



<b>Titre:</b> Title:	Modélisation numérique tridimensionnelle directe de l'évolution d'une bulle d'air dans un écoulement d'eau
Auteur: Author:	Anthony Sansone
Date:	2021
Туре:	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis
Référence: Citation:	Sansone, A. (2021). Modélisation numérique tridimensionnelle directe de l'évolution d'une bulle d'air dans un écoulement d'eau [Master's thesis, Polytechnique Montréal]. PolyPublie. <u>https://publications.polymtl.ca/9181/</u>

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

URL de PolyPublie: PolyPublie URL:	https://publications.polymtl.ca/9181/
Directeurs de recherche: Advisors:	Stéphane Étienne, & Cédric Béguin
Programme: Program:	Génie mécanique

## POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

## Modélisation numérique tridimensionnelle directe de l'évolution d'une bulle d'air dans un écoulement d'eau

## ANTHONY SANSONE

Département de génie mécanique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées* Génie mécanique

Septembre 2021

© Anthony Sansone, 2021.

## POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

Modélisation numérique tridimensionnelle directe de l'évolution d'une bulle d'air dans un écoulement d'eau

présenté par Anthony SANSONE

en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées* a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

Alain BATAILLY, président Stéphane ÉTIENNE, membre et directeur de recherche Cédric BÉGUIN, membre et codirecteur de recherche Philippe CAUSSE, membre

À mon père, ma mère, et ma petite sœur...

#### REMERCIEMENTS

Je voudrais remercier en priorité mes directeurs de recherche, Stéphane et Cédric. Tout d'abord, merci d'avoir eu confiance en moi en m'intégrant à l'équipe de recherche, il y a maintenant presque deux ans. Au départ, j'étais inquiet quant à l'aspect "programmation" du sujet proposé, mais vous avez su me rassurer. Et je me suis finalement rendu compte que j'adore programmer. Aussi, malgré vos emplois du temps très chargés, vous avez toujours su trouver du temps pour m'aider lorsque j'étais bloqué. Vous étiez à la fois très impliqués dans mon projet, tout en me laissant très automone sur la gestion de celui-ci et de mon emploi du temps personnel, ce fut très appréciable. Votre bonne humeur et votre optimisme ont su me garder motivé même dans les moments les plus durs. Ce fut une très belle première expérience dans le monde de la recherche, j'ai beaucoup apprécié ce projet. David, je tiens aussi à te remercier.

Un grand merci à General Electric (GE) ainsi qu'au Conseil de Recherches en Sciences Naturelles et en Génie du Canada (CRSNG) pour leur support financier dans le cadre de la Chaire industrielle de recherche CRSNG-General Electric en écoulements diphasiques. Je tiens également à remercier le programme Formation Orientée vers la Nouveauté, la Collaboration et l'Expérience en Recherche (FONCER) sur le Génie Par la Simulation (GPS) pour leur apport financier ainsi que de ressources essentielle à cette recherche. Cela m'a permis de me consacrer à mes études plus sereinement.

Merci à ma chère école des Arts&Métiers pour m'avoir donné l'opportunité de réaliser ce double-diplôme de 2 ans à l'étranger.

Merci aux membres du jury de prendre le temps d'évaluer mes travaux.

Merci à tous mes collègues de bureau. Même si on a passé peu de temps en présentiel ensemble, merci à la team du C306 pour ces débuts ensemble au bureau, puis en distanciel : Flo, Jean-Jovis, Mathilde, Théo, Sarra, Thomas. Merci aussi à Stefane, Paulo, Othmane, Grégoire, Florentin, Leila. Cette entraide mutuelle m'a permis de mieux avancer dans le projet. Ces petites activités en dehors du travail étaient très sympathiques.

Merci à Yohann et Étienne pour leur formation au programme Calcul et Analyse en DYnamique des Fluides (CADYF). Vos conseils ont été précieux pour l'avancée de mon projet.

Je tiens maintenant à faire mes remerciements plus personnels.

Merci à mes amis les Faux Plans. Une petite pensée pour Vivien et Rémi qui sont rentrés trop tôt. Mathilde, Charlotte, Florian, Thomas, PA, Raph, un énorme merci pour tous ces voyages incroyables. On a découvert une bonne partie du Québec ensemble, merci de m'avoir supporté à chaque caprice au Tim Hortons et à chaque baignade dans les eaux les plus froides du Québec. Et évidemment merci pour tous ces moments plus tranquilles à Montréal. Merci à Théo pour ces petites sorties en dehors de Montréal, et ses nombreuses poutines de la Banquise. Merci à Théo et Élisa et tous les autres pour ces petits repas, et toutes ces activités ensemble.

Merci à Marine de m'avoir donné tous les bons conseils pour m'installer au Québec à mon arrivée en août 2019, et pour son accueil chaleureux.

Merci à tous mes colocataires de la rue Cartier : d'abord Valentin, Louis, Bruno, puis Axel, Agathe, Mathéo et enfin Megan. Merci de m'avoir supporté à manger tous ces chickenosaurus, merci pour tout ces petits moments passés ensemble dans notre cher appartement. Ce fut vraiment un plaisir de vivre avec vous, notamment pendant ces différents confinements, je n'aurais pas tenu sans ce soutien mutuel, et tous ces petits jeux, repas, Smash, séries, et même puzzles, ensemble. Ces petits moments en extérieur depuis l'allègement des mesures sanitaires, me sont aussi très chers.

Merci à mes amis de France (les Chefs, la bande d'épiciers, la fam's) pour m'avoir soutenu à distance, vous me manquez fort.

Merci à la team des Vétérans pour tous ces moments sur la patinoire (autant à  $-30^{\circ}$ C qu'à  $+30^{\circ}$ C). Fred, Max, Max, d'Jo, Martin, Kevin, et tous les autres, merci pour tous vos précieux conseils. Ma belle progression sur les patins et roller, le bâton en main, je vous la dois.

Des remerciements plus distingués pour Héloïse. Malgré les évènements que je ne mentionnerais pas ici, tu m'as encouragé et soutenu pour me lancer dans cette grande aventure à 6000km de la maison. Tu as été là pendant cette première année, je te dois alors des remerciements en toute objectivité.

Toutes ces rencontres au Québec furent magnifiques.

Une pensée particulière pour Soline. On verra où tout ceci nous mènera, mais peu importe : à l'heure actuelle je tiens à te remercier. Sans le vouloir, et peut-être même sans le savoir, tu as su me redonner confiance en moi. Merci pour toutes ces discussions par message, et plus récemment pour ces moments passés ensemble. Tu m'as donné beaucoup de courage pendant la rédaction de ce mémoire.

Merci aussi de m'avoir fait découvrir la belle campagne sherbrookoise, en compagnie de Ben, Élodie, Lucas et tous les autres.

Enfin, ceux sans qui je ne serais jamais arrivé jusqu'ici... Mes parents, et ma petite soeur. Un immense merci. Vous m'avez toujours encouragé, soutenu et poussé vers l'avant depuis mon plus jeune âge. Vous avez toujours été là pour que je puisse étudier dans un environnement favorable, et lorsque je vous ai parlé pour la première fois de cette opportunité d'étudier à l'étranger, vous m'avez tout de suite encouragé sans aucune hésitation. Une fois au Québec, vous m'avez toujours soutenu à distance, dans les bons moments comme dans les plus durs. Nous avons passé des heures toutes les semaines au téléphone, et vous aviez toujours les bons mots pour me rassurer. Je n'ai pas les mots pour vous dire à quel point je vous suis reconnaissant. J'ai hâte que vous puissiez enfin venir découvrir le Québec avec moi.

Papi, Mami, je vous remercie aussi, pour les mêmes raisons. Jott, Laïka je sais que vous m'attendez, je reviendrai bientôt.

#### RÉSUMÉ

Ce mémoire présente le développement d'une méthode numérique de résolution des écoulements fluides à plusieurs phases basée sur la résolution des équations de Navier-Stokes avec suivi d'interface interfluide. La méthode développée permet la résolution fine de l'évolution de bulles dans un écoulement liquide. Une formulation Arbitraire Lagrangienne-Eulerienne (ALE) couplée à la Méthode des Éléments Finis (MEF) permet une imposition directe des conditions aux limites au niveau de l'interface diphasique. Deux d'entre elles sont particulièrement discutées dans ce mémoire : la tension superficielle qui est déterminée implicitement avec l'opérateur de Laplace-Beltrami, et une condition de régularisation du maillage. Ces termes ont été implémentés tridimensionnellement dans le programme numérique CADYF. Une étape de vérification et validation à l'aide de cas tests permet de démontrer le bon développement de ces conditions aux limites. On verra qu'un léger problème de conservation de masse subsiste, mais qu'il reste négligeable si le maillage est pertinemment choisi.

En sommes, le code CADYF ainsi étendu permet de simuler avec précision l'évolution d'une ou plusieurs bulles d'air dans un écoulement d'eau. Il pourrait être réutilisé dans l'état pour obtenir de plus amples résultats concernant les effets induits par une bulle sur une autre.

#### ABSTRACT

This thesis present a development of a numerical method for solving multiphasic fluid flows. This resolution is made by solving the Navier-Stokes equations, with interface tracking. This method allows an acute resolution of a bubbles group evolution in a liquid flow. An Arbitrary Lagrangian-Eulerian formulation linked with the Finite Element Method allows a direct application of boundary conditions at the biphasic interface. Two of them are especially discussed in this thesis : surface tension which is implicitly identified by the Laplace-Beltrami operator, and a mesh regularization condition. Both has been implemented in three dimensions into the numerical program CADYF. Verification and validation cases has been led in order to ensure the proper implementation of these boundary conditions. We will see that a little mass conservation problem still occur. However, this problem is insignificant if the mesh is well choosen.

Thus, this extended CADYF version allows to accurately simulate one or several air bubbles progress in a water flow. This work could be reused to acquire more results regarding to effects induced by a bubble on another one.

# TABLE DES MATIÈRES

DÉDICA	ACE	iii
REMER	RCIEMENTS	iv
RÉSUM	IÉ	vii
ABSTR	ACT	viii
TABLE	DES MATIÈRES	ix
LISTE I	DES TABLEAUX	xi
LISTE I	DES FIGURES	xii
LISTE I	DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xiv
CHAPI	TRE 1 INTRODUCTION	1
1.1	Définitions et concepts de base	1
1.2	Éléments de la problématique	2
1.3	Objectifs de recherche	3
1.4	Plan du mémoire	3
CHAPI	TRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	4
2.1	Méthodes numériques en mécanique des fluides diphasique $\ . \ . \ . \ . \ .$	4
	2.1.1 Méthodes de capture d'interface	5
	2.1.2 Méthodes de suivi d'interface	6
	2.1.3 Méthodes à interfaces diffusives	7
2.2	Détermination de la tension superficielle	7
	2.2.1 Opérateur de Laplace-Beltrami	9
	2.2.2 Problèmes induits	9
2.3	Ascension de bulles	11
CHAPI	TRE 3 MÉTHODOLOGIE : MÉTHODES NUMÉRIQUES APPLIQUÉES AUX	
ÉCO	OULEMENTS DIPHASIQUES	13
3.1	Théorie physique de l'écoulement monophasique	13

3.2	Métho	des numériques appliquées à l'écoulement monophasique : la Méthode	
	des Éle	éments Finis	14
	3.2.1	Formulation variationnelle des équations de Navier-Stokes	14
	3.2.2	Espaces fonctionnels et normes induites	15
	3.2.3	Approximation des inconnues du problème	16
	3.2.4	Approximation géométrique : discrétisation du domaine	16
	3.2.5	Résolution du système matriciel	20
3.3	Spécifi	cités de l'écoulement diphasique	22
	3.3.1	Suivi de l'interface	22
	3.3.2	Discrétisation de l'interface	26
	3.3.3	Conditions aux limites appliquées à l'interface diphasique	28
CHAPI'	TRE 4	VÉRIFICATION ET VALIDATION	34
4.1	Vérific	ation	34
	4.1.1	Saut de pression	34
	4.1.2	Condition de régularisation	37
4.2	Valida	tion $\ldots$	50
	4.2.1	Présentation de la simulation	51
	4.2.2	Résultat de la simulation	53
CHAPI'	TRE 5	CONCLUSION	55
5.1	Synthè	ese des travaux	55
5.2	Limita	tions de la solution proposée	55
5.3	Amélio	prations futures	56
RÉFÉR	ENCES	8	58

## LISTE DES TABLEAUX

Tableau 4.1	Erreur relative sur le saut de pression de l'interface en fonction de la	
	taille caractéristique des éléments	35
Tableau 4.2	Nombres adimensionnels caractérisant un problème d'ascension d'une	
	bulle	38
Tableau 4.3	Caractéristiques des simulations pour l'étude de la convergence de la	
	perte de masse	46
Tableau 4.4	Nombres adimensionnels caractérisant un problème d'oscillation d'une	
	bulle	52

## LISTE DES FIGURES

Figure 2.1	Les différents régimes de bulles en ascension, définis par Clift et $al.$ [1].	
	Figure adaptée de $[1]$	11
Figure 3.1	Élément tétraédrique de Taylor-Hood $P_2 - P_1$ isoparamétrique dans un	
	contexte 3D	17
Figure 3.2	Élément tétra édrique de Taylor-Hood $\operatorname{P2-P1}$ de référence dans un contexte	
	3D	18
Figure 3.3	Représentation des descriptions eulériennes, lagrangienne et ALE entre	
	deux instants $t_n$ et $t_{n+1}$ sur un cas unidimentionnel selon l'axe x. Figure	
	adaptée de [2] $\ldots$	24
Figure 3.4	Élément d'interface dans un contexte 3D	26
Figure 3.5	Élément triangulaire de Taylor-Hood P2-P1 de référence dans un contexte	
	3D	27
Figure 3.6	Ensemble ${\bf V}$ des nœuds voisins au nœud courant sommet (s) ou milieu	
	$(m) \ldots \ldots$	33
Figure 4.1	Erreur relative sur le saut de pression de l'interface en fonction de la	
	taille caractéristique des éléments	36
Figure 4.2	Saut de pression pour une taille caractéristique de $r/12$	
Figure 4.3	Déformation du maillage selon l'axe $\vec{x}$ .	
	$\mathbf{Gauche}$ : sans condition de régularité - $\mathbf{Droite}$ : avec condition de	
	régularité barycentrique	40
Figure 4.4	Déformation du maillage de l'interface en fonction du temps $\ . \ . \ .$	41
Figure 4.5	Comparaison de la perte de masse en fonction du temps $\ldots \ldots$	43
Figure 4.6	Tentative de correction $(3)$	44
Figure 4.7	Tentative de correction $(4)$	45
Figure 4.8	Fonction de raffinement du maillage	46
Figure 4.9	Vue en coupe du maillage avec une taille caractéristique de $r/12$	47
Figure 4.10	Comparaison de la perte de masse en fonction du temps pour différentes	
	tailles de maille caractéristiques	48
Figure 4.11	Taux de perte de masse par unité de temps en fonction de la taille	
	caractéristique des éléments	49
Figure 4.12	Durée physique de simulation en fonction du nombre de noeuds avec	
	une machine de bureau à 8 coeurs	50
Figure 4.13	Forme géométrique initiale de la bulle	51

Figure 4.14 Amplitude de l'oscillation en fonction du temps adimensionnel [domaine de taille  $10d_e$  (—); domaine de taille  $30d_e$  (—)], comparaison avec résultats de Fortin [maillage fin (—); maillage grossier (—)], et solution analytique de Lamb [3] [modèle linéaire non-visqueux (—); modèle linéaire visqueux (—); modèle non-linéaire (—)] ..... 53

# LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

# Sigles \_\_\_\_\_

ALE	Arbitrary Lagrangian-Eulerian	
BDF	Backward Differentiation Formula	
CADYF	Calcul et Analyse en DYnamique des Fluides	
CRSNG	Conseil de Recherches en Sciences Naturelles et en Génie du Canada	
$\operatorname{CSF}$	Continuum Surface Force	
CSS	Continuum Surface Stress	
DI	Diffuse Interface	
EPA	Environmental Protection Agency	
FONCER	Formation Orientée vers la Nouveauté, la Collaboration et l'Expérience	
	en Recherche	
GE	General Electric	
GPS	Génie Par la Simulation	
LBM	Lattice Boltzmann Method	
LS	Level Set	
MEF	Méthode des Éléments Finis	
MMS	Method of Manufactured Solution	
MPI	Message Passing Interface	
MVF	Méthode des Volumes Finis	
OMP	Open Multi Processing	
REQM	Racine de l'Erreur Quadratique Moyenne	
SI	Sharp Interface	
SPH	Smoothed-Particle Hydrodynamics	
VOF	Volume Of Fluid	

# Nombres adimensionnels \_\_\_\_\_

$\rho^*$ Masse	volumique	relative
----------------	-----------	----------

- $\mu^*$  Viscosité dynamique relative
- t\* Temps adimensionnel
- Eo Nombre d'Eötvös
- M Nombre de Morton
- Oh Nombre d'Ohnesorge

- $\vec{u}$  Champ de vitesse, de composantes [u,v,w]
- p Champ de pression

#### Variables indépendantes \_\_\_\_\_

- t Temps
- x, y, z Coordonnées cartésiennes
- r, s, t Coordonnées de référence

## Formulation ALE et Pseudo-Solide

$\vec{u_{ALE}}$	Vitesse ALE
$\vec{\chi}$	Déplacement du maillage, de composantes $[\xi,\eta,\zeta]$
$\lambda_{ps}, \mu_{ps}$	Coefficients de Lamé
${\cal E}$	Tenseur de Green-Lagrange

#### Fonctions test et d'interpolation; degrés de liberté

- $\vec{\phi_u}$  Fonction test de la vitesse
- $\phi_p$  Fonction test de la pression
- $\vec{u_i}$  Degré de liberté en vitesse
- $\vec{x_i}$  Degré de liberté en position
- $p_i$  Degré de liberté en pression
- $N_i^u$  Fonction d'interpolation de la vitesse
- $N_i^x$  Fonction d'interpolation de la position
- $N_i^p$  Fonction d'interpolation de la pression

#### Domaines \_

- $\Omega$  Domaine volumique
- $\Omega^*$  Domaine de référence
- $\partial \Omega$  Bord du domaine
- $\Gamma_D$  Frontières de Dirichlet
- $\Gamma_N$  Frontières de Neumann
- $\gamma$  Bord de l'interface

- $L^2_{\Omega}$  Espace des fonctions de carré intégrable
- $H^1_{\Omega}$  Espace de Sobolev
- $\|.\|_{L_2}$  Norme  $L_2$
- $\|.\|_{H_1}$  Norme  $H_1$

## Propriétés physiques \_\_\_\_\_

- $\rho$  Masse volumique
- $\mu$  Viscosité dynamique
- $\sigma$  Coefficient de tension superficielle

#### Géométrie \_\_\_\_\_

- $l_c$  Taille caractéristique des éléments
- $d_e$  Diamètre équivalent
- r Rayon
- a Grand axe
- *b* Petit axe
- $\alpha \quad \text{Déformation} \quad$
- $\kappa \quad \text{Courbure} \quad$
- $\vec{n}$  Normale unitaire
- $\vec{t}$  Tangente unitaire

#### Matrices et tenseurs \_

- $\mathcal{J}$  Matrice Jacobienne
- $\mathcal{J}^*$  Matrice pseudo-inverse de Moore-Penrose
- J Jacobien
- A Matrice élémentaire
- B Second membre élémentaire
- R Résidu
- $\mathbb{T}$  Tenseur des contraintes
- $\mathbb{I}$  Tenseur identité

#### Opérateurs vectoriels \_\_\_\_\_

 $\nabla$  Opérateur nabla

- $\underline{\nabla}$  Gradient surfacique
- $\underline{\Delta}$  Opérateur de Laplace-Beltrami

#### Autre \_\_\_\_\_

- $\psi$  Fonction d'advection
- H Fonction de Heaviside
- $\vec{T}$  Force de tension superficielle
- $\vec{f}$  Force volumique
- $\frac{\partial}{\partial t}$  Dérivée partielle temporelle
- g Gravité

#### CHAPITRE 1 INTRODUCTION

#### 1.1 Définitions et concepts de base

Le monde actuel connait certains problèmes énergético-environnementaux, qu'il faut corriger au plus vite afin d'y limiter l'impact de l'homme. En effet, la biodiversité est très dense et variée dans les eaux douces, même si celles-ci représentent seulement 0,01% de l'eau de la planète. Mais cette biodiversité est largement impactée par une des plus imposantes constructions de l'homme : les barrages. Ces barrages peuvent avoir plusieurs utilités comme l'irrigation, la fourniture en eau potable, et la production d'électricité, mais ils entraînent en contrepartie l'appauvrissement en oxygène des eaux en aval de ceux-ci, notamment dans les climats très chauds ou très froids. Des normes sur la qualité de l'eau ont d'ailleurs été instaurées par l'Environmental Protection Agency (EPA) et le Conseil canadien des ministres de l'environnement. Un des phénomènes qui se manifeste beaucoup l'hiver au Canada est le *Winterkill*. Il s'agit d'un évènement de grande mortalité de la faune aquatique lié au manque d'oxygène dissous dans les lacs. Ce manque d'oxygène est dû à une absence de photosynthèse : en effet, l'épaisse couche de glace hivernale recouvrant les lacs empêche les rayons du soleil d'atteindre les plantes aquatiques photosynthétiques. Trop peu d'oxygène est alors créé dans ces retenues d'eau.

Les travaux décrits dans ce mémoire s'inscrivent dans la chaire de recherche industrielle en écoulement diphasique en partenariat avec le Conseil de Recherches en Sciences Naturelles et en Génie du Canada et General Electric (CRSNG-GE), dirigée par mon directeur de recherche, Stéphane Étienne de l'école Polytechnique de Montréal. L'objectif du partenaire industriel GE est de comprendre les interactions diphasiques air-eau afin de concevoir et réaliser des turbines hydroélectriques aérantes. Le but étant d'oxygéner l'eau pauvre en oxygène, turbinée en aval des barrages hydroélectriques, tout en atténuant les vibrations dues à la rotation des turbines lorsqu'elles fonctionnent en dehors de leur point de fonctionnement optimal.

Pour atteindre cet objectif, la Chaire emploie une méthodologie bien cadrée. Plusieurs sujets de recherche (mémoire ou thèse) sont définis et travaillés en parallèle afin de mieux comprendre les écoulements diphasiques air-eau. Il est séparé en deux grands thèmes : étude expérimentale des lois de similitudes (6 sujets) et étude de la modélisation numérique de l'avenir du nuage de bulles (6 sujets). Mes travaux s'inscrivent dans ce deuxième thème. Se référer aux sections 1.2 et 1.3 pour plus de détails sur la problématique et les objectifs de mes travaux. Un des outils de simulation numérique utilisé dans la chaire de recherche est le programme numérique CADYF. Il s'agit d'un code de calcul basé sur la MEF, entièrement développé à l'école Polytechnique de Montréal. Il a été initié par le Prof. Dominique Pelletier en 1985, et est amélioré d'années en années par les élèves chercheurs en maîtrise ou doctorat. On peut citer les auteurs des dernières avancées de ce programme : Vautrin, Muller, Fortin [4–6] et bien d'autres. CADYF comporte aujourdhui plus de 300000 lignes de code. Il est développé en langage Fortran.

Ce logiciel est conçu en trois sous-programmes :

- amiral Le pré-processeur amiral prend en compte les fichiers d'entrées écrits par l'utilisateur, et transforme les informations en commandes lisibles par le calculateur. Il génère aussi le maillage à partir d'un maillage de fond, fourni soit par le mailleur interne *Tria2D*, soit par le mailleur externe *GMSH* [7]. Comme son nom l'indique, *Tria2D* ne fonctionne qu'en deux dimensions, je vais alors utiliser le mailleur *GMSH* pour travailler tridimensionnellement.
- cadyf Il s'agit du cœur du programme : le calculateur éléments finis
- adapt permet d'adapter le maillage afin d'améliorer la résolution numérique. L'adaptation de maillage ne fonctionne qu'avec le mailleur *Tria2D*, je n'utiliserai alors pas ce sous-programme là.

Les résultats de calcul sont visualisés et post-traités sur les logiciels Paraview et Gnuplot.

La version du programme CADYF au commencement de mes travaux était capable de faire des calculs tridimensionnels en monophasiques, mais pas en multiphasique. Elle était cependant capable de faire des calculs bidimensionnels multiphasiques précis depuis les travaux de Vautrin [4], qui a notamment travaillé sur une meilleure implémentation de la tension superficielle. Fortin a travaillé sur une version annexe du programme CADYF. Il a implémenté tridimensionnellement les écoulements diphasiques en s'appuyant plus particulièrement sur une condition de régularisation du maillage.

Mon travail était ainsi d'implémenter tridimensionnellement l'aspect diphasique des écoulements fluides dans la nouvelle version de CADYF. Les deux difficultés de ce développement sont l'application de la tension superficielle et de la condition de régularité.

#### 1.2 Éléments de la problématique

Dans le contexte numérique de la chaire de recherche, la série de projets comportant mes travaux s'inscrit dans une problématique de développement de loi de paroi pour couche limite aérée. Le but étant de prédire correctement la perte de charge d'un écoulement diphasique. Il serait ambitieux de modéliser directement un nuage de bulles aux grandes échelles. On commence d'abord par une bulle, puis un petit groupe de bulles aux petites échelles, en simulation numérique directe. Les corrélations sur la dynamique des bulles (notamment la traînée induite d'une bulle sur une autre) pourraient être un accès direct à la détermination des lois de paroi.

### 1.3 Objectifs de recherche

Dans le cadre de la problématique décrite dans la section précédente, mon **objectif principal** est de développer, vérifier et valider une méthode de résolution numérique tridimensionnelle des écoulements à phases séparées dans le programme CADYF pour la simulation de bulles.

Cette implémentation se découpe en trois objectifs spécifiques :

- Développement des éléments de Taylor-Hood pour une interface 2D évoluant dans un espace 3D.
- Développement, vérification et validation d'une méthode de calcul implicite de la tension de surface.
- Développement et vérification d'une condition de régularisation du maillage de l'interface.

#### 1.4 Plan du mémoire

Ce mémoire présente les travaux effectués autour de quatre chapitres en plus de ce chapitre introductif.

On commencera par présenter au Chapitre 2 une revue de littérature des travaux déjà effectués dans le domaine pour se donner une meilleure idée des possibilités de simulations numériques. Cet état de l'art n'est pas exhaustif, mais il renvoit vers des références que le lecteur curieux peut consulter. On offrira ensuite au Chapitre 3 une explication plus précise des méthodes numériques utilisées. C'est dans cette partie qu'on trouvera l'explication de mes développements ajoutés au programme CADYF. On proposera ensuite quelques cas de vérification et validation au Chapitre 4. On y trouvera aussi un problème sur lequel je me suis particulièrement investi : la conservation de la masse. Enfin on trouvera au Chapitre 5 une conclusion des travaux effectués avec une proposition d'amélioration pour les travaux futurs.

#### CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

Ce chapitre résume, non exhaustivement, un état de l'art des différentes modélisations utilisées par la communauté scientifique pour la simulation d'écoulements diphasiques. Ma problématique est basée sur la résolution directe des équations de Navier-Stokes à petite échelle, donc on passera succinctement en revue les principales méthodes numériques moyennées utilisées en mécanique des fluides diphasiques pour résoudre ces équations. Ensuite, on décrira les différentes méthodes disponibles pour prendre en compte la tension superficielle dans les écoulements à interfaces, et enfin on verra un état des études portant sur l'ascension de bulles.

#### 2.1 Méthodes numériques en mécanique des fluides diphasique

Il existe actuellement plusieurs méthodes pour résoudre les équations de Navier-Stokes de manière directe. La plupart se basent sur la Méthode des Éléments Finis (MEF), et nécessitent un maillage. Fortin [6] et Vautrin [4] les ont résumées dans leur revue. On peut classifier ces méthodes de différentes manières :

- Par type de référentiel comme le fait Fortin :
  - Formulation lagrangienne
  - Formulation eulerienne
  - Formulation hybride : ALE

(Ces formulations sont décrites plus en détail à la section 3.3.1)

- Par méthode de détermination de l'interface comme le fait Vautrin :
  - Méthodes de capture d'interface
  - Méthodes de suivi d'interface

Les listes précédentes classifient uniquement des MEF. On peut aussi faire une classification d'un niveau plus haut, dont les MEF font parties :

- Par méthode numérique :
  - Méthode des Éléments Finis (MEF)
  - Méthode des Volumes Finis (MVF)
  - Lattice Boltzmann Method (LBM)
  - Smoothed-Particle Hydrodynamics (SPH)

Se référer à Prosperetti et Tryggvason [8] pour plus de détails. La méthode SPH se base sur une formulation lagrangienne des équations de Navier-Stokes alors que la méthode LBM n'utilise pas les équations de Navier-Stokes. C'est l'équation discrète de Boltzmann qui est résolue à l'aide d'un schéma de collision-propagation.

Chacune de ces méthodes présentent leurs avantages et inconvénients. On utilisera la même classification que Vautrin pour les décrire et les résumer. Se référer à Vautrin [4] et Fortin [6] pour plus de détails. On verra ensuite qu'il existe un autre type de méthode à la section 2.1.3, que Fortin et Vautrin ne mentionnent pas.

#### 2.1.1 Méthodes de capture d'interface

Les méthodes de capture d'interface fonctionnent sur le principe de détermination implicite de l'interface diphasique. La formulation est purement eulérienne. Le maillage reste fixe dans le temps, l'interface ne correspond pas forcément aux nœuds du maillage. La position de l'interface n'est alors pas connue exactement, elle est généralement approximée par une équation d'advection (2.1)

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \psi = 0 \tag{2.1}$$

Il existe deux grandes catégories de méthodes à capture d'interface :

- Volume de fluide, ou Volume of fluid (VOF); introduite par Hirt et Nichols [9]
- Surfaces de niveau, ou Level Set (LS); introduite par Osher et Sethian [10]

La fonction  $\psi$  prend des valeurs réelles continues de 0 à 1 dans le cas VOF. Le domaine est en fait divisé en cellules : si une cellule se trouve entièrement dans le fluide 1 on aura  $\psi = 1, 0$ , si elle se situe entièrement dans le fluide 2 on aura  $\psi = 0, 0$ , et si la cellule se trouve à la fois dans le fluide 1 et 2 (donc au niveau de l'interface),  $\psi$  sera égal à la fraction de fluide 1 par rapport au fluide 2 présent dans la cellule.

Dans le cas LS, seul le signe de  $\psi$  compte :  $\psi > 0$  si on se situe dans le fluide 1,  $\psi < 0$  si on se situe dans le fluide 2, et  $\psi = 0$  au niveau de l'interface.

Les propriétés du fluide (masse volumique  $\rho$  et viscosité  $\mu$ ) s'écrivent dans les deux cas en fonction de  $\psi$  (équations 2.2) :

VOF: 
$$\rho = \rho_1 \psi + \rho_2 (1 - \psi))$$
 &  $\mu = \frac{1}{\rho} [\psi \mu_1 \rho_1 + (1 - \psi) \rho_2 \mu_2]$  (2.2a)

LS: 
$$\rho = \rho_1 + H(\psi)(\rho_2 - \rho_1) \quad \& \quad \mu = \mu_1 + H(\psi)(\mu_2 - \mu_1)$$
 (2.2b)

avec  $H(\psi)$  une pseudo fonction de Heaviside dans le cas LS. La fonction est lissée dans

une épaisseur fictive autour de l'interface pour éviter une trop grosse discontinuité. Dans le cas VOF, la fonction  $\psi$  doit être reconstruite avec précision. Gopala et van Wachem [11] proposent une revue des différents modèles de reconstruction de celle-ci.

Le désavantage de ces méthodes est donc la difficulté à calculer exactement les composantes géométriques de l'interface étant donné qu'on ne connait pas la position de celle-ci. Elles sont cependant très efficaces lorsque l'interface connait de grandes déformations ou de grands changements topologiques (par exemple, le fractionnement ou la coalescence de bulles). Le grand avantage des méthodes VOF est qu'elle assure la conservation de la masse contrairement aux méthodes LS. Mais la fonction  $\psi$  est plus facile à obtenir dans le cas LS.

Mirjalili et al. [12] propose une revue de ces différentes méthodes de capture d'interface.

#### 2.1.2 Méthodes de suivi d'interface

Contrairement aux méthodes de capture d'interface, l'interface est déterminée explicitement lors du suivi d'interface. Il n'y a pas besoin d'utiliser de fonction déterminée par une équation d'advection. La formulation peut-être eulérienne ou ALE.

Les avantages et inconvénients de ces méthodes sont le contraire des avantages et inconvénients des méthodes de capture d'interface : elles ne se prêtent pas bien aux grandes déformations ou changements topologiques des interfaces, mais peuvent représenter très précisément l'interface (on connait sa position exacte) et prendre en compte les phénomènes à petites échelles. Elles permettent aussi d'implémenter plus simplement des phénomènes comme la tension superficielle (voir section 2.2). Cependant, la conservation de la masse n'est pas assurée.

Il existe plusieurs méthodes de suivi d'interface :

— Front-tracking (méthode introduite par Unverdi et Tryggvason [13])

Cette méthode utilise deux maillages indépendants : le maillage classique du domaine, eulérien, donc fixe, ainsi qu'un maillage lagrangien de l'interface. Les nœuds du maillage de l'interface se déplacent donc sans altérer le maillage eulérien du domaine. Mais ce genre de méthode est difficile à mettre en place.

- Volume-tracking (méthode introduite par Harlow et Welch [14])
   Cette méthode est basée sur un ensemble de particules virtuelles qui sont déplacées par le champ de vitesse solution des équations. L'interface est alors interpolée entre les particules virtuelles extérieures du volume courant.
- Méthodes ALE (adaptée à la MEF par Hughes et al. [15])
   Il s'agit de la méthode qui sera utilisée dans le cadre de ces travaux. Elle est décrite

plus en détail à la section 3.3.1. L'avantage des méthodes ALE est qu'il suffit d'un seul maillage pour discrétiser l'ensemble du domaine ainsi que l'interface. Cependant, les nœuds du maillage doivent se déplacer pour suivre l'interface. C'est alors qu'entre en jeu la vitesse de déplacement du maillage. Le choix de cette vitesse est arbitraire, et doit être choisie afin de garder le maillage le plus régulier possible. Si l'interface se déforme trop, on peut procéder à une étape de remaillage du domaine. Mais on n'utilisera pas un tel procédé dans le cadre de ce projet car l'adaptation de maillage n'est pas encore développée en 3 dimensions dans le programme CADYF.

#### 2.1.3 Méthodes à interfaces diffusives

On remarque aussi dans la littérature qu'un autre type de méthode est utilisé. Il s'agit des méthodes à interface diffusive (ou Diffuse Interface (DI)) en opposition aux méthodes à interface tranchante (ou Sharp Interface (SI)). Toutes les méthodes décrites dans les sections précédentes (2.1 et 2.1.2) font parties de la catégorie des méthodes SI d'après Shaikh [16], Mao [17] et Yue [18].

Contrairement à ces méthodes là, les méthodes DI fonctionnent sur le principe d'un changement graduel des propriétés physiques à l'approche de l'interface. Elles peuvent s'apparenter à des méthodes LS (section 2.1) mais plus physiquement d'après Yue, puisque la fonction  $\psi$ n'est pas choisie artificiellement pour les méthodes DI. Shaikh propose d'ailleurs une comparaison entre les méthodes SI-LS et DI-LS.

L'équation mise en place ressemble à l'équation d'advection 2.1 mais avec un second membre. Mao utilise par exemple l'équation de *Allen-Cahn phase-field* (voir [17]).

Ces méthodes sont très efficaces pour les changements topologiques, et permet de calculer les grandeurs géométriques de l'interface sans difficulté. Mais elles ne conservent pas naturellement la masse.

Se référer à [19] pour une revue des différentes méthodes DI.

#### 2.2 Détermination de la tension superficielle

La tension superficielle est un un aspect très important à prendre en compte pour la résolution des écoulements diphasiques. Il est décrit avec plus de détails à la section 3.3.3.

L'équation 3.31 introduit le terme de tension surperficielle. Sous sa forme la plus simple, avec un coefficient de tension superficielle uniforme, il s'écrit de la manière suivante :

$$\vec{T} = -\sigma \kappa \vec{n} \tag{2.3}$$

avec  $\sigma$  le coefficient de tension superficielle,  $\kappa$  la courbure, et  $\vec{n}$  le vecteur normal.

Vautrin référence les différentes méthodes de calcul de la tension superficielle dans la revue de littérature de sa thèse [4] de 2020. Étant donné que je vais utiliser la même méthode que lui, je vais rappeler les différentes façons qu'il a décrites pour déterminer la tension superficielle. Je m'intéresserai ensuite aux avancées dans le domaine qui ont été faites après la rédaction de sa thèse, soit depuis 2020.

Les façons de déterminer la tension superficielle sont les suivantes :

- Approche Continuum Surface Force (CSF) La tension de surface est exprimée sur le domaine volumique  $\Omega$  plutôt que sur la surface interfaciale  $\Gamma$ . Afin que la définition de la tension de surface soit toujours valide, on la multiplie par une fonction  $\delta(\Gamma, x)$  afin que la tension de surface soit nulle dans le volume, et non nulle sur l'interface ( $\delta$  vaut 1 sur l'interface et 0 partout ailleurs). Cette méthode a été introduite par Brackbill [20].
- Approche Continuum Surface Stress (CSS) Cette approche, dite intégrale, se base sur la formule de Frenet-Serret (équation 2.4) :

$$d\vec{t} = \kappa \vec{n} ds \tag{2.4}$$

avec  $\vec{t}$  et  $\vec{n}$  la tangente et normale à la courbe interfaciale. L'intégration de la tension de surface se simplifie donc grandement grâce à l'équation 2.4. L'utilisation de cette méthode remonte à Peskin [21]. Anjos [22] l'utilise aussi, mais il multiplie la tension superficielle par une fonction de Heaviside.

— Imposition comme une condition aux limites Cette méthode est à utiliser avec une description lagrangienne ou ALE de l'interface. Il suffit de naturellement imposer la tension de surface comme une condition aux limites couplée sur les frontières des deux domaines qui coïncident pour former l'interface.

Le calcul de la courbure  $\kappa$  reste le plus difficile dans cette méthode puisqu'elle fait intervenir des dérivées de second ordre en espace. Il existe alors deux méthodes pour la déterminer : la méthode de Fortin [6] ou l'utilisation de l'opérateur de Laplace-Beltrami (voir section 2.2.1). On optera pour cette dernière dans le cadre de ces travaux.

Pour plus de détails, on peut référer le lecteur à Popinet [23], qui a récemment fait une revue de littérature de toutes ces méthodes numériques.

#### 2.2.1 Opérateur de Laplace-Beltrami

Cette section prend une valeur importante puisqu'il s'agit de la méthode que je vais utiliser pour déterminer la tension superficielle.

L'opétateur de Laplace-Beltrami est un opérateur issu de géométrie différentielle. Dziuk [24] a été le premier à utiliser cette méthode. Elle sera plus détaillée dans la section 3.3.3.

Plusieurs chercheurs ont utilisé l'opérateur de Laplace-Beltrami par la suite, et même récemment. Cet opérateur peut intervenir dans plusieurs des méthodes énumérées ci-dessus. Ivančić [25] utilise l'opérateur de Laplace-Beltrami avec une méthode ALE. Vautrin [4] utilise aussi l'opérateur de Laplace-Beltrami dans le cadre d'une méthode ALE, en deux dimensions. Je vais appliquer la même méthode mais en tridimensionnel.

Récemment (en 2021), de la même manière que Hysing [26] et Groß et Reusken [27], Smuda [28] utilise l'opérateur de Laplace-Beltrami dans le cadre d'une méthode *Level-set*. Hysing combine l'opérateur de Laplace-Beltrami avec l'approche CSF afin de travailler avec un schéma complètement implicite, et donc avec régularisation de la fonction  $\delta$ . Mais Smuda précise qu'il n'utilise pas de régularisation contrairement à Hysing, puisque la méthode de Galerkin Discontinue étendue qu'il utilise suffit à déterminer l'interface avec précision.

#### 2.2.2 Problèmes induits

L'utilisation des méthodes ALE couplées à l'opérateur de Laplace-Beltrami peuvent engendrer d'autres problèmes. Ils sont décrits dans les sections ci-dessous.

#### Conservation de la masse

Les articles récents évoquent un problème récurrent pour les simulations à interface : la conservation de la masse. Ce problème apparait notamment pour les méthodes de suivi d'interface. La masse est très bien conservée avec la méthode VOF par exemple comme on a vu à la section 2.1.1.

Potghan [29] explique que le problème de conservation de masse est important dans les méthodes ALE. Il affirme que, contrairement à Anjos [22], il n'a pas besoin d'ajouter une correction pour que la masse soit conservée. En effet, Potghan linéarise le terme de tension superficielle à l'ordre 4, ce qui permet d'obtenir une perte de masse presque nulle. Anjos n'évoque pas de linéarisation de ce terme, mais ajoute une correction : il fait déplacer les nœuds de l'interface dans la direction de la normale calculée. La valeur du déplacement est calculée par itérations successives en comparant la masse initiale et courante.

Fortin et Vautrin [4,6], qui utilisent aussi le calculateur CADYF évoquent aussi des problèmes de conservation de masse. Ils sont certes négligeables avec un maillage fin (erreur relative de l'ordre de  $10^{-6}$  pour Fortin et  $10^{-4}$  pour Vautrin), mais bel et bien existants. D'après Vautrin, ces problèmes auraient plusieurs origines selon les cas. Il peuvent venir :

- de la formulation employée couplée à la déformation de la surface interfaciale : méthode du Pseudo-Solide (Section 3.3.1) et ALE (Section 3.3.1)
- du processus de remaillage

Pour le cas d'Anjos [22], l'erreur sur la conservation vient du processus de remaillage. La correction qu'il évoque se manifeste donc à chaque étape de remaillage. Etant donné que leur erreur sur la conservation de masse est faible, Fortin et Vautrin ne proposent pas de moyen pour y remédier. On reviendra sur ce problème à la section 4.1.2.

Mao [17] qui utilise une méthode DI couplée à une détermination CSF de la tension superficielle obtient aussi des problèmes de conservation de la masse. Il ajoute alors un multiplicateur de Lagrange dans son équation de *Allen-Cahn phase-field*, et la perte de masse relative devient inférieure à 1%, pour un cas d'ascension de bulle.

#### Déformation du maillage

Si les conditions aux limites au niveau de l'interface diphasique sont lagrangiennes (c'està-dire que la vitesse du maillage est égale à la vitesse du fluide), le maillage de celle-ci a tendance à beaucoup se déformer. Les nœuds migrent en aval de l'écoulement dans le cas de l'ascension d'une bulle. Ce défaut est décrit par Dai [30], et plus récemment par Fu [31], Vautrin [4] et Fortin [6]. On observe aussi ce phénomène dans le cadre de ces travaux, se référer aux sections 3.3.3 et 4.1.2. Dai propose de régler ce problème de lissage de maillage en ajustant la localisation de chaque nœud en prenant la moyenne géométrique de la position des nœuds voisins à celui-ci. Cette moyenne peut éventuellement être pondérée par un poids exprimé en fonction de la distance du nœud courant à son voisin. Il s'agit d'une méthode de lissage Laplacienne, et il explique que ces méthodes sont les plus simples et rapides à mettre en place. Fortin utilise une méthode similaire mais en passant par la vitesse du maillage plutôt que son déplacement. Vautrin, lui, utilise une méthode qui fonctionne seulement en 2 dimensions, sur des interfaces ouvertes : il impose un distance constante entre les nœuds de l'interface. Plus de détails sont disponibles à la section 3.3.3. Fu [31] ajoute deux inconnues de plus dans son système matriciel : la vitesse tangentielle du maillage et la contrainte normale-normale. On ne suit pas cette méthode car cela demanderait beaucoup de travail de développement d'ajouter une inconnue dans le programme CADYF (se référer à la section 3.2.5 pour plus de détails sur les inconnues utilisées). Fu couple ensuite la formulation faible

de l'opérateur de Laplace-Beltrami avec la vitesse tangentielle du maillage pour corriger le problème d'agglutination des nœuds en aval de la bulle.

### 2.3 Ascension de bulles

Dans le domaine de la mécanique des fluides diphasique, on retrouve de nombreux problèmes concernant la différence de densité des deux fluides. Une bulle composée d'un fluide à plus faible densité que la phase continue, soumise uniquement à la gravité, va naturellement se mouvoir vers le haut. Les simulations d'ascension de bulle sont ainsi beaucoup utilisées de nos jours, que ce soit pour pour valider les modèles numériques implémentés, ou obtenir des résultats sur la portance ou trainée excercée sur ces bulles.

Clift et al. [1] a été le premier à rassembler toutes les similations existantes en 1978 dans une grosse revue de litterature.

Il a ainsi défini trois types de régimes pour les bulles, selon leur déformation pendant leur ascension (Figure 2.1).



Figure 2.1 Les différents régimes de bulles en ascension, définis par Clift et al. [1]. Figure adaptée de [1]

Une bulle va appartenir à un de ces régimes selon la valeur des nombres adimensionnels suivants. Ces nombres seront définis et décrits à la section 4.1.2.

- nombre de Reynolds
- nombre de Morton
- nombre d'Eötvos

Une dizaine d'année plus tard, Bhaga et Weber [32] viennent compléter cette classification. On compte aujourd'hui 9 régimes.

Plusieurs autres travaux ont été réalisés depuis. On peut se référer encore une fois à Fortin [6] qui les a succintement résumés.

Même si on a longtemps simulé l'ascension d'une seule bulle, on trouve plus récemment des travaux observant l'ascension de plusieurs bulles.

On citera par exemple Potghan [29], qui utilise méthode ALE pour simuler en 2 dimensions l'ascension de deux bulles coaxiales dans le régime à calotte sphérique. La bulle suiveuse monte plus vite que la bulle de tête.

Mao [17] utilise une méthode DI alors que Ngo [33] et Cambareri [34] utilisent des méthodes LS. Ils se placent tous les trois dans un problème tridimensionnel. Cambareri simule en fait un grand groupe de bulles dans un canal. Mao et Ngo simulent eux des changements topologiques : les bulles de Ngo sont positionées obliquement au départ, elles montent dans la phase continue en passant dans le régime à calotte sphérique, puis coalescent lorsque la bulle du bas rattrape celle du haut. Celles de Mao sont sur le même axe mais n'ont pas le même diamètre. Les bulles montent dans le régime elliptique et fusionnent avec une surface libre.

## CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE : MÉTHODES NUMÉRIQUES APPLIQUÉES AUX ÉCOULEMENTS DIPHASIQUES

Ce chapitre explique la modélisation physique d'un écoulement fluide diphasique, ainsi que sa résolution numérique.

Un écoulement fluide diphasique est un écoulement qui fait intervenir deux fluides (gaz ou liquide) non miscibles séparés par une interface. Dans mon cas, il s'agira de deux fluides différents dans deux phases différentes (bulle d'air gazeuse dans un domaine d'eau liquide).

Je vais ainsi d'abord présenter la physique d'un écoulement monophasique ainsi que sa résolution numérique, puis l'adaptation des deux domaines monophasiques grâce à l'interface pour former la physique diphasique. Mon travail a consisté d'abord en la compréhension fine des principaux principes utilisés dans le programme CADYF, pour ensuite pouvoir implémenter le plus efficacement possible l'aspect diphasique en 3 dimensions, la présentation de ce chapitre suivra donc ce fil directeur. On portera ainsi plus d'importance aux conditions d'interface entre ces deux fluides, car il s'agit de l'axe de travail le plus important de mon projet de recherche : l'amélioration de l'implémentation numérique des contidions aux limites d'interface, en 3 dimensions, passant par le développement des éléments Tri 6-12 iso.

#### 3.1 Théorie physique de l'écoulement monophasique

La mécanique des fluides est régie par des équations aux dérivées partielles en temps et en espace. En effet, pour modéliser un écoulement dans un domaine fluide, on utilise les équations de Naviers-Stokes.

Pour un écoulement visqueux, newtonien, incompressible, et instationnaire, les équations de Navier-Stokes se résument aux équations de *Continuité* (3.1a) et de *Mouvement* (3.1b):

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \tag{3.1a}$$

$$\rho\left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla)\vec{u}\right) = \nabla \cdot \mathbb{T} + \rho \vec{f}$$
(3.1b)

avec  $\mathbb{T} = -p \cdot \mathbb{I} + \mu \left( \nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^{\mathsf{T}} \right)$  le tenseur des contraintes, et  $\vec{f}$  l'ensemble des forces volumiques (la gravité dans notre cas).

Ces équations régissent l'intérieur d'un domaine fluide  $\Omega$ , il faut ensuite prendre en compte certaines conditions aux limites sur le bord  $\partial \Omega$  du domaine. Il peut s'agir des conditions de Dirichlet (3.2a) ou de Neumann (3.2b).

$$\vec{u} = \vec{u_D} \quad \text{sur} \quad \Gamma_D \tag{3.2a}$$

$$\mathbb{T} \cdot \vec{n} = T_N \quad \text{sur} \quad \Gamma_N \tag{3.2b}$$

avec  $\vec{u_D}$  et  $\vec{T_N}$  les conditions à imposer (respectivement en vitesse et effort).

Les frontières  $\Gamma_D$  et  $\Gamma_N$  doivent respecter les conditions suivantes (3.3) :

$$\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset \tag{3.3a}$$

$$\Gamma_D \cup \Gamma_N = \partial \Omega \tag{3.3b}$$

# 3.2 Méthodes numériques appliquées à l'écoulement monophasique : la Méthode des Éléments Finis

Que ce soit en monophasique ou diphasique, les équations de Navier-Stokes (3.1) ne sont pas linéaires. Pour trouver une solution approchée à ces équations, utiliser une méthode numérique est une bonne approche. La méthode choisie dans le code de calcul CADYF est la Méthode des Éléments Finis (MEF). Elle sera couplée à d'autres méthodes, comme pour la résolution du système matriciel (section 3.2.5) par exemple.

#### 3.2.1 Formulation variationnelle des équations de Navier-Stokes

La MEF se base sur une formulation, dite *faible* ou variationnelle des équations de Navier-Stokes. Il s'agit d'une fomulation équivalente à la forme *forte* (3.1), mais avec un ordre de dérivation plus faible. En effet, le terme  $\nabla \cdot \mathbf{T}$  dans l'équation de mouvement (3.1b) comporte des dérivées secondes en espace du vecteur  $\vec{u}$ . La formulation faible va alors contenir seulement des dérivées premières, il n'y a donc pas de condition à imposer sur les dérivées secondes, la solution  $\vec{u}$  est donc plus simple à obtenir.

Pour abaisser le degré de dérivation de l'équation de mouvement (3.1b), on procède en quatre

étapes :

- multiplication de l'équation 3.1b par une fonction test de la vitesse  $\vec{\phi_u}$
- intégration sur le domaine  $\Omega$
- Intégration par partie du terme  $\vec{\phi_u} \cdot (\nabla \cdot \mathbb{T})$
- Application du théorème de *Green-Ostrogradski* pour transformer l'intégrale de volume  $\Omega$  en une intégrale surfacique sur la frontière  $\partial\Omega$  du domaine  $\Omega$

Pour l'équation de continuité 3.1a, il suffit de multiplier par une fonction test de la pression  $\phi_p$ , puis on intègre sur le domaine  $\Omega$ .

Les formes faibles des équations de Navier-Stokes sont alors données dans les équations 3.4, obtenues après les étapes de calcul ci-dessus.

$$\int_{\Omega} \phi_p (\nabla \cdot \vec{u}) d\Omega = 0 \tag{3.4a}$$

$$\int_{\Omega} \vec{\phi_u} \cdot \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} - \vec{f} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbb{T} : \nabla \vec{\phi_u} d\Omega = \int_{\partial \Omega} \vec{\phi_u} \cdot \vec{T} d\Gamma$$
(3.4b)

avec  $\vec{T} = -\mathbb{T} \cdot \vec{n}$  la force qu'exerce le fluide sur la frontière  $\partial \Omega$ Le terme de bord  $\int_{\partial \Omega} \vec{\phi_u} \cdot \vec{T} d\Gamma$  représente alors les frontières ou interfaces du domaine, c'est à ce niveau qu'on impose les conditions aux limites.

#### 3.2.2 Espaces fonctionnels et normes induites

Pour que la formulation faible du problème soit valide, il faut que les fonctions test  $\phi_p$  et  $\vec{\phi_u}$  appartiennent aux mêmes espaces fonctionnels que leur formulation forte, c'est-à-dire les espaces suivants :

$$\phi_p \in L^2_{\Omega} = \left\{ f : \Omega \to \mathbb{R}, \quad \int_{\Omega} |f|^2 d\Omega < \infty \right\}$$
(3.5)

 $L^2_\Omega$  étant l'espace des fonctions de carré intégrable.

$$\vec{\phi_u} \in H^1_{\Omega} = \left\{ f : \Omega \to \mathbb{R}, \quad f \in L^2_{\Omega} \land f^{(1)} \in L^2_{\Omega} \right\}$$
(3.6)

 $H^1_{\Omega}$  étant l'espace de Sobolev.

Ces espaces induisent des normes qui nous permettrons de déterminer les erreurs et les taux de convergence. Ces normes sont définies ci-dessous :

$$||f||_{L_2} = \left(\int_{\Omega} |f|^2 d\Omega\right)^{1/2}$$
(3.7a)

$$||f||_{H_1} = \left(\int_{\Omega} |f|^2 d\Omega + \int_{\Omega} |f^{(1)}|^2 d\Omega\right)^{1/2}$$
(3.7b)

#### 3.2.3 Approximation des inconnues du problème

Les inconnues  $\vec{u}$  et p sont discrétisées par des approximations polynomiales  $\vec{u_h}$  et  $p_h$  (équations 3.8).

$$\vec{u}(\vec{x}) \approx \vec{u_h}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{n_u} \vec{u_i} N_i^u(\vec{x})$$
 (3.8a)

$$p(\vec{x}) \approx p_h(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{n_p} p_i N_i^p(\vec{x})$$
(3.8b)

Dans l'équation 3.8,  $N_i^u$  et  $N_i^p$  sont des fonctions d'interpolation, normalisées et sans dimension. Ainsi, les coefficients  $\vec{u_i}$  et  $p_i$  sont respectivement interprétés comme des vitesses et pressions. Il s'agit des degrés de liberté en vitesse et pression, évoqués dans la section 3.2.4. Le nombre  $(n_u \text{ et } n_p)$  et le degré des fonctions d'interpolation dépendent du type d'élément choisi (se référer à la section 3.2.4). Les fonctions d'interpolation sont en fait les mêmes que les fonctions test (section 3.2.1). Elles appartiennent aux mêmes espaces fonctionnels (section 3.2.2). Il s'agit de la méthode de Galerkin. Le vecteur  $\vec{x}$  est le vecteur position, de coordonnées (x,y,z) appartenant au domaine  $\Omega$ .

#### 3.2.4 Approximation géométrique : discrétisation du domaine

Le domaine de calcul est divisé en ce qu'on appelle des *éléments*. Il s'agit de formes géométriques simples qui associées entre elles vont approximer la forme du domaine. Plus il y aura d'éléments, plus le domaine sera représenté fidèlement. On utilise le plus souvent des triangles pour un domaine en 2 dimensions, et des tétraèdres en 3 dimensions. L'association de tous les éléments est appelé le maillage.

Un élément est composé de plusieurs nœuds : il s'agit de points géométriques. À ces nœuds sont associés des degrés de liberté en vitesse et en pression (section 3.2.3). Une dénomiation  $P_m - P_n$  indique l'ordre des polynômes d'interpolation des degrés de liberté : polynôme d'ordre m pour la vitesse et d'ordre n pour la pression. Un segment approximé à l'ordre k nécessite k+1 degrés de liberté. Ainsi, un tétraèdre aura 4 degrés de liberté si il est approximé à l'ordre 1, et 10 à l'ordre 2. Les éléments de type  $P_m - P_{m-1}$  sont appelés les éléments de Taylor-Hood (ou de Lagrange)

Un élément  $P_m - P_n$  est dit *isoparamétrique* si il est composé de autant de nœuds géométriques que de degré de liberté en vitesse. Il est dit *subparamétrique* si il a moins de nœuds géométriques que de degré de liberté en vitesse, et *superparamétrique* dans le cas contraire. L'interpolation *superparamétrique* n'est jamais utilisée, car elle peut mener à une divergence de la solution.

Dans le cadre de ces travaux, on va utiliser des éléments de Taylor-Hood  $P_2 - P_1$  isoparamétriques. Ils sont ainsi composés de  $n_u = 10$  degrés de liberté en vitesse et géométrie, et de  $n_p = 4$  degrés de liberté en pression. Ils sont représentés sur la Figure 3.1. Les disques verts représentent les degrés de liberté en pression, et les cercles noirs représentent les nœuds géométriques ainsi que les degrés de liberté en vitesse.



Figure 3.1 Élément tétraédrique de Taylor-Hood  $P_2 - P_1$  isoparamétrique dans un contexte 3D

Le choix de ces éléments est basé sur les deux raisons suivantes :

- L'approximation  $P_2 P_1$  respecte la condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi (LBB), elle ne nécessite donc pas d'être stabilisée, contrairement à l'approximation  $P_1 - P_1$  qui est instable en pression. Etant donné que Fortin [6] utilisait des éléments  $P_1 - P_1$ , il utilisait entre autres, une stabilisation PSPG (*Pressure Stabilizing Petrov Galerkin*). L'approximation  $P_2 - P_1$  permet de plus un meilleur contrôle de l'erreur que l'approximation  $P_1 - P_1$ .
- Le choix isoparamétrique permet de rester consistant avec l'utilisation de l'opérateur de Laplace-Beltrami (voir section 3.3.3) pour la détermination de la tension de surface.
  Fortin [6] devait utiliser des éléments P<sub>1</sub> P<sub>1</sub> pour rester consistant avec sa méthode de calcul de la tension de surface (méthode rapidement décrite à la section 3.3.3)

Les fonctions d'interpolation 3.2.3 sont des polynômes de Lagrange, de degré  $P_m - P_n$ . Cependant, étant donné que tous les éléments sont différents, il faudrait construire des polynômes de Lagrange sur chacun d'entre eux. Ce serait trop lourd numériquement, alors on construit ces polynômes sur un élément de référence. Cet élément est représenté à la Figure 3.2. Il s'agit d'un tétraèdre de dimensions normalisées, représenté par les coordonnées de référence  $\vec{r} = (r,s,t)$ . Appelons  $\Omega^*$  le domaine de référence tel que :

 $\Omega^* = \{ (r, s, t) \mid r \ge 0 \land s \ge 0 \land t \ge 0 \land r + s + t \le 1 \}$ (3.9)



Figure 3.2 Élément tétraédrique de Taylor-Hood P2-P1 de référence dans un contexte 3D

Les polynômes de Lagrange sont alors construits sur l'élément de référence comme dans l'équation 3.10. On peut y voir les polynômes pour les degrés de liberté en vitesse ou géométrique, et pour ceux en pression.
$$\forall j \in [1; 10], \ N_{j}^{u}(\vec{r}) = \begin{cases} L_{1}(\vec{r}) = -l_{1}(\vec{r})(1 - 2l_{1}(\vec{r})) \\ L_{2}(\vec{r}) = -l_{2}(\vec{r})(1 - 2l_{2}(\vec{r})) \\ L_{3}(\vec{r}) = -l_{3}(\vec{r})(1 - 2l_{3}(\vec{r})) \\ L_{4}(\vec{r}) = -l_{4}(\vec{r})(1 - 2l_{4}(\vec{r})) \\ L_{5}(\vec{r}) = 4l_{2}(\vec{r})l_{1}(\vec{r}) \\ L_{6}(\vec{r}) = 4l_{2}(\vec{r})l_{3}(\vec{r}) \\ L_{7}(\vec{r}) = 4l_{3}(\vec{r})l_{1}(\vec{r}) \\ L_{8}(\vec{r}) = 4l_{4}(\vec{r})l_{1}(\vec{r}) \\ L_{9}(\vec{r}) = 4l_{2}(\vec{r})l_{4}(\vec{r}) \\ L_{10}(\vec{r}) = 4l_{3}(\vec{r})l_{4}(\vec{r}) \end{cases}$$

$$(3.10)$$

avec :

$$\begin{cases}
l_1(\vec{r}) = 1 - r - s - t \\
l_2(\vec{r}) = r \\
l_3(\vec{r}) = s \\
l_4(\vec{r}) = t
\end{cases}$$
(3.11)

Pour recalculer les coefficients élémentaires, on suppose qu'il existe une application de transformation de coordonnées :

$$\begin{array}{rcl}
\phi & : & \Omega^* & \to & \Omega \\
& \vec{r} & \mapsto & \vec{x}(\vec{r})
\end{array}$$
(3.12)

Ce changement de variable fait alors intervenir une intégration du Jacobien de la fonction  $\phi$  sur le domaine de référence. L'intégration est évaluée numériquement avec une quadrature de Gauss. Le Jacobien est lui obtenu en prenant le déterminant de la matrice Jacobienne (3.13).

$$\mathcal{J}_{3D\to3D} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial x}{\partial t} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial t} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial t} \end{bmatrix}$$
(3.13)

Pour des éléments en 3 dimensions évoluant dans un domaine en 3 dimensions, la matrice

Jacobienne obtenue est une matrice carrée, il n'y a donc aucun problème pour obtenir le déterminant.

Pour obtenir les éléments de la matrice Jacobienne, on discrétise le vecteur  $\vec{x}(\vec{r})$  de la même manière qu'à la section 3.2.3. On dérive ensuite simplement l'expression linéaire obtenue (3.14).

$$\vec{x}(\vec{r}) \approx \vec{x_h}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{n_x} \vec{x_i} N_i^x(\vec{r})$$
 (3.14)

 $N_i^x(\vec{r})$  représente les fonctions d'interpolation géométriques. Elles sont donc égales aux fonctions d'interpolation en vitesse  $N_i^u(\vec{x})$  de l'équation 3.10 dans le cas des éléments  $P_2 - P_1$ isoparamétriques.

On passe ainsi des coordonnées de références (r,s,t) aux coordonnées physiques (x,y,z).

### 3.2.5 Résolution du système matriciel

#### Mise en place du système matriciel

Pour résoudre le problème, il faut alors déterminer en chaque nœud du domaine et en chaque instant, l'ensemble des 10 inconnues suivantes :

- les composantes de la vitesse du fluide :  $\vec{u} = (u, v, w)$
- la pression : p
- les composantes des réactions (condition de Neumann dans la forme faible des équations) :  $\vec{L} = (l_x, l_y, lz)$
- les composantes de la variable introduite dans la section 3.3.1, qui représentent la déformation du maillage :  $\vec{\chi} = (\xi, \eta, \zeta)$

Ces inconnues forment le vecteur  $\vec{x}$ . Toutes les équations écrites sur l'élément courant (par exemple les formes faibles des équations de Navier-Stokes (équation 3.4) sur un élément du domaine, ou les conditions aux limites interfaciales (section 3.3.3) pour les éléments d'interface) forment alors un système d'équation non-linéaire de la forme :

$$A \otimes \vec{x} = B \tag{3.15}$$

A est alors appelée la matrice élémentaire et le vecteur B le second membre élémentaire. Ensuite vient l'étape d'assemblage : on somme toutes les matrices élémentaires dans une matrice globale dite d'assemblage. Contrairement à la matrice élémentaire, la matrice d'assemblage est creuse : elle est principalement composée d'éléments nuls, cela améliore alors le stockage en mémoire.

Le programme CADYF emploie une formulation *monolithique*, c'est à dire que toutes les inconnues du système sont résolues en même temps. Il fait appel au résoluteur PARDISO (*PARallel DIrect Sparse sOlver*) pour résoudre le système assemblé. Le solveur résout le système parallèlement sur une architecture à mémoire partagée, c'est-à-dire que l'information est traitée simultanément sur plusieurs coeurs d'un même processeur (8 coeurs pour nos ordinateurs de bureau). L'interface de programmation parallèle utilisée est OpenMP.

## Méthode de Newton-Raphson

À un instant donné, afin d'arriver à une solution approchée du problème la plus exacte possible, on utilise dans CADYF une méthode itérative. La méthode choisie est celle de Newton-Raphson, adaptée aux sytèmes d'équations non linéaires.

On discrétise la solution  $\vec{x}$  en une suite de valeurs itérées sur k :  $\vec{x_k}$ 

Dans le cadre de la méthode de Newton-Raphson, le système 3.15 résolu par PARDISO à chaque itération devient alors :

$$\mathcal{J}(\vec{x_k}) \otimes \delta \vec{x} = -R(\vec{x_k}) \tag{3.16}$$

avec  $\mathcal{J}(\vec{x_k}) = \nabla R(\vec{x_k})$  la matrice Jacobienne du résidu  $R(\vec{x_k})$  et  $\delta \vec{x}$  la perturbation. L'étape de mise à jour de la solution se fait comme à l'équation 3.17 :

$$\vec{x_k} = \vec{x_{k-1}} + \delta \vec{x} \tag{3.17}$$

Ainsi, la MEF est appliqué successivement pour chaque itération de la méthode de Newton-Raphson. On arrête les itérations lorqu'on a atteint un taux de convegence du résidu  $(R(\vec{x_k}) \rightarrow 0)$  suffisamment bon, ce taux étant défini par l'utilisateur.

On discrétise ensuite le problème temporellement. Pour cela on utilise la méthode Backward Differentiation Formula (BDF) qui est bien décrite par Fortin et Vautrin [4,6].

Pour déterminer le Jacobien, il existe deux méthodes. Ces deux méthodes sont utilisées dans CADYF selon la formulation des équations du résidu :

— Jacobien analytique.

On dérive tout simplement analytiquement le résidu. L'avantage de cette solution est que la formulation obtenue est exacte, et est efficace numériquement. Cependant, il peut s'avérer difficile de dériver certaines formulations du résidu (comme l'équation 3.42 par exemple).

Jacobien numérique.

On détermine numériquement ce Jacobien à l'aide d'une différence finie :

$$\mathcal{J}^{ij} = \frac{\partial R^i}{\partial x^j} \approx \frac{R^i(\dots, x^j + \delta x^j, \dots) - R^i(\dots, x^j, \dots)}{\delta x^j}$$
(3.18)

On appelle  $R^i(\ldots, x^j + \delta x^j, \ldots)$  le résidu perturbé,  $R^i(\ldots, x^j, \ldots)$  le résidu nonperturbé et  $\delta x^j$  la perturbation. La perturbation est évaluée de la manière suivante :

$$\delta x^{j} = \sqrt{\epsilon_{float64}} \max\left(1, \frac{\|x^{j}\|_{L_{1}}}{V}\right) \tag{3.19}$$

avec  $||x^j||_{L_1}$  la norme  $L_1$  de  $x^j$ , V le volume de l'élément en question, et  $\epsilon_{float64} \approx 10^{-16}$ . Cette méthode fonctionne pour n'importe quel résidu, mais n'est pas exacte et peut amener à des coûts numériques élevés. En effet, on doit calculer pour chaque variable le résidu perturbé en chaque variable. Pour réduire le temps de calcul, on utilise alors le principe de factorisation adaptative : on garde la même matrice Jacobienne d'une itération à l'autre si la norme du résidu converge suffisamment.

#### 3.3 Spécificités de l'écoulement diphasique

L'aspect physique important dans les écoulements diphasiques est la présence d'une interface séparant les deux domaines fluides. Les équations de Navier-Stokes sont résolues indépendament dans les deux domaines, et le couplage entre les deux fluides est réalisé grâce à l'imposition de conditions aux limites à l'interface.

Tout ce qui a été expliqué en sections monophasique reste alors vrai, on ajoute simplement le couplage entre les deux fluides.

Cette partie traitera directement les aspects numériques à modifier pour prendre en compte cette interface.

## 3.3.1 Suivi de l'interface

## Description de la formulation ALE

Pour résoudre un problème de mécanique des fluides, il faut déterminer en tout temps et en tout point du domaine les variables décrites dans la section 3.2.5. Il existe plusieurs méthodes pour cela.

**Description lagrangienne** La description la plus intuitive est dite lagrangienne. Comme on le fait en mécanique du solide, on décompose le domaine fluide en particule à l'instant initial, et on suit ensuite ces particules en fonction du temps. Les nœuds du maillage suivent donc les particules fluides. Cette formulation n'est cependant pas très bien adaptée en mécanique des fluides car le maillage se déforme énormément.

**Description eulérienne** Plus couramment, dans la MEF pour les fluides, la description utilisée est une description eulérienne. Les nœuds du domaine sont immobiles dans le temps. On s'intéresse aux variables de la particule de fluide qui se trouve sur le nœud en question à un instant t. Cette formulation est très bien adaptée en mécanique des fluides monophasique si le domaine est composé de frontières fixes. Cependant, dans le cas diphasique où l'interface entre les deux fluides n'est pas fixe dans le temps, cela cause des problèmes. En effet, les nœuds qui représentent explicitement l'interface devraient se déplacer en même temps que l'interface. Mais ils sont fixes dans l'espace, c'est donc impossible, le maillage ne peut pas suivre l'interface.

**Description ALE** On utilise alors une méthode située entre les deux méthodes précédentes pour que le maillage puisse suivre l'interface et rester le plus régulier possible : la formulation ALE. Il s'agit d'une formulation qui préserve les avantages des deux formulations précédentes, en limitant grandement leurs incovéniants.

Dans cette description, on laisse le maillage se déplacer indépendamment des particules de fluides dans tout le domaine. Cela permet aux nœuds de l'interface de rester sur l'interface et donc de la suivre. Ces nœuds ont un déplacement imposé par les conditions aux limites (section 3.3.3). Les nœuds du domaine, voisins de l'interface se déplacent également afin d'éviter des retournements d'éléments. La méthode utilisée pour le déplacement des nœuds du domaine est la méthode du Pseudo-Solide (section 3.3.1)

Les trois descriptions sont schématisées dans la Figure 3.3

Les particules de fluides (disques verts) et les nœuds du maillage (cercles noirs) sont coïncidants à l'instant  $t_n$ , et varient selon les 3 formulations à l'instant  $t_{n+1}$ .

# Mise en équation de la formulation ALE

Pour prendre en compte cette description ALE, il faut modifier nos équations.

Il faut être conscient qu'il existe trois vitesses selon le référentiel dans lequel on se place (puisque le fluide se déplace par rapport au maillage qui lui aussi est en mouvement) :



Description ALE

Figure 3.3 Représentation des descriptions eulériennes, lagrangienne et ALE entre deux instants  $t_n$  et  $t_{n+1}$  sur un cas unidimentionnel selon l'axe x. Figure adaptée de [2]

- $-\vec{u}$ : la vitesse des particules de fluide
- $\vec{u}_{ALE}$ : la vitesse ALE, qui est choisie arbitrairement comme son nom l'indique
- $\vec{u}_{relative}$ : la vitesse relative du fluide par rapport au maillage

Ces trois vitesses sont reliées par la relation suivante :

$$\vec{u}_{relative} = \vec{u} - \vec{u}_{ALE} \tag{3.20}$$

On remarque les cas particuliers suivants :

— si  $\vec{u}_{ALE} = 0$ , on a  $\vec{u}_{relative} = \vec{u}$  et on retombe sur le cas eulérien

— si  $\vec{u}_{ALE} = \vec{u}$ , on a  $\vec{u}_{relative} = 0$  et on retombe sur le cas lagrangien

Ainsi, si on prend en compte la vitesse relative dans la formulation faible des équations de

Navier-Stokes (3.4), cela donne :

$$\int_{\Omega} \phi_p (\nabla \cdot (\vec{u} - \vec{u}_{ALE})) d\Omega = 0$$
(3.21a)

$$\int_{\Omega} \vec{\phi_u} \cdot \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + ((\vec{u} - \vec{u}_{ALE}) \cdot \nabla) \vec{u} - \vec{f} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbb{T} : \nabla \vec{\phi_u} d\Omega = \int_{\partial \Omega} \vec{\phi_u} \cdot \vec{T} d\Gamma$$
(3.21b)

Pour plus de détails sur la description ALE, se référer à la revue sur le sujet de Donea *et al.* [2], ainsi qu'à Étienne *et al.* [35] et Hay *et al.* [36] pour l'implémentation de la formulation ALE pour les équations de Navier-Stokes dans CADYF.

## Méthode du Pseudo-Solide

Le choix arbitraire de la vitesse ALE se base sur une méthode venant de la mécanique du solide. On assimile le maillage global du domaine à un milieu solide élastique et on lui applique les lois associées. D'où l'appelation *Pseudo-Solide*.

On introduit alors une nouvelle variable  $\vec{\chi} = (\xi, \eta, \zeta)$  qui représente le déplacement du nœud du maillage en question par rapport à sa position d'origine. On impose alors arbitrairement que la vitesse ALE soit égale à la vitesse du déplacement du maillage :

$$\vec{u}_{ALE} = \frac{\partial \vec{\chi}}{\partial t} \tag{3.22}$$

La loi qui régit un milieu solide élastique isotrope est la loi de Hooke 3.23, elle stipule que la divergence du tenseur de Cauchy est nulle si le solide n'a aucune densité et n'est soumis à aucune force extérieure :

$$\nabla \cdot (\lambda_{ps} \operatorname{Tr}(\mathcal{E})\mathbb{I} + 2\mu_{ps}\mathcal{E}) = 0$$
(3.23)

avec  $\mathcal{E}$  le tenseur de Green-Lagrange, défini à l'équation 3.24, et  $(\lambda_{ps}, \mu_{ps})$  les coefficients de Lamé du Pseudo-Solide.

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} (\nabla \vec{\chi} + \nabla \vec{\chi}^{\mathsf{T}}) \tag{3.24}$$

#### 3.3.2 Discrétisation de l'interface

Comme on a vu à la section 3.2.4, les deux domaines fluides sont maillés avec des éléments tétraédriques (Figure 3.1). Ainsi, pour relier ces deux domaines au niveau de l'interface, assurer la cohérence entre les éléments tétraédriques, et pour pouvoir appliquer les conditions aux limites sur l'interface, il faut mailler la surface de l'interface avec un certain type d'éléments. On utilise des éléments qu'on a appelé *Tri 6-12 iso*.

Ce sont des éléments de dimension 2 évoluant dans un domaine de dimension 3, puisque l'interface en 3 dimensions est une surface. On utilise alors des triangles de Taylor-Hood  $P_2 - P_1$ isoparamétriques classiques (Figure 3.4), mais qu'on dédouble. Cela permet de relier les éléments d'interface aux éléments de la zone extérieure (nœuds 1 à 6) et de l'autre coté, aux éléments de la zone intérieure (nœuds 7 à 12). Ces deux triangles sont géométriquement identiques, et séparés par une hauteur nulle (collés entre eux) afin de donner une épaisseur nulle à l'interface. Il suffit donc de donner certaines conditions aux limites sur les côtés intérieur et extérieur (voir section 3.3.3).



Figure 3.4 Élément d'interface dans un contexte 3D

De la même manière qu'à la section 3.2.4 on passe de l'élément physique à l'élément de référence 3.5.

Etant donné que l'élément de référence évolue en 2 dimensions, les fonctions d'interpolation se réduisent aux équations suivantes 3.25 :



Figure 3.5 Élément triangulaire de Taylor-Hood P2-P1 de référence dans un contexte 3D

$$\forall j \in [1;6], \ N_{j}^{u}(\vec{r}) = \begin{cases} L_{1}(\vec{r}) = -l_{1}(\vec{r})(1 - 2l_{1}(\vec{r})) \\ L_{2}(\vec{r}) = -l_{2}(\vec{r})(1 - 2l_{2}(\vec{r})) \\ L_{3}(\vec{r}) = -l_{3}(\vec{r})(1 - 2l_{3}(\vec{r})) \\ L_{4}(\vec{r}) = 4l_{2}(\vec{r})l_{1}(\vec{r}) \\ L_{5}(\vec{r}) = 4l_{2}(\vec{r})l_{3}(\vec{r}) \\ L_{6}(\vec{r}) = 4l_{3}(\vec{r})l_{1}(\vec{r}) \end{cases} \qquad \forall j \in [1;3], \ N_{j}^{p}(\vec{r}) = \begin{cases} L_{1}(\vec{r}) = l_{1}(\vec{r}) \\ L_{2}(\vec{r}) = l_{2}(\vec{r}) \\ L_{3}(\vec{r}) = l_{3}(\vec{r}) \\ L_{3}(\vec{r}) = l_{3}(\vec{r}) \end{cases}$$

$$(3.25)$$

avec :

$$\begin{cases} l_1(\vec{r}) = 1 - r - s \\ l_2(\vec{r}) = r \\ l_3(\vec{r}) = s \end{cases}$$
(3.26)

Pour passer des coordonnées de référence aux coordonnées physiques, on procède de la même manière qu'à la section 3.2.4.

La différence notable est que la matrice Jacobienne n'est pas carrée, puisque les éléments sont des éléments de dimension 2 évoluant dans un domaine de dimension 3.

$$\mathcal{J}_{2D\to3D} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial s} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial s} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial s} \end{bmatrix}$$
(3.27)

Pour rappel, le Jacobien est le déterminant de la matrice Jacobienne. Mais étant donné qu'elle n'est pas carrée, on va utiliser la matrice de Gram. Le Jacobien sera défini comme étant le pseudo-déterminant de la matrice de Gram, c'est-à-dire la racine carrée du déterminant de la matrice de Gram :

$$J = \sqrt{\det\left(\mathcal{J}^{\mathsf{T}} \otimes \mathcal{J}\right)} \tag{3.28}$$

Pour inverser la matrice Jacobienne qui n'est pas carrée, on utilise la matrice pseudo-inverse de Moore-Penrose :

$$\mathcal{J}^* = (\mathcal{J}^\mathsf{T} \otimes \mathcal{J})^{-1} \otimes \mathcal{J}^\mathsf{T}$$
(3.29)

## 3.3.3 Conditions aux limites appliquées à l'interface diphasique

Maintenant qu'on a introduit (section 3.3.2) l'élément *Tri 6-12 iso* qui permet d'assurer la connectivité entre les deux domaines, on peut alors imposer les conditions aux limites au niveau de l'interface. Certaines conditions vont s'appliquer sur les nœuds intérieurs (vitesses du fluide, saut de contrainte, condition de non pénétration et condition de régularité) et d'autres s'appliqueront sur les nœuds extérieurs (égalité intérieure/extérieure des déplacements des nœuds et des vitesses du fluide).

On rappelle que les nœuds extérieurs sont les nœuds de 1 à 6 et les nœuds intérieurs de 6 à 12. On définit alors les ensembles suivants :

$$\mathbf{ext} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$$
$$\mathbf{int} = \{7, 8, 9, 10, 11, 12\}$$

#### Condition sur les vitesses du fluide

La vitesse sur les nœuds **int** du fluide est déterminée par les équations de Navier-Stokes (3.4). Dans le cas où il n'y a pas de transfert de masse entre les deux fluides, il y a continuité des vitesses des deux cotés de l'interface. Pour assurer cette continuité, on impose l'égalité des vitesses des fluides entre les zones intérieures et extérieures. Cette condition est appliquée sur les nœuds **ext**.

$$\forall j \in \mathbf{ext}, \quad \vec{u_j} = u_{j+6} \tag{3.30}$$

On reconnait que cette condition est appliquée comme une condition de Dirichlet classique. Grâce à la méthode des réactions (voir Fortin [6]) la contrainte sur les nœuds **ext** en est déduite.

Cette égalité est déduite du principe de conservation de la masse. Se référer à la démonstration de Vautrin [4].

#### Saut de contrainte et tension superficielle

Etant donné qu'on a déterminé la contrainte sur les nœuds ext, on pourrait simplement appliquer une condition d'égalité sur les nœuds **int** comme on l'a fait pour la vitesse. Cependant, si une tension de surface est présente à l'interface, elle implique un saut de contrainte dans la direction normale. L'égalité se transforme en l'équation 3.31 :

$$\forall j \in \mathbf{int}, \quad \vec{\tau_j} = \tau_{j-6} + (-\sigma \kappa \vec{n} + \underline{\nabla} \sigma)_j \tag{3.31}$$

On voit que le saut de contrainte est composé de deux termes :

- la contrainte de tension superficielle classique, avec  $\sigma$  le coefficient de tension superficielle,  $\kappa$  la courbure de l'interface, et  $\vec{n}$  la normale à l'interface.
- cause de l'effet Marangoni (aussi connu sous le nom de *"larmes de vin"*). Ce terme est égal au gradient surfacique du coefficient de tension de surface. On reviendra sur la notion de gradient surfacique avec l'opérateur de Laplace-Beltrami (équation 3.33). On supposera dans ce travail que le coefficient de tension de surface est uniforme, donc ce terme de Marangoni sera nul.

Cette égalité est déduite du principe de conservation de la quantité de mouvement. Se référer à la démonstration de Vautrin [4].

Ce qui est difficile dans l'implémentation de cette condition, c'est d'obtenir une formulation de la courbure  $\kappa$ . Habituellement, on calcule la courbure analytiquement à partir de la paramétrisation de la surface interfaciale, mais dans notre cas, on ne peut pas paramétriser l'interface.

Plusieurs méthode sont alors envisageables.

La méthode utilisée auparavant dans le code numérique CADYF était celle de Fortin [6]. Elle consistait en un calcul de la courbure moyenne en utilisant l'information des éléments voisins (tous les éléments auxquels appartient le nœud courant). Mais avec l'appel aux éléments voisins, cette méthode n'était pas dans l'esprit de la MEF. De plus, elle pouvait être utilisée seulement avec des éléments  $P_1 - P_1$ .

On utilise alors une autre méthode, basée directement sur la formulation variationnelle, et donc plus en cohérence avec la MEF. Elle permet l'utilisation des éléments  $P_2 - P_1$  présentés dans la section 3.3.2 ce qui offre un meilleur contrôle de l'erreur. De plus, elle se formule et s'implémente plus simplement. Cette méthode a déjà été implémentée dans CADYF par Vautrin [4,37] en 2 dimensions. Je l'ai implémentée en 3D.

Cette méthode se base sur l'utilisation de l'opérateur de Laplace-Beltrami. Dziuk [24] a été le premier à utiliser cet opérateur dans le cas de la MEF. L'opérateur de Laplace-Beltrami est en fait une relation géométrique simple :

$$\underline{\Delta}\vec{x} = \kappa\vec{n} \tag{3.32}$$

L'opérateur  $\Delta$  est l'opérateur laplacien classique à la différence qu'il est projeté tangentiellement à la surface. Il s'agit de la divergence du gradient surfacique, défini ci-dessous pour un champ scalaire ou vectoriel *a* quelconque :

$$\underline{\nabla}a = (\mathbb{I} - \vec{n} \otimes \vec{n}^{\mathsf{T}}) \nabla a \tag{3.33}$$

avec I la matrice identité. Ainsi, la force de tension superficielle  $\vec{T} = -\sigma \kappa \vec{n}$  peut s'écrire sous la forme :

$$\vec{T} = -\sigma \underline{\Delta} \vec{x} \tag{3.34}$$

Introduire l'équation 3.34 dans le terme de bord de la formulation faible de l'équation de mouvement (3.4b) permet d'affaiblir une fois de plus la formulation. Avec une intégration par parties et le théorème de *Green-Ostrogradski*, on obtient la relation suivante :

$$\int_{\partial\Omega} \vec{\phi_u} \cdot \vec{T} d\Gamma = -\sigma \int_{\partial\Omega} \vec{\phi_u} \cdot \underline{\Delta} \vec{x} d\Gamma = -\sigma \int_{\underline{\partial\Omega}} \underline{\nabla} \vec{x} \colon \underline{\nabla} \vec{\phi_u} d\Gamma + \sigma \int_{\gamma} \partial_{\gamma} \vec{x} \cdot \vec{\phi_u} d\gamma \tag{3.35}$$

$$\underbrace{\neg}_{\text{Tension superficielle}}_{\text{affaiblie}} \underbrace{\neg}_{\text{Effet de bord}}_{\text{Effet de bord}}$$

avec  $\gamma$  la frontière de la surface  $\partial\Omega$ , et  $\partial_{\gamma}\vec{x}$  agissant sur  $\gamma$  de façon tangentielle à l'interface. Vautrin utilise des interfaces ouvertes en 2 dimensions [4,37], comme par exemple l'ascension d'une demi bulle sur une paroi solide. Je n'utiliserai que des interfaces fermées, donc le terme de bord sera nul. La formulation faible 3.35 devient alors :

$$\int_{\partial\Omega} \vec{\phi_u} \cdot \vec{T} d\Gamma = -\sigma \int_{\partial\Omega} \underline{\nabla} \vec{x} \colon \underline{\nabla} \vec{\phi_u} d\Gamma$$
(3.36)

L'équation 3.36 est donc une formulation faible au même titre que celle des équations de Navier-Stokes (3.4). On a abaissé l'ordre de dérivation, ce qui permettra une résolution dans l'esprit de la MEF. Pour plus de détails sur l'opérateur de Laplace-Beltrami, se référer à Groß et Reusken [27]

On a perdu une dimension, mais on évolue toujours dans un espace 3D. On utilise alors le même type de matrice Jacobienne  $\mathcal{J}_{2D\to 3D}$  qu'à la section 3.3.2.

#### Condition sur le déplacement des nœuds

Il faut aussi imposer des conditions sur le déplacement de l'interface, pour que celle-ci représente fidèlement les deux domaines au cours du temps, sans qu'il y ait de transfert de masse.

On annule donc les équations du Pseudo-Solide (section 3.3.1) sur les nœuds de l'interface. On impose à la place une condition sur les nœuds **ext**. Leurs déplacements doivent être égaux à ceux des nœuds **int** :

$$\forall j \in \mathbf{ext}, \quad \vec{\chi_j} = \vec{\chi_{j+6}} \tag{3.37}$$

Il faut maintenant une condition sur les nœuds int.

Auparavant, on imposait sur les nœuds **int** que la vitesse du déplacement du maillage soit égale à la vitesse du fluide. En théorie, toutes ces conditions suffisent pour représenter physiquement l'écoulement des deux fluides. En pratique, on observe un déplacement néfaste des nœuds de l'interface. Ils ont tendance à se déplacer tangentiellement sur l'interface, et à s'agglutiner en aval de l'écoulement. Cela déforme alors inutilement le maillage. Se référer à la section 4.1.2.

Pour corriger ce problème, on transforme la condition précédente en deux conditions :

- vitesse de déplacement du maillage égale à la vitesse du fluide sur la projection normale (équation 3.38)
- *condition de régularité* du maillage sur la projection tangentielle (équations 3.39 et 3.40)

La première condition se traduit par l'équation suivante :

$$\forall j \in \mathbf{int}, \quad \frac{\partial \vec{\chi_j}}{\partial t} \cdot \vec{n_j} = \vec{u_j} \cdot \vec{n_j}$$

$$(3.38)$$

Cette égalité est aussi déduite du principe de conservation de la masse. Se référer à la démonstration de Vautrin [4]. Cette condition et toutes les autres conditions vues plus haut sont des conditions physiques.

On appelle la deuxième condition, qu'on impose sur la vitesse de déplacement tangentiel du maillage, *condition de régularité*. Cette condition est une condition non-physique puisque elle ne modélise pas un phénomène physique comme les autres conditions. Elle est utile seulement pour l'aspect numérique, afin de garder le maillage le plus régulier possible et contrer le problème d'accumulation des nœuds en certains points de l'interface.

Pour cela, on utilise la méthode de Fortin [6]. Elle consiste à faire un barycentrage des vitesses tangentielles des nœuds voisins au nœud courant (équations 3.39 et 3.40).

$$\forall j \in \mathbf{int}, \quad \frac{\partial \vec{\chi_j}}{\partial t} \cdot \vec{t_1} = \frac{1}{V} \sum_{v=1}^{V} \frac{\partial \vec{\chi_v}}{\partial t} \cdot \vec{t_1}$$
(3.39)

$$\forall j \in \mathbf{int}, \quad \frac{\partial \vec{\chi_j}}{\partial t} \cdot \vec{t_2} = \frac{1}{V} \sum_{v=1}^{V} \frac{\partial \vec{\chi_v}}{\partial t} \cdot \vec{t_2}$$
(3.40)

Les nœuds voisins en question (ensemble  $\mathbf{V}$ ) sont représentés sur la Figure 3.6 selon si le nœud courant est sommet ou milieu de l'élément courant.

On aurait pu utiliser les trois équations 3.38, 3.39 et 3.40 pour fermer le système d'équation. Mais on a trouvé une méthode plus élégante qui évite le calcul des tangentes  $\vec{t_1}$  et  $\vec{t_2}$  et qui est donc plus efficace numériquement. On regroupe les trois équations scalaires 3.38, 3.39 et 3.40 sous une seule équation vectorielle 3.41, en s'inspirant de la méthode de Dai [30]. Il utilise la projection tangentielle ( $\mathbb{I} - \vec{n_j} \otimes \vec{n_j}^{\mathsf{T}}$ ), tout comme dans l'équation 3.33 pour l'utilisation de l'opérateur de Laplace-Beltrami (section 3.3.3).

$$\forall j \in \mathbf{int}, \quad \underbrace{\left(\frac{\partial \vec{\chi_j}}{\partial t} - \vec{u_j}\right) \cdot (\vec{n_j} \otimes \vec{n_j}^{\mathsf{T}})}_{\text{Composante normale}} + \underbrace{\left(\frac{\partial \vec{\chi_j}}{\partial t} - \frac{1}{V} \sum_{v=1}^{V} \frac{\partial \vec{\chi_v}}{\partial t}\right) \cdot (\mathbb{I} - \vec{n_j} \otimes \vec{n_j}^{\mathsf{T}})}_{\text{Composante tangentielle}} = 0 \quad (3.41)$$

En simplifiant l'équation 3.41, on obtient l'équation 3.42 :



Figure 3.6 Ensemble  $\mathbf{V}$  des nœuds voisins au nœud courant sommet (s) ou milieu (m)

$$\forall j \in \mathbf{int}, \quad \left(\frac{\partial \vec{\chi_j}}{\partial t} - \frac{1}{V} \sum_{v=1}^{V} \frac{\partial \vec{\chi_v}}{\partial t}\right) - (\vec{n_j} \otimes \vec{n_j}^{\mathsf{T}}) \cdot \left(\vec{u_j} - \frac{1}{V} \sum_{v=1}^{V} \frac{\partial \vec{\chi_v}}{\partial t}\right) = 0 \tag{3.42}$$

Il suffit ensuite de projeter l'équation 3.42 sur les axes  $\vec{x}$ ,  $\vec{y}$  et  $\vec{z}$  pour fermer le système d'équations.

Cette méthode de barycentrage fonctionne puisque elle permet d'éviter l'accumulation des nœuds de l'interface en aval de l'écoulement. Cependant, elle mène à un problème : on remarque un transfert de masse indésirable à travers l'interface. Ce problème sera discuté dans la section (4.1.2).

Dai [30] utilise aussi dans sa formulation des coefficients d'isobarycentrage qui sont proportionnels à la distance entre le nœud courant et voisin, afin de pondérer l'influence des nœuds voisins par leur distance au nœud courant. Je laisse moi-même ce coefficient égal à 1 en première approximation.

Il existe une autre méthode de régularisation sur la projection tangentielle, celle qu'a utilisée Vautrin [4], basée sur l'égalisation de la distance entre les nœuds. Cependant, cette méthode ne fonctionne qu'en deux dimensions avec des interfaces ouvertes.

# CHAPITRE 4 VÉRIFICATION ET VALIDATION

Dans la vie courante, les termes de *vérification* et *validation* sont très synonymes. On ne porte pas tant d'importance au sens profond de ces termes. Cependant, dans le monde scientifique, ces deux termes ont des définitions très précises, et portent des concepts qui sont très importants dans le processus de développement d'un programme numérique. Ils ont des définitions différentes, même si cette différence est subtile à saisir.

Ce chapitre présente ainsi quelques cas de vérification et validation du développement ajouté au code CADYF par mes soins. Se référer respectivement aux sections 4.1 et 4.2 pour des définitions précises des termes de vérification et validation, ainsi que les cas d'écoulements qui y sont associés.

### 4.1 Vérification

Le terme de vérification s'applique directement à l'implémentation elle-même. Vérifier un développement, c'est s'assurer que les équations, les modèles ou méthodes numériques soient correctement implémentées. Autrement dit, on vérifie que le programme numérique est bien développé. Pour cela, on utilise des solutions analytiques connues pour comparer aux résultats obtenus par le code numérique. Mais il n'existe que peu de cas de ce genre pour les équations de Navier-Stokes. On utilise couramment la Méthode des Solutions Manufacturées (ou *Method of Manufactured Solution* (MMS)) pour vérifier un programme numérique. Les MMS permettent de développer une solution exacte mais arbitraire physiquement. On n'utilisera pas ce genre de méthodes, mais elles ont déjà été utilisées dans le cadre de la vérification du programme CADYF par Vautrin [4] par exemple.

## 4.1.1 Saut de pression

Une des méthodes qui permet de vérifier que la tension superficielle est bien implémentée est la détermination du saut de pression au niveau de l'interface.

En effet, la loi de Young-Laplace relie le saut de pression au passage de l'interface à la tension superficielle et la courbure de celle-ci. Cette loi s'exprime comme à l'équation 4.1 :

$$\Delta P = \gamma \kappa \tag{4.1}$$

avec  $\Delta P$  la différence de pression des deux côtés de l'interface,  $\gamma$  la tension de surface, et  $\kappa$ 

la courbure de l'interface au point donné.

caract

Dans le cas d'une sphère, la courbure est uniforme sur la surface, et est égale à  $\kappa = 2/R$ .

Ainsi, on peut facilement vérifier la bonne implémentation de la tension superficielle en comparant le saut de pression numérique au saut de pression théorique calculé par l'équation 4.1. Pour faire cette vérification, on simule une sphère soumise à aucune force extérieure ni aucun écoulement. On se place dans un cas stationnaire. On impose arbitrairement une tension de surface  $\gamma = 1$  et un rayon R = 0, 5. Tous les autres paramètres de ce problème (masses volumiques, viscosités) ne vont pas influer sur la solution, donc on n'accordera pas d'importance à leur valeur. Ainsi, l'inconnue non triviale de ce problème est la pression. Elle est censée être égale à la pression théorique qui vaut  $\Delta P_{th} = 4$  d'après l'équation 4.1.

Pour comparer les sauts de pression théorique et numérique, on calcule l'erreur relative (équation 4.2) :

$$Erreur(\%) = \frac{\Delta P_{th} - \Delta P_{num}}{\Delta P_{th}}$$
(4.2)

On va effectuer cette comparaison pour plusieurs maillages afin d'effectuer une analyse de convergence de cette erreur. En effet, on raffine petit à petit le maillage en jouant sur la taille caractéristique des éléments  $l_c$ , et on calcule l'erreur pour chacune d'entre elles. Les résultats sont répertoriés à la table 4.1.

Tableau 4.1 Erreur relative sur le saut de pression de l'interface en fonction de la taille

éristique des éléments	S	
	Taille caractéristique	Erreur $(\%)$
	r/3	0 18387

Taille caracteristique	Erreur (%)
r/3	$0,\!18387$
r/4	$0,\!05979$
r/6	0,03118
r/8	0,01220
r/10	0,00523
r/12	0,00199

On voit que peu importe le maillage, l'erreur obtenue est très petite (inférieure à 1%). De plus elle diminue avec la taille caractéristique.

On trace alors cette table sous forme de courbe pour vérifier la convergence de l'erreur en fonction de la taille caractéristique. Voir Figure 4.1



Figure 4.1 Erreur relative sur le saut de pression de l'interface en fonction de la taille caractéristique des éléments

Cette courbe forme presque une droite. En analysant son coefficient directeur, on remarque qu'on obtient une super-convergence d'ordre  $\approx 4$ . Ces résultats sont très encourageants, la super-convergeance indique une bonne vérification des efforts.

Cette vérification participe à mettre en évidence une bonne implémentation de la tension superficielle.

On peut voir à titre d'exemple, le saut de pression numérique dans le cas du maillage de taille caractéristique r/12, à la Figure 4.2.



Figure 4.2 Saut de pression pour une taille caractéristique de r/12

# 4.1.2 Condition de régularisation

Dans cette section, on va vérifier l'implémentation de la condition de régularité barycentrique. On veut s'assurer que la méthode présentée à la section 3.3.3 reflète bien la physique du problème en question, c'est-à-dire de garder un maillage le plus régulier possible sur l'interface.

Pour cela, on fait des simulations d'ascension de bulle. Ce genre de simulations est beaucoup utilisée dans la littérature en vérification et validation de méthodes numériques diphasiques. Elles vont nous permettre de vérifier deux points : l'objectif premier de la méthode (la régularité du maillage) ainsi que la conservation de la masse.

# Présentation des simulations

Ces simulations sont des simulations d'ascension d'une bulle d'air dans de l'eau, en régime quasi-sphérique. La bulle n'est soumise à aucun écoulement, et est soumise uniquement à la gravité comme action mécanique extérieure. Elle part d'une solution initiale nulle, le centre de la bulle se situe à l'origine du repère. L'action de la gravité sur la bulle implique l'ascension de celle-ci sur l'axe  $\vec{y}$ . On laisse tourner les simulations jusqu'à la solution stationnaire.

On utilise ce genre de simulations car cela va nous permettre de voir si le maillage se comporte correctement dans l'écoulement induit autour de la bulle par l'ascension de celle-ci

Ces simulations seront réalisées adimensionnellement.

Afin de les adimensionnaliser, on liste d'abord les paramètres concernant l'ascension de la bulle :

 $\mu_c, \quad \mu_d, \quad \rho_c, \quad \rho_d, \quad t, \quad d_e, \quad \gamma, \quad g$ 

Le théorème de  $\Pi$  - Buckingham énonce que : "un problème comprenant n grandeurs physiques qui dépendent de m unités fondamentales peut se réécrire sous la forme d'un problème comprennant (n-m) paramètres adimensionnels indépendants."

Ainsi, on défini cinq paramètres adimensionnels à la table 4.2 :

	Tableau	4.2	Nombres	adimensionnels	caractérisant u	n 1	problème	ď	ascension	ď	une	bul	lle
--	---------	-----	---------	----------------	-----------------	-----	----------	---	-----------	---	-----	-----	-----

Nombre adimensionnel	Expression
$\rho^*$	$\frac{\rho_d}{\rho_c}$
$\mu^*$	$rac{\mu_d}{\mu_c}$
Eo	$\frac{\Delta \rho g d_e^2}{\gamma}$
M	$\frac{g\mu_c^4\Delta\rho}{ ho_c^2\gamma^3}$
$t^*$	$t\sqrt{\frac{g}{d_e}}$

Le nombre de Morton (M) est une propriété intrinsèque aux caractéristiques des fluides mis en jeu : dans le cas d'une bulle d'air dans un écoulement d'eau, le nombre de Morton vaut :  $M_{air/eau} = 2,6251.10^{-11}$ . On n'aura alors pas le choix de la valeur de M. De même, on n'aura pas le choix sur les valeurs de la masse volumique relative et de la viscosité relative. Dans le cas air/eau, on a  $\rho^* = 1,225.10^{-3}$  et  $\mu^* = 1,8.10^{-2}$ .

On fixe le diamètre de la bulle à 1, ainsi que  $\rho_c = 1 \ kg/m^3$  et  $\mu_c = 1.10^{-2} \ Pa.s$ . On en déduit alors  $\rho_d = 1,225.10^{-3} \ kg/m^3$  et  $\mu_d = 1,8.10^{-4} \ Pa.s$ .

Il reste alors le nombre d'Eötvös (Eo), aussi appelé le nombre de Bond. Il représente physiquement le ratio des forces capillaires sur les forces gravitationnelles. On peut choisir librement sa valeur selon le régime de bulle dans lequel on veut se placer (cf. section 2.3).

On veut rester dans le régime sphérique donc on choisi une valeur faible du nombre d'Eötvös. On a pris Eo = 0,0655. Etant donné que tous les autres paramètres sont fixés, on joue sur le couple  $(g, \gamma)$  pour obtenir une telle valeur de *Eo*. On prendra  $(g; \gamma) = (0, 327; 4, 993)$ . Enfin,  $t^*$  représente le temps adimensionnel.

Ce choix d'adimensionnalisation permet de choisir les valeurs des paramètres de telle sorte à ce qu'elles aient un ordre de grandeur plus proche entre elles que dans le cas dimensionnel. Cela permet de mieux conditionner le système matriciel et donc rendre la résolution plus efficace.

# Effet correctif de la condition de régularisation

Pour mettre en évidence le problème d'agglutination des nœuds en aval de l'écoulement lors de l'ascension d'une bulle, et ainsi vérifier que la condition de régularisation corrige bien ce problème, on réalise deux simulations, identiques mis à part la condition sur le déplacement des nœuds de l'interface : déplacement lagrangien pour une simulation, condition de régularité pour l'autre.

On affiche les résultats de ces simulations à la Figure 4.3. Il s'agit d'images de l'état de la simulation à l'instant t=0,7 (unité adimensionnelle). En a) on a la vue du maillage du dessus, en b) on a la vue du dessous. À gauche, la simulation avec condition lagrangienne, à droite la simulation avec condition de régularisation. On affiche la déformation du maillage selon l'axe  $\vec{x}$ . L'instant t=0,7 correspond au moment où la simulation avec condition lagrangienne s'arrête : elle ne converge plus car le maillage est trop déformé. Les simulations avec condition de régularisation de régularisation peuvent durer indéfiniment.

Ces images sont obtenues avec le logiciel de visualisation  $Paraview^1$ .

<sup>1.</sup> Paraview n'est pas capable d'afficher graphiquement les éléments paraboliques géométriquement, mais il s'agit bien rééllement d'éléments paraboliques. Les portions de droite sont en réalité des paraboles.



Figure 4.3 Déformation du maillage selon l'axe  $\vec{x}$ . Gauche : sans condition de régularité - **Droite** : avec condition de régularité barycentrique

On voit bien que les éléments ont une surface plus petite dans la vue du dessous et plus grande dans la vue du dessus, du côté gauche (lagrangien). Cela montre que les nœuds se sont accumulés vers le bas de la bulle. Au contrainte, du côté droit (condition de régularité), les surfaces des éléments sont restées constantes, on peut donc voir que cette condition de régularité corrige le problème repéré.

Afin de mettre en évidence ce phénomene plus analytiquement, on détermine l'erreur de régularité du maillage.

Il faut ainsi définir une erreur représentant l'irrégularité du maillage. Pour cela, on peut comparer la différence de l'aire de chaque élément à l'aire moyenne des éléments. Pour que

l'erreur totale comprenne la contribution de chaque élément (qu'elle soit positive ou négative), on utilise la Racine de l'Erreur Quadratique Moyenne (REQM), appliquée ainsi à l'aire des éléments. Pour déterminer l'aire moyenne des éléments, on divise l'aire totale de la bulle par le nombre d'éléments. La formule ainsi utilisée est présentée à l'équation 4.3 :

$$REQM = \sqrt{\frac{1}{N_E} \left( \sum_E (S_E - \overline{S_E})^2 \right)}$$
(4.3)

avec  $S_E$  la surface de l'élément et  $N_E$  le nombre d'éléments

On trace alors (Figure 4.4) la REQM en fonction du temps pour les deux simulations réalisées (avec et sans condition de régularité).



Figure 4.4 Déformation du maillage de l'interface en fonction du temps

On voit que sans condition de régularité, l'erreur est croissante, de façon exponentielle, alors qu'en ajoutant la condition de régularité, elle reste constante. Ce résultat est alors très prometteur. On remarque cependant que même si l'erreur est constante dans le cas avec condition de régularité, elle est non nulle. Cela peut s'expliquer, puisque les éléments n'ont pas tous exactement la même aire, donc cela créé une légère erreur lorsqu'on la compare à l'aire moyenne. Ceci est dû au mailleur utilisé GMSH : il fourni un maillage avec des éléments pas très réguliers dès le départ. Mais l'important, c'est que l'aire des éléments ne varie pas au court du temps, ce qui est bien validé ici car l'erreur est constante dans le cas avec condition de régularité.

Ce problème est peu évoqué dans la littérature, et est encore moins mis en avant analytiquement. Comme on l'a vu dans la section 2.2.2, Fu [31] met bien en évidence le problème de régularité du maillage dans ses cas d'ascension de bulles en affichant directement le maillage déformé, mais ne calcule pas l'erreur obtenue.

#### Conservation de la masse

En cherchant à vérifier l'implémentation de la condition de régularité, on s'est rendu compte d'un problème. Comme mentionné dans la section 3.3.3, la formulation de la condition de régularisation mène à un transfert de masse à travers l'interface, même si la condition de conservation de la masse est aussi implémentée (équation 3.30).

D'après la littérature (section 2.2.2), cette non conservation de la masse peut avoir plusieurs origines. Elle est très fréquente dans les modélisations avec méthodes ALE puisque la masse n'est pas conservée naturellement comme dans les cas VOF par exemple.

Cependant, dans notre cas, sans condition de régularité, on n'observe aucune perte ou gain de masse dans la bulle. Mais dès lors qu'on prend en compte la condition de régularité, on observe une perte de masse de la bulle. Pour le prouver, on compare la masse de la bulle en fonction du temps pour des cas avec et sans condition de régularité. On utilise les mêmes simulations qu'à la section précédente (4.1.2).

La perte de masse est calculée de la manière suivante :

Perte de masse (%) 
$$= \frac{m_i - m_t}{m_i} * 100$$
 (4.4)

avec  $m_i$  la masse initiale et  $m_t$  la masse à l'instant t.

On affiche ainsi à la Figure 4.5 la perte de masse en fonction du temps pour les deux simulations avec ou sans condition de régularité.



Figure 4.5 Comparaison de la perte de masse en fonction du temps

On voit bien que la perte de masse est quasi-nulle sans la condition de régularité, alors qu'elle augmente linéairement dans le cas avec condition de régularité. On peut donc déduire que la condition de régularité exacerbe l'erreur numérique induite par notre formulation.

On voit qu'après le temps t = 0, 5, l'erreur sur la courbe sans condition de régularité augmente légèrement, mais c'est normal : cela est dû au fait que le maillage se déforme beaucoup, justement à cause du manque de condition de régularité.

Dans ces simulations, le maillage était grossier, les éléments ont une taille caractéristique de r/3 avec r le rayon de la bulle. Se référer à la section 4.1.2 pour voir comment le maillage agit sur la conservation de la masse. On remarque que pour ce maillage grossier, la perte de masse est conséquente avec la condition de régularité. J'ai alors essayé de corriger ce problème, cela m'a pris beaucoup de temps et de tentatives, en vain.

**Tentatives de corrections de l'erreur sur la conservation de la masse** Afin de rendre la condition de régularité consistante avec la conservation de la masse, on tenté d'apporter des corrections. Cependant, aucune d'entre elles n'ont fonctionné. Voici une liste non-exhaustive

chronologique des corrections testées :

- 1. Échange dans le choix des nœuds voisins (Figure 3.6)
- 2. Projection seulement selon le vecteur (1,0,0) pour le calcul de la tangente
- 3. Utilisation de la normale moyenne avec la contribution de tous les éléments voisins (Figure 4.6)
- 4. Utilisation de la normale moyenne sur les itérations de Newton-Raphson (Figure 4.7)
- 5. Détermination implicite des tangentes (Équation 3.41)

On pensait que le problème venait de la normale, d'où les essais (3) et (4) en prenant une autre normale. Se référer aux figures respectivement 4.6 et 4.7 pour une schématisation<sup>2</sup> de la normale retenue. Mais les résultats obtenus étaient toujours les mêmes quant à la perte de masse.



Figure 4.6 Tentative de correction (3)

<sup>2.</sup> Les schémas sont représentés en 2D pour plus de lisibilité, mais ils s'appliquent bel et bien en 3D dans le programme CADYF



Figure 4.7 Tentative de correction (4)

**Raffinement du maillage sur l'interface** On a donc déduit que la seule solution qui permet de réduire considérablement l'erreur sur la conservation de la masse dans la bulle est d'avoir un maillage suffisamment fin sur l'interface.

Pour vérifier cette théorie, j'ai réalisé une étude de convergence de l'erreur en fonction de la taille caractéristique de maille.

Pour mener cette étude de convergence, on fait plusieurs simulations avec des tailles caractéristiques de maille  $l_c$  différentes. Se référer à la section 4.1.2 pour plus de détails sur les simulations.

On s'intéresse à la perte de masse (équation 4.4) en fonction du temps ainsi qu'à la durée de simulation. Les éléments techniques sont résumés dans la table 4.3. On va d'abord comparer la perte de masse en fonction du temps pour les différentes tailles caractéristiques de maille, puis on tracera le taux de perte de masse en fonction de la taille caractéristique de maille, ce qui fera office d'étude de convergence.

On raffine autour de l'interface pour réduire le temps de calcul. La fonction de raffinement est présentée dans la Figure 4.8<sup>3</sup>. Cela montre de plus que le problème vient uniquement de la taille de maille sur l'interface (et pas de tout le domaine).

<sup>3.</sup> La Figure 4.8 n'est pas à l'échelle exacte afin d'offrir une meilleure lisibilité au lecteur

Taille caractéristique $l_c$	Nombre de nœuds	Durée physique de simulation
r/3	7739	$52 \min 09 s$
r/4	10892	$63 \min 37 \mathrm{s}$
r/6	19165	116 min 11 s
r/8	30716	242 min 26 s
r/10	47259	$1116 \min 05 s$
r/12	65798	2687 min 28 s

Tableau 4.3 Caractéristiques des simulations pour l'étude de la convergence de la perte de masse



Distance au centre de la bulle (adimensionnelle)

Figure 4.8 Fonction de raffinement du maillage

Pour mieux visualiser le raffinement autour de l'interface, on affiche une vue en coupe du plan de normale  $\vec{z}$  passant par l'origine du maillage de la simulation avec une taille caractéristique de r/12 (Figure 4.9).



Figure 4.9 Vue en coupe du maillage avec une taille caractéristique de r/12

Les résultats des simulations sont présentés à la Figure 4.10. On y voit les courbes de perte de masse en fonction du temps adimensionnel. On choisi de couper les simulations à un temps adimensionnel de 20 : cela correspond à l'instant où la bulle a atteint une hauteur d'ascension  $\eta = 10d$  avec d le diamètre de la bulle. On voit sur cette figure que plus le maillage est fin, moins la perte de masse augmente rapidement avec le temps.



Figure 4.10 Comparaison de la perte de masse en fonction du temps pour différentes tailles de maille caractéristiques

Pour étudier le taux de convergence de l'erreur sur la masse, on le trace en fonction du raffinement à la Figure 4.11.



Figure 4.11 Taux de perte de masse par unité de temps en fonction de la taille caractéristique des éléments

La courbe est tracée en échelle logarithmique : on obtient une droite. En étudiant le coefficient directeur de cette droite, on en déduit qu'on a une super-convergence d'ordre  $\approx 6$ , ce qui est très encourageant. Ainsi, on voit que l'erreur sur la conservation de la masse peut être réduite en utilisant un maillage assez fin.

Mais plus le maillage est fin, plus le nombre de nœuds sera élevé.

La Figure 4.12 représente la durée de simulation en fonction du nombre de nœuds



Figure 4.12 Durée physique de simulation en fonction du nombre de noeuds avec une machine de bureau à 8 coeurs

Afin que les simulations ne soient pas trop couteuses en calculs (et donc trop longues à simuler) mais qu'elles assurent une bonne conservation de la masse, on choisira une taille de maille caractéristique de r/10. L'erreur sur la conservation de la masse est très faible pour une telle valeur de taille de maille caractéristique, on la considèrera alors comme négligeable.

## 4.2 Validation

Le terme de validation, lui, s'applique à l'aspect physique du problème : l'implémentation des équations reflète-t-elle bien la physique du phénomène étudié ? Autrement dit, on valide que le bon programme numérique soit développé. On s'assure que le programme numérique donne des résultats proches de la réalité physique. Pour cela, on utilise des cas dont les solutions sont connues, mais pas forcément exactes, à la différence des solutions analytiques utilisées dans les cas de vérification.

On va valider dans cette partie que la tension de surface est bien implémentée. On se basera sur un cas d'oscillation de bulle.

## 4.2.1 Présentation de la simulation

La tension superficielle a pour effet de minimiser l'aire de l'interface pour un volume donné. Étant donné que toute mes simulations se font en écoulement incompressible, les volumes sont constants. La forme géométrique qui possède la plus petite surface possible pour un volume donné est une sphère.

Ainsi, si la tension superficielle est la seule action à entrer en jeu, la bulle va se transformer en sphère, peu importe sa forme géométrique initiale.

Dans ce cas de validation, on va observer ce comportement. On part d'une bulle ellipsoïdale (Figure 4.13), soumise à aucun écoulement initial ni à aucune force extérieure. Elle est censée tendre vers une forme sphérique avec le temps. On va observer le régime transitoire avant que la bulle ne devienne totalement sphérique : elle oscille autour de sa forme d'équilibre sphérique.



Figure 4.13 Forme géométrique initiale de la bulle

On choisi de déformer la sphère de 5% par rapport à son grand axe pour obtenir l'ellipsoïde. Il faut aussi modifier les petits axes, pour que la sphère tende vers le rayon souhaité. Voir l'équation 4.5 pour les valeurs du grand axe a et des petits axes b.

$$a = \alpha * r \tag{4.5a}$$

$$b = \frac{1}{\sqrt{\alpha * r}} \tag{4.5b}$$

avec r le rayon de la sphère souhaitée, et  $\alpha = 1,05$  la déformation de 5%

Pour la même raison que le cas de vérification de la section 4.1.2, on adimensionnalise le problème.

On liste d'abord les paramètres concernant l'oscillation de la bulle :

$$\mu_c, \quad \mu_d, \quad \rho_c, \quad \rho_d, \quad t, \quad d_e, \quad \gamma, \quad \alpha$$

avec  $\alpha$  déjà adimensionnel.

D'après le théorème de  $\Pi$  - Buckingham, on défini quatre paramètres a dimensionnels à la table 4.4 :

Tableau 4.4 Nombres adimensionnels caractérisant un problème d'oscillation d'une bulle

Nombre adimensionnel	Expression
$ ho^*$	$\frac{\rho_d}{\rho_c}$
$\mu^*$	$\frac{\mu_d}{\mu_c}$
Oh	$rac{\mu_c}{\sqrt{ ho_c \gamma d_e}}$
$t^*$	$t\sqrt{rac{\gamma}{ ho_c d_e^3}}$

On fixe le diamètre de la bulle sphérique souhaitée à 1, donc r = 0, 5. On fixe aussi les valeurs des masses volumiques et viscosité :  $\rho_c = 1 \ kg/m^3$  et  $\mu_c = 1.10^{-3} \ Pa.s$ ;  $\rho_d = 1.10^{-3} \ kg/m^3$  et  $\mu_d = 1.10^{-5} \ Pa.s$ .

On prendra un coefficient de tension de surface  $\gamma = 5N/m$ 

Oh représente le ratio des forces visqueuses sur les forces capilaires. Il est appelé le nombre d'Ohnesorge, et vaut dans notre cas  $Oh = 4,46.10^{-4}$ .

Enfin,  $t^*$  représente le temps adimensionnel.

Le maillage a une taille caractéristique  $l_c = r/12$ 

## 4.2.2 Résultat de la simulation

Pour que les résultats soient plus parlants, on affiche l'amplitude d'oscillation relative a/r en fonction du temps adimensionnel. Voir Figure 4.14.

Je compare mes résultats avec ceux de Fortin [6] et de Lamb [3]. Fortin avait réalisé les mêmes simulations, avec un maillage grossier de taille caractéristique  $l_c = r/8$  et avec un maillage fin de  $l_c = r/16$ .



Figure 4.14 Amplitude de l'oscillation en fonction du temps adimensionnel [domaine de taille  $10d_e$  (—); domaine de taille  $30d_e$  (—)], comparaison avec résultats de Fortin [maillage fin (—); maillage grossier (—)], et solution analytique de Lamb [3] [modèle linéaire non-visqueux (—); modèle linéaire visqueux (—); modèle non-linéaire (—)]

Fortin avait comparé ses cas avec la solution analytique de Lamb [3]. Il avait conclu que son cas était validé. On voit que la bulle de mon cas oscille de la même manière que la sienne, donc on peut avoir une conclusion équivalente. On voit aussi que le confinement de la bulle a un petit effet sur la solution : plus le domaine est grand, moins l'effet de masse ajoutée est grand, donc plus la fréquence d'oscilation est grande.

Ainsi, ces cas de vérification et de validation ont permis de s'assurer que la solution développée est correcte. On pourrait utiliser encore d'autres cas pour s'assurer encore plus de la fiabilité de la solution. Ce développement ajouté au programme CADYF permettrait ainsi, dans l'état actuel, de simuler l'ascension d'un groupe de bulle afin de déterminer quels sont les effets induits des unes sur les autres.
### CHAPITRE 5 CONCLUSION

Ce chapitre vient conclure le présent mémoire. On synthétise d'abord les travaux effectués dans le cadre de ce projet. Comme dans tout projet limité dans le temps, les travaux proposés viennent avec des limites. On les résume dans la section 5.2. Enfin, on propose des amélioration éventuelles à ce projet qui pourraient être effectuées dans le futur afin d'encore améliorer le développement de cette méthode de résolution numérique des écoulements diphasiques.

### 5.1 Synthèse des travaux

L'objectif principal de ce projet était d'implémenter une méthode numérique de résolution des écoulements diphasiques tridimensionnels dans le programme CADYF. La formulation utilisée est ALE, couplée à la MEF. Cela permet une imposition directe des conditions aux limites au niveau de l'interface. La formulation bidimensionnelle de Vautrin [4] a été utilisée pour améliorer celle tridimensionnelle de Fortin [6]. Fortin proposait dans la conclusion de ses travaux une amélioration concernant la nature des éléments utilisés pour le maillage du domaine. Des problèmes l'ont obligé à utiliser des éléments de type  $P_1 - P_1$ . Mais la méthode de Vautrin a permis l'implémentation des éléments  $P_2 - P_1$ , ce qui a pour effet d'augmenter la précision en réduisant le nombre de nœuds nécessaires. De plus la méthode de Vautrin ici développée en 3 dimensions est plus dans l'esprit de la MEF que l'ancienne méthode de Fortin, puisque celle-ci se base sur une formulation variationnelle de l'opérateur de Laplace-Beltrami. L'autre axe de développement était d'implémenter la condition de régularité de Fortin dans la nouvelle version de CADYF. Ce fut un succès, et la formulation a même été améliorée. Ces développements ont été ensuite vérifiés et validés.

Nos objectifs initiaux étaient d'utiliser ce développement pour simuler des petits groupes de bulles d'air dans un écoulement d'eau, mais je me suis heurté à un problème lors de la vérification de l'implémentation de la condition de régularité : la conservation de la masse. Je me suis beaucoup concentré sur ce problème qui me semble capital dans le domaine de la dynamique des fluides numérique. Plusieurs solutions ont été essayées, ce qui a lourdement affecté le planning des simulations.

### 5.2 Limitations de la solution proposée

Ces travaux sont néanmoins victimes de quelques limitations.

• Le développement de l'interface tridimensionnelle apportée dans ces travaux ne concerne

que les interfaces *fermées*. On ne peut alors pas simuler, par exemple, l'ascension d'une demi bulle le long d'une paroi.

- Malgré le faible taux de perte de masse obtenu en choisissant un maillage suffisamment fin, le problème de conservation de masse reste bel et bien présent. Cela nous force à utiliser un maillage fin, comportant beaucoup de nœuds .
- Comme mentionné dans le chapitre introductif (Chapitre 1) on utilise un mailleur externe à CADYF pour générer le maillage en 3 dimensions, pour la simple et bonne raison que le mailleur interne *Tria2D* est développé uniquement en 2 dimensions. On ne peut alors actuellement pas adapter le maillage en espace, les simulations divergent alors dès que l'interface se déforme trop (obtention d'éléments de volume négatif).
- Étant donné le choix d'une méthode de suivi d'interface dans le logiciel CADYF, les changements topologiques (fractionnement ou coalescence de bulles notamment) sont difficiles à prendre en compte.

## 5.3 Améliorations futures

On pourrait envisager des améliorations à ces travaux afin de rendre les opérations de calculs numériques plus efficaces.

- Actuellement, le programme CADYF fonctionne en parallèle sur les différents cœurs d'un seul processeur. Il fonctionne ainsi sur un principe de mémoire *partagée*. L'interface de programmation actuellement utilisée pour partager la mémoire est Open Multi Processing (OMP). Nos ordinateurs de bureaux comportent 8 cœurs. On utilise aussi un cluster de calcul qui comporte des processeurs (nœuds) ayant 16 cœurs. Il serait cependant beaucoup plus efficace de *distribuer* la mémoire sur les différents nœuds du cluster, cela accélérerait grandement le processus de calculs. Il faudrait alors développer l'interface de programmation Message Passing Interface (MPI). Ces travaux sont envisagés par le professeur S. Étienne.
- Développer le mailleur *Tria3D* permettrait l'adaptation de maillage en 3 dimensions, ce qui permettrait de tenir compte du déplacement des régions les plus critiques dans l'espace en fonction du temps. Ce développement serait un gros travail. On pourrait aussi développer une méthode d'adaptation de maillage en incluant *GMSH* dans la boucle d'adaptation, ce qui demanderait moins de développement.
- Afin d'essayer de corriger le problème de conservation de masse, on pourrait essayer d'intégrer la normale de l'interface en chaque nœud parmi les inconnues du problème (Section 3.2.5) afin qu'elle soit résolue en même temps que toutes les autres inconnues du système matriciel. Cela éviterait de le faire manuellement (Section 4.1.2).

• Pour rendre possible les simulations à interfaces *ouvertes*, il faudrait trouver et développer une méthode de détermination de la courbe qui résulte de l'intersection entre l'interface et la frontière du domaine.

# RÉFÉRENCES

- R. Clift, J. Grace et M. Weber, *Bubbles, drops, and particles*. New York, NY : Academic Press inc., janv. 1978.
- [2] J. Donea *et al.*, "Arbitrary Lagrangian–Eulerian Methods," dans *Encyclopedia of Computational Mechanics*. American Cancer Society, 2004.
- [3] H. Lamb, "Hydrodynamics," Victoria University of Manchester, Cambridge University Press, Dover Publications Inc., New York, Printed in the USA, Card Number 46-1891, 1945.
- [4] Y. Vautrin, "Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques de fluides séparés par une interface avec une méthode d'éléments finis adaptatives en espace et en temps," thèse de doctorat, Dép. de génie mécanique, École Polytechnique de Montréal, Montréal, QC, 2020.
- [5] E. Muller, "Une méthode d'éléments finis adaptative pour les écoulements instationnaires complexes," thèse de doctorat, Dép. de génie mécanique, École Polytechnique de Montréal, Montréal, QC, 2020.
- [6] S. Fortin, "Étude de bistabilité des bulles ellipsoïdales par une méthode ale de résolution des écoulements diphasiques," mémoire de maîtrise, Dép. de génie mécanique, École Polytechnique de Montréal, Montréal, QC, 2019.
- [7] C. Geuzaine et J. F. Remacle, "Gmsh : a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, p. 1309–1331, 2009.
- [8] A. Prosperetti et G. Tryggvason, *Computational Methods for Multiphase Flow*. Cambridge : Cambridge University Press, 2007.
- [9] C. W. Hirt et B. D. Nichols, "Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries," *Journal of Computational Physics*, vol. 39, n°. 1, p. 201–225, janv. 1981.
- [10] S. Osher et J. A. Sethian, "Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations," *Journal of Computational Physics*, vol. 79, n<sup>o</sup>. 1, p. 12–49, nov. 1988.
- [11] V. R. Gopala et B. G. van Wachem, "Volume of fluid methods for immiscible-fluid and free-surface flows," *Chemical Engineering Journal*, vol. 141, nº. 1-3, p. 204–221, juill. 2008.

- [12] S. Mirjalili, S. Jain et M. Dodd, "Interface-capturing methods for two-phase flows : An overview and recent developments," *Center for Turbulence Research - Annual research brief*, p. 117–135, déc. 2017.
- [13] S. O. Unverdi et G. Tryggvason, "A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows," *Journal of Computational Physics*, vol. 100, nº. 1, p. 25–37, mai 1992.
- [14] F. H. Harlow et J. E. Welch, "Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface," *The Physics of Fluids*, vol. 8, n<sup>o</sup>. 12, p. 2182, déc. 2004.
- [15] T. J. R. Hughes, W. K. Liu et T. K. Zimmermann, "Lagrangian-Eulerian finite element formulation for incompressible viscous flows," *Computer Methods in Applied Mechanics* and Engineering, vol. 29, n°. 3, p. 329–349, déc. 1981.
- [16] J. Shaikh, A. Sharma et R. Bhardwaj, "On comparison of the sharp-interface and diffuseinterface level set methods for 2D capillary or/and gravity induced flows," *Chemical Engineering Science*, vol. 176, p. 77–95, févr. 2018.
- [17] X. Mao, V. Joshi et R. Jaiman, "A variational interface-preserving and conservative phase-field method for the surface tension effect in two-phase flows," *Journal of Computational Physics*, vol. 433, p. 110166, mai 2021.
- [18] P. Yue et al., "A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluids," Journal of Fluid Mechanics, vol. 515, p. 293–317, sept. 2004.
- [19] D. M. Anderson, G. B. McFadden et A. A. Wheeler, "DIFFUSE-INTERFACE ME-THODS IN FLUID MECHANICS," Annual Review of Fluid Mechanics, vol. 30, nº. 1, p. 139–165, janv. 1998.
- [20] J. Brackbill, D. Kothe et C. Zemach, "A continuum method for modeling surface tension," *Journal of Computational Physics*, vol. 100, nº. 2, p. 335–354, juin 1992.
- [21] C. S. Peskin, "Flow patterns around heart valves : A numerical method," Journal of Computational Physics, vol. 10, nº. 2, p. 252–271, oct. 1972.
- [22] G. Anjos, N. Mangiavacchi et J. Thome, "An ALE-FE method for two-phase flows with dynamic boundaries," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 362, p. 112820, avr. 2020.
- [23] S. Popinet, "Numerical Models of Surface Tension," Annual Review of Fluid Mechanics, vol. 50, n<sup>o</sup>. 1, p. 49–75, 2018.
- [24] G. Dziuk, "An algorithm for evolutionary surfaces," Numerische Mathematik, vol. 58, n°. 1, p. 603–611, déc. 1990.

- [25] F. Ivančić, T. W. Sheu et M. Solovchuk, "Elimination of spurious velocities generated by curvature dependent surface force in finite element flow simulation with mesh-fitted interface," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 372, p. 113356, déc. 2020.
- [26] S. Hysing, "A new implicit surface tension implementation for interfacial flows," International Journal for Numerical Methods in Fluids, vol. 51, nº. 6, p. 659–672, juin 2006.
- [27] S. Gross et A. Reusken, Numerical Methods for Two-phase Incompressible Flows, ser. Springer Series in Computational Mathematics. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2011, vol. 40.
- [28] M. Smuda, "Direct Numerical Simulation of Multi-Phase Flows using Extended Discontinuous Galerkin Methods," 2021.
- [29] N. Potghan et C. S. Jog, "An arbitrary Lagrangian-Eulerian-based finite element strategy for modeling incompressible two-phase flows," *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 93, n<sup>o</sup>. 6, p. 1712–1735, juin 2021.
- [30] M. Dai et D. P. Schmidt, "Adaptive tetrahedral meshing in free-surface flow," Journal of Computational Physics, vol. 208, nº. 1, p. 228–252, sept. 2005.
- [31] G. Fu, "Arbitrary Lagrangian-Eulerian hybridizable discontinuous Galerkin methods for incompressible flow with moving boundaries and interfaces," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 367, p. 113158, août 2020.
- [32] D. Bhaga et M. Weber, "Bubbles in viscous liquids : shapes, wakes and velocities," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 105, p. 61–85, 1981.
- [33] L. C. Ngo et H. G. Choi, "A multi-level adaptive mesh refinement for an integrated finite element/level set formulation to simulate multiphase flows with surface tension," *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 79, nº. 4, p. 908–933, févr. 2020.
- [34] J. J. Cambareri, J. Fang et I. A. Bolotnov, "Interface capturing simulations of bubble population effects in PWR subchannels," *Nuclear Engineering and Design*, vol. 365, p. 110709, août 2020.
- [35] S. Etienne, A. Garon et D. Pelletier, "Perspective on the geometric conservation law and finite element methods for ALE simulations of incompressible flow," *Journal of Computational Physics*, vol. 228, n<sup>o</sup>. 7, p. 2313–2333, avr. 2009.
- [36] A. Hay et al., "High-order temporal accuracy for 3D finite-element ALE flow simulations," Computers & Fluids, vol. 100, p. 204–217, sept. 2014.

[37] Y. Vautrin *et al.*, "Automatic adaptive remeshing for unsteady interfacial flows with surface tension," dans *AIAA Scitech 2020 Forum*, ser. AIAA SciTech Forum. American Institute of Aeronautics and Astronautics, janv. 2020.