure 9.10(a)). En activant la tension superficielle, on observe une modifi-



(a) $S = 0$ (b) S = 0,3

Figure 9.10 Jet libre numérique avec inertie ($Re = 24$)

cation à peine perceptible de la topologie de la surface libre de moins de 0,1% (cf. figure 9.10(b)). Goren et Wronski (1966) observent expérimentalement, avec la tension superficielle, un gonflement de $\chi = -4{,}6\%$. Il est observé que pour un tel nombre de Reynolds, la tension superficielle modifie le gonflement d'environ 0,2% (Reddy et Tanner, 1978).

9.6 Les jets impactants

Le *jet impactant*, couramment utilisé dans l'industrie, consiste en un jet libre entrant perpendiculairement en contact avec une paroi solide. Tel qu'illustré à la figure 9.11, cet écoulement est composé de plusieurs zones caractéristiques, ce qui en fait un sujet d'étude intéressant. Sous certaines conditions, la tension superficielle peut produire un ressaut hydraulique en aval de l'écoulement.

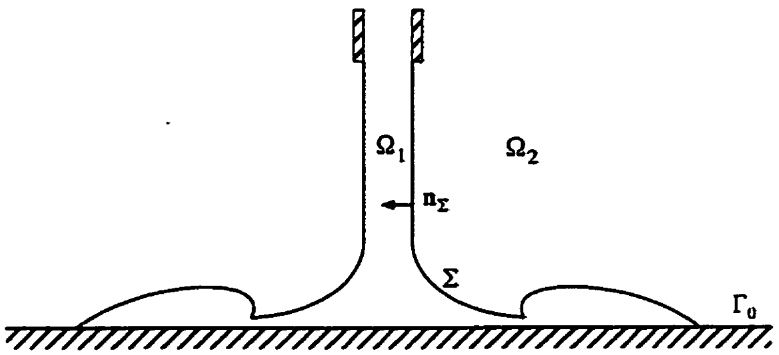


Figure 9.11 Le jet normal

Dans cette étude, nous nous intéressons aux jets impactants *émergés* et en particulier, à la topologie de l'interface fluide-gaz et à l'écoulement sous-jacent. Une difficulté additionnelle doit être considérée, *i.e.* le nombre de Reynolds associé à un jet impactant est beaucoup plus élevé en pratique que pour les écoulements de jet libre. Ceci s'accompagne donc de difficultés numériques additionnelles associées aux écoulements à convection dominante. Notre but à moyen terme est d'étudier l'influence de la tension superficielle sur les jets impactants. Mais comme la physique entourant l'écoulement de tel jet est complexe, il n'a pas été possible de compléter notre étude de ces phénomènes et d'inclure l'influence de la tension superficielle dans cette recherche.

Les études numériques des écoulements de jet impactant sont difficiles à trouver. À notre connaissance, la seule étude numérique d'un tel écoulement, avec modélisation d'un ressaut hydraulique circulaire, est décrite dans (Chaudhry, 1994). Celui-ci

résout les équations de Boussinesq, une variation des équations de St-Venant, dans lesquelles est inclue la hauteur de la surface libre. En résolvant ces équations à l'aide de shémas de différences finies avec capture de choc, Chaudhry réussit à obtenir des résultats de qualité, validés par des données expérimentales. Dans notre cas, nous nous limitons à la présentation de quelques résultats de simulation d'un jet impactant émergé, sans tension superficielle.

Le problème est similaire au jet libre. Les conditions limites utilisées pour la simulation sont illustrées à la figure 9.12. Malgré un nombre de Reynolds assez modeste

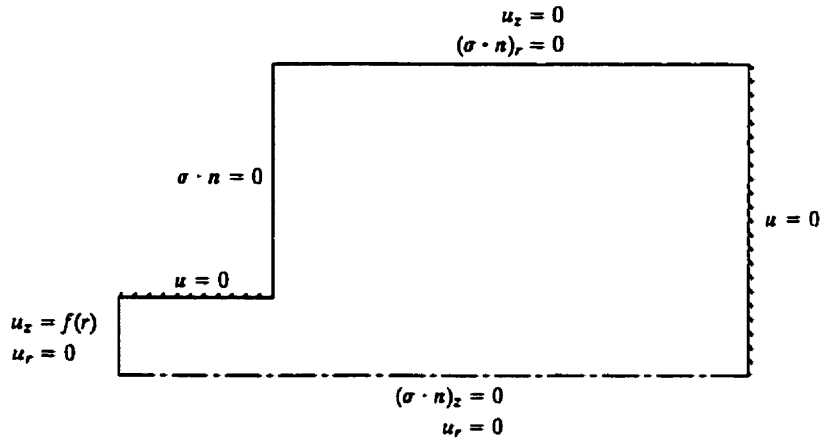
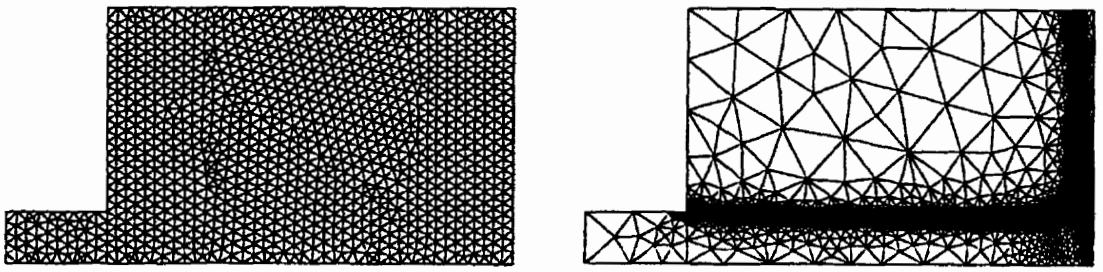


Figure 9.12 Les conditions limites pour le problème du jet impactant

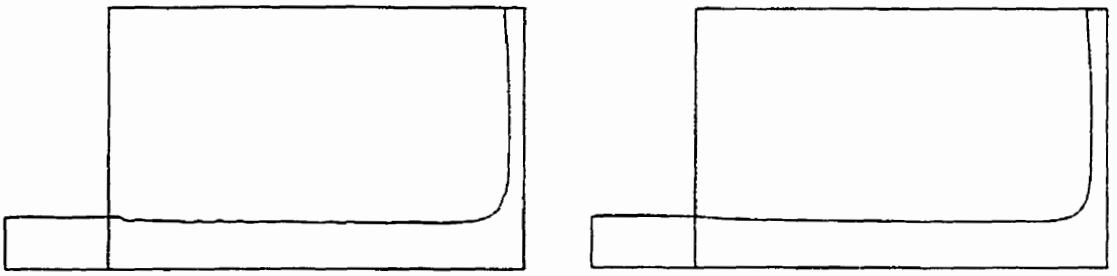
de $Re = 100$, un maillage initial relativement fin a dû être utilisé afin d'obtenir une première solution. Deux cycles adaptatifs ont été exécutés. Le maillage initial et le maillage obtenu au deuxième cycle adaptatif sont illustrés à la figure 9.13. On peut deviner la position de la surface libre en observant le raffinement du maillage final. On remarque aussi un raffinement plus important près de la région de stagnation du jet, ceci étant dû à l'important gradient de pression à cet endroit. On constate aussi les économies de calcul obtenues en amont de l'écoulement du gaz ambiant.

On peut constater, à la figure 9.14, l'influence de l'adaptativité sur la définition des surfaces libres numériques. On remarque d'abord la forme caractéristique du jet en sortie du tube pour un nombre de Reynolds élevé. On remarque également la meilleure définition de la surface libre, en sortie du tube, pour la simulation exécutée avec le maillage adapté. Nous connaissons l'importance d'une représentation



(a) Maillage initial (b) Cycle 2

Figure 9.13 Maillages utilisés pour la modélisation du jet impactant

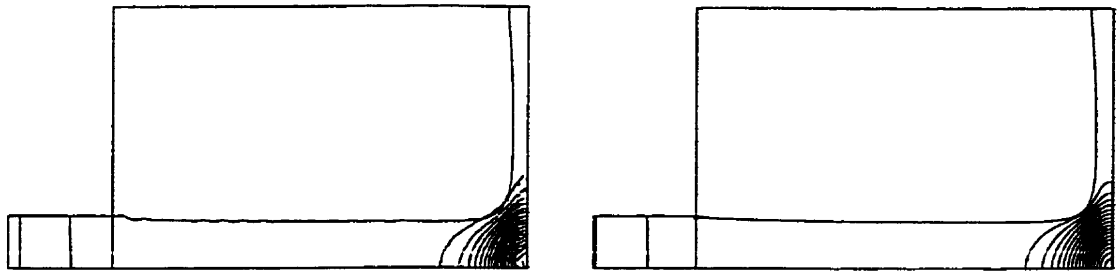


(a) Maillage initial (b) Cycle 2

Figure 9.14 Interfaces numériques pour le problème du jet impactant

précise de l'interface en aval du tube. La régularité de la surface libre est également assurée dans les régions de courbure importante, *i.e.* dans la région d'impact du jet. Ceci facilitera l'évaluation des normales et de la courbure lorsque viendra le temps d'étudier les ressauts hydrauliques.

Finalement, on illustre la pression calculée à la figure 9.15. On comprend pourquoi l'estimateur d'erreur « a jugé bon » de raffiner le maillage dans la région de stagnation du jet. L'important gradient de pression y est beaucoup mieux représenté à l'aide du maillage raffiné.



(a) Maillage initial (b) Cycle 2

Figure 9.15 Distribution de pression pour le problème du jet impactant

9.7 Notes et bibliographie

Nous ne prétendons pas avoir révolutionné l'analyse numérique avec les résultats de la section 9.5. En consultant la littérature sur ce sujet, on peut constater que la modélisation numérique de ces problèmes était déjà maîtrisée dans les années soixante-dix. Ceci a été rendu possible grâce à l'utilisation de la stratégie lagrangienne, celle-ci faisant de la modélisation de jet un problème « facile ». Alors que l'utilisation d'une stratégie eulérienne fait de la simulation des jets un problème « difficile ». Nous rappelons qu'un des buts de cette thèse est le développement d'une méthodologie *générale*, applicable à tous types de problème.

CHAPITRE 10

LA DYNAMIQUE DE BULLES ET DE GOUTTELETTES

Ce chapitre traite de l'étude numérique de la dynamique d'une gouttelette, ou d'une bulle[1], soumise à un écoulement linéaire. Taylor fût le premier à faire une étude exhaustive de ce problème. Plusieurs données de qualité sont disponibles dans la littérature, ce qui nous a amené à nous intéresser à ce problème. Ce type d'écoulement étant dominé par les effets de la tension superficielle, la méthodologie présentée au chapitre 5 sera centrale dans ces simulations.

Le problème de Taylor, avec une brève description du montage expérimental utilisé pour produire les données qui sont utilisées, est d'abord présenté. Les nombres adimensionnels sur lesquels nous nous baserons pour faire l'analyse des écoulements de gouttelettes sont ensuite définis. Des détails sur la méthodologie numérique utilisée pour modéliser ce type d'écoulement, ainsi que son positionnement dans ce que l'on retrouve dans la littérature, sont alors décrits. Suivent quelques résultats numériques, qui sont confrontés aux données expérimentales disponibles dans la littérature.

10.1 Le problème de Taylor

Soit une goutte sphérique d'un liquide dans un autre liquide au repos. Les deux fluides sont newtoniens et immiscibles. La bulle est soumise à un *écoulement linéaire* bidimensionnel, décrit par le champ de vitesse

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{\nabla u})\boldsymbol{x} = \frac{1}{2}\dot{\gamma}\begin{pmatrix} 1+\beta & 1-\beta \\ -1+\beta & -1-\beta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \tag{10.1}$$

1. On parle de gouttelettes lorsque les milieux sont de phase liquide et de bulles lorsque les fluides sont de différentes phases. Nous ne serons pas très rigoureux dans l'utilisation de ces termes, ce qui nous permettra de ne pas être trop répétitif.

où $\dot{\gamma}$ est le cisaillement associé à l'écoulement. Le paramètre β détermine le type d'écoulement auquel la goutte est soumise. Par exemple, pour $\beta = 1$, on obtient un *écoulement élongationnel*:

$$\begin{cases} u(x\,,y) = \quad \dot{\gamma}\,x; \\ v(x\,,y) = -\dot{\gamma}\,y, \end{cases}$$

alors que pour $\beta = 0$, on obtient un *écoulement cisaillé*:

$$\begin{cases} u(x\,,y) = \dot{\gamma}\,y; \\ v(x\,,y) = \quad 0. \end{cases}$$

Le comportement observé est que les contraintes appliquées à la goutte par l'écoulement font qu'elle se déforme et va jusqu'à se briser sous certaines conditions, alors que la force capillaire résiste à cette déformation.

Étudier la dynamique de gouttelettes soumises à ce type d'écoulement, qui peut paraître simple et sembler n'être d'intérêt que d'un point de vue académique, est justifié par le fait que pour des écoulements industriels, les longueurs caractéristiques des gouttes isolées sont très petites comparées à celles de l'écoulement global. L'étude du comportement d'une ou de quelques gouttelettes isolées dans un écoulement linéaire constituera donc une approximation acceptable à l'échelle d'une goutte. Une fois la modélisation numérique de ce type d'écoulement maîtrisée, nous pourrons espérer être en mesure de nous attaquer au problème global que l'on peut retrouver dans les applications industrielles. Le but est soit de répandre une phase liquide dans une autre, soit d'augmenter les surfaces de contact entre deux phases afin d'obtenir un transfert de chaleur plus efficace, soit pour déterminer le comportement rhéologique d'une émulsion. Des exemples pratiques peuvent être trouvés dans des procédés tels les suspensions, les émulsions, la dispersion de colorants, d'agents anti-statiques, le malaxage multiphase de fluide immiscible, l'impression à jets d'encre, la fabrication de verre biphase, la séparation du pétrole et de l'eau ou le contrôle du carburant dans les systèmes à propulsion liquide en état d'apesanteur (Stone, 1994; Ostrach, 1982; Bentley et Leal, 1986a).

D'un point de vue expérimental, ce type d'écoulement est généré à l'aide d'un système de quatre rouleaux rotatifs plongés dans un bassin (cf. figure 10.1). Ce

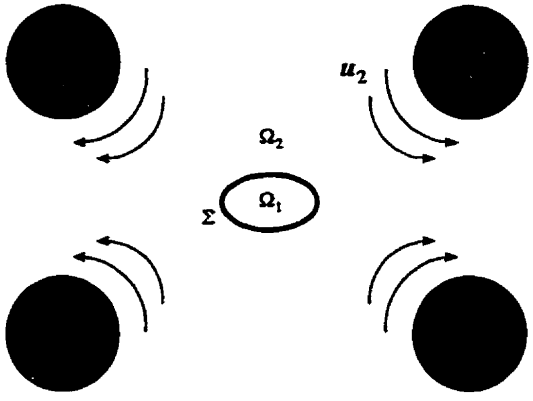


Figure 10.1 Le montage de Taylor

montage fût initialement utilisé par Taylor (1934), qui contrôlait les rouleaux manuellement. Il est important que le taux de rotation de chaque cylindre soit tel que le cisaillement demeure constant et que le centre de gravité de la bulle soit maintenu au point de stagnation de l'écoulement, que l'on définit comme étant à l'origine du système de coordonnées. Ceci n'étant pas une mince tâche, Bentley et Leal (1986a) ont raffiné ce montage en profitant des possibilités de l'informatique. Ils ont conçu un système automatisé permettant de contrôler de façon précise la rotation des rouleaux. Ce montage leur a permis d'obtenir une quantité importante de données de grande qualité. Ceci nous mena donc à nous baser sur ces résultats expérimentaux pour valider nos résultats numériques. En pratique, ce montage ne peut être utilisé que pour des écoulements qui sont tels que $|\beta| > 0{,}2$. Sinon, deux des rouleaux interfèrent avec l'écoulement. Donc, pour l'écoulement cisaillé, il serait nécessaire d'enlever deux rouleaux du montage. C'est pourquoi en pratique, l'écoulement cisaillé est généré à l'aide de deux bandes parallèles qui se déplacent en directions opposées, générant ainsi le cisaillement voulu. Ce cas limite a été étudié numériquement par Béliveau et al. (1998) et de façon succinte à l'aide de la méthodologie proposée dans cette thèse (Dufour et Pelletier, 1998b).

10.2 Adimensionnalisation

L'écoulement de gouttelettes peut être caractérisé par quelques paramètres adimensionnels, définis à l'aide des quantités de référence du tableau 10.1. L'équation de

Tableau 10.1

L_0	rayon de la goutte au repos (a)
u_0	$a\dot{\gamma}$
ρ_0	densité du milieu ambiant (ρ_2)
μ_0	viscosité du milieu ambiant (μ_2)
α	coefficient de tension superficielle

conservation de la masse (1.1), sous forme adimensionnelle, reste inchangée,

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{u}_i = 0,$$

alors que l'équation de conservation de la quantité de mouvement (1.2) devient

$$Re\,\bar{\rho}_i(\bar{u}_i \cdot \bar{\nabla})\bar{u}_i = \bar{\nabla} \cdot \bar{\sigma}_i + Re\,\bar{\rho}_i \bar{f}_i,$$

puisque nous étudions, dans ce cas, des écoulements dont les effets visqueux sont dominants. Le *nombre de Reynolds* est défini comme

$$Re = \frac{\rho_0\, u_0\, L_0}{\mu_0} = \frac{\rho_2\, \dot{\gamma}\, a^2}{\mu_2}.$$

L'équilibre des forces à l'interface devient

$$(\bar{\sigma}_2 - \bar{\sigma}_1) \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \frac{1}{Ca}\,\bar{\kappa}\,\mathbf{n}_\Sigma, \tag{10.2}$$

où, dans les travaux auxquels nous nous référons, le *nombre capillaire* est défini comme

$$Ca = \frac{\mu_0\, u_0}{\alpha} = \frac{\mu_2\, a\, \dot{\gamma}}{\alpha},$$

qui est une mesure de l'importance relative entre les forces visqueuses et la force capillaire. D'autres nombres adimensionnels sont utilisés dans l'étude de la défor-

mation de gouttelettes, soit le *ratio de viscosités*,

$$\lambda = \frac{\mu_1}{\mu_2},$$

et le *ratio de densités*,

$$\kappa = \frac{\rho_1}{\rho_2},$$

ce dernier étant approximativement égal à 1 pour les fluides étudiés. Deux autres paramètres, définis par Taylor, nous permettront de faire une comparaison quantitative entre les mesures expérimentales et les résultats numériques de déformation de gouttelettes. En supposant que la bulle est elliptique et en définissant B et L comme étant les demi petit-axe et demi grand-axe de celle-ci, tel qu'illustré à la figure 10.2, le *paramètre de déformation* d'une gouttelette est défini comme

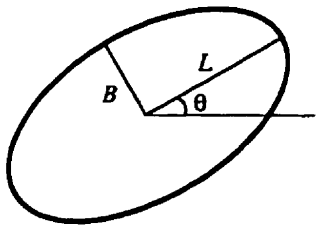


Figure 10.2 La définition du paramètre de déformation

$$D = \frac{L - B}{L + B},$$

qui est nul lorsque la bulle est sphérique, et tend vers 1 lorsqu'elle devient infiniment allongée. Lorsqu'une bulle devient fortement déformée, le ratio L/B devient grand et le paramètre de déformation D ne constitue plus une bonne mesure de la déformation de la bulle ($D \approx 1$ quelque soit L/B grand). Taylor propose alors de plutôt utiliser le ratio

$$\widehat{D} = \frac{L}{a}.$$

Lorsque le modèle CSF, présenté à la section 5.2.1, est utilisé pour tenir compte de la tension superficielle, la condition (10.2) est introduite dans les équations de

Navier-Stokes adimensionnelles pour devenir

$$Re\,\tilde{\rho}_i(\tilde{\boldsymbol{u}}_i \cdot \tilde{\boldsymbol{\nabla}})\tilde{\boldsymbol{u}}_i = \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_i + Re\,\tilde{\rho}_i\tilde{\boldsymbol{f}}_i + \frac{1}{Ca}\tilde{\kappa}\,\tilde{\boldsymbol{\nabla}}F.$$

On obtiendrait la même forme adimensionnelle avec les autres modèles présentés au chapitre 5.

10.3 La modélisation numérique des écoulements de gouttelettes

Les deux grandes approches de suivi d'interface sont utilisées pour la modélisation numérique d'écoulement de gouttelettes, soit les approches lagrangienne et eulérienne. Il semble naturel de discrétiser la surface libre de chaque goutte et de calculer l'équilibre des forces directement aux noeuds. Un exemple représentatif de l'application de la stratégie lagrangienne, ou plus précisément de l'approche eulérienne-lagrangienne, est illustré par les travaux de Tryggvason, qui étudie la dynamique et l'intéraction de bulles tridimensionnelles (Unverdi et Tryggvason, 1992b,a; Nobari et al., 1996; Loth et al., 1997). Chaque bulle est discrétisée par un maillage de surface. Les noeuds de ces maillages sont transportés par le champ de vitesse de l'écoulement calculé sur un maillage fixe. Des efforts récents et similaires à l'approche de Tryggvason peuvent être trouvés dans les travaux de Udaykumar et al. (1997), qui valident certains de leurs résultats à l'aide des données de Bentley et Leal (1986b), ainsi que dans ceux de Navti et al. (1997), ces derniers travaillant dans le contexte des éléments finis. Les avantages et inconvénients de l'approche lagrangienne ont été énoncés aux sections 4.2 et 4.3.1. La modélisation de la coalescense et du bris des gouttelettes est la principale limitation de cette stratégie. Une option est de n'appliquer aucun traitement spécial lorsque deux gouttes entrent en collision. Les gouttes restent alors voisines tout en demeurant distinctes (Unverdi et Tryggvason, 1992b,a). D'autres interrompent la simulation pour « coller manuellement » les gouttes venant en contact (Nobari et al., 1996). Sinon, il est nécessaire d'automatiser le tout au prix d'une complexité d'implémentation importante. Les *méthodes de particules* sont peu utilisées pour modéliser l'écoulement de gouttelettes. Brackbill (1988) utilise à cette fin la méthode PIC, représentant chaque gouttelette par un nombre quelconque de particules, transportées par le champ de

vitesse du fluide ambiant. On ne retrouve pas les problèmes associés aux méthodes lagrangiennes lors de coalescence ou de bris. Mais comme mentionné au chapitre 4, la question non négligeable du coût de calcul entre en ligne de compte.

Ces limitations font que l'approche eulérienne est une alternative plus populaire pour modéliser les écoulements avec gouttelettes. Les premiers efforts ont été faits à l'aide de la méthode VOF. On retrouve quelques exemples de cette approche dans les travaux de Ashgriz et Poo (1991), de Kothe et Mjolsness (1992) et de Mashayek et Ashgriz (1995a) pour n'en nommer que quelques-uns. L'implémentation d'une telle stratégie reste relativement lourde étant donné l'algorithme de reconstruction d'interface. La méthode des lignes de niveau enlève la nécessité d'avoir à concevoir un tel algorithme, ce qui en fait un choix populaire chez les utilisateurs de la méthode des différences finies (Sussman et al., 1994; Chang et al., 1996). Peu d'effort ont été faits pour modéliser la dynamique de gouttelettes dans le cadre de la méthode des éléments finis, à l'aide d'une approche eulérienne. À notre connaissance, Béliveau et al. (1998) sont les seuls à avoir utilisé cette approche, à l'aide de la méthode de la pseudo-concentration, résolvant l'équation de transport de façon découplée à l'aide de la méthode de Galerkin discontinue. Comme nous l'avons vu, la principale limitation de l'approche eulérienne vient du manque de précision dans la définition de l'interface. Ceci a pour conséquence de rendre délicate la modélisation de la tension superficielle, qui a un rôle prépondérant dans la dynamique des gouttelettes.

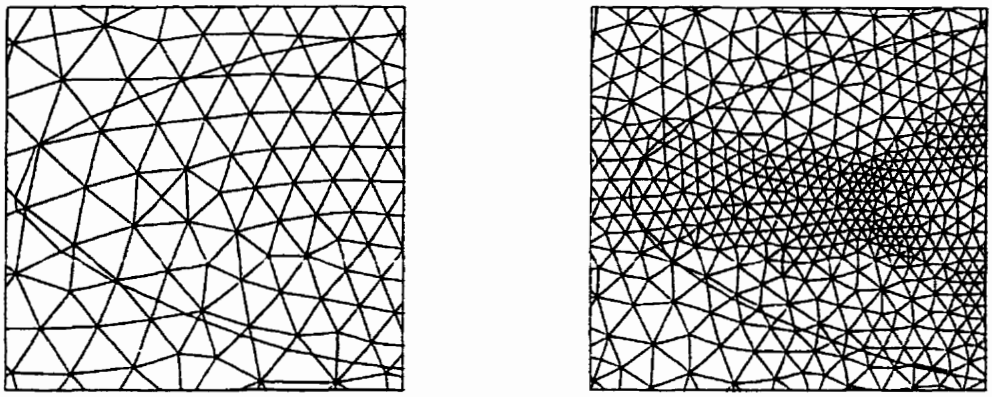
Afin de compenser pour le manque de précision de l'approche eulérienne, tout en gardant la possibilité de pouvoir modéliser les écoulements de gouttelettes où la coalescence et les bris sont une éventualité, la stratégie numérique proposée à la section 6.3 sera utilisée. En fait, puisque l'objet de cette thèse est l'étude des écoulements stationnaires, nous n'emploierons pas la stratégie proposée pour modéliser les écoulements avec coalescence et bris de bulles, le principal attrait de l'approche eulérienne. Nous irons plutôt *sur le terrain* des méthodes lagrangiennes, en modélisant les faibles déformations de gouttes soumises à un écoulement stationnaire. Nous verrons si la stratégie adaptative pourra compenser pour le manque de précision de l'approche eulérienne, en comparant nos résultats avec les données expérimentales de Bentley et Leal (1986b).

10.4 Résultats numériques

Les fluides étudiés sont immiscibles et newtoniens. On suppose qu'aucune viscosité interfaciale ou gradient de tension superficielle sont présents à la surface libre. Les fluides ont à peu près la même densité, ce qui fait que la gravité n'a pas d'influence sur l'écoulement. Comme il a déjà été mentionné, les effets visqueux seront dominants dans les écoulements étudiés, le nombre de Reynolds sera donc négligeable. La dynamique d'une gouttelette ne dépendra donc que du ratio de viscosité λ, du nombre capillaire Ca et du type d'écoulement, qui dans notre cas sera déterminé par le paramètre β. Même si le montage de Taylor peut mener à des comportements transitoires, nous nous concentrons sur les écoulements stationnaires. Tout dépendant des fluides en écoulement et de la nature de l'écoulement généré par les cylindres, la goutte atteindra un état stationnaire tant que le *nombre capillaire critique* Ca_{cr}, déterminé expérimentalement, ne sera pas franchi. Ce sera le cas pour tous les problèmes étudiés.

La stratégie couplée présentée au chapitre 6 est utilisée. Seule l'estimation d'erreur par projections locales a été utilisée. La capture adaptative d'interface n'a pas été nécessaire pour ce type d'écoulement multifluide. On peut observer, à la figure 10.3, l'importance de l'adaptivité pour améliorer la représentation de l'interface et par conséquent l'évaluation de l'angle de rotation de la bulle, ainsi que le paramètre de déformation. L'angle de rotation d'une bulle, par exemple, semble pouvoir être déterminé à environ deux éléments près, soit une erreur possible de quelques degrés pour un maillage grossier.

Puisque les expériences de Bentley et Leal sont tridimensionnelles, nous n'aurons autre choix que de commettre une erreur de modélisation en approximant le problème dans un cadre bidimensionnel. Il est clair que le montage de Taylor génère un écoulement 2-D. Mais nous nous retrouverons à déformer une « goutte cylindrique ». Le système de coordonnées axisymétrique n'est pas plus adéquat puisqu'on se retrouve à modéliser un écoulement généré par des « tores rotatifs » et les gouttes déformées, qui ne sont pas symétriques par rapport aux axes de coordonnées, ne correspondent pas aux gouttes physiques. Nous nous voyons donc dans l'obligation de se limiter à un modèle bidimensionnel, tout en gardant en tête cet état de



(a) Cycle 1 (b) Cycle 3

Figure 10.3 Résolution de la surface libre à différents cycles adaptatifs

fait lorsque viendra le temps de comparer nos résultats numériques aux données expérimentales.

Les fluides qui composent le milieu ambiant sont des huiles de ricin oxidées, alors que les gouttelettes sont formées de silicone. Plus de détail sur ces fluides sont disponibles dans l'article de Bentley et Leal (1986b). Les paramètres nécessaires pour mener nos simulations sont donnés au tableau 10.2. La goutte au repos est

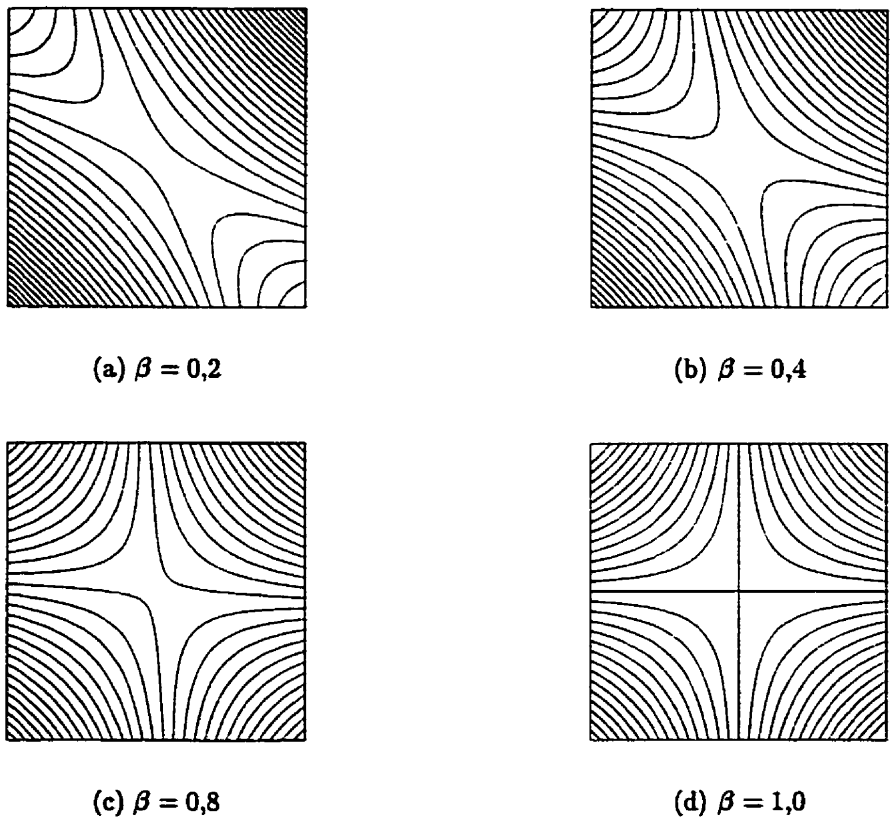
Tableau 10.2

β	λ	κ
0,2	27,30	1,0
0,4	1,58	1,0
0,8	0,00108	1,0
1,0	0,12	1,0

de rayon $a = 1$ mm. Pour des raisons pratiques, nous avons opté pour un domaine de calcul de dimensions 1 cm × 1 cm, même si dans le montage expérimental, les rouleaux forment un carré de dimensions 2,54 cm × 2,54 cm. Ce choix semble adéquat d'un point de vue numérique. Des tests supplémentaires pourraient être faits sur l'influence des dimensions du domaine de calcul sur la déformation des gouttelettes. Les conditions limites en vitesse sont données par l'expression (10.1),

appliquée sur $\partial\Omega$. Comme pour le problème de Laplace, la forme initiale de la bulle sert à initialiser la pseudo-concentration.

Bentley et Leal ont produit une grande quantité de données expérimentales pour différents ratios de viscosités et nombres capillaires et ce pour différents types d'écoulement. Nous avons opté pour quatre écoulements, soit $\beta = 0{,}2\,, 0{,}4\,, 0{,}8\,, 1{,}0$. Les lignes de courant de ces écoulements, sans les gouttes, sont illustrées à la figure 10.4. Pour de grands cisaillements, il est observé que les gouttes s'alignent avec la ligne



(a) $\beta = 0{,}2$ (b) $\beta = 0{,}4$

(c) $\beta = 0{,}8$ (d) $\beta = 1{,}0$

Figure 10.4 Lignes de courant des écoulements générés par le montage de Taylor

de courant dite sortante, qui forme un angle de

$$\theta_e = 0{,}5 \sin^{-1}\left(\frac{\beta - 1}{\beta + 1}\right) \tag{10.3}$$

avec l'axe des x. Pour chaque écoulement, un ratio de viscosités λ a été choisi (cf. ta-

bleau 10.2) afin d'illustrer une variété de comportement que l'on peut retrouver en pratique.

Des comparaisons entre les données de Bentley et Leal et nos résultats numériques serviront à la validation de notre modèle. Les comparaisons seront faites au niveau du paramètre de déformation D et de l'angle formé par le demi-grand axe de la goutte et l'axe des x. Les résultats sont classés en fonction du ratio de viscosités des fluides en écoulement.

10.4.1 Écoulements à fort ratio de viscosités

Le premier cas étudié consiste en une paire de fluides dont le ratio de viscosités est de $\lambda = 27{,}3$, dans un écoulement caractérisé par le paramètre $\beta = 0{,}2$. Sous ces conditions, l'écoulement est dominé par la vorticité et on observe expérimentalement qu'il est alors très difficile de déformer une gouttelette et impossible de la briser.

Le tableau 10.3 liste les valeurs numériques et expérimentales du paramètre de déformation et de l'angle des gouttelettes. On peut constater que le paramètre

Tableau 10.3

	Exper.		Numer.	
Ca	D	θ	D	θ
0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,082	0,0635	−28,0	0,089	−17,0
0,164	0,0786	−34,0	0,106	−20,0
0,246	0,0788	−35,0	0,112	−21,0
0,329	0,0798	−35,0	0,118	−21,0

de déformation est presque constant, ceci étant la conséquence de l'écoulement rotationnel. La méthodologie numérique surévalue le paramètre de déformation, ceci étant possiblement attribuable au modèle bidimensionnel. On peut noter que l'angle de rotation numérique des gouttelettes est sous-évalué. Cependant, si on se réfère à l'expression (10.3), la ligne de courant sortante devrait former un angle de $\theta_e = -20{,}9$ avec l'axe des x, ce que nous obtenons. Même si Bentley et Leal affirment qu'ils observent que l'angle des gouttelettes dépasse un peu la valeur de θ_e, étant

donné l'écart important on peut soupsonner une erreur de transcription dans leurs chiffres.

La *courbe de déformation*, illustrée à la figure 10.5, compare graphiquement les prédictions numériques (□) du paramètre de déformation D et les données expérimentales de Bentley et Leal (△). Sa forme concave est caractéristique d'un écoulement

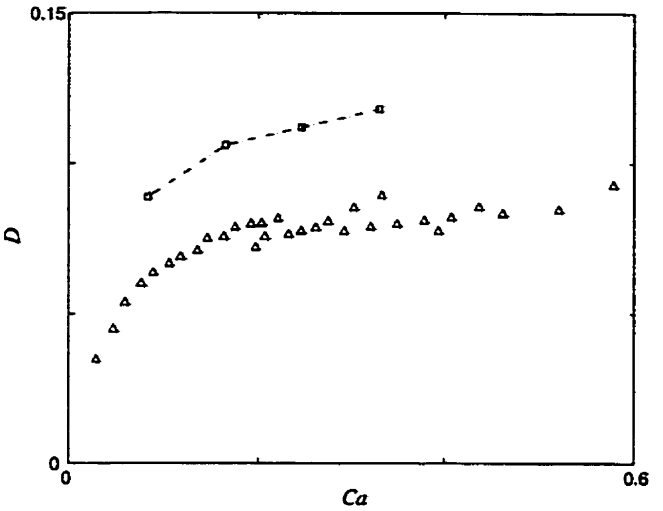


Figure 10.5 La courbe de déformation pour le problème de Taylor, pour un ratio de viscosités de $\lambda = 27{,}3$ ($\beta = 0{,}2$)

rotationnel. Malgré la surévaluation, la courbe numérique semble vouloir suivre la même tendance que les données expérimentales.

10.4.2 Écoulements à ratio de viscosités intermédiaire

Nous étudions maintenant la déformation d'une goutte dont le ratio de viscosités avec le fluide ambiant est de $\lambda = 1{,}58$, qui est soumise à un écoulement correspondant au paramètre $\beta = 0{,}4$. Les résultats numériques sont présentés au tableau 10.4 et la courbe de déformation correspondante, à la figure 10.6. Les gouttes se déforment plus que dans le cas précédent, étant donné qu'elles sont moins visqueuses. Comme il est illustré à la figure 10.7, le rayon de courbure des extrémités des gouttelettes devient plus petit avec l'augmentation du cisaillement. L'angle que forment les gouttes avec l'axe des x croît de façon monotone avec le cisaillement jusqu'à ce

Tableau 10.4

	Exper.		Numer.	
Ca	D	θ	D	θ
0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,116	0,192	−1,0	0,22	−3,0
0,129	0,216	−4,0	0,26	−5,0
0,143	0,250	−6,0	0,29	−6,0
0,168	0,323	−8,0	0,36	−8,0

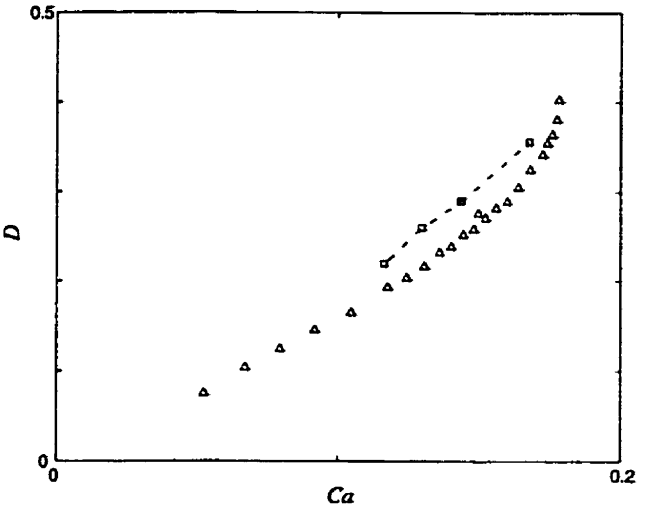
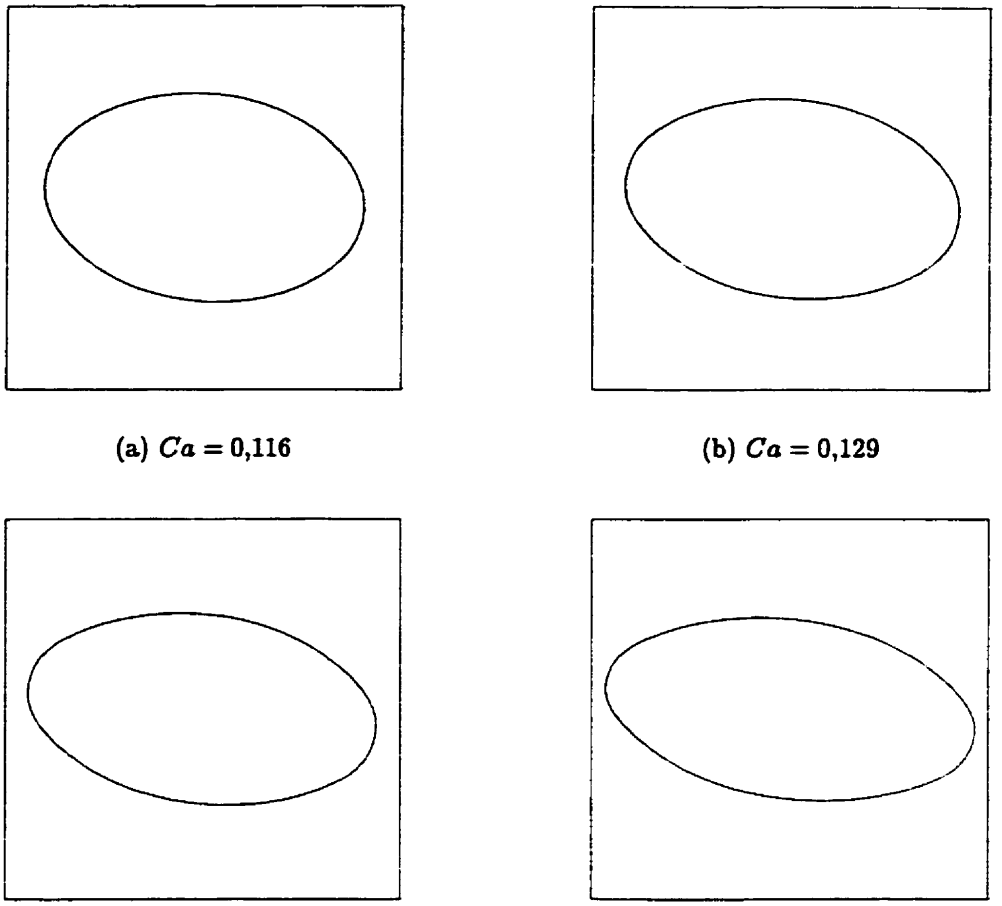


Figure 10.6 La courbe de déformation pour le problème de Taylor, pour un ratio de viscosités de $\lambda = 1{,}58$ ($\beta = 0{,}4$)

que l'angle de la ligne de courant sortante avec l'horizontale, soit $\theta_e = -12{,}7$, soit atteint pour un nombre capillaire près du nombre capillaire critique.

Le paramètre de déformation est encore une fois systématiquement surestimé par les prédictions numériques, pour ce ratio de viscosités. Le paramètre de déformation pour $Ca = 0{,}168$ ne suit pas la tendance des données expérimentales. Ceci peut être attribué au nombre capillaire qui est près du nombre capillaire critique, $Ca_{cr} = 0{,}178$. Le problème s'approche donc d'un écoulement transitoire et comme on sait, notre méthodologie n'a pas été conçue pour modéliser ces écoulements. La goutte commence probablement à souffrir de perte de matière.



(a) $Ca = 0{,}116$ (b) $Ca = 0{,}129$

(c) $Ca = 0{,}143$ (d) $Ca = 0{,}168$

Figure 10.7 Gouttelettes numériques, pour différents nombres capillaires, pour un ratio de viscosités intermédiaire de $\lambda = 1{,}58$ ($\beta = 0{,}4$)

10.4.3 Écoulements à faible ratio de viscosités

Le dernier cas étudié de façon quantitative est un écoulement diphasique avec un ratio de viscosités de $\lambda = 1{,}08 \times 10^{-3}$ et un paramètre d'écoulement de $\beta = 0{,}8$. Le tableau 10.5 fait une liste des valeurs numériques et expérimentales du paramètre de déformation et de l'angle des gouttelettes. Dans ce cas, puisque les gouttelettes deviennent fortement déformées, nous devons avoir recours au paramètre de déformation alternatif $\widehat{D}$.

Tableau 10.5

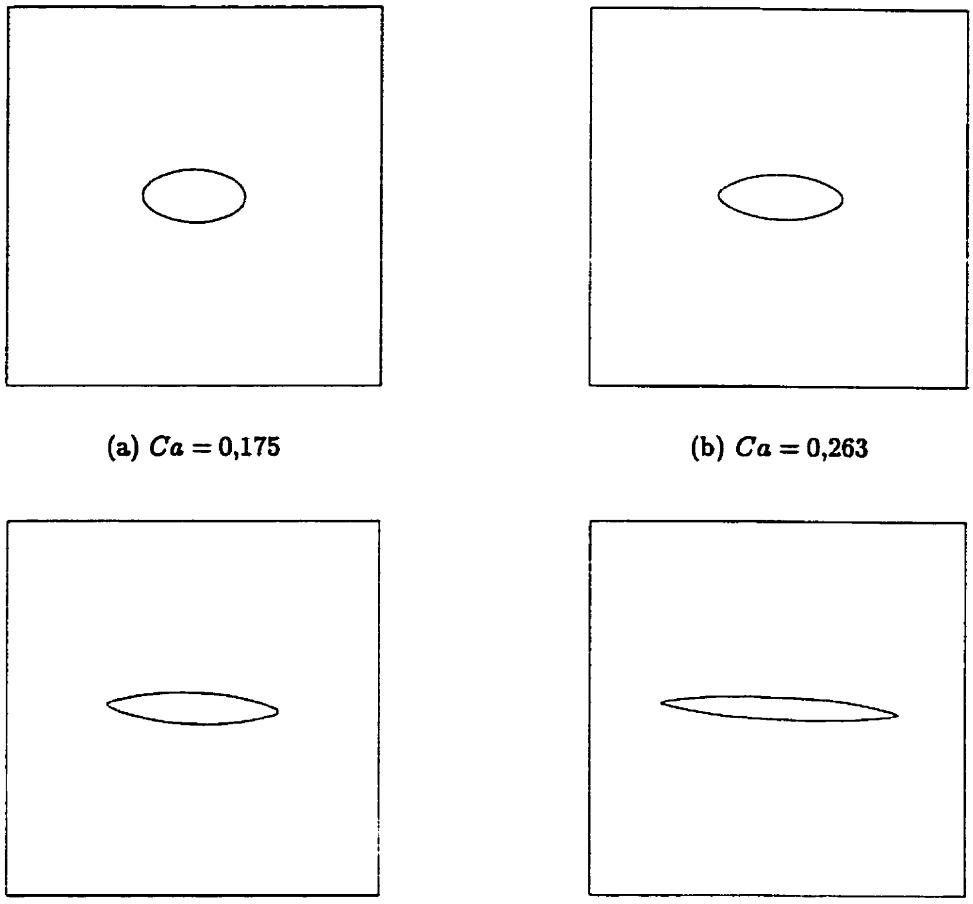
	Exper.		Numer.	
Ca	D	θ	D	θ
0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,175	0,315	−1,0	0,33	−1,0
0,263	0,531	−1,5	0,51	−2,0
Ca	$\widehat{D}$	θ	$\widehat{D}$	θ
0,321	2,70	−2,0	2,30	−2,0
0,409	3,77	−3,0	3,19	−3,0

On remarque à la figure 10.8 que le comportement qualitatif des « gouttelettes numériques » est similaire à ce que Bentley et Leal observent au laboratoire. Il est possible d'appliquer d'importante déformation à une goutte avant d'observer un bris. Ceci se traduit par un nombre capillaire critique assez grand, que l'on observe être autour de $Ca_{cr} = 0{,}51$. On observe aussi que, contrairement au cas précédent, les extrémités des gouttelettes deviennent pointues lorsque le cisaillement augmente. Il est cependant plus facile de déformer une goutte dans ce cas, que pour un ratio de viscosités intermédiaire. L'orientation des gouttes s'approche de l'angle de la ligne de courant sortante ($\theta_e = 3{,}2$) lorsque $Ca \to Ca_{cr}$.

On observe que les prédictions numériques se détériorent pour de grands nombres capillaire. On se réfère encore à l'explication que, pour un tel nombre capillaire, l'écoulement est presque transitoire. Nous n'avons ni algorithme de mise-à-jour de l'interface, ni procédé qui assure la conservation de la matière. Donc, lorsque les bulles deviennent fortement déformées, il en est de même pour la pseudo-concentration et rien ne nous assure qu'il y a toujours la même quantité de matière dans la goutte.

10.4.4 Écoulement élongationnel

Afin de conclure cette étude sur la déformation des gouttelettes, penchons nous brièvement sur le cas particulier de l'écoulement élongationnel ($\beta = 1{,}0$), mais d'un point de vue qualitatif. Quelques études expérimentales portent sur cet écoulement particulier (Rallison, 1984; Stone et Leal, 1989). Nous prévoyons valider notre méthodologie pour ce type d'écoulement dans un proche avenir. Ce qui est intéressant



(a) $Ca = 0{,}175$ (b) $Ca = 0{,}263$

(c) $Ca = 0{,}321$ (d) $Ca = 0{,}409$

Figure 10.8 Gouttelettes numériques, pour différents nombres capillaires, pour un faible ratio de viscosités de $\lambda = 1{,}08 \times 10^{-3}$ ($\beta = 0{,}8$)

dans cet écoulement est que nous pouvons profiter de la symétrie axiale de la goutte et exécuter les simulations dans un système de coordonnées axisymétrique et ce sans commettre d'impair.

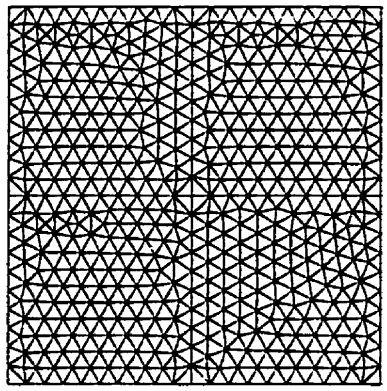
La figure 10.9 illustre la série de maillages qui a été construite pour obtenir la discrétisation finale utilisée pour les calculs. Comme il a été mentionné au chapitre 7, la pression est une quantité clef dans la dynamique des gouttelettes. La figure 10.10(a) illustre les isolignes de la pression pour ce problème. On constate la régularité de cette approximation, fondamentale à une modélisation précise des écoulements à surfaces libres avec tension superficielle. La figure 10.10(b) illustre

les lignes de courant, celles-ci faisant la démonstration que même si l'écoulement n'a pas complètement atteint l'état stationnaire, les conditions qui y mènent sont presques remplies. On observe les zones de recirculation dans la gouttelette. Les lignes de courant du fluide ambiant contournent la bulle. Ceci nous porte à croire qu'en modélisant les équations de conservation transitoires, nous serons en mesure d'atteindre l'état stationnaire complet assez rapidement.

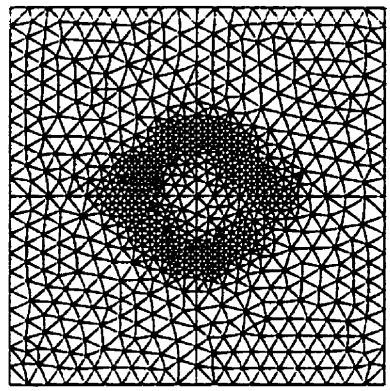
10.5 Notes et bibliographie

Il est intéressant de remarquer que Taylor (1932, 1934) avait déjà observé et classifié de façon qualitative, dès 1934, la plupart des comportements modélisés dans ce chapitre. Il avait cependant dû se limiter aux écoulements élongationnel et cisaillé. Il en a été de même pour presque tous les auteurs qui se sont intéressés au problème après lui, pour les raisons techniques mentionnées plus haut.

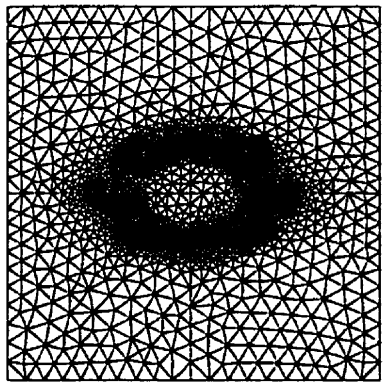
Les résultats de validation de ce chapitre ont été présentés récemment dans (Dufour et Pelletier, 1999b), alors que la modélisation de la goutte soumise à un écoulement élongationnel a été présentée dans (Dufour et Pelletier, 1998a).



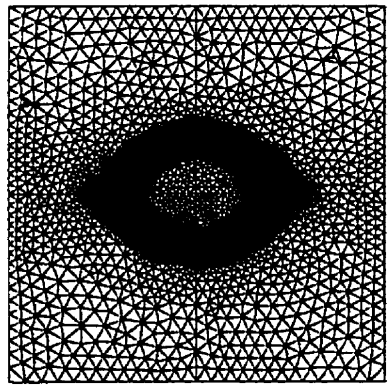
(a) Maillage initial



(b) Cycle 1

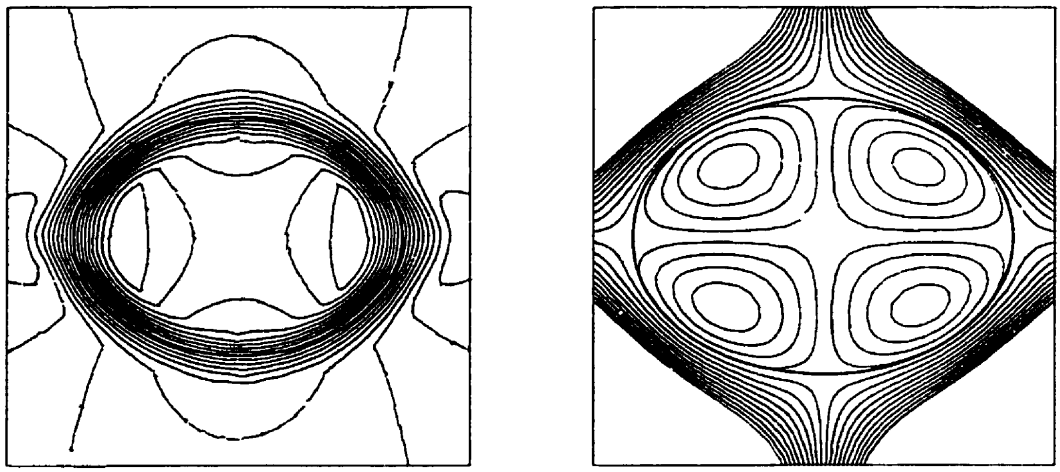


(c) Cycle 2



(d) Cycle 3

Figure 10.9 Maillages obtenus aux différents cycles de la stratégie de remaillage adaptatif, pour la modélisation de la dynamique d'une gouttelette soumise à un écoulement élongationnel



(a) Pression (b) Lignes de courant

Figure 10.10 Isolignes calculées dans le cadre de la modélisation de la dynamique d'une bulle soumise à un écoulement élongationnel

CONCLUSION

Une méthode d'éléments finis adaptative pour la modélisation d'écoulements incompressibles, stationnaires, à surfaces libres a été présentée. Un effort particulier a été déployé afin de développer une méthodologie *facile à implémenter*, que l'on peut utiliser pour modéliser une *variété* d'écoulements à surfaces libres et qui nous permet d'obtenir des approximations dont la *précision est contrôlée*, à un *coût raisonnable*. Ce qui caractérise l'approche proposée est l'utilisation d'une méthodologie adaptative pour aider à la capture des surfaces libres. Il est connu que la stratégie eulérienne pour la localisation de surface libre est une approche générale, mais qui souffre de problèmes de précision dans certaines situations. L'utilisation de l'adaptativité améliore la précision des approximations des variables dépendantes et aide à déterminer de façon précise la position des surfaces libres tout en permettant de modéliser adéquatement la physique interfaciale. Deux approches pour coupler le transport des surfaces libres à la résolution des équations de conservation ont été étudiées. D'abord, la méthodologie adaptative a été introduite dans l'approche découplée de Fortin et al. (1992). Nous avons aussi présenté une stratégie de résolution complètement couplée qui prend avantage des méthodes d'éléments finis stabilisées, de l'interpolation continue de la variable transportée et de l'estimation d'erreur par projections locales. Cette méthodologie satisfait la majorité des critères cités plus haut.

Plusieurs écoulements à surfaces libres, de nature assez diverse, ont été étudiés afin de démontrer la flexibilité de l'approche proposée. L'étude du problème de Laplace a permis de choisir un modèle pour la simulation des écoulements à surfaces libres avec tension superficielle et d'identifier des comportements numériques pathologiques dans plusieurs autres modèles. Ce problème a également permis d'identifier plusieurs points clefs dans la modélisation de la tension superficielle. Les calculs des normales numériques, de la courbure et par conséquent de la force capillaire sont délicats et diverses remarques ont été faites à ce sujet. Nous avons constaté que la modélisation de ces écoulements à l'aide des équations de conservation stationnaires était un problème difficile, qui mène parfois à des impasses. La dynamique de gouttelettes,

qui peut sembler mener sous certaines conditions à un état stationnaire, est en fait un phénomène transitoire.

L'étude des écoulements stratifiés et de la coextrusion a montré que la stratégie adaptative permettait de transporter une interface de façon précise. Même si la méthodologie proposée n'est pas construite en fonction de la conservation de la matière pour chaque fluide, on observe que celle-ci est satisfaisante. Une comparaison a aussi été effectuée entre les stratégies couplées et découplées. Malgré que cette dernière approche est moins coûteuse du point de vue de l'espace mémoire nécessaire pour la résolution d'un problème, elle semble nécessiter plus de temps de calcul. L'algorithme a finalement été appliqué à l'écoulement de polymères dans une filière industrielle, pour observer que le transport de la surface libre semble toujours précis dans un écoulement complexe.

Les jets, qui avaient jusqu'à maintenant surtout été étudiés dans un contexte lagrangien, se sont montrés difficiles à traiter. Il a été observé que la stratégie adaptative est importante non seulement pour le suivi d'interface, mais aussi pour aider à la représentation numérique de l'importante discontinuité aux lèvres du tube. Les jets sans tension superficielle nous ont causé peu de problème, la validation des résultats numériques avec les données expérimentales étant très bonne. Cependant, la présence de cette discontinuité a fait que le calcul précis des termes entrant dans la modélisation de la tension superficielle s'est avéré très difficile. Des améliorations devront être apportées à la stratégie numérique afin de modéliser correctement ce type d'écoulement. Nous avons ensuite étudié les jets pour lesquels l'inertie est dominante. Que ce soit pour les jets libres, où les jets impactants à haut nombre de Reynolds, la stratégie adaptative s'est avérée des plus utile.

Finalement, nous avons étudié les écoulements dominés par les effets de la tension superficielle. Nous avons réussi à valider notre méthodologie à l'aide des données expérimentales de Bentley et Leal (1986b) sur la dynamique de gouttelettes. Plusieurs simulations, pour divers types d'écoulement, ratios de viscosités et nombres capillaires, ont été effectuées. Malgré le modèle numérique bidimensionnel, on observe une concordance qualitative, et jusqu'à un certain point quantitative, entre les résultats des simulations et les données expérimentales. La stratégie adaptative s'est montrée essentielle dans l'évaluation précise des quantités utilisées pour

les comparaisons. Il a aussi été montré que l'évaluation de plusieurs variables clefs dans la modélisation de la tension surperficielle, telle la pression, bénéficiaient de la stratégie adaptative.

Un but qui a dirigé les décisions prises tout au long de cette recherche a été de développer une méthodologie qui nous permettait « d'aller plus loin ». Ces travaux constituent une étude préliminaire de divers problèmes à surfaces libres. Ce domaine d'étude est riche et les ramifications et extensions sont nombreuses. Pour les chercheurs qui pourraient être intéressés à utiliser cette méthodologie, voici une liste de problèmes qui pourraient être intéressants, de notre point de vue, à étudier.

D'abord, plusieurs développements analytiques d'écoulement multifluide sont disponibles dans la littérature (Han, 1981; Middleman, 1995; Sadhal et al., 1997). Nous n'avons pas beaucoup fait usage de ces résultats. Ceux-ci forment une banque de problèmes de vérification très intéressante. Des exemples de problème pour lesquels de telles solutions existent sont les écoulements stratifiés, le calandrage, les bris de fibre, etc.

Nous avons vu que la limitation majeure de notre méthodologie numérique était que nous nous étions restreint aux écoulements stationnaires. Nous avons constaté que ces phénomènes sont en fait transitoires. Il est donc essentiel d'étudier ces écoulements du point de vue des équations de conservation instationnaires. De plus, la plupart des applications industrielles où on retrouve des écoulements à surfaces libres sont transitoires. De futurs travaux ne sauraient donc être faits dans un autre cadre de travail. Nous avons déjà débuté l'étude de la dynamique d'une bulle dans un écoulement cisaillé (Dufour et Pelletier, 1998b). Il pourrait être intéressant de valider ces résultats dans ce cadre de travail.

L'étude des écoulements multifluides plus complexes pourrait être considérée. L'effet de la compressibilité ou de la turbulence des fluides sur les surfaces libres ferait un sujet d'étude intéressant. Une plus grande complexité peut aussi être obtenue en réunifiant plusieurs types d'écoulement à surfaces libres. Des exemples de problèmes sont le remplissage de moule par un fluide contenant des bulles, le bris d'un jet en gouttelettes, etc.

L'utilisation de schémas d'intégration en temps est depuis longtemps chose courante en éléments finis. Il n'en est cependant pas de même pour la méthodologie adaptative. D'abord, la stratégie de remaillage devient plus lourde. On peut cependant retrouver des exemples d'utilisation de cette stratégie pour des problèmes transitoires complexes dans les travaux de Löhner. Il serait intéressant d'étudier l'utilisation d'une technique de raffinement/déraffinement de petits groupes d'éléments. L'estimation d'erreur devra aussi être généralisée aux problèmes transitoires. On peut retrouver des estimateurs d'erreur pour les équations de Navier-Stokes transitoires. Il en est de même pour l'équation de transport transitoire (cf. section 3.3). Il reste à réunir ces composantes dans une stratégie adaptative transitoire pour les écoulements à surfaces libres. Cette stratégie devrait aussi être plus flexible pour l'étude des problèmes tridimensionnels.

Il est clair que l'utilisation d'une approche couplée fait que nous avons à résoudre un système d'équations linéaires algébriques de grande taille. On aurait tout avantage à profiter des résoluteurs itératifs, qui sont maintenant grandement répendus.

L'extension au 3-D semble toujours évidente et donne l'impression de ne rien apporter d'intéressant du point de vue de l'analyse numérique. Du côté des applications, il en est tout autrement. Il est toujours délicat d'attribuer la responsabilité des écarts entre les données numériques et expérimentales à l'imprécision de la stratégie numérique alors qu'une erreur de modélisation importante se produit en approximant un problème 3-D par un modèle 2-D.

BIBLIOGRAPHIE

ACHCHAB, B. (1998). Estimations d'erreur a posteriori robustes en convection-diffusion à convection dominante pour des formulations de Petrov-Galerkin, prétirage.

AGASSANT, J.-F., AVENAS, P., SERGENT, J.-P., VERGNES, B. et VINCENT, M. (1996). *La mise en forme des matières plastiques*, Technique & documentation-Lavoisier, Paris, troisième édition.

AGASSANT, J.-F., FORTIN, A. et DEMAY, Y. (1994). Prediction of stationary interfaces in coextrusion flows, *Polym. Eng. Sci.*, *34*, 14, 1101–1108.

AIHARA, T., KIM, J. K. et MARUYAMA, S. (1990). Effects of temperature-dependent fluid properties on heat transfer due to an axisymmetric inpinging gas jet normal to a flat surface, *Wärme-und Stoffübertragung*, *25*, 145–153.

AINSWORTH, M. et ODEN, J. T. (1997). *A posteriori* error estimation in finite element analysis, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *142*, 1–88.

AINSWORTH, M., ZHU, J. Z., CRAIG, A. W. et ZIENKIEWICZ, O. C. (1989). Analysis of the Zienkiewicz-Zhu *A-posteriori* error estimator in the finite element method, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, *28*, 2161–2174.

ALMEIDA, R. C. et GALEÃO, A. C. (1996). An adaptive Petrov-Galerkin formulation for the compressible Euler and Navier-Stokes equations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *129*, 157–176.

ARBOGAST, T. et WHEELER, M. F. (1995). A characteristics-mixed finite element method for advection-dominated transport problems, *SIAM J. Numer. Anal.*, *32*, 2, 404–424.

ASHGRIZ, N. et POO, J. Y. (1991). FLAIR: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction, *J. Comput. Phys.*, *93*, 449–468.

BABUŠKA, I. et RHEINBOLT, W. C. (1978a). *A-posteriori* error estimates for the finite element method, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, *12*, 1597–1615.

BABUŠKA, I. et RHEINBOLT, W. C. (1978b). Error estimates for adaptive finite element computations, *SIAM J. Numer. Anal.*, *15*, 4, 736–754.

BACH, P. et HASSAGER, O. (1985). An algorithm for the use of the Lagrangian specification in Newtonian fluid mechanics and applications to free-surface flow, *J. Fluid Mech.*, *152*, 173–190.

BANK, R. E. et WEISER, A. (1985). Some *A posteriori* error estimators for elliptic partial differential equations, *Math. Comp.*, *44*, 170, 283–301.

BARLOW, J. (1976). Optimal stress locations in finite element models, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, *10*, 243–251.

BATCHELOR, G. K. (1967). *An Introduction to Fluid Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge.

BÉLIVEAU, A. (1997). *Méthodes de Lesaint-Raviart modifiées: applications au calcul des surfaces libres*, Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, Montréal.

BÉLIVEAU, A., FORTIN, A. et DEMAY, Y. (1998). A two-dimensional numerical method for the deformation of drops with surface tension, *Int. J. of Computational Fluid Dynamics*, *10*, 225–240.

BELLET, M. et CHENOT, J.-L. (1993). A Lagrangian approach to fluid flow in metal casting processes, *Computational Methods for Moving Boundary Problems in Heat and Fluid Flow*, L. C. Wrobel et C. A. Brebbia, Computational Mechanics Publications & Elsevier Applied Science, chapitre 13, 287–316.

BENSON, D. J. (1992). Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *99*, 235–394.

BENTLEY, B. J. et LEAL, L. G. (1986a). A computer-controlled four-roll mill for investigations of particle and drop dynamics in two-dimensional linear shear flows, *J. Fluid Mech.*, *167*, 219–240.

BENTLEY, B. J. et LEAL, L. G. (1986b). An experimental investigation of drop deformation and breakup in steady, two-dimensional linear flows, *J. Fluid Mech.*, *167*, 241–283.

BERMEJO, R. (1995). A Galerkin-caracteristic algorithm for transport-diffusion equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, *32*, 2, 425–454.

BLACKBURN, W. S. (1976). Letter to the editor, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, *10*, 3, 718–719.

BRACKBILL, J. U. (1988). The ringing instability in particle-in-cell calculations of low-speed flow, *J. Comput. Phys.*, *75*, 469–492.

BRACKBILL, J. U., KOTHE, D. B. et ZEMACH, C. (1992). A continuum method for modeling surface tension, *J. Comput. Phys.*, *100*, 335–354.

BREZZI, F. (1974). On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers, *R.A.I.R.O.*, *2*, 129–151.

BROOKS, A. N. et HUGHES, T. J. R. (1982). Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *32*, 199–259.

CHANG, Y. C., HOU, T. Y., MERRIMAN, B. et OSHER, S. (1996). A level set formulation of Eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows, *J. Comput. Phys.*, *124*, 449–464.

CHAUDHRY, M. H. (1994). Computation of flows with shocks and bores, *Computer Modeling of Free-Surface and Pressurized Flows*, M. H. Chaudhry et L. W. Mays, Kluwer Academic Publishers, The Nederlands, chapitre 3, 63–82.

CHRISTIE, I., GRIFFITHS, D. F., MITCHELL, A. R. et ZIENKIEWICZ, O. C. (1976). Finite element methods for second order differential equations with significant first derivatives, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, *10*, 1389–1396.

CIARLET, P. G. (1978). *The Finite Element Method for Elliptic Problems*, North-Holland, Amsterdam.

CODINA, R. (1993). A discontinuity-capturing crosswind-dissipation for the finite element solution of the convection-diffusion equation, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *110*, 325–342.

CODINA, R., OÑATE, E. et CERVERA, M. (1992). The intrinsic time for the streamline upwind/Petrov-Galerkin formulation using quadratic elements, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *94*, 239–262.

CODINA, R., SCHAFER, U. et OÑATE, E. (1994). Mould filling simulation using finite element, *International Journal for Numerical Methods in Heat Fluid Flow*, *4*, 291–310.

COURANT, R. (1943). Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations, *Bull. Amer. Math. Soc.*, *42*, 2165–2186.

DHATT, G., GAO, D. M. et CHEIKH, A. B. (1990). A finite element simulation of metal flow in moulds, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, *30*, 821–831.

DHEUR, J. et CROCHET, M. J. (1987). Newtonian stratified flow through an abrupt expansion, *Rheol. Acta*, *26*, 401–413.

DHEUR, J. et CROCHET, M. J. (1989). Stratified flows of Newtonian and viscoelastic fluids, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, *32*, 1–18.

DOUGLAS JR., J. et WANG, J. (1989). An absolutely stabilized finite element method for the Stokes problem, *Math. Comp.*, *52*, 186, 495–508.

DUFOUR, S. (1995). Simulation numérique de la coextrusion, Rapport technique, Institut des matériaux industriels—Conseil national de recherches du Canada, Boucherville.

DUFOUR, S. et PELLETIER, D. (1998a). An adaptive finite element method for incompressible flows with interfaces, *29th AIAA Fluid Dynamics Conference*, Rapport AIAA 98–2969, American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA), Albuquerque, NM, 14.

DUFOUR, S. et PELLETIER, D. (1998b). An adaptive finite element method for multiphase flows with surface tension, *Computational Mechanics: New Trends and Applications*, S. R. Idelsohn, E. Oñate et E. N. Dvorkin, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), Barcelone, Espagne, 18.

DUFOUR, S. et PELLETIER, D. (1999a). Computations of multiphase flows with surface tension using adaptive finite element methods, *37th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Rapport AIAA 99–0544, American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA), Reno, NV, 12.

DUFOUR, S. et PELLETIER, D. (1999b). A study of drop dynamics using an adaptive finite element method, *14th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, Rapport AIAA 99–3318, American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA), Norfolk, VA, 12.

DUFOUR, S., PELLETIER, D., HÉTU, J.-F. et GARCÍA-REJÓN, A. (1996). A numerical study of multilayer flow behavior inside blow molding dies, *1996 First Joint Topical Conference on Processing, Structure and Properties of Polymeric Materials*, S. Kim, American Institute of Chemical Engineers (AIChE) et Polymer Processing Society (PPS), American Institute of Chemical Engineers, New York, 166–168.

ELKAÏM, D., KIM, Y. H., MUTTIN, F., BELLET, M., KAMARA, A. et CHENOT, J.-L. (1992). Finite element Lagrangian computations of metal flow in moulds, prétirage, CEMEF, Sofia-Antipolis.

FERZIGER, J. H. (1981). *Numerical Methods for Engineering Application*, John Wiley & Sons, New York.

FLORYAN, J. M. et RASMUSSEN, H. (1989). Numerical methods for viscous flows with moving boundaries, *Applied Mechanics Review*, *42*, 12, 323–341.

FORTIN, A., CARRIER, P. et DEMAY, Y. (1995). Numerical simulation of co-extrusion and film casting, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, *20*, 31–57.

FORTIN, A., DEMAY, Y. et AGASSANT, J.-F. (1992). Computation of stationary interface between generalized Newtonian fluids, *Rev. Eur. Éléments Finis*, *1*, 2, 181–196.

FORTIN, M. et FORTIN, A. (1985). A generalization of Uzawa's algorithm for the solution of the Navier-Stokes equations, *Communications in Applied Numerical Methods*, *1*, 205–208.

FRANCA, L. P. et FREY, S. L. (1992). Stabilized finite element methods: II. the incompressible Navier-Stokes equations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *99*, 209–233.

FRANCA, L. P., FREY, S. L. et HUGHES, T. J. R. (1992). Stabilized finite element methods: I. application to the advective-diffusive model, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *95*, 253–276.

GALEÃO, A. C. et DO CARMO, E. G. D. (1988). A consistent approximate upwind Petrov-Galerkin method for convection-dominated problems, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *68*, 83–95.

GIRAULT, V. et RAVIART, P.-A. (1986). *Finite Element Methods of Navier-Stokes Equations*, tome 5 de *Springer Series in Computational Mathematics*, Springer-Verlag, Berlin.

GOREN, S. L. et WRONSKI, S. (1966). The shape of low-speed capillary jets of Newtonian liquids, *J. Fluid Mech.*, *25*, 185–198.

GREENSTADT, J. (1995). The removal of overshoot in P.D.E. solutions by the use of special basis functions, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *120*, 45–64.

HAN, C. D. (1981). *Multiphase Flow in Polymer Processing*, Academic Press, New York.

HARLOW, F. H. (1988). PIC and its progeny, *Computer Physics Communications*, *48*, 1–10.

HARLOW, F. H. et WELCH, J. E. (1965). Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface, *Physics of Fluids*, *8*, 12, 2182–2189.

HEINRICH, J. C., HUYAKORN, P. S., ZIENKIEWICZ, O. C. et MITCHELL, A. R. (1977). An 'upwind' finite element scheme for two-dimensional convective transport equation, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, *11*, 131–143.

HÉTU, J.-F. (1991). *Méthode d'éléments finis adaptatives pour les écoulements visqueux incompressibles*, Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, Montréal.

HÉTU, J.-F. (1999). Communication personnelle.

HÉTU, J.-F., GAO, D. M. et GARCÍA-REJÓN, A. (1995). Effective application of the Lesaint-Raviart method to mould filling dynamics, *Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow*, Pineridge Press, Swansea, tome 9, 1064–1075.

HINTON, E. et CAMPBELL, J. S. (1974). Local and global smoothing of discontinuous finite element functions using a least squares method, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, *8*, 461–480.

HIRT, C. W. et NICHOLS, B. D. (1981). Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, *J. Comput. Phys.*, *39*, 201–225.

HUGHES, T. J. . R., FRANCA, L. P. et HULBERT, G. M. (1989). A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VIII. the Galerkin/least-squares method for advective-diffusive equations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *73*, 173–189.

HUGHES, T. J. R. et BROOKS, A. (1979). A multi-dimensional upwind scheme with no crosswind diffusion, *Finite Element Methods for Convection Dominated Flows*, T. J. R. Hughes, ASME, New York, tome 34, 19–35.

HUGHES, T. J. R., MALLET, M. et MIZUKAMI, A. (1986). A new finite element formulation for computational fluid dynamics: II. beyond SUPG, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *54*, 341–355.

ILINCA, F. (1996). *Méthode d'éléments finis adaptatives pour les écoulements turbulents*, Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, Montréal.

JACQMIN, D. (1996). An energy approach to the continuum surface tension method, *34th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit*, Rapport AIAA 96–0858, American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA), Reno, NV, 10.

JEONG, J. H. et YANG, D. Y. (1998). Finite element analysis of transient fluid flow with free surface using VOF (volume-of-fluid) method and adaptive grid, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, *26*, 1127–1154.

JOHNSON, C. (1987). *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*, Cambridge University Press, Cambridge.

JOHNSON, C. (1990). Adaptive finite element methods for diffusion and convection problems, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *82*, 301–322.

KARAGIANNIS, A., HRYMAK, A. N. et VLACHOPOULOS, J. (1990). Three-dimensional studies on bicomponent extrusion, *Rheol. Acta*, *29*, 71–87.

KECK, R. (1998). *Reinitialization for Level Set Methods*, Diploma, University of Kaiserslautern, Kaiserslautern.

KOTHE, D. B. (1997). Perspective on Eulerian finite volume methods for incompressible interfacial flows, *Free Surface Flow Workshop*, Centre for Mechanical Sciences, Udine, Italie, 65.

KOTHE, D. B. et MJOLSNESS, R. C. (1992). RIPPLE: A new model for incompressible flows with free surfaces, *AIAA J.*, *30*, 2694–2700.

KOTHE, D. B. et RIDER, W. J. (1995a). Comments on modeling interfacial flows with volume-of-fluid methods, Rapport technique LA-UR-94-3384, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM.

KOTHE, D. B. et RIDER, W. J. (1995b). Practical considerations for interface tracking methods, *6th International Symposium on Computational Fluid Dynamics*, Lake Tahoe, 7.

KOTHE, D. B., ZEMACH, C. et CHAUMUZEAU, T. (1994). Three-dimensional volume tracking of fluid interfaces on general hexahedral meshes, prétirage, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM.

LABBÉ, P. et GARON, A. (1995). A robust implementation of Zienkiewicz and Zhu's local patch recovery method, *Commun. Numer. Meth. Engng.*, *11*, 427–434.

LAFAURIE, B., NARDONE, C., SCARDOVELLI, R., ZALESKI, S. et ZANETTI, G. (1994). Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER, *J. Comput. Phys.*, *113*, 134–147.

LANDAU, L. D. et LIFSHITZ, E. M. (1987). *Fluid Mechanics*, Pergamon Press, Oxford, deuxième édition.

LAYTON, W. et POLMAN, B. (1996). Oscillation absorption finite element methods for convection-diffusion problems, *SIAM J. Sci. Comput.*, *17*, 6, 1328–1346.

LEBORGNE, G. (1992). *Simulation numérique d'écoulements de fluides viscoélastiques de type Oldroyd: utilisation d'éléments finis de degré 1*, Thèse de doctorat, École Polytechnique, Paris.

LESAINT, P. et RAVIART, P. A. (1974). On a finite element method for solving the neutron transport equation, *Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations*, C. de Boor, Academic Press, New York, 89–123.

LIU, X. et LIENHARD V, J. H. (1993). The hydraulic jump in circular jet impingement and in other thin liquid films, *Experiments in Fluids*, *15*, 108–116.

LOTH, E., TAEIBI-RAHNI, M. et TRYGGVASON, G. (1997). Deformable bubbles in a free shear layer, *International Journal of Multiphase Flow*, *23*, 5, 977–1001.

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

MASHAYEK, F. et ASHGRIZ, N. (1995a). Advection of axisymmetric interfaces by the volume-of-fluid method, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, *20*, 1337–1361.

MASHAYEK, F. et ASHGRIZ, N. (1995b). A hybrid finite-element-volume-of-fluid method for simulating free surface flows and interfaces, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, *20*, 1363–1380.

MAVRIDIS, H., HRYMAK, A. N. et VLACHOPOULOS, J. (1987). Finite element simulation of stratified multiphase flows, *AIChE J.*, *33*, 3, 410–422.

MIDDLEMAN, S. (1995). *Modeling Axisymmetric Flows: Dynamics of Films, Jets and Drops*, Academic Press, San Diego.

MITSOULIS, E. et HENG, F. L. (1987). Numerical simulation of coextrusion from a circular die, *J. Appl. Polym. Sci.*, *34*, 1713–1725.

NAVTI, S. E., RAVINDRAN, K., TAYLOR, C. et LEWIS, R. W. (1997). Finite element modelling of surface tension effects using a Lagrangian-Eulerian kinematic description, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *147*, 41–60.

NICKELL, R. E., TANNER, R. I. et CASWELL, B. (1974). The solution of viscous incompressible jet and free-surface flows using finite-element methods, *J. Fluid Mech.*, *65*, 189–206.

NOBARI, M. R., JAN, Y.-J. et TRYGGVASON, G. (1996). Head-on collision of drops—a numerical investigation, *Phys. Fluids*, *8*, 1, 29–42.

NOH, W. F. et WOODWARD, P. (1976). SLIC (simple line interface calculation), *Lecture Notes In Physics*, A. I. van de Vooren et P. J. Zandbergen, Springer-Verlag, New York, tome 59, 330–340.

OMODEI, B. J. (1980). On the die-swell of an axisymmetric Newtonian jet, *Computers and Fluids*, *8*, 275–289.

OÑATE, E., GARCÍA, J. et IDELSOHN, S. (1997). Computation of the stabilization parameter for the finite element solution of advective-diffusive problems, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, *25*, 1385–1407.

OSTRACH, S. (1982). Low-gravity fluid flows, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Annual Review Inc., tome 14, 313–345.

PAPASTAVROU, A. et VERFÜRTH, R. (1998). A computational comparison of *A posteriori* error estimators for convection-diffusion problems, *Computational Mechanics: New Trends and Applications*, S. R. Idelsohn, E. Oñate et E. N. Dvorkin, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), Barcelone, Espagne, 12.

PELLETIER, D., ZAKI, A. et FORTIN, A. (1994). Adaptive remeshing for hyperbolic transport problems, *Comp. Fluid Dyn.*, *3*, 79–99.

PERAIRE, J., VAHDATI, M., MORGAN, K. et ZIENKIEWICZ, O. C. (1987). Adaptive remeshing for compressible flow computations, *J. Comput. Phys.*, *72*, 449–466.

PESKIN, C. S. (1977). Numerical analysis of blood flow in the heart, *J. Comput. Phys.*, *25*, 220–252.

PROBSTEIN, R. F. (1989). *Physicochemical Hydrodynamics: An Introduction*, Butterworth-Heinemann, Boston.

PUCKETT, E. G. et SALTZMAN, J. S. (1992). A 3D adaptive mesh refinement algorithm for multimaterial gas dynamics, *Physica D*, *60*, 84–93.

RAITHBY, G. D. (1976). Skew upstream differencing schemes for problems involving fluid flow, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *9*, 153–164.

RALLISON, J. M. (1984). The deformation of small viscous drops and bubbles in shear flows, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Annual Reviews Inc., tome 16, 45–66.

RAMASWAMY, B. (1990). Numerical simulation of unsteady viscous free surface flow, *J. Comput. Phys.*, *90*, 396–430.

RANNACHER, R. (1998). *A posteriori* error estimation in least-squares stabilized finite element schemes, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *166*, 99–114.

REDDY, K. R. et TANNER, R. I. (1978). Finite element solution of viscous jet flows with surface tension, *Computers and Fluids*, *6*, 83–91.

REED, W. H. et HILL, T. R. (1973). Triangular mesh methods for the neutron transport equation, Rapport technique LA-UR-73-479, Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, NM.

RIDER, W. J. et KOTHE, D. B. (1995a). A marker particle method for interface tracking, *6th International Symposium on Computational Fluid Dynamics*, Lake Tahoe, 6.

RIDER, W. J. et KOTHE, D. B. (1995b). Stretching and tearing interface tracking methods, *12th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, Rapport AIAA 95–1717, American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA), San Diego, CA, 11.

SACCO, R. et STYNES, M. (1998). Finite element methods for convection-diffusion problems using exponential splines on triangles, *Computers Math. Applic.*, *35*, 35–45.

SADHAL, S. S., AYYASWAMY, P. S. et CHUNG, J. N. (1997). *Transport Phenomena with Drops and Bubbles*, Mechanical Engineering Series, Springer-Verlag, New York.

SOULAÏMANI, A., FORTIN, M., DHATT, G. et OUELLET, Y. (1991). Finite element simulation of two- and three-dimensional free surface flows, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *86*, 265–296.

STONE, H. A. (1994). Dynamics of drop deformation and breakup in viscous fluids, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Annual Review Inc., tome 26, 65–102.

STONE, H. A. et LEAL, L. G. (1989). Relaxation and breakup of an initially extended drop in an otherwise quiescent fluid, *J. Fluid Mech.*, *198*, 399–427.

STROUBOULIS, T. et ODEN, J. T. (1990). *A posteriori* error estimation of finite element approximation in fluid mechanics, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *78*, 201–242.

SÜLI, E. et HOUSTON, P. (1996). Finite element methods for hyperbolic problems: *A posteriori* error analysis and adaptivity, *State of the Art in Numerical Analysis Conference*, York, G.B., 33.

SUSSMAN, M., SMEREKA, P. et OSHER, S. (1994). A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow, *J. Comput. Phys.*, *114*, 146–159.

TAYLOR, G. I. (1932). The viscosity of a fluid containing small drops of another fluid, *Proc. R. Soc. London*, tome 138 de *A*, 41–48.

TAYLOR, G. I. (1934). The formation of emulsions in definable fields of flow, *Proc. R. Soc. London*, tome 146 de *A*, 501–523.

THOMPSON, E. (1986). Use of pseudo-concentration to follow creeping viscous flows during transient analysis, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, *6*, 749–761.

TOUZANI, R. (1988). Implementation of the discontinuous finite element method for hyperbolic equations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *68*, 115–123.

TSIVERIOTIS, K. et BROWN, R. A. (1993). Solution of free-boundary problems using finite-element/Newton methods and locally refined grids: Application to analysis of solidification microstructure, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, *16*, 827–843.

TURGEON, É. (1997). *Application d'une méthode d'éléments finis adaptative à des écoulements axisymétriques*, Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal, Montréal.

UDAYKUMAR, H. S., KAN, H.-C., SHYY, W. et TRAN-SON-TAY, R. (1997). Multiphase dynamics in arbitrary geometries on fixed Cartesian grids, *J. Comput. Phys.*, *137*, 366–405.

UNVERDI, S. O. et TRYGGVASON, G. (1992a). Computations of multi-fluid flows, *Physica D*, *60*, 70–83.

UNVERDI, S. O. et TRYGGVASON, G. (1992b). A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows, *J. Comput. Phys.*, *100*, 25–37.

WEATHERBURN, C. E. (1927). On differential invariants in geometry of surfaces, with some applications to mathematical physics, *The Quarterly Journal of Pure and Applied Mathematics*, *50*, 230–269.

WILLIAMS, M. J., KOTHE, D. B. et PUCKETT, E. G. (1998). Convergence and accuracy of kernel-based continuum surface tension models, Rapport technique LA-UR-98-2268, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM.

YOUNGS, D. L. (1982). Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion, *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, 273–285.

ZAKI, A. (1993). *Simulation numérique des problèmes de convection sur des maillages adaptatifs non structurés du type* h-p, Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, Montréal.

ZHANG, Z. et ZHU, J. Z. (1995). Analysis of the superconvergent patch recovery technique and *A posteriori* error estimator in the finite element method (I), *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *123*, 173–187.

ZHANG, Z. et ZHU, J. Z. (1998). Analysis of the superconvergent patch recovery technique and *A posteriori* error estimator in the finite element method (II), *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *163*, 159–170.

ZHU, J. Z. (1997). *A posteriori* error estimation—the relationship between different procedures, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, *150*, 411–422.

ZIENKIEWICZ, O. C. et HUANG, G. C. (1989). Adaptive modelling of transient coupled metal forming processes, *Numiform 89: Numerical Methods in Industrial Forming Processes*, E. G. Thompson, R. D. Wood, O. C. Zienkiewicz et A. Samuelson, A. A. Balkema, Rotterdam, 8.

ZIENKIEWICZ, O. C. et TAYLOR, R. L. (1989). *The Finite Element Method*, McGraw-Hill, Londre.

ZIENKIEWICZ, O. C. et ZHU, J. Z. (1987). A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, *24*, 337–357.

ZIENKIEWICZ, O. C. et ZHU, J. Z. (1991). Adaptivity and mesh generation, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, *32*, 783–810.

ZIENKIEWICZ, O. C. et ZHU, J. Z. (1992a). The superconvergent patch recovery and *A posteriori* error estimates. Part 1: The recovery technique, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, *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, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, *33*, 1365–1382.

INDEX

A

adaptive mesh refinement, 60
adhérence aux parois, 99
adimensionnalisation, 105, 112, 130
agents anti-statiques, 128
amont
  de l'écoulement, 11
  direction, 23
angle de rotation d'une bulle, 134
arbitrary Lagrangian-Eulerian, 59
aval de l'écoulement, 23

B

bulle, 71, 127

C

cable, 93
capture adaptative d'interface, 61, 75, 77
capture d'interface, 50
capture de discontinuité, 27, 115
caractéristiques, 96
carte de taille, 31
cellule d'éléments, 39
centre de courbure, 9
chaleur massique, 6, 72
cisaillement, 128
coefficient de tension superficielle, 9, 65
coextrusion, 93
condensation statique, 71
condition d'immiscibilité, 10
conditions limites, 7, 71
  aux interfaces, 8
    équilibre des forces, 9, 66, 73, 115, 130
    continuité de la température, 9
    continuité de la vitesse normale, 8
    continuité de la vitesse tangentielle, 9, 73
    continuité du flux de chaleur, 10
  de Dirichlet, 7
  de Neumann, 8
conductivité thermique, 6, 72
conservation de la matière, 51, 56, 62, 104, 141
constante des gaz parfaits, 7
continuum surface force, 66, 73, 80
contrainte d'incompressibilité, 73
contrôle du carburant dans les systèmes à propulsion liquide, 128
coordonnées axisymétriques, 85
couchage, 65
courants parasites, 89
courbe de déformation, 138
courbure de la surface libre, 9, 66, 68
Crouzeix-Raviart, élément de, 71
cycle adaptatif, 33, 35

D

delta de Dirac, 68

demi grand-axe, 131
demi petit-axe, 131
densité, 5, 72
diamètre d'un canal, 105, 113
diffusion artificielle, 18
diffusion dans le sens des lignes de courant, 19
diffusion numérique, 18
dispersion de colorants, 128
dissipation visqueuse, 5
distribution de taille, 31, 33, 77
domaine de calcul, 7
débit, 99

E

écoulement
  élongationnel, 128, 141
  cisaillé, 128
  développé, 99
  en capillaire, 111
  linéaire, 127
  rempant, 77
  stationnaire, 81
  stratifié, 71, 94
effets visqueux, 134
élasticité, 94
élastomère thermoplastique, 107
élimination pas soustraction, 90
émulsions, 128
énergie d'activation, 7
énergie libre de Helmholtz, 69
équation(s)
  Boussinesq, 124
  conservation de l'énergie, 5, 71
  conservation de la masse, 5
  conservation de la quantité de mouvement, 5
  convection-diffusion, 17
  hyperbolique, 23
  Navier-Stokes, 71
  St-Venant, 124
  Stokes, 94
  transport, 11, 73, 81
équidistribution de l'erreur, 33
erreur
  élémentaire, 33
  admissible locale, 33
  admissible totale, 33
espace
  de Sobolev, 13
  des fonctions de carré intégrable, 12
  dual, 13
estimation d'erreur a posteriori, 32, 35
  par projection, 36
  par projection globale, 37
  par projection locale, 39, 77
  par résolution de problèmes locaux, 42, 75
  problèmes hyperboliques, 46
état stationnaire, 81
eulériennes, méthodes, 50
extrudeuse, 95
extrusion, 93

F

fabrication de fibre, 111
fabrication de verre biphase, 128

facteur de glissement, 7
facteur de réduction de l'erreur, 33
factorisation LU, 73
fibre, 93
filière, 93
film multicouche, 93
fluide
  incompressible, 5
  newtonien, 6
  newtonien généralisé, 6
  non miscible, 10
  viscoélastique, 94
fonction
  d'interpolation, 16
  de courant, 96
  de taille, 31, 34
  distance, 55
  test, 14
force(s)
  capillaire, 64, 113
    interfaciale, 67
    volumique, 67
  de van der Waals, 64
  visqueuses, 113
  volumique, 6
forme faible
  équation de conservation de l'énergie, 15
  équation de conservation de la masse, 14
  équation de conservation de la quantité de mouvement, 14
  équation de transport, 15
fraction de volume, 50

G

Galerkin
  méthode de, 74, 75
Galerkin, méthode de, 16
gonflement, 114, 117
  en sortie de filière, 112
  numérique, 119
gouttelette, 127

H

hauteur de l'interface, 99
huile de ricin oxidée, 135

I

immersed boundaries method, 70
immiscibilité, 73
impression à jets d'encre, 65, 128
inertie, 117
interface, 8

J

jet
  impactant, 77, 111, 123
    émergé, 123
  libre, 111, 117

L

Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi, condition de, 16
lagrangien augmenté, 73
lagrangienne, méthode, 57
lagrangienne-eulérienne, méthode, 58
Laplace, 65
  loi de, 65
  problème de, 80
Lax-Milgram, théorème de, 15

LBB, condition, 16, 71
level set method, 55
ligne de courant sortante, 137
lignes de courant, 19
lignes de niveau, 55

M

maillage, 16
  de fond, 31
  optimal, 31, 33
mailleur à progression de front, 31
malaxage multiphase, 128
marker and cell, 51
matrice
  de convection, 16
  de convection thermique, 16
  de diffusion thermique, 16
  de diffusion visqueuse, 16
  de transport de la pseudo-concentration, 16
  divergence, 16
  masse, 81
miscibilité, 64
mise-à-jour d'interface, 56, 62, 141
mixte, méthode, 58
modèle
  d'Arrhénius, 7
  de Carreau, 6, 107
  de loi-de-puissance, 6
  de Newton, 6
  de Norton-Hoff, 6
montage de Taylor, 129
moulage, 111
méthode d'éléments finis stabilisée, 75
  Douglas-Wang, 22
  Galerkin/least-squares, 21
  méthode de Galerkin discontinue, 23, 74
  streamline upwind, 19
  streamline upwind/Petrov-Galerkin, 20
méthode directe, 76
méthode décentrée, 18
méthode itérative, 76
méthode résiduelle, 18

N

Newton, méthode de, 73
nombre capillaire critique, 134
nombres adimensionnels
  capillaire, 113, 130
  gonflement, 114
  paramètre de déformation, 131
  paramètre de tension superficielle, 114
  Péclet, 17, 105
  ratio de densités, 131
  ratio de viscosités, 131
  Reynolds, 105, 113, 130
  Weber, 113
normale extérieure, 7
normale extérieure à un élément, 43
normale à l'interface, 8

O

opérateur de transition, 33
oscillations numériques, 26, 74
oscillations parasites, 83

P

paramètre de déformation, 131
paramètre de déformation alternatif, 131
paramètre de stabilisation, 21
paramètre de tension superficielle, 114
paroi solide, 8
particle in cell, 60
particules, méthode des, 59
peinture à air comprimé, 110
perte de matière, 139
Petrov-Galerkin, discrétisation de type, 19
piecewise linear interface calculation, 53
point de stagnation, 129
point-fixe, méthode de, 73
points d'échantillonnage, 40
polyamide, 107
polymères, 93
pression, 6
pression capillaire, 64
principe de superposition, 7
problème de Taylor, 127
problème variationnel local de l'erreur, 42
produit scalaire, 12
projection continue, 84
préconditionnement, 112
pseudo-concentration, 10, 53, 72
pseudo-transitoire, 82

R

raffinement local, 30
ratio
  de densités, 131
  de débits, 99
  de viscosités, 99, 131
rayon d'une goutte, 130
rayon de courbure, 9, 66, 85
reconstruction d'interface, 51
relèvement, 15
remaillage, 30
ressaut hydraulique, 111, 123
retrait, 117
régime permanent, 82
région de stagnation, 124
région de transition, 66, 82
région de transition volumique, 67
régularité, 84
résolution en correction, 81

S

saut en pression, 64, 83, 86
silicone, 135
simple line interface calculation, 51
solution quasi-analytique, 98
source de chaleur, 6
stratégie
  couplée, 75, 97
  découplée, 73, 97
suivi d'interface, 57
superconvergence, 39
surface libre, 8
suspensions, 128
systèmes à décollage vertical, 110
séchage du papier et des textiles, 110
séparation du pétrole et de l'eau, 128

T

taille d'un élément, 31, 34
tangente à l'interface, 8
taux de convergence, 34
température, 6
tenseur
    de Cauchy, 6
    de pression capillaire, 68
    des extra-contraintes, 6
    vitesse-de-déformation, 6
tension superficielle, 64, 80
terme d'absorption non linéaire, 27
thermodynamique, 69
traitement thermique du verre, 110
transfert thermique, 111
transitoire, 82
tube, 93
turbulence, 111

U

ultraconvergence, 40
unité de surface, 67
Uzawa, algorithme, 73

V

variables primitives, 71
vecteur
    des composantes de la pseudo-concentration, 16
    des composantes en pression, 16
    des composantes en température, 16
    des composantes en vitesse, 16
vecteurs parasites, 84
viscosité, 6, 72
    de référence, 7
vitesse
    de l'interface, 9
    du fluide, 6
    moyenne, 105, 113
volume of fluid, 52
vorticité, 137

Y

Young, 65