PolyPublie
Polytechnique Montréal

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
UNIVERSITÉ D'INGÉNIERIE

Titre: Title:	Simulation des grandes échelles appliquée à la modélisation des écoulements turbulents à surface libre
Auteur: Author:	Roland Rivard
Date:	2012
Type:	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis
Référence: Citation:	Rivard, R. (2012). Simulation des grandes échelles appliquée à la modélisation des écoulements turbulents à surface libre [Ph.D. thesis, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/962/

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: PolyPublie URL:	https://publications.polymtl.ca/962/
Directeurs de recherche: Advisors:	Roland Rivard
Programme: Program:	Mathématiques de l'ingénieur

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

https://publications.polymtl.ca

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

SIMULATION DES GRANDES ÉCHELLES APPLIQUÉE À LA MODÉLISATION DES ÉCOULEMENTS TURBULENTS À SURFACE LIBRE

ROLAND RIVARD
DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES ET DE GÉNIE INDUSTRIEL
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR
(MATHÉMATIQUES DE L'INGÉNIEUR)
OCTOBRE 2012

© Roland Rivard, 2012.

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée :

SIMULATION DES GRANDES ÉCHELLES APPLIQUÉE À LA MODÉLISATION DES ÉCOULEMENTS TURBULENTS À SURFACE LIBRE

présentée par : RIVARD Roland

en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiæ Doctor

a été dûment acceptée par le jury constitué de :

M. SAUCIER Antoine, Ph.D., président

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

M. VÉTEL Jérôme, Ph.D., membre

M. PARASCHIVOIU Marius, Ph.D., membre

À Nicole (1947 - 2009)

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Monsieur Steven Dufour qui a su me diriger et me conseiller tout en me laissant une totale liberté. Je me dois aussi de le remercier pour son soutien financier. J'aimerais aussi ajouter que j'ai apprécié le fait qu'il ait su développer une attitude certaine dans le déchiffrement de mon discours plutôt aléatoire.

Je dois aussi des remerciements au Fonds de recherche du Québec - Nature et technologies (FQRNT) pour m'avoir octroyé une bourse d'étude. Celle-ci m'a permis de pouvoir me concentrer uniquement sur mon projet de recherche pendant la durée de son attribution.

Monsieur Jérôme Vétel, je m'excuse pour mes questions de 15 minutes d'une demi-journée. En tant que spécialiste de la physique, vous comprenez certainement mieux que moi cette dilatation temporelle. Je vous remercie d'avoir pris le temps de répondre à toutes mes questions et de prendre part à l'évaluation de ce travail.

Je veux également remercier Monsieur Antoine Saucier, le président du présent jury, dont les questions et commentaires lors de la présentation de mon examen général de synthèse ont occupé mon esprit tout au long de la présente recherche. Je suis convaincu que celles qui suivront la lecture de ce document me seront tout aussi profitables.

De très sincères remerciements à Monsieur Marius Paraschivoiu pour avoir immédiatement accepté de participer en tant que membre externe à l'évaluation de ce travail. Vos questions et commentaires sauront certainement me faire réfléchir sur certaines dimensions du problème qui m'auront échappées.

Je suis également reconnaissant à Monsieur François Bertrand d'avoir accepté le rôle de représentant du directeur des études supérieures. Je dois souligner que la rencontre avec Monsieur Bertrand et les membres de son équipe m'a permis de voir une autre facette de l'utilisation de la simulation des grandes échelles qui a été des plus enrichissante.

Je tiens à remercier Monsieur Dominique Orban pour avoir porté à mon attention les méthodes itératives projetées et pour les nombreuses discussions fructueuses.

Enfin, merci Cyndie... ici trop de mots seraient insuffisants.

Résumé

Nous proposons un modèle numérique pour la simulation des écoulements turbulents incompressibles et immiscibles à surface libre. La turbulence est modélisée à l'aide de la simulation des grandes échelles. La capture d'interface est effectuée à l'aide de la méthode de la pseudo-concentration. La discrétisation de ce problème est faite dans le cadre de la méthode des éléments finis. Pour ce faire, un nouveau code a été développé afin de permettre l'étude de problèmes tridimensionnels de grande envergure. Une analyse mathématique des problèmes de perte de masse liés à l'utilisation d'un marqueur eulérien pour la capture des surfaces libres est proposée. Différentes techniques de reconstruction des dérivées sont comparées pour la modélisation de la tension superficielle. Une simplification d'une stratégie de projection des méthodes de Krylov, ainsi qu'une façon de préconditionner ces méthodes, sont présentées. Les composantes du modèle numérique proposé sont vérifiées et validées à l'aide de résultats théoriques et expérimentaux. Le problème de Young-Laplace, des problèmes de bulles en ascension libre, le problème de la marche descendante et l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente sont étudiés.

Abstract

We propose a numerical model for the simulation of non-miscible and incompressible turbulent free surface flows. Turbulence is modeled using large eddy simulation (LES). Interface capturing is performed using the pseudo-concentration method. The discretization of this problem is performed in the context of the finite element method. A new simulation code was developed in order to allow the study of large-scale three-dimensional problems. A mathematical analysis of mass loss problems related to the use of an Eulerian marker for free surface capturing is proposed. Various derivative reconstruction techniques for the modeling of surface tension are compared. A simplification of a projection strategy for Krylov methods, including a procedure for preconditioning these methods, are developed. The components of the proposed numerical model are verified and validated using theoretical and experimental results. The Young-Laplace problem, rising bubble problems, the backward-facing step problem, and the turbulent Rayleigh-Taylor instability are studied.

Table des matières

DÉDICACE iii

REMERCIEMENTS iv

RÉSUMÉ v

ABSTRACT vi

TABLE DES MATIÈRES vii

LISTE DES TABLEAUX xi

LISTE DES FIGURES xiii

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS xvi

LISTE DES ANNEXES xxii

CHAPITRE1 INTRODUCTION 1

CHAPITRE2 DYNAMIQUE DES ÉCOULEMENTS À SURFACE LIBRE 6

2.1 Équations de Navier-Stokes 6

2.1.1 Fluides incompressibles 8

2.2 Système d'équations régissant les écoulements à surface libre 9

2.2.1 La pseudo-concentration 10

2.2.2 Équation de transport de la pseudo-concentration 13

2.2.3 La tension superficielle 15

2.2.4 Formulation du système d'équations 16

2.3 Analyse dimensionnelle 17

2.3.1 Adimensionnalisation du système d'équations des écoulements à surface libre 17

CHAPITRE3 DISCRÉTISATION DES ÉQUATIONS 19
3.1 Les espaces fonctionnels 19
3.2 Passage à la forme faible 21
3.3 Discrétisation de la forme faible 23
3.4 Stabilisation des oscillations numériques 26

CHAPITRE4 RÉSOLUTION DU SYSTÈME DISCRET 29
4.1 Méthodes directes 29
4.2 La condensation statique 30
4.2.1 Condensation statique pour l'élément MINI 30
4.2.2 Condensation statique pour l'élément Crouzeix-Raviart 32
4.3 La méthode d'Uzawa ou du lagrangien augmenté 34
4.4 Les méthodes itératives 35
4.4.1 Les méthodes de Krylov classiques 35
4.4.2 Les méthodes de Krylov projetées 37
4.4.3 Préconditionnement des méthodes de Krylov projetées 42
4.5 Comparaison des stratégies 45

CHAPITRE5 RETOUR SUR LA PSEUDO-CONCENTRATION 46
5.1 Définition et initialisation de la pseudo-concentration 47
5.1.1 Définition constructive de la pseudo-concentration 47
5.1.2 Exemple de construction d'une fonction de transition 49
5.1.3 Stratégie de recalcul de la pseudo-concentration 50
5.1.4 Conservation de la masse et zone de transition 52
5.1.5 Erreur commise sur la conservation de masse 54
5.2 Modélisation de la tension superficielle 58
5.2.1 Reconstruction des dérivées de $\boldsymbol{F}$ 59

CHAPITRE6 ÉCOULEMENTS TURBULENTS INCOMPRESSIBLES 63
6.1 Les équations de Navier-Stokes moyennées (RANS) 63
6.2 Simulation numérique directe 66

6.3 La simulation des grandes échelles (LES) 68
6.3.1 Filtrage des équations de Navier-Stokes 70
6.3.2 Erreur de commutation 71
6.3.3 Modélisation du tenseur de Reynolds 71

CHAPITRE7 ÉCOULEMENTS TURBULENTS À SURFACE LIBRE 80
7.1 Système d'équations des écoulements turbulents à surface libre 81
7.1.1 Simulation des grandes échelles des écoulements à surface libre 81

CHAPITRE8 VÉRIFICATION DE LA MODÉLISATION DE LA FORCE CAPILLAIRE : LE PROBLÈME DE YOUNG-LAPLACE 89
8.1 Approximation analytique de la solution 89
8.2 Résultats numériques 91
8.2.1 La bulle de géométrie sphérique 91
8.2.2 La bulle de géométrie ellipsoïdale 94

CHAPITRE9 VALIDATION DU MODÈLE DE CAPTURE D'INTERFACE : LA DYNAMIQUE DES BULLES 98
9.1 La dynamique d'une bulle soumise à la poussée d'Archimède 98
9.1.1 Le diagramme de Grace 98
9.1.2 Résultats numériques pour le problème du diagramme de Grace 103
9.2 La coalescence de deux bulles 105
9.2.1 Description du problème 105
9.2.2 Résultats numériques pour la coalescence 105
9.3 Retour sur la conservation de la masse 108

CHAPITRE10 VALIDATION DU MODÈLE DE TURBULENCE : LE PROBLÈME DE LA MARCHE DESCENDANTE 112
10.1 Description du problème et mesures importantes 113
10.2 Démarche et résultats numériques 115

CHAPITRE11 VALIDATION DE LA MODÉLISATION DES ÉCOULEMENTS TURBULENTS À SURFACE LIBRE : L'INSTABILITÉ DE RAYLEIGH-TAYLOR TURBULENTE126
11.1 Résultats numériques 129

CHAPITRE12 CONCLUSION 136

RÉFÉRENCES 143

ANNEXES 150

Liste des tableaux

Tableau 2.1 Décomposition adimensionnelle. 18

Tableau 4.1 Comparaison de l'algorithme de la méthode PBiCGStab préconditionnée et PBiCGStab préconditionnée projetée. 44

Tableau 4.2 Comparaison des différentes stratégies de résolution pour le problème d'un écoulement stratifié avec la combinaison d'éléments P2^{+}/P1^{D}/P1. 45

Tableau 8.1 Nombre de pas de temps pour atteindre l'état stationnaire pour le problème de Young-Laplace. 92

Tableau 8.2 Ordre de grandeur de la norme du champ de vitesse pour le problème de Young-Laplace. 92

Tableau 8.3 Saut en pression pour le problème de Young-Laplace. 93

Tableau 9.1 Données adimensionnelles pour le problème de la bulle en ascension libre dans un fluide. 101

Tableau 9.2 Comparaison du nombre de Reynolds terminal calculé Re_c et du nombre de Reynolds terminal expérimental Re_e avec mise à jour de la pseudo-concentration. L'erreur relative entre ces deux valeurs $Er(Re)$ ainsi que l'erreur relative sur la conservation de la masse $Er(M)$ sont aussi fournies. 104

Tableau 9.3 Données adimensionnelles pour le problème de la coalescence de deux bulles dans un liquide. 105

Tableau 9.4 Comparaison du nombre de Reynolds terminal calculé (Re_c) et du nombre de Reynolds terminal expérimental (Re_e) sans mise à jour de la pseudo-concentration. L'erreur relative entre ces deux valeurs ($Er(Re)$) ainsi que l'erreur relative sur la conservation de la masse $Er(M)$ sont aussi fournies. 111

Tableau 10.1 Données adimensionnelles pour le problème de la marche descendante. . . 115

Tableau 10.2 Conditions limites pour le problème de la marche descendante, exprimées en fonction de la base canonique de $\mathbb{R}^3$. 116

Tableau 10.3 Longueurs de recollement calculées pour le problème de la marche descendante pour différents nombres de Reynolds. 117

Tableau 11.1 Données adimensionnelles pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente. 127
Tableau 11.2 Conditions limites pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente exprimées en fonction des vecteurs de la base canonique de $\mathbb{R}^3$. 129
Tableau 11.3 Valeur de α optimale et nombre de Reynolds terminal pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente. 130

Liste des figures

Figure 2.1 Représentation 2D d'un écoulement à surface libre. 9

Figure 5.1 Approximations de la fonction indicatrice dans $\Omega_2 = [\text{-}1\ ,\ 0[$. 46

Figure 5.2 Représentation 2D d'un écoulement à surface libre avec la zone de transition de Γ (en pointillé). 47

Figure 5.3 Représentation 2D de l'algorithme de mise à jour de F. 51

Figure 5.4 Cellule d'éléments pour un maillage triangulaire ($\cdot$: nœud géométrique, $\circ$: nœud de calcul sur une arrête et $\oplus$: nœud de calcul à l'intérieur d'un élément). 60

Figure 6.1 Illustration de la cascade d'énergie. 67

Figure 6.2 Loi en $\text{-}5/3$ de Kolmogorov. 67

Figure 6.3 Filtrage à la paroi. 74

Figure 8.1 Problème de Young-Laplace. 91

Figure 8.2 Pression et vitesse dans le plan $z = 0$ (P1-bulle/P1/P1, DL2P et $h = 0{,}02$) pour le problème de Young-Laplace. 94

Figure 8.3 Géométrie initiale et finale de la bulle pour le problème de Young-Laplace. 95

Figure 8.4 Pression et vitesse dans le plan $x - y$ pour le problème de Young-Laplace. 96

Figure 8.5 Graphe le long de l'axe des x pour le problème de Young-Laplace à l'état stationnaire. 97

Figure 9.1 Diagramme tiré de Grace (1973). 99

Figure 9.2 Coupe selon le plan $z = 0$ du domaine pour le problème de la bulle en ascension libre. 101

Figure 9.3 Coupe selon le plan $z = 0$ du maillage du domaine. La zone foncée contient des éléments de petite taille et correspond à la région où évolue la bulle en ascension libre. 102

Figure 9.4 Évolution de la vitesse ascendante pour différents nombres d'Eötvös et de Morton (vitesse ascendante en noir, vitesse ascendante moyenne entre $t = 1$ et $t = 2{,}5$ en rouge et la vitesse ascendante moyenne plus ou moins l'écart type en pointillé bleu). 103
Figure 9.5 Géométrie des bulles à $t = 2{,}5$. 104
Figure 9.6 Maillages initial et final pour le problème de coalescence. Les zones foncées correspondent à des éléments de petites tailles situés autour de la surface libre. C'est le résultat de la capture adaptative d'interface (Dufour, 1999). 106
Figure 9.7 Coalescence de deux bulles. 107
Figure 9.8 Variation du volume des bulles près de la coalescence. 108
Figure 9.9 Géométrie d'une bulle d'air dans l'eau à $t = 1$ ($Eo = 100$ et $Mo = 1$). . . 109
Figure 9.10 Évolution de l'erreur sur la masse pour $\varepsilon = 0{,}125$ ($h = 0{,}1$ en bleu, $h = 0{,}075$ en rouge, $h = 0{,}0625$ en noir, $h = 0{,}05$ en magenta et $h = 0{,}0375$ en vert). 110
Figure 9.11 Évolution de l'erreur sur la masse pour $h = 0{,}05$ ($\varepsilon = 0{,}125$ en bleu, $\varepsilon = 0{,}1$ en rouge, $\varepsilon = 0{,}075$ en noir et $\varepsilon = 0{,}06$ en magenta). 110
Figure 10.1 Géométrie du problème de la marche descendante (origine fixée au coin supérieur de la marche et au centre de la géométrie dans la direction $\boldsymbol{k}$). . . 112
Figure 10.2 Longueur de recollement. 113
Figure 10.3 Profils de vitesse au centre de l'écoulement (o) données expérimentales (Armaly *et al.*, 1983) et (—) résultats numériques. 118
Figure 10.4 Évolution de la longueur de recollement en fonction du temps initial dans le calcul de la moyenne. 119
Figure 10.5 Pression et composantes de la vitesse présentées sur l'extrusion du champ de vitesse au centre de l'écoulement $(z = 0)$ (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc). 120
Figure 10.6 Composantes du champ de vorticité présentées sur l'extrusion du champ de vitesse au centre de l'écoulement $(z = 0)$ (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc). 121

Figure 10.7 Évolution de la longueur de recollement suivant la norme du chapm de vitesse à différents temps (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc). 122
Figure 10.8 Surfaces de niveau de la pression (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc). 123
Figure 10.9 Isosurfaces de la vitesse (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc). 124
Figure 10.10 Lignes de courant de l'écoulement (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc). 125
Figure 11.1 Hauteur de mélange pour le problème de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. . 127
Figure 11.2 Position initiale de la surface libre pour les instabilités de Rayleigh-Taylor. 128
Figure 11.3 Variation de α (—) et α optimal (- -) pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor chloroforme-eau. 130
Figure 11.4 Courbe de croissance théorique (rouge) vs courbe numérique (noire) pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente. 131
Figure 11.5 Erreur relative entre la courbe théorique et la courbe numérique pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente. 131
Figure 11.6 Évolution de la surface libre pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente. 132
Figure 11.7 Seconde instabilité de Rayleigh-Taylor. 133
Figure 11.8 Lignes de courant de l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente à $t = 6{,}5$ (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc). 134
Figure 11.9 Champ de vitesse au centre de l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc). 135
Figure 11.10 Vorticité au centre de l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc). 135

Liste des sigles et abréviations

$<<$	: beaucoup plus petit que
$*$	: produit de convolution
$\emptyset$	: ensemble vide
$\|\cdot\|_2$	: norme euclidienne de $\mathbb{R}^n$
$\circ$	: composition de fonction
$\oplus$	: somme directe
$\otimes$	: produit tensoriel ou produit de Kronecker
$\cdot$	: produit scalaire dans $\mathbb{R}^n$
$:$	: double contraction tensorielle
$(u, v)_{L^2(\Omega)}$	: produit scalaire de $L^2(\Omega)$
$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})_{L^2(\Omega)}$	: produit scalaire de $L^2(\Omega)^n$
$(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\nu})_{L^2(\Omega)}$	: produit scalaire de $L^2(\Omega)^{(n\times n)}$
$(u, v)_{1,\Omega}$	: produit scalaire sur $H^1(\Omega)$
$(u, v)_{0,\Omega}$	: produit scalaire sur $L^2(\Omega)$
$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})_{0,\Omega}$	: produit scalaire de $L^2(\Omega)^n$
$(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\nu})_{0,\Omega}$	: produit scalaire de $L^2(\Omega)^{(n\times n)}$
$\langle \varphi, \psi \rangle_{L^2_{\boldsymbol{u}}(\Lambda)}$	: relation de dualité sur $L^2_{\boldsymbol{u}}(\Lambda)$
$\boldsymbol{A}$	: matrice de diffusion visqueuse
AB^TB	: structure matricielle associée aux problèmes de point de selle
AB^TBC	: structure matricielle associée aux problèmes de point de selle modifié
A_δ	: erreur de commutation
ANN	: Approximate Nearest Neighbor
A_t	: nombre de Atwood
$\boldsymbol{B}$	: matrice de divergence
BLAS	: Basic Linear Algebra Subroutines
BiCG	: biconjugate gradient

BiCGStab : stabilized biconjugate gradient

C_D : constante dynamique

$\boldsymbol{C_F}$: matrice de transport de la pseudo-concentration

CGS : conjugate gradient squared

C^k : ensemble des fonctions k-fois continûment différentiables

χ_{Ω_2} : fonction indicatrice de l'ensemble Ω_2

C_ω : constante du modèle WALE

C_S : constante de Smagorinsky

CSF : continuum surface force

$\boldsymbol{C_u}$: matrice de convection

δ : largeur du filtre

$\boldsymbol{\delta}$: delta de Kronecker

D : constante de Van Driest

ΔM_k : variation de la masse du domaine de calcul au k-ième pas de temps

ΔP : saut en pression

Δt : pas de temps

$\partial\Omega$: frontière du domaine de calcul

$\partial\Omega_{DF}^-$: domaine des conditions de Dirichlet en pseudo-concentration

$\partial\Omega_{D\boldsymbol{u}}$: domaine de définition de conditions de Dirichlet en vitesse

$\partial\Omega_i$: frontière de la portion du domaine de calcul du fluide i

$\partial\Omega_{N\boldsymbol{u}}$: domaine de définition des conditions de Neumann en vitesse

DDL : degré de liberté

DL2P : double projection dans L^2

DLF : double approximation linéaire

DNS : direct numerical simulation

ε : demi-largeur de la zone de transition

Eo : nombre d'Eötvös

$\boldsymbol{f}$: force externe

f_ε : fonction de transition

$\boldsymbol{f_s}$: force capillaire

$\boldsymbol{f_v}$: approximation de la force capillaire

F : pseudo-concentration

$\overline{F}$: pseudo-concentration filtrée

F_{DF} : condition de Dirichlet en pseudo-concentration

F_h : approximation discrète de la pseudo-concentration

Fr : nombre de Froude

$\mathcal{F}_\varepsilon$: ensemble des fonctions de transition

$\boldsymbol{g}$: champ gravitationnel

γ : coefficient de tension superficielle

Γ : surface libre

$\Gamma(t)$: surface libre évoluant dans le temps

$\boldsymbol{n}_\Gamma$: vecteur normal à la surface libre

$\boldsymbol{n}_{\Gamma(t)}$: vecteur normal à la surface libre évoluant dans le temps

GLS : Galerkin least-square

GMRES : generalized minimal-residual

I_{B^TB} : matrice de projection orthogonale dans $ker(B)$

I_M : préconditionneur pour les méthodes de Krylov projetées

I_{MI} : préconditionneur pour les méthodes de Krylov projetées

$H^{1/2}(\Lambda)^3$: restriction de $H^1(\Omega)^3$ au bord Λ

$H^{-1/2}(\Lambda)^3$: dual de $H^{1/2}(\Lambda)^3$

$H^1(\Omega)$: espace de Sobolev défini sur Ω

$H^1(\Omega)^3$: version vectorielle de $H^1(\Omega)$

$H^1(\Omega)^{(3\times3)}$: version tensorielle de $H^1(\Omega)$

κ : courbure moyenne

K : noyau de convolution de filtrage

Kn : nombre de Knudsen

$\boldsymbol{K}_n$: base de l'espace de Krylov de dimension n

$L^2(\Omega)$: fonctions de carré intégrable sur Ω

$L^2(\Omega)^n$: version vectorielle de $L^2(\Omega)$

$L^2(\Omega)^{(n\times n)}$: version tensorielle de $L^2(\Omega)$

$L^2_{\boldsymbol{u}}(\Lambda)$: espace défini au bord de Ω pour les problèmes de transport

LBB : condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi

LDL^T : factorisation matricielle

LES : large eddy simulation

LU : factorisation matricielle

μ : viscosité

μ_i : viscosité du fluide i

$M_k(\Omega)$: masse du domaine de calcul au k-ième pas de temps

$M(\Omega_i)$: masse du fluide i

$\tilde{M}(\Omega_i)$: masse approximative du fluide i

$\boldsymbol{M_F}$: matrice de masse de la pseudo-concentration

Mo : nombre de Morton

MR : méthode de reconstruction des dérivées de Marchandise et Remacle

$\boldsymbol{M_u}$: matrice de masse en vitesse

∇ : opérateur gradient

$\nabla\cdot$: opérateur divergence

$\nabla^S \boldsymbol{u}$: tenseur du taux des déformations

ν_T : viscosité turbulente

p : pression

$\overline{p}$: pression filtrée

$\langle p \rangle$: pression moyenne

$\tilde{p}$: pression filtrée avec le filtre de Favre

p_h : approximation discrète de la pression

p_H : pression hydrostatique

$P_{ker(B)}$: projection orthogonale dans ker(B)

$P(s)$: cellule d'éléments centrée en s

ϕ_i^F : interpolant en pseudo-concentration

ϕ_i^p : interpolant en pression

ϕ_i^u : interpolant du champ de vitesse pour la composante u

ϕ_i^v : interpolant du champ de vitesse pour la composante v

ϕ_i^w : interpolant du champ de vitesse pour la composante w

$\Phi_{\partial\Omega_{DF}^-}(\Omega)$: fonction de $\Phi(\Omega)$ à valeur nulle sur $\partial\Omega_{DF}^-$

Φ_h : discrétisation de $\Phi(\Omega)$

$\Phi(\Omega)$: espace de base pour les problèmes de transport

PARDISO : bibliothèque numérique de factorisation matricielle

PBiCGStab : projected stabilized biconjugate gradient

PGMRES : projected generalized minimal-residual

PSPG : pressure stabilizing / Petrov-Galerkin

Q_h : discrétisation de $L^2(\Omega)$

QF : approximation quadratique

QMR : quasi-minimal residual

r : facteur de pénalisation pour la méthode d'Uzawa

ρ : densité

R : rayon d'une sphère

$\mathbb{R}$: espace des réels

$\mathbb{R}^n$: espace vectoriel réel de dimension n

RANS : Reynolds averaged Navier-Stokes

Re : nombre de Reynolds

ρ_i : densité du fluide i

$\boldsymbol{\sigma}$: tenseur de Reynolds

SLF : simple approximation linéaire

SuperLU : bibliothèque numérique de factorisation matricielle

SUPG : streamline upwind / Petrov-Galerkin

t : temps

τ : paramètre de stabilisation

$\boldsymbol{\tau}$: tenseur des contraintes

T : un élément

$\boldsymbol{t}_\Gamma$: vecteur tangent à la surface libre

$\boldsymbol{t}_{N\boldsymbol{u}}$: condition de Neumann en vitesse

$\boldsymbol{\tau_i}$: tenseur du fluide i

TFQMR : transpose-free quasi-minimal residual

$\boldsymbol{u}$: champ de vitesse

$\overline{\boldsymbol{u}}$: champ de vitesse filtré

$\langle \boldsymbol{u} \rangle$: champ de vitesse moyen

$\boldsymbol{u}'$: champ des fluctuations

$\tilde{\boldsymbol{u}}$: champ de vitesse filtré avec le filtre de Favre

$\boldsymbol{u}_{\partial\Omega}$: normale extérieure à la frontière du domaine de calcul

$\boldsymbol{u}_{D\boldsymbol{u}}$: condition de Dirichlet en vitesse

$\boldsymbol{u}_{\Gamma}$: champ de vitesse de la surface libre

$\boldsymbol{u}_h$: approximation discrète du champ de vitesse

$\boldsymbol{u}_i$: champ de vitesse du fluide i

$\boldsymbol{u}^{\perp}$: complément orthogonal de l'espace engendré par $\boldsymbol{u}$

UMFPACK : bibliothèque numérique de factorisation matricielle

V_h : discrétisation de $H^1(\Omega)^3$

$V(\Omega_i)$: volume du fluide i

VOF : volume of fluids

Ω : domaine de calcul

$\bar{\Omega}$: fermeture du domaine de calcul

$\mathring{\Omega}$: intérieur du domaine de calcul

Ω_h : discrétisation du domaine de calcul (maillage)

Ω_i : portion du domaine de calcul du fluide i

We : nombre de Weber

WALE : wall-adapting local eddy-viscosity

Liste des annexes

ANNEXE A ÉLÉMENTS FINIS 3-D 150

Chapitre 1

Introduction

L'étude des écoulements turbulents est un domaine qui suscite de plus en plus l'attention des chercheurs. On peut s'en convaincre en faisant une brève recherche sur le sujet dans la banque de données «Web of Science». En effet, on constate que le nombre moyen de publications par année est passé de près de 2400 entre 1990 et 1999 à près de 5500 entre 2010 et 2012. L'intérêt particulier pour ce type d'écoulement vient du fait que dans la nature, presque tous les écoulements sont turbulents. En fait, il faut faire un effort pour qu'il en soit autrement.

Afin d'illustrer l'importance pour l'industrie d'une meilleure compréhension des écoulements turbulents, considérons l'exemple de l'écoulement de l'eau dans une turbine hydraulique. En plus d'être turbulent, cet écoulement fait intervenir un phénomène physique connu sous le nom de cavitation. La cavitation est la formation sous l'effet de la pression, à température constante, de petites bulles de vapeur qui implosent aussitôt en créant des jets à haute vitesse. Les principales conséquences de ce phénomène sont le bruit, la diminution de la performance ainsi que l'usure prématurée des pièces d'équipement, soit les aubes de la turbine. La simulation numérique de bulles cavitantes dans un écoulement turbulent permettrait d'avoir une meilleure compréhension de la physique de ce phénomène et de développer des turbines mieux adaptées à leur apparition, améliorant ainsi leur performance et réduisant leur usure. La simulation d'écoulements turbulents cavitants nécessite l'utilisation de plusieurs modèles numériques :

- un modèle permettant la simulation des écoulements turbulents ;
- un modèle permettant de suivre l'évolution des bulles de vapeur, de leur création à leur implosion ;
- un modèle permettant d'approximer la tension superficielle ;
- un modèle permettant de simuler le changement de phase de l'eau en vapeur sous l'effet de la pression, à température constante.

Les travaux portant sur la simulation directe de ce type d'écoulement sont toujours relativement

peu nombreux dans la littérature. Les quelques articles qui portent sur la modélisation numérique des écoulements turbulents multifluides proposent souvent une méthodologie qui est dirigée vers un problème bien spécifique ou qui n'est pas clairement justifiée. Une méthodologie numérique générale, vérifiée et validée selon les règles de l'art, reste encore à être développée. Il s'agit clairement d'un domaine d'étude en émergence. Pour ce projet, nous nous situerons donc dans un cadre de travail plus fondamental, en amont de l'exemple décrit plus haut. L'objectif principal de cette thèse consiste à développer une méthodologie numérique générale pour la modélisation des écoulements turbulents à surface libre. Pour ce faire, nous nous sommes donnés comme tâche d'atteindre les quatre objectifs spécifiques suivants :

1. développer, vérifier et valider un modèle numérique pour la simulation des écoulements turbulents multifluides ;
2. implémenter un code d'éléments finis 3D pour la mise en œuvre du modèle numérique proposé ;
3. faire une analyse mathématique de la conservation de la masse lorsqu'un marqueur eulérien est utilisé pour la capture des surfaces libres soumises à d'importantes déformations ;
4. simplifier et préconditionner une famille de méthodes itératives pour la résolution des systèmes linéaires provenant de la discrétisation des équations modélisant les écoulements turbulents à surface libre.

Les choix méthodologiques suivants permettront de s'assurer de l'atteinte de ces objectifs :

1. Notre approche sera basée sur la combinaison de la simulation des grandes échelles («Large Eddy Simulation» (LES)) et de la capture d'interface à l'aide d'une approche eulérienne. Le tout sera discrétisé dans le cadre de la méthode des éléments finis. Le modèle proposé sera vérifié et validé en se basant sur divers résultats théoriques et expérimentaux. Le problème de la marche descendante ainsi que l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente seront étudiés en détail.
2. Puisque les travaux associés à cette thèse constituent un premier projet de recherche sur les écoulements turbulents au Département de mathématiques et de génie industriel, et que les projets passés sur l'étude des écoulements à surface libre avaient été faits en 2D, il a été nécessaire de développer un nouveau code de simulation 3D. L'implémentation d'une

méthodologie numérique nouvelle comme celle proposée dans le cadre de ce projet nécessite l'utilisation d'un code ouvert. Assez peu de codes étaient bien adaptés à ce projet et leur modification aurait nécessité des efforts importants. Donc, malgré l'investissement en temps non négligeable, il a été décidé de mettre en œuvre un code d'éléments finis 3D dédié à l'étude des écoulements turbulents à surface libre.

3. La difficulté principale présente dans la modélisation des écoulements à surface libre est que la position de l'interface est une inconnue du problème et que la physique interfaciale influence sa dynamique. La capture d'interface à l'aide d'une fonction qui sert de marqueur pour identifier chaque fluide en écoulement est une approche populaire pour modéliser les écoulements multifluides. Puisque l'interface n'est pas discrétisée explicitement, cette stratégie semble être la plus simple pour la modélisation des écoulements turbulents avec surface libre. Cependant, la propriété de mélange associée à ce type d'écoulement génère d'importantes déformations du marqueur. Différentes stratégies sont utilisées pour minimiser ces déformations non physiques, que ce soit la réinitialisation transitoire du marqueur, l'adaptation de maillage ou la reconstruction des dérivées entrant dans le calcul de la force capillaire. Une analyse mathématique rigoureuse permettra de mieux comprendre l'impact de ces différentes stratégies sur la conservation de la quantité de matière de chaque fluide en écoulement. Les conclusions de cette étude sont vérifiées et validées à l'aide de différents problèmes de bulles en ascension libre. Le modèle de la simulation des grandes échelles nous oblige aussi à nous assurer que le problème d'écoulement multifluide est cohérent dans ce contexte, ce qui est fait dans le cadre de ce travail.

4. Le modèle développé pour l'étude des écoulements turbulents à surface libre à l'aide de la simulation des grandes échelles nécessite la discrétisation d'un système de 5 équations aux dérivées partielles non linéaires sur des maillages suffisamment fins pour bien capturer la physique modélisée. Ces problèmes mènent donc à des systèmes d'équations algébriques linéaires de très grande taille (de l'ordre du million de degrés de liberté et plus). Puisque le calcul parallèle ne fait pas partie des objectifs de ce projet, il est nécessaire d'utiliser des méthodes itératives performantes. Les méthodes de Krylov classiques ne convergent pas toujours et la recherche de préconditionneurs bien adaptés aux problèmes étudiés n'est pas toujours facile. Dans le cadre de ce projet de recherche une famille de méthodes itératives adap-

tées à la structure des matrices associées à nos problèmes est simplifiée et préconditionnée. La performance d'une de ces méthodes est comparée aux différentes stratégies numériques retrouvées dans la littérature pour résoudre ces systèmes linéaires.

Cette thèse est divisée en deux grandes parties. La première est consacrée à la présentation des nombreuses composantes nécessaires à l'élaboration du modèle numérique proposé ainsi qu'à la résolution du problème discret associé, soit les équations de conservation et leur discrétisation, la méthode de capture d'interface, la modélisation de la tension superficielle, les méthodes itératives pour la résolution de la matrice augmentée, les modèles de turbulence et la modélisation des écoulements turbulents à surface libre. Le seconde partie porte sur la vérification et la validation de ces composantes. Un effort particulier a été fait afin de choisir des problèmes pour lesquels nous avons soit une solution analytique, soit des données expérimentales permettant la comparaison avec nos simulations numériques. Nous évitons ainsi de présenter des problèmes pour lesquels seuls des résultats numériques sont disponibles. Nous avons aussi évité les problèmes dont la discrétisation nécessitait l'utilisation du calcul parallèle. Nous nous sommes donc concentrés sur les problèmes de vérification et de validation qui pouvaient être étudiés de façon rigoureuse avec les ressources de calcul à notre disposition à l'heure actuelle. Reste que la stratégie proposée pourra être utilisée directement dans un code parallèle pour étudier des problèmes de plus grande envergure. Les problèmes étudiés dans cette thèse sont donc le problème de Young-Laplace, la dynamique de bulles soumises à la poussée d'Archimède, le problème de la marche descendante et l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente.

Première partie :

Modélisation des écoulements turbulents à surface libre

Chapitre 2

Dynamique des écoulements à surface libre

Les exemples d'écoulements à surface libre sont présents partout autour de nous. Il suffit de penser à une rivière qui met en jeu l'air et l'eau (écoulement liquide-gaz), à la fumée qui s'échappe d'une cheminée d'usine (écoulement gaz-gaz) ou encore à un déversement de pétrole dans l'océan (écoulement liquide-liquide). Dans ce chapitre, nous nous proposons de présenter le système d'équations aux dérivées partielles régissant ce type d'écoulement sous l'hypothèse d'immiscibilité des fluides. Nous terminerons avec une brève présentation de l'analyse dimensionnelle.

2.1 Équations de Navier-Stokes

Le système d'équations que nous allons présenter n'est valide que sous l'*hypothèse des milieux continus*. Cette hypothèse permet de faire le lien entre le monde discret des molécules et le monde du continu. En d'autres mots, elle a pour conséquence de rendre continus le champ de vitesse, la pression, la densité, la viscosité, etc. Soulignons que nous pouvons l'invoquer seulement si le *nombre de Knudsen* du fluide est petit ($Kn << 1$). C'est le cas par exemple pour des fluides tels que l'air et l'eau. Le cas $Kn >> 1$ est régit par l'équation de Boltzmann.

Rappel 2.1. Le nombre de Knudsen est défini par :

$$Kn = \frac{\overline{\lambda}}{\overline{L}}$$

où $\overline{\lambda}$ est la longueur du libre parcours moléculaire moyen et $\overline{L}$ est une longueur caractéristique représentative de l'échelle physique.

Le système de Navier-Stokes est formé de trois équations. La première est l'*équation de con-*

servation de la quantité de mouvement,

$$\frac{\partial\left(\rho\boldsymbol{u}\right)}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\rho\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u}\right)+\nabla p-\nabla\cdot\boldsymbol{\tau}=\boldsymbol{f} \tag{2.1}$$

où

$$\boldsymbol{\tau}=\mu\left(2\nabla^{S}\boldsymbol{u}-\tfrac{2}{3}\boldsymbol{\delta}\nabla\cdot\boldsymbol{u}\right)$$

et dans lequel

$$\boldsymbol{\delta}=\boldsymbol{\delta}_{ij}=\begin{cases}1 & \text{si } i=j\,;\\ 0 & \text{sinon}\end{cases}$$

est le *delta de Kronecker* et

$$\nabla^{S}\boldsymbol{u}=\frac{\nabla\boldsymbol{u}+\nabla\boldsymbol{u}^{T}}{2}$$

est le *tenseur du taux de déformation*. Elle est le résultat de l'application de la seconde loi de Newton sur un volume infinitésimal de fluide. Dans la littérature, on la rencontre souvent avec le terme de force $\boldsymbol{f}$ fixé à $\mathbf{0}$. Cette simplification est possible quand la force externe se réduit à la *force gravitationnelle*, *i.e.* $\boldsymbol{f}=\rho\boldsymbol{g}$. En effet, dans ce cas particulier il existe une fonction potentielle $p_H(\boldsymbol{x})=-\rho\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{x}$, la *pression hydrostatique*, telle que $\boldsymbol{f}=-\nabla p_H$. En combinant p_H et p (les deux pressions), on obtient le $\mathbf{0}$ du membre de droite. Bien que formellement, le terme de pression devienne $\nabla(p+p_H)$, il est d'usage de conserver la notation ∇p. La seconde équation est l'*équation de continuité*, aussi connue sous le nom d'*équation de conservation de la masse* :

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\rho\boldsymbol{u}\right)=0. \tag{2.2}$$

La troisième est l'*équation de conservation d'énergie* que nous n'énoncerons pas puisque nous ne considérerons seulement que des écoulements isothermes. Cependant, l'expression de cette équation, ainsi qu'un développement théorique complet du système d'équations de Navier-Stokes, peuvent être trouvés dans l'ouvrage de Schlichting et Gersten (2000).

2.1.1 Fluides incompressibles

L'incompressibilité d'un fluide est caractérisée par l'invariance de son volume sous l'effet de la pression. Lorsque nous sommes en présence d'un tel fluide, nous pouvons apporter certaines simplifications aux équations (2.1) et (2.2). Mathématiquement, cette propriété se traduit par l'annulation de la dérivée particulaire de la densité (Schlichting et Gersten, 2000), *i.e.*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \rho = 0. \tag{2.3}$$

Rappel 2.2. Soit $\boldsymbol{u}$ un champ de vitesse et g une fonction à valeur scalaire. On définit la dérivée particulaire de g par

$$\frac{Dg}{Dt} = \frac{\partial g}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla g.$$

Remarque 2.1. Dans la littérature, on caractérise souvent implicitement un fluide incompressible comme étant à densité constante. Cependant, il est important de noter que ce n'est qu'une condition suffisante. La condition (2.3) est plus générale et plus représentative de la réalité. Pour s'en convaincre il suffit de penser à l'océan qui est localement incompressible, mais dont la densité globale varie.

En développant l'équation de continuité (2.2) et en mettant à profit l'équation (2.3), on obtient que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = \underbrace{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \rho}_{0} + \rho \nabla \cdot \boldsymbol{u} = \rho \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0.$$

Maintenant, en exploitant le fait que la densité est une quantité strictement positive, on déduit l'équation de continuité incompressible,

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0. \tag{2.4}$$

En utilisant la même démarche, on montre que l'équation de conservation de la quantité de mouvement (2.1) devient

$$\rho \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}) + \nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{f}, \tag{2.5}$$

où

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu\nabla^S \boldsymbol{u}.$$

Soulignons qu'il est possible de pousser un peu plus loin la simplification du terme de convection $\rho\nabla\cdot(\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u})$. En effet, puisque ce dernier est équivalent à $\boldsymbol{u}(\nabla\cdot\boldsymbol{u})+(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}$, il suffit d'utiliser l'équation (2.4) pour obtenir que $\nabla\cdot(\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u}) = (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}$. Néanmoins, nous conserverons l'écriture avec le produit tensoriel, ce qui facilitera la présentation du modèle de la simulation des grandes échelles que nous verrons plus loin.

Les équations (2.4) et (2.5) forment le système d'équations de Navier-Stokes incompressibles. C'est la formulation la plus souvent rencontrée et c'est celle que nous utiliserons. Cependant, il nous faudra justifier ce choix. En effet, les écoulements à surface libre font intervenir deux fluides et rien ne garantit, a priori, que l'équation (2.3) sera respectée.

2.2 Système d'équations régissant les écoulements à surface libre

Une surface libre est une région de contact entre des milieux de différentes phases liquides, solides et gazeuses. Elle peut aussi être la région séparant deux matières de même phase, mais de propriétés différentes (Dufour, 1999). Pour nous, une surface libre sera la région de contact entre deux fluides incompressibles et immiscibles. Nous aurons donc des écoulements liquide-liquide ou liquide-gaz.

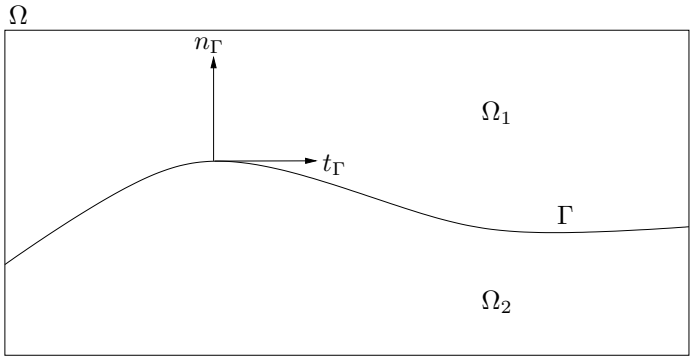


Figure 2.1 Représentation 2D d'un écoulement à surface libre.

Considérons la situation représentée à la figure 2.1. Dans cette figure, nous avons que Ω_1 contient le fluide 1, Ω_2 contient le fluide 2, Γ est l'interface entre ces fluides, $\boldsymbol{n}_\Gamma$ est la normale à l'interface et $\boldsymbol{t}_\Gamma$ est la tangente à Γ. Soit $\boldsymbol{u}_1$ la vitesse du premier fluide, $\boldsymbol{u}_2$ la vitesse du second fluide et $\boldsymbol{u}_\Gamma$ la vitesse de l'interface. Notre modèle doit respecter certaines conditions de continuité sur la vitesse et une condition d'équilibre de forces (Batchelor, 1967). Nous avons tout d'abord la *condition de continuité de la vitesse normale* :

$$\boldsymbol{u}_1 \cdot \boldsymbol{n}_\Gamma = \boldsymbol{u}_2 \cdot \boldsymbol{n}_\Gamma = \boldsymbol{u}_\Gamma \cdot \boldsymbol{n}_\Gamma, \tag{2.6}$$

suivie de la *condition de continuité de la vitesse tangentielle* :

$$\boldsymbol{u}_1 \cdot \boldsymbol{t}_\Gamma = \boldsymbol{u}_2 \cdot \boldsymbol{t}_\Gamma, \tag{2.7}$$

après quoi s'ajoute la *condition d'équilibre des forces intérieures* :

$$(\boldsymbol{\tau}_2 - \boldsymbol{\tau}_1) \cdot \boldsymbol{n}_\Gamma = \gamma\kappa\boldsymbol{n}_\Gamma, \tag{2.8}$$

où γ est le coefficient de tension superficielle et κ est la courbure moyenne de l'interface. Enfin, mentionnons la *condition d'immiscibilité* qui dans le cas stationnaire s'écrit (Agassant *et al.*, 1994)

$$\boldsymbol{u}_\Gamma \cdot \boldsymbol{n}_\Gamma = 0. \tag{2.9}$$

Dans ce qui suit, nous présentons les différents ingrédients nécessaires à la formulation d'un modèle cohérent avec toutes ces contraintes.

2.2.1 La pseudo-concentration

En quelques mots, la pseudo-concentration est une fonction marqueur définie sur tout le domaine et ayant pour rôle d'identifier chacun des fluides et leur interface. Pour le moment, nous nous contenterons de donner une idée intuitive de la pseudo-concentration. Nous reviendrons avec un développement plus formel au chapitre 5.

Rappel 2.3.

- Soit $E \subseteq \mathbb{R}^n$. Formellement, on dit que E est un domaine si c'est un ouvert connexe de $\mathbb{R}^n$. Dans notre cas, E est un domaine si son intérieur est non vide et connexe dans $\mathbb{R}^n$.
- $C^k(E, \mathbb{R})$ est l'ensemble des fonctions définies sur E à valeur dans $\mathbb{R}$ et k fois continûment différentiables sur E.
- Soit $E \subset \mathbb{R}^n$. Alors la frontière de E est définie par $\partial E = \bar{E} \setminus \mathring{E}$ où $\bar{E}$ et $\mathring{E}$ désignent respectivement la fermeture et l'intérieur de E.
- Soit E un ensemble non vide et E_i, $i = 1, 2, \ldots, n$, n sous-ensembles non vides de E. Alors les E_i forment une partition de E si $E_i \cap E_j = \emptyset$, $\forall\, i \neq j$, et $\bigcup_{i=1}^{n} E_i = E$.
- Soit $E \subseteq \mathbb{R}^n$ un ensemble non vide. La *fonction indicatrice* de E est définie par

$$\chi_E(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \boldsymbol{x} \in E\,; \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Considérons $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un domaine ainsi que Ω_1 et Ω_2 une partition de Ω. Notons $\Gamma = \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2$ la frontière entre Ω_1 et Ω_2 (voir figure 2.1). Alors la pseudo-concentration, notée F, est une approximation $C^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R})$ de la fonction indicatrice de Ω_1 ou de Ω_2 restreinte à Ω, telle que $F(\Gamma) = \left\{\frac{1}{2}\right\}$ et $F(\Omega \setminus \Gamma) = [0\,,\,1] \setminus \left\{\frac{1}{2}\right\}$.

Il est important de remarquer que selon cette définition, il existe potentiellement plus d'une pseudo-concentration. De plus, elle ne nous dit rien sur la qualité de l'approximation. Pour le moment, elle nous donne seulement le nécessaire à la poursuite de la présentation sans incohérences mathématiques et physique. Lorsque nous reviendrons sur cette fonction au chapitre 5, nous verrons que la pseudo-concentration peut être vue comme une représentante d'une classe d'équivalence de fonctions possédant des propriétés bien définies. Enfin, ajoutons que pour la suite et sans perte de généralité, nous supposerons que F est une approximation de la fonction indicatrice de Ω_2.

Remarque 2.2. Initialement, la pseudo-concentration introduite par Thompson (1986) n'était rien d'autre que la fonction indicatrice d'un des sous-ensembles Ω_i. Nous adopterons une approche différente par souci de rigueur. De plus, cette façon de faire aura comme avantage de nous permettre d'expliquer et de déduire un résultat important lors du développement du système d'équations pour

la modélisation des écoulements turbulents à surface libre.

En utilisant ce que nous savons jusqu'à présent sur la pseudo-concentration, nous pouvons écrire

$$\Gamma = \left\{ \boldsymbol{x} \in \Omega \mid F(\boldsymbol{x}) = \tfrac{1}{2} \right\} = F^{-1}(\tfrac{1}{2}), \tag{2.10}$$

une caractérisation de la surface libre. Dans le cas des écoulements transitoires, le «partitionnement» dépendra du temps. Ainsi nous aurons que $F = F(\boldsymbol{x}, t)$ et

$$\Gamma(t) = \left\{ \boldsymbol{x} \in \Omega \mid F(\boldsymbol{x}, t) = \tfrac{1}{2} \right\} = F^{-1}(\tfrac{1}{2}, t). \tag{2.11}$$

Dans ce cas, nous devrons exiger que F soit C^1 en temps en plus d'être C^2 en espace.

Arrivé à ce point, nous sommes en droit de nous demander : pourquoi exiger une telle régularité de F ? Commençons à justifier ce choix. Clairement, cette décision ne repose pas sur la fonctionnalité de marquage de F. En effet, pour y arriver, il suffirait de définir F comme suit :

$$F(\boldsymbol{x}, t) = \begin{cases} 0 & \text{si } \boldsymbol{x} \in \Omega_1 \setminus \Gamma(t)\,; \\ \frac{1}{2} & \text{si } \boldsymbol{x} \in \Gamma(t)\,; \\ 1 & \text{si } \boldsymbol{x} \in \Omega_2 \setminus \Gamma(t). \end{cases}$$

Malgré que la caractérisation de l'interface soit en grande partie la raison d'être de la pseudo-concentration, nous avons besoin qu'elle en fasse un peu plus. En effet, cette fonction doit aussi servir à définir une viscosité et une densité globale réunissant celles des 2 fluides. Soit ρ_i et μ_i, $i \in \{1, 2\}$, la densité et la viscosité de chaque fluide. Alors on définit

$$\rho(\boldsymbol{x}, t) = \rho_1(\boldsymbol{x}) + \big(\rho_2(\boldsymbol{x}) - \rho_1(\boldsymbol{x})\big) F(\boldsymbol{x}, t) \tag{2.12}$$

et

$$\mu(\boldsymbol{x}, t) = \mu_1(\boldsymbol{x}) + \big(\mu_2(\boldsymbol{x}) - \mu_1(\boldsymbol{x})\big) F(\boldsymbol{x}, t). \tag{2.13}$$

Cette écriture permet d'expliquer la nécessité d'avoir la continuité de F. En effet, il faut bien garder en tête que les équations de Navier-Stokes sont valides en milieux continus. La continuité de F est donc obligatoire. De plus, en regardant les équations de Navier-Stokes, on voit que $\rho(\boldsymbol{x}, t)$ et

$\mu(\boldsymbol{x}, t)$ doivent être des quantités dérivables. Pour assurer ceci, il faut que F le soit aussi. Ces deux arguments obligent d'avoir la continuité mais pas encore la régularité de F. Cependant, la présence de la dérivée temporelle de la densité dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement de concert avec l'hypothèse des milieux continus entraînent que F doit être continûment dérivable par rapport au temps. Avant de continuer, éliminons l'incohérence qu'il semble y avoir entre l'immiscibilité et la continuité de F. Intuitivement on peut penser que cette condition est une interdiction de mélange entre les fluides. Ce faisant, on peut voir une discontinuité dans les quantités physiques globales au niveau de l'interface. Cependant, il n'en est rien. Nous savons qu'il existe une zone de mélange d'une taille inférieure ou égale à $100\ \mu m$ (Probstein, 1989). En d'autres termes, l'immiscibilité respecte la continuité des quantités physiques. Nous terminerons cette argumentation un peu plus loin.

Enfin, l'utilisation de la pseudo-concentration nous donne des quantités physiques globales continues. En d'autres mots, elle nous permet de considérer un écoulement à deux fluides comme s'il s'agissait d'un seul fluide que nous appellerons le *pseudo-fluide*. Il en découle immédiatement que le champ de vitesse est continu sur tout le domaine. Nous avons donc que les conditions (2.6) et (2.7) sont implicitement respectées. Remarquons que pour le moment, F est une inconnue. Il nous faut donc ajouter une équation pour lever cette indétermination.

2.2.2 Équation de transport de la pseudo-concentration

L'équation de transport de la pseudo-concentration peut être déduite intuitivement de la manière suivante. Dans ce qui suit, nous adoptons la convention selon laquelle $\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}_{\Gamma(t)} < 0$ en amont de l'écoulement. Considérons Δt un intervalle de temps infinitésimal et $\boldsymbol{x}$ un point du domaine sur la surface libre. L'immiscibilité permet d'écrire que

$$\Gamma(t + \Delta t) = \Gamma(t) - \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}_{\Gamma(t)} \Delta t \tag{2.14}$$

au point $\boldsymbol{x}$. En divisant par Δt de part et d'autre de cette égalité et en passant à la limite quand $\Delta t \to 0$, on déduit que

$$\frac{\partial \Gamma(t)}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}_{\Gamma(t)} = 0 \tag{2.15}$$

en tout point de la surface libre $\Gamma(t)$. En utilisant le fait que la pseudo-concentration nous donne une caractérisation de la normale de $\Gamma(t)$ en chaque point :

$$\boldsymbol{n}_{\Gamma(t)|_{\boldsymbol{x}}} = \nabla F(\boldsymbol{x}, t)$$

ainsi que de sa vitesse ponctuelle :

$$\left.\frac{\partial \Gamma(t)}{\partial t}\right|_{\boldsymbol{x}} = \frac{\partial F(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t},$$

on peut écrire une approximation de l'équation (2.15) valide sur tout le domaine :

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla F = 0, \tag{2.16}$$

l'*équation de transport de la pseudo-concentration*. Remarquons que dans le cas permanent, cette équation est une approximation de l'équation (2.9).

Hormis le fait que l'équation de transport permette de suivre l'interface et de respecter la condition d'immiscibilité, elle a en plus une remarquable conséquence sur l'incompressibilité. Montrons que si ρ_1 et ρ_2 respectent l'équation (2.3) alors $\rho(\boldsymbol{x}, t)$ telle que définie à l'équation (2.12) fait de même. En effet, on a

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \rho &= \underbrace{\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \rho_1}_{0} + (\rho_2 - \rho_1) \underbrace{\left(\frac{\partial F}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla F \right)}_{0} \\
&\quad + F \left(\frac{\partial (\rho_2 - \rho_1)}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla (\rho_2 - \rho_1) \right) \\
&= F \left(\underbrace{\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \rho_2}_{0} - \left(\underbrace{\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \rho_1}_{0} \right) \right) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Donc dès qu'on a deux fluides incompressibles, alors le pseudo-fluide l'est lui aussi. Il ne reste qu'à traiter la condition d'équilibre des forces intérieures pour terminer la présentation du modèle.

2.2.3 La tension superficielle

La tension superficielle est la conséquence la plus visible de l'action des forces de Van Der Walls. C'est grâce à elle que certains insectes arrivent à marcher sur l'eau et c'est aussi elle qui nous permet de faire des bulles d'eau savonneuse. Ici, nous présenterons le modèle CSF (Continuum Surface Force) proposé par Brackbill *et al.* (1992). Comme il a déjà fait ses preuves (Dufour, 1999; Marchandise, 2006), il nous paraît être un bon choix. L'idée de ce modèle est de remplacer la véritable force capillaire, une force par unité de surface, par une approximation par unité de volume. L'expression de la force capillaire,

$$\boldsymbol{f_s}(\boldsymbol{x}) = \gamma\, \kappa\, \boldsymbol{n}_\Gamma\, \delta_S, \tag{2.17}$$

où γ est le *coefficient de tension superficielle*, κ est la *courbure* et $\boldsymbol{n}_\Gamma$ est la *normale à la surface libre*, est remplacée par

$$\boldsymbol{f_v}(\boldsymbol{x}) = \gamma\, \kappa(F)\, \nabla F. \tag{2.18}$$

On retrouve bien dans ces formulations la condition d'équilibre des forces (voir équation (2.8)). La courbure moyenne qui est définie par

$$\kappa = -\nabla \cdot \boldsymbol{n}_\Gamma$$

est approximée par l'équation (Weatherburn, 1927)

$$\kappa(F) = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla F}{\|\nabla F\|_2} \right). \tag{2.19}$$

Revenons sur la justification du fait que F doit appartenir à C^2 en espace. L'approximation de la courbure fait intervenir les dérivées secondes de F. Ceci implique que F doit être au moins deux fois dérivables. Il ne reste qu'à faire appel une autre fois à l'hypothèse des milieux continus pour obtenir que $\boldsymbol{f_v}$ soit continue. Les dérivées secondes de F doivent donc être continues. En somme, il faut que F soit C^2 en espace et C^1 en temps. Ceci termine la justification de cette condition.

Nous verrons au chapitre 3 que l'approximation faite de l'équation (2.17) nécessite une grande attention. En effet, une mauvaise évaluation de la courbure peut conduire à des aberrations physiques.

Maintenant, nous avons tout en main pour écrire les équations qui régissent les écoulements à surface libre du modèle que nous utiliserons.

2.2.4 Formulation du système d'équations

En rassemblant les équations de Navier-Stokes et l'équation de transport, on obtient le système d'équations aux dérivées partielles :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial(\rho \boldsymbol{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}) + \nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \rho \boldsymbol{g} + \boldsymbol{f_v}\,; \\ \dfrac{\partial F}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla F = 0\,; \\ \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = 0 \end{cases} \tag{2.20}$$

dans le cas général et

$$\begin{cases} \rho \dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}) + \nabla p - \nabla \cdot \left(2\mu \nabla^S \boldsymbol{u}\right) = \rho \boldsymbol{g} + \boldsymbol{f_v}\,; \\ \dfrac{\partial F}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla F = 0\,; \\ \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \end{cases} \tag{2.21}$$

dans le cas incompressible, où ρ et μ sont définies par les équations (2.12) et (2.13). À ceci s'ajoute les *conditions limites* :

$$\begin{cases} \boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_{D\boldsymbol{u}} & \text{sur } \partial\Omega_{D\boldsymbol{u}} \text{ et } t \geq 0\,; \\ \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{n}_{\partial\Omega} = \boldsymbol{t}_{N\boldsymbol{u}} & \text{sur } \partial\Omega_{N\boldsymbol{u}} \text{ et } t \geq 0\,; \\ F = F_{DF} & \text{sur } \partial\Omega^-_{DF} \text{ et } t \geq 0 \end{cases} \tag{2.22}$$

et les *conditions initiales* :

$$\begin{cases} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, 0) = \boldsymbol{u}_0(\boldsymbol{x}), \quad \forall\, \boldsymbol{x} \in \Omega\,; \\ F(\boldsymbol{x}, 0) = F_0(\boldsymbol{x}), \quad \forall\, \boldsymbol{x} \in \Omega, \end{cases} \tag{2.23}$$

où $\boldsymbol{n}_{\partial\Omega}$ est la normale extérieure à la frontière $\partial\Omega$ du domaine et

$$\partial\Omega^-_{DF} = \{\boldsymbol{x} \in \partial\Omega \mid \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}_{\partial\Omega} < 0\}. \tag{2.24}$$

Soulignons que les ensembles $\partial\Omega_{D\boldsymbol{u}}$ et $\partial\Omega_{N\boldsymbol{u}}$ forment une partition de $\partial\Omega$. Ils sont les domaines de définition respectifs des conditions de Dirichlet et de Neumann en vitesse.

2.3 Analyse dimensionnelle

Nous terminons ce chapitre par une brève présentation de l'analyse dimensionnelle. Puisque c'est l'outil qui a permis d'aborder et d'approfondir notre compréhension de la turbulence, il nous paraît essentiel de s'y attarder quelque peu.

L'analyse dimensionnelle prend racine dans un résultat fondamental, le *théorème de Buckingham*, qui s'énonce comme suit :

Théorème 2.1 (Buckingham)**.** *Soit un modèle physique complet $f(q_1,\, q_2,\, \ldots,\, q_n) = 0$ à n variables faisant intervenir k unités physiques indépendantes. Alors il existe $n-k$ variables adimensionnelles $\Pi_1,\, \Pi_2,\, \ldots,\, \Pi_{n-k}$, telles que l'équation précédente puisse être réécrite sous la forme $F(\Pi_1,\, \Pi_2,\, \ldots,\, \Pi_{n-k}) = 0$.*

Ce théorème a pour conséquence d'impliquer la similitude de deux systèmes physiques dans lesquels les paramètres adimensionnels sont identiques. Dans notre contexte, ce théorème affirme que nous pouvons effectuer nos simulations numériques sur les problèmes adimensionnalisés et que le tout aura bien un sens physique transposable à la réalité.

2.3.1 Adimensionnalisation du système d'équations des écoulements à surface libre

Dans cette sous-section, nous présenterons l'adimensionnalisation la plus couramment utilisée pour les systèmes d'équations (2.20) et (2.21). Puisque cette écriture n'est pas unique, il est primordial d'identifier les paramètres adimensionnels utilisés.

Tout d'abord, on commence par réécrire toutes les quantités d'intérêt comme le produit d'une valeur caractéristique, identifiée par « $\bar{}$ », et une quantité adimensionnelle, identifiée par « $\tilde{}$ ». La réécriture que nous utiliserons est présentée dans le tableau 2.1. En remplaçant dans les systèmes

Tableau 2.1 Décomposition adimensionnelle.

$\boldsymbol{u} = \bar{u}\tilde{\boldsymbol{u}}$	$L = \bar{L}\tilde{L}$	$\rho = \bar{\rho}\tilde{\rho}$
$\mu = \bar{\mu}\tilde{\mu}$	$\boldsymbol{g} = \bar{g}\tilde{\boldsymbol{g}}$	$p = \bar{\rho}\bar{u}^2\tilde{p}$
$t = \frac{\bar{L}}{\bar{u}}\tilde{t}$	$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\bar{u}}{\bar{L}}\frac{\partial}{\partial \tilde{t}}$	$\nabla = \frac{1}{\bar{L}}\tilde{\nabla}$
$\gamma = \bar{\gamma}\tilde{\gamma}$		

d'équations (2.20) et (2.21), on trouve :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\left(\tilde{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}\right)}{\partial\tilde{t}} + \tilde{\nabla}\cdot\left(\tilde{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}\otimes\tilde{\boldsymbol{u}}\right) + \tilde{\nabla}\tilde{p} - \dfrac{1}{Re}\tilde{\nabla}\cdot\tilde{\boldsymbol{\tau}} = \dfrac{1}{Fr^2}\tilde{\rho}\tilde{\boldsymbol{g}} + \dfrac{1}{We}\boldsymbol{f_v}\,; \\ \dfrac{\partial F}{\partial\tilde{t}} + \tilde{\boldsymbol{u}}\cdot\nabla F = 0\,; \\ \dfrac{\partial\tilde{\rho}}{\partial\tilde{t}} + \tilde{\nabla}\cdot\left(\tilde{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}\right) = 0 \end{cases} \tag{2.25}$$

pour la forme générale et

$$\begin{cases} \tilde{\rho}\dfrac{\partial\tilde{\boldsymbol{u}}}{\partial\tilde{t}} + \tilde{\rho}\tilde{\nabla}\cdot\left(\tilde{\boldsymbol{u}}\otimes\tilde{\boldsymbol{u}}\right) + \tilde{\nabla}\tilde{p} - \tilde{\nabla}\cdot\left(\dfrac{1}{Re}2\tilde{\mu}\tilde{\nabla}^S\tilde{\boldsymbol{u}}\right) = \dfrac{1}{Fr^2}\tilde{\rho}\tilde{\boldsymbol{g}} + \dfrac{1}{We}\boldsymbol{f_v}\,; \\ \dfrac{\partial F}{\partial\tilde{t}} + \tilde{\boldsymbol{u}}\cdot\nabla F = 0\,; \\ \tilde{\nabla}\cdot\tilde{\boldsymbol{u}} = 0 \end{cases} \tag{2.26}$$

pour la forme incompressible, où $Re = \dfrac{\bar{\rho}\bar{u}\bar{L}}{\bar{\mu}}$ est le *nombre de Reynolds*, $Fr = \dfrac{\bar{u}}{\sqrt{\bar{g}\bar{L}}}$ est le *nombre de Froude* et $We = \dfrac{\bar{\rho}\bar{u}^2\bar{L}}{\bar{\gamma}}$ est le *nombre de Weber*. Puisque dans la suite nous n'utiliserons que l'écriture adimensionnelle, nous laisserons tomber les « ˜ ». Tout au long de cette thèse, toutes les quantités seront exprimées de manière adimensionnelle sauf mention explicite du contraire.

Chapitre 3

Discrétisation des équations

Le système d'équations présenté au chapitre précédent sera discrétisé avec la méthode des éléments finis. Ceci s'effectue en trois étapes. La première est le passage à la forme faible de notre système d'équations en le plongeant dans les espaces fonctionnels appropriés. La seconde est la discrétisation des espaces fonctionnels et du domaine. Enfin, la troisième est la résolution du système discret obtenu. Dans ce qui suit, nous ferons un bref survol des points importants pour la mise en œuvre de cette méthode.

3.1 Les espaces fonctionnels

En premier lieu, nous présentons en rafale les espaces fonctionnels que nous utiliserons pour l'écriture de la forme faible du système d'équations (2.26). Soit Ω un domaine de $\mathbb{R}^3$ et $\Lambda \subseteq \partial\Omega$. On définit l'espace des fonctions de carré intégrable par

$$L^2(\Omega) = \{u : \Omega \to \mathbb{R} \mid \int_\Omega u^2 \, d\boldsymbol{x} < \infty\}$$

muni du produit scalaire

$$(u, v)_{L^2(\Omega)} = \int_\Omega uv \, d\boldsymbol{x}.$$

Les versions vectorielle et tensorielle de cet espace s'écrivent respectivement

$$L^2(\Omega)^3 = \{\boldsymbol{u} : \Omega \to \mathbb{R}^3 \mid \int_\Omega \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} \, d\boldsymbol{x} < \infty\}$$

et

$$L^2(\Omega)^{(3\times3)} = \{\boldsymbol{\mu} : \Omega \to \mathbb{R}^{(3\times3)} \mid \int_\Omega \boldsymbol{\mu} : \boldsymbol{\mu} \, d\boldsymbol{x} < \infty\}$$

où « $\cdot$ » est le produit scalaire de $\mathbb{R}^3$ et « $:$ » est la double contraction de $\mathbb{R}^{3\times3}$. Leurs produits scalaires respectifs sont

$$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})_{L^2(\Omega)} = \int_\Omega \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{x}$$

et

$$(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\nu})_{L^2(\Omega)} = \int_\Omega \boldsymbol{\mu} : \boldsymbol{\nu} \, d\boldsymbol{x}.$$

À l'aide de $L^2(\Omega)$, on définit l'espace de Sobolev

$$H^1(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega) \mid \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, 2, \ldots, n\}$$

ayant pour produit scalaire

$$(u, v)_{1,\Omega} = (u, v)_{L^2(\Omega)} + \sum_{i=1}^{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x_i}, \frac{\partial v}{\partial x_i} \right)_{L^2(\Omega)}.$$

Les espaces $H^1(\Omega)^3$ et $H^1(\Omega)^{(3\times3)}$ sont définis de la même manière en utilisant $L^2(\Omega)^3$ et $L^2(\Omega)^{(3\times3)}$. Nous aurons aussi besoin de

$$H^{1/2}(\Lambda)^3 = \{\boldsymbol{u}|_\Lambda \mid \boldsymbol{u} \in H^1(\Omega)^3\},$$

de $H^{-1/2}(\Lambda)^3$ sont dual et de

$$H^1_{D\boldsymbol{u}}(\Omega)^3 = \{\boldsymbol{u} \in H^1(\Omega)^3 \mid \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}, \forall \, \boldsymbol{x} \in \partial\Omega_{D\boldsymbol{u}}\}.$$

Rappel 3.1. Soit E un espace fonctionnel. L'espace dual de E est l'espace fonctionnel constitué de toutes les formes linéaires continues définies sur E.

Remarque 3.1. Il est courant de voir l'espace de Sobolev $H^0(\Omega)$ représenter l'espace $L^2(\Omega)$. Il en est de même pour son produit scalaire qui est défini par

$$(u, v)_{0,\Omega} = (u, v)_{L^2(\Omega)}.$$

Les espaces fonctionnels présentés jusqu'ici sont suffisants pour traiter l'équation de conservation de la quantité de mouvement et l'équation de continuité. En ce qui concerne l'équation de transport, il nous faut introduire quelques espaces supplémentaires.

Soit $\boldsymbol{u} \in L^2(\Omega)^3$, on définit

$$L^2_{\boldsymbol{u}}(\Lambda) = \{\varphi : \Lambda \to \mathbb{R} \mid \int_\Lambda |\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}_\Lambda| \varphi^2 \, d\boldsymbol{x} < \infty\}$$

muni de la relation de dualité

$$\langle \varphi, \psi \rangle_{L^2_{\boldsymbol{u}}(\Lambda)} = \int_\Lambda |\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}_\Lambda| \varphi\psi \, d\boldsymbol{x}.$$

Finalement, avec cet espace, on définit

$$\Phi(\Omega) = \{\varphi \in L^2(\Omega) \mid \boldsymbol{u} \cdot \nabla\varphi \in L^2(\Omega) \text{ et } \varphi \mid_{\partial\Omega^-_{DF}} \in L^2_{\boldsymbol{u}}(\partial\Omega^-_{DF})\}$$

et

$$\Phi_{\partial\Omega^-_{DF}}(\Omega) = \{\varphi \in \Phi(\Omega) \mid \varphi(\boldsymbol{x}) = 0, \forall \, \boldsymbol{x} \in \partial\Omega^-_{DF}\}.$$

Remarque 3.2. L'espace $\Phi_{\partial\Omega^-_{DF}}(\Omega)$ n'est pas rencontré en général dans la littérature. À notre connaissance, ce dernier n'apparaît que dans Raviart (1981). Le plus souvent, le passage de la forme forte de l'équation de transport à sa forme faible n'est pas présenté ou bien l'espace fonctionnel nécessaire à cette étape n'est pas clairement identifié.

3.2 Passage à la forme faible

La forme faible du système d'équations (2.26) s'obtient en multipliant chaque équation par des fonctions tests appartenant à un espace fonctionnel adéquat et en intégrant sur tout le domaine. L'idée derrière cette opération est de chercher de l'information sur la solution de notre système en observant son action sur des espaces fonctionnels bien choisis. Pour ce faire, nous prenons les fonctions tests dans $L^2(\Omega)$ pour l'équation de continuité, dans $H^1_{D\boldsymbol{u}}(\Omega)^3$ pour l'équation de la conservation de la quantité de mouvement et dans $\Phi_{\partial\Omega^-_{DF}}(\Omega)$ pour l'équation de transport . De

plus, nous supposerons que $\boldsymbol{f} \in L^2(\Omega)^3$, $\boldsymbol{u}_{D\boldsymbol{u}} \in H^{1/2}(\partial\Omega_{D\boldsymbol{u}})^3$ et $\boldsymbol{t}_{N\boldsymbol{u}} \in H^{-1/2}(\partial\Omega_{N\boldsymbol{u}})^3$. Suivant ces choix, nous obtenons que la forme faible de l'équation de la continuité est

$$(\nabla \cdot \boldsymbol{u},\, q)_{0,\Omega} = 0,\, \forall\, q \in L^2(\Omega). \tag{3.1}$$

Pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement nous avons en premier lieu,

$$\left(\rho\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t},\, \boldsymbol{v}\right)_{0,\Omega} + \left(\rho\nabla \cdot (\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u})\,,\, \boldsymbol{v}\right)_{0,\Omega} + (\nabla p,\, \boldsymbol{v})_{0,\Omega} - \left(\nabla \cdot \left(\frac{1}{Re} 2\mu\nabla^S \boldsymbol{u}\right),\, \boldsymbol{v}\right)_{0,\Omega}$$

$$= (\boldsymbol{f},\, \boldsymbol{v})_{0,\Omega}\,,\, \forall\, \boldsymbol{v} \in H^1_{D\boldsymbol{u}}(\Omega)^3. \tag{3.2}$$

En appliquant le théorème de la divergence aux deux derniers termes du membre de gauche, on obtient

$$\left(\rho\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t},\, \boldsymbol{v}\right)_{0,\Omega} + \left(\rho\nabla \cdot (\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u})\,,\, \boldsymbol{v}\right)_{0,\Omega} - (p,\, \nabla \cdot \boldsymbol{v})_{0,\Omega} + \left(\frac{1}{Re} 2\mu\nabla^S \boldsymbol{u},\, \nabla^S \boldsymbol{v}\right)_{0,\Omega}$$

$$= (\boldsymbol{f},\, \boldsymbol{v})_{0,\Omega} + \langle \boldsymbol{t}_{N\boldsymbol{u}},\, \boldsymbol{v}\rangle_{H^{-1/2},\, H^{1/2}},\, \forall\, \boldsymbol{v} \in H^1_{D\boldsymbol{u}}(\Omega)^3 \tag{3.3}$$

pour forme faible. Enfin, la forme faible de l'équation de transport est

$$\left(\frac{\partial F}{\partial t},\, \varphi\right)_{0,\Omega} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla F,\, \varphi)_{0,\Omega} = 0,\, \forall\, \varphi \in \Phi_{\partial\Omega^-_{DF}}(\Omega). \tag{3.4}$$

Le problème consiste maintenant à trouver $(\boldsymbol{u},\, p,\, F) \in H^1(\Omega)^3 \times L^2(\Omega) \times \Phi(\Omega)$ tel que les équations (3.1), (3.3) et (3.4) soient satisfaites. Arrivé à ce point, il est important de discuter de l'existence et de l'unicité d'une solution à ce problème.

Dans le cas où la forme faible se réduit à trouver $\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{E}$ tel que

$$\mathcal{A}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \mathcal{G}(\boldsymbol{v}),\, \forall \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{E}, \tag{3.5}$$

où $\boldsymbol{E}$ est un espace de Hilbert, $\mathcal{A}$ est une forme bilinéaire et $\mathcal{G}$ est une forme linéaire. Le théorème de Lax-Milgram garantit l'existence et l'unicité d'une solution sous certaines hypothèses sur $\mathcal{A}$ et $\mathcal{G}$. Lorsqu'on complexifie le tout en un problème mixte, de type point de selle, on cherche

$(\boldsymbol{u}, p) \in \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{F}$ tel que :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) + \mathcal{B}(\boldsymbol{v}, p) &= \mathcal{G}(\boldsymbol{v}), \quad \forall \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{E}\,; \\ \mathcal{B}(\boldsymbol{u}, q) &= \mathcal{H}(q), \quad \forall q \in \boldsymbol{F}, \end{aligned} \tag{3.6}$$

où $\boldsymbol{E}$ et $\boldsymbol{F}$ sont des espaces de Hilbert, $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$ sont des formes bilinéaires et $\mathcal{G}$ et $\mathcal{H}$ sont des formes linéaires. Le système formé des équations (3.1) et (3.3) est de cette forme. Les hypothèses du théorème de Lax-Milgram deviennent alors insuffisantes et il faut ajouter des conditions de continuité et la condition *inf-sup* sur $\mathcal{B}$ pour s'assurer de l'existence d'une solution unique. Cette condition est aussi connue sous le nom de condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi (LBB) (Brezzi, 1974). Pour les problèmes plus complexes, comme celui qui fait l'objet de cette thèse, il n'existe à notre connaissance aucun résultat permettant de garantir l'existence d'une solution unique. Toutefois, il est d'usage de résoudre la forme faible en supposant implicitement que les hypothèses du théorème de Lax-Milgram de concert avec la condition inf-sup sont suffisantes. Pour plus de détails sur le théorème de Lax-Milgram et sur la condition inf-sup, nous renvoyons le lecteur à Brenner et Scott (1996).

3.3 Discrétisation de la forme faible

La discrétisation des équations (3.1), (3.3) et (3.4) est effectuée par l'intermédiaire d'une approximation discrète de chacun des espaces fonctionnels utilisés. Cette façon de procéder est la *méthode de Galerkin*. Tout d'abord, on commence par discrétiser (mailler) le domaine Ω. Pour nous, une discrétisation du domaine Ω, notée Ω_h, sera une tétraédrisation de ce dernier. L'indice h représente la taille du plus grand tétraèdre présent dans le maillage. Nous définirons la taille d'un tétraèdre T par

$$\text{taille}(T) = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2} \tag{3.7}$$

où Δx, Δy et Δz sont les dimensions de la plus petite boîte contenant T. Ensuite, sur chaque tétraèdre $T \in \Omega_h$, on définit :

1. $\mathcal{P}$, un espace vectoriel de fonctions (les *fonctions d'interpolation*) ;
2. $\mathcal{N}$, une base du dual de $\mathcal{P}$ (les *variables nodales*).

Chaque triplet $(T, \mathcal{P}, \mathcal{N})$ ainsi constitué est appelé un élément fini au sens de la définition de Ciarlet (1978). L'élément fini tétraédrique, le plus souvent rencontré en 3D, possède les spécifications suivantes :

1. $\mathcal{P}_k = \{\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_n\}$, où les ϕ_n sont les polynômes de Lagrange de degré k ;
2. $\mathcal{N}_k = \{N_1, N_2, \ldots, N_n\}$, où les N_i sont tels que $N_i(\phi_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j; \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$

Remarque 3.3. Bien que techniquement, N_i soit une fonctionnelle d'évaluation au i-ème point d'interpolation, il est d'usage que cette dernière soit identifiée au i-ème point d'interpolation lui-même. Dans ce cas, $N_i(\phi_j)$ s'écrit $\phi_j(N_i)$. L'annexe A contient la liste des éléments finis tétraédriques couramment utilisés.

Cette procédure nous permet de construire les espaces fonctionnels discrets $V_h \subset H^1(\Omega)^3$, $Q_h \subset L^2(\Omega)$ et $\Phi_h \subset \Phi(\Omega)$. Notons que le choix des espaces discrets V_h et Q_h n'est pas arbitraire. En effet, afin de s'assurer de l'existence et de l'unicité de la solution du problème discret il faut que la combinaison d'éléments choisis respecte la condition *inf-sup* discrète. De plus, ceci garantit la convergence de la solution discrète vers la solution continue quand $h \to 0$. De là, on définit une approximation discrète de la variable dépendante sur chaque tetraèdre du maillage Ω_h par :

$$u(\boldsymbol{x}, t) \approx u_h(\boldsymbol{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_u} u(N_i^u, t)\phi_i^u(\boldsymbol{x})\,; \tag{3.8}$$

$$v(\boldsymbol{x}, t) \approx v_h(\boldsymbol{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_v} v(N_i^v, t)\phi_i^v(\boldsymbol{x})\,; \tag{3.9}$$

$$w(\boldsymbol{x}, t) \approx w_h(\boldsymbol{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_w} w(N_i^w, t)\phi_i^w(\boldsymbol{x})\,; \tag{3.10}$$

$$p(\boldsymbol{x}, t) \approx p_h(\boldsymbol{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_p} p(N_i^p, t)\phi_i^p(\boldsymbol{x})\,; \tag{3.11}$$

$$F(\boldsymbol{x}, t) \approx F_h(\boldsymbol{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_F} F(N_i^F, t)\phi_i^F(\boldsymbol{x}), \tag{3.12}$$

où $\boldsymbol{u} = (u\ v\ w)^T$ et $\boldsymbol{u}_h = (u_h\ v_h\ w_h)^T$. La dernière étape concerne la discrétisation en temps. Pour ce faire nous opterons pour une formule aux différences implicite. Ceci nous donne

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}_h(\boldsymbol{x}, t_k)}{\partial t} \approx \frac{\alpha \boldsymbol{u}_h(\boldsymbol{x}, t_k) - (\alpha+\beta)\boldsymbol{u}_h(\boldsymbol{x}, t_{k-1}) + \beta \boldsymbol{u}_h(\boldsymbol{x}, t_{k-2})}{\Delta t} \tag{3.13}$$

et

$$\frac{\partial F_h(\boldsymbol{x}, t_k)}{\partial t} \approx \frac{\alpha F_h(\boldsymbol{x}, t_k) - (\alpha+\beta)F_h(\boldsymbol{x}, t_{k-1}) + \beta F_h(\boldsymbol{x}, t_{k-2})}{\Delta t}, \tag{3.14}$$

où Δt est le pas de temps et $t_k = t_0 + k\Delta t$, $k = 1,\ 2,\ \ldots$ Les choix $\alpha = 1$, $\beta = 0$ et $\alpha = \frac{3}{2}$, $\beta = \frac{1}{2}$ donnent respectivement le schéma d'Euler implicite et le schéma de Gear.

Remarque 3.4. La discrétisation en temps à l'aide d'une formule aux différences explicite est tout aussi valable et largement répandue. Cependant, elle est plus contraignante au niveau du choix du pas de temps pour en assurer la stabilité. C'est pour cette raison que nous avons porté notre choix sur les deux schémas implicites présentés qui sont inconditionnellement stables.

En utilisant ces approximations dans les équations (3.1), (3.3) et (3.4), on obtient l'équation matricielle non linéaire :

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{M_u}(\rho) + \boldsymbol{C_u}(\rho,\vec{\boldsymbol{U}}) + \boldsymbol{A}(\mu) & 0 & \boldsymbol{B}^T \\ 0 & \boldsymbol{C_F}(\vec{\boldsymbol{U}}) + \boldsymbol{M_F} & 0 \\ \boldsymbol{B} & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\boldsymbol{U}} \\ \vec{\boldsymbol{F}} \\ \vec{\boldsymbol{P}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{\boldsymbol{G}} \\ \vec{\boldsymbol{0}} \\ \vec{\boldsymbol{0}} \end{pmatrix}. \tag{3.15}$$

Nous retrouvons la matrice de masse en vitesse $\boldsymbol{M_u}(\rho)$, la matrice de convection $\boldsymbol{C_u}(\rho,\vec{\boldsymbol{U}})$, la matrice de diffusion visqueuse $\boldsymbol{A}(\mu)$, la matrice de divergence $\boldsymbol{B}$, la matrice de transport de la pseudo-concentration $\boldsymbol{C_F}(\vec{\boldsymbol{U}})$ et enfin la matrice de masse de la pseudo-concentration $\boldsymbol{M_F}$. Les vecteurs $\vec{\boldsymbol{U}}$, $\vec{\boldsymbol{F}}$ et $\vec{\boldsymbol{P}}$ contiennent respectivement les inconnues en vitesse, en pseudo-concentration et en pression. Le vecteur $\vec{\boldsymbol{G}}$ contient les quantités connues. Afin de résoudre l'équation (3.15) nous aurons recours à une méthode de résolution adaptée aux équations non linéaires *e.g.* une méthode de points fixes ou la méthode de Newton. Ce faisant, l'équation matricielle (3.15) deviendra un

système d'équations linéaires de la forme :

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{U} \\ \vec{P} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{G} \\ \vec{H} \end{pmatrix} \tag{3.16}$$

où A est une matrice qui sera toujours considérée comme n'étant pas symétrique, $\vec{U}$ est un vecteur contenant les inconnues en vitesse et en pseudo-concentration, $\vec{P}$ est un vecteur contenant les inconnues en pression, $\vec{G}$ est un vecteur contenant des quantités connues liées à l'équation de la conservation de la quantité de mouvement et à l'équation de transport et $\vec{H}$ est un vecteur contenant des quantités connues liées à l'équation de continuité.

Remarque 3.5. En pratique, lorsqu'on utilise la méthode de Newton ou celle du point fixe, on adopte une formulation dite en correction. Cette formulation donne un système d'équations de la forme :

$$\begin{pmatrix} A^n & B^{nT} \\ B^n & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\vec{U}^n \\ d\vec{P}^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{R}_1^n \\ \vec{R}_2^n \end{pmatrix}$$

où $\vec{R}_1^n = \vec{G}^n - A^n\vec{U}^n - B^{nT}\vec{P}^n$ et $\vec{R}_2^n = \vec{H}^n - B^n\vec{U}^n$ sont les résidus. L'objectif de cette formulation est de trouver les corrections $d\vec{U}^n$ et $d\vec{P}^n$ nous permettant de nous approcher itérativement de la solution. Bien que ce soit là la forme exacte des systèmes d'équations que nous aurons à résoudre, nous conserverons la notation de l'équation (3.16) sauf si la notation en correction s'avère nécessaire, l'objectif de ceci étant de simplifier l'écriture. Il faut donc voir l'équation (3.16) comme étant une représentation structurelle du système d'équations linéaires résolu.

3.4 Stabilisation des oscillations numériques

La principale faiblesse liée à l'utilisation de la méthode de Galerkin pour résoudre notre système d'équations (3.1), (3.3) et (3.4) est la présence d'oscillations dans la solution discrète des équations hyperboliques. Or, l'équation de transport est précisément de ce type. Pour contrer ce comportement indésirable, nous ferons appel à la méthode de stabilisation SUPG (Streamline Upwind / Petrov-Galerkin) introduite par Brooks et Hughes (1982). L'idée de cette méthode est d'u-

tiliser des fonctions tests judicieusement modifiées,

$$\bar{\phi}_i^p = \phi_i^p + \tau \boldsymbol{u}_h \cdot \nabla \phi_i^p, \tag{3.17}$$

où τ est un paramètre de stabilisation à déterminer. Lorsque les fonctions tests sont de degré supérieur à 1, deux autres possibilités de modifications s'offrent à nous. La formulation GLS (Galerkin/Least-Square) de Hughes *et al*. (1989) et celle de Douglas et Wang (1989) qui ne diffèrent l'une de l'autre que par un signe. Notons que ces deux formulations coïncident avec la méthode SUPG si l'interpolant est de faible degré (≤ 1). Puisque nous utiliserons principalement l'élément P1 (voir Annexe A) pour discrétiser l'équation de transport de la pseudo-concentration, nous n'utiliserons que la méthode SUPG pour discrétiser l'équation (3.4).

Une application pratique de ces méthodes de stabilisation est de permettre à certaines combinaisons d'éléments vitesse-pression d'être stables sans satisfaire la condition LBB (Hughes *et al*., 1986). C'est le cas, par exemple, de la combinaison P1/P1. Notons que dans ce cas, la méthode SUPG est utilisée de concert avec une méthode de stabilisation en pression notée PSPG (Pressure Stabilizing / Petrov-Galerkin) (Hughes *et al*., 1986). Dans ces cas, les fonctions tests en vitesse sont :

$$\bar{\phi}_i^u = \phi_i^u + \tau \left(\boldsymbol{u}_h \cdot \nabla \phi_i^u - \frac{\partial \phi_j^p}{\partial x} \right) ; \tag{3.18}$$

$$\bar{\phi}_i^v = \phi_i^v + \tau \left(\boldsymbol{u}_h \cdot \nabla \phi_i^v - \frac{\partial \phi_j^p}{\partial y} \right) ; \tag{3.19}$$

et

$$\bar{\phi}_i^w = \phi_i^w + \tau \left(\boldsymbol{u}_h \cdot \nabla \phi_i^w - \frac{\partial \phi_j^p}{\partial z} \right) . \tag{3.20}$$

Le choix du paramètre τ n'est pas arbitraire et doit être calculé élément par élément (Franca *et al*., 1992a; Franca et Frey, 1992b; Fries et Matties, 2004).

Ajoutons quelques mots sur la structure de l'équation matricielle (3.16). Lorsqu'on utilise la méthode SUPG pour l'équation de transport, la structure de cette équation reste inchangée. Toutefois, quand la méthode SUPG/PSPG est utilisée pour stabiliser une combinaison d'éléments en

vitesse-pression du type Pn/Pn, le système matriciel prend la forme :

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{U} \\ \vec{P} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{G} \\ \vec{H} \end{pmatrix}. \tag{3.21}$$

En terminant, soulignons que les systèmes matriciels que nous aurons à résoudre auront soit la forme de l'équation (3.16) ou celle de l'équation (3.21) et seront généralement de grande taille. Il convient donc de présenter les différentes stratégies qui sont à notre disposition pour résoudre ces systèmes linéaires.

Chapitre 4

Résolution du système discret

Dans ce chapitre, nous faisons un bref survol des différentes méthodes et stratégies permettant de résoudre les équations matricielles (3.16) et (3.21). Afin d'alléger la notation, nous écrirons AB^TB pour référer à la matrice de l'équation (3.16) et AB^TBC pour référer à celle de l'équation (3.21).

4.1 Méthodes directes

L'approche directe pour la résolution des équations (3.16) et (3.21) consiste à utiliser une factorisation matricielle LU. Il existe plusieurs bibliothèques numériques pouvant s'acquitter de cette tâche. Les plus connues sont SuperLU de Xiaoye (2005), UMFPACK de Davis (2004) et Pardiso de Schenk et Gärtner (2004). Selon notre expérience, les deux premières sont plus ou moins robustes. Il arrive régulièrement qu'elles ne donnent pas de solution. En revanche, Pardiso est robuste et plus performante. Notons que toutes ces méthodes sont très gourmandes en mémoire et c'est là leur principale faiblesse. Dans notre cas, les matrices AB^TB et AB^TBC ne sont pas symétriques. Toutefois, si le cas se présente, on peut faire une économie en mémoire en utilisant une factorisation du type LDL^T. Cette factorisation est disponible dans Pardiso, mais la routine le plus populaire exécutant cette tâche est MA57 de la bibliothèque HSL (Harwell Subroutine Library) (Duff, 2004). Néanmoins, le problème de stockage demeure car en général, les problèmes considérés produisent des matrices de grande taille (de l'ordre de 10^5 à 10^6 degrés de liberté). Il devient donc important de trouver des stratégies permettant de réduire les exigences en mémoire tout en conservant une bonne rapidité de résolution.

4.2 La condensation statique

La condensation statique est une stratégie permettant de réduire la taille de la matrice à factoriser. Elle est applicable lorqu'on utilise les combinaisons d'éléments P1-bulle/P1 (MINI) ou P2$^+$/P1^D (Crouzeix-Raviart) ou P1$^+$/P0 (voir Annexe A) pour la discrétisation des équations de Navier-Stokes en vitesse-pression. Elle consiste à éliminer les degrés de liberté (DDL) en vitesse et en pression situés à l'intérieur des éléments, qu'on appelle les «bulles». La justification de cette opération réside dans le fait que les inconnues liées aux bulles ne sont partagées avec aucun autre élément. Il est par conséquent possible de résoudre le problème localement pour ces inconnues. Ajoutons que cette stratégie ne s'applique pas directement à la matrice AB^TB, mais plutôt au niveau de l'assemblage. Il en résulte une réduction importante de la taille de la matrice du système global. Dans cette section, nous ne présenterons que la condensation statique pour l'élément MINI et l'élément Crouzeix-Raviart. Le cas P1$^+$/P0 ne présente aucune difficulté supplémentaire et peut être déduit par mimétisme.

4.2.1 Condensation statique pour l'élément MINI

La formulation en correction de l'équation (3.16) pour l'élément MINI s'écrit :

$$\begin{cases} A_{11}\, d\vec{U}_1 + A_{12}\, d\vec{U}_2 + B_1^T\, d\vec{P}_1 = \vec{R}_1\,; \\ A_{21}\, d\vec{U}_1 + A_{22}\, d\vec{U}_2 + B_2^T\, d\vec{P}_2 = \vec{R}_2\,; \\ \qquad\qquad B_1\, d\vec{U}_1 + B_2\, d\vec{U}_2 = \vec{R}_3, \end{cases} \tag{4.1}$$

où $d\vec{U}_1$ est la correction sur les DDL en vitesse sans la bulle, $d\vec{U}_2$ est la correction des DDL en vitesse associés aux bulles, $d\vec{P}_i$ sont les corrections sur les DDL en pression et $\vec{R}_i$ représente chaque résidu. Notons que le système global et le système local ont la même structure et dans ce qui suit, nous ne ferons aucune distinction de notation entre eux.

En utilisant la seconde équation du système (4.1), on déduit que

$$d\vec{U}_2 = A_{22}^{-1}\left(\vec{R}_2 - A_{21}\, d\vec{U}_1 - B_1^T\, d\vec{P}_1\right). \tag{4.2}$$

En utilisant cette équation dans le système (4.1), on obtient le système réduit :

$$\begin{cases} \left(A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21}\right)\ d\vec{U}_1 + \left(B_1^T - A_{12}A_{22}^{-1}B_2^T\right)\ d\vec{P}_1 = \vec{R}_1 - A_{12}A_{22}^{-1}\ \vec{R}_2; \\ \left(B_1 - B_2A_{22}^{-1}A_{21}\right)\ d\vec{U}_1 - \left(B_2A_{22}^{-1}B_2^T\right)\ d\vec{P}_2 = \vec{R}_3 - B_2A_{22}^{-1}\ \vec{R}_2. \end{cases} \tag{4.3}$$

En effectuant cette opération pour chaque élément et en assemblant le tout, on obtient un système global de la forme AB^TBC. La taille de la matrice de ce nouveau système est réduite de 2 fois le nombre d'éléments en 2D et de 3 fois le nombre d'éléments en 3D. De là, on résout pour obtenir $d\vec{U}_1$, $d\vec{P}_1$ et $d\vec{P}_2$. Enfin, à l'aide de l'équation (4.2), on récupère $d\vec{U}_2$ élément par élément lors de l'assemblage. Techniquement, pour effectuer cette opération, nous devons garder une copie de A_{22}^{-1}, A_{21}, ${B_1}^T$ et de $\vec{R}_2$ en mémoire pour chaque élément. Toutefois, puisque nous utilisons une formulation en correction, nous pouvons utiliser l'astuce suivante. Puisque l'équation (4.2) apparaît dans une boucle de Newton ou de point fixe sous la forme

$$d\vec{U}_2^n = A_{22}^n{-}1\left(\vec{R}_2^n - A_{21}^n\ d\vec{U}_1^n - B_1^{nT}\ d\vec{P}_1^n\right), \tag{4.4}$$

il s'agit d'utiliser la solution de l'itération précédente plutôt que celle de l'itération courante pour récupérer la correction sur les bulles lors de l'assemblage. En somme, on remplace l'équation (4.4) par

$$d\vec{U}_2^n = A_{22}^n{-}1\left(\vec{R}_2^n - A_{21}^n\ d\vec{U}_1^{n-1} - B_1^{nT}\ d\vec{P}_1^{n-1}\right). \tag{4.5}$$

Ceci permet d'éliminer le surcoût en mémoire. Cependant, on peut se questionner sur la validité de cette astuce. En d'autres mots, est-il raisonnable de supposer que si la boucle de Newton ou de point fixe converge avec le système condensé, alors le tout converge vers la solution du système non condensé ? Afin de s'en convaincre, il suffit de remarquer que si on tient compte de la norme des corrections sur les bulles dans le calcul de la norme de la correction globale et que la norme du résidu global inclut la contribution des bulles, alors si la boucle de Newton ou de point fixe converge, on a que la norme de la correction et celle du résidu tendent toutes deux vers $\vec{0}$. Ceci revient à dire que le problème avec condensation statique converge vers la même solution que le problème sans condensation statique.

4.2.2 Condensation statique pour l'élément Crouzeix-Raviart

La condensation statique de l'élément Crouzeix-Raviart demande un peu plus de travail que pour l'élément MINI. En effet, celle-ci s'effectue en deux étapes. La première condense la bulle en vitesse et la seconde condense les trois bulles en pression. Pour des fins de clarté, nous allons séparer les étapes sur le membre de gauche et de droite. Sous forme matricielle, la formulation résiduelle prend la forme

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & B_{11}^T & B_{12}^T \\ A_{21} & A_{22} & B_{21}^T & B_{22}^T \\ B_{11} & B_{21} & 0 & 0 \\ B_{12} & B_{22} & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\vec{U}_1 \\ d\vec{U}_2 \\ d\vec{P}_1 \\ d\vec{P}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d\vec{G}_1 \\ d\vec{G}_2 \\ d\vec{H}_1 \\ d\vec{H}_2 \end{pmatrix}. \tag{4.6}$$

La première étape consiste à multiplier la dernière ligne de la matrice par l'inverse de la sous-matrice B_{22}. Cette opération nous donne à gauche,

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & B_{11}^T & B_{12}^T \\ A_{21} & A_{22} & B_{21}^T & B_{22}^T \\ B_{11} & B_{21} & 0 & 0 \\ B_{22}^{-1}B_{12} & I & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.7}$$

et à droite,

$$\begin{pmatrix} d\vec{G}_1 \\ d\vec{G}_2 \\ d\vec{H}_1 \\ B_{22}^{-1}\, d\vec{H}_2 \end{pmatrix}. \tag{4.8}$$

Ensuite, à l'aide de la sous-matrice identité obtenue, on effectue toutes les opérations matricielles nécessaires afin d'éliminer les autres sous-matrices de la seconde colonne. Cette gymnastique n'est

rien d'autre que la condensation des contributions de la bulle en vitesse. Ceci étant fait, on a

$$\begin{pmatrix} A_{11} - A_{12}B_{22}^{-1}B_{12} & 0 & B_{11}^T & B_{12}^T \\ A_{21} - A_{22}B_{22}^{-1}B_{12} & 0 & B_{21}^T & B_{22}^T \\ B_{11} - B_{21}B_{22}^{-1}B_{12} & 0 & 0 & 0 \\ B_{22}^{-1}B_{12} & I & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.9}$$

à gauche et

$$\begin{pmatrix} d\vec{G}_1 - A_{12}B_{22}^{-1}\, d\vec{H}_2 \\ d\vec{G}_2 - A_{22}B_{22}^{-1}\, d\vec{H}_2 \\ d\vec{H}_1 - B_{21}B_{22}^{-1}\, d\vec{H}_2 \\ B_{22}^{-1}\, d\vec{H}_2 \end{pmatrix} \tag{4.10}$$

à droite. Enfin, on fait une manipulation similaire avec la seconde ligne qu'on multiplie par l'inverse de B_{22}^T. Un petit rappel : l'inverse de cette matrice n'est rien d'autre que la transposée de l'inverse de B_{22}, calculée précédemment. Ce travail résulte en la condensation des contributions des bulles en pression. Le tout terminé, on trouve la matrice condensée

$$\begin{pmatrix} A_{11} - A_{12}B_{22}^{-1}B_{12} - B_{12}^T B_{22}^{-T}\left(A_{21} - A_{22}B_{22}^{-1}B_{12}\right) & B_{11}^T - B_{12}^T B_{22}^{-T} B_{21}^T \\ B_{11} - B_{21}B_{22}^{-1}B_{12} & 0 \end{pmatrix} \tag{4.11}$$

et le membre de droite associé

$$\begin{pmatrix} d\vec{G}_1 - A_{12}B_{22}^{-1}\, d\vec{H}_2 - B_{12}^T B_{22}^{-T}\left(\, d\vec{G}_2 - A_{22}B_{22}^{-1}\, d\vec{H}_2\right) \\ d\vec{H}_1 - B_{21}B_{22}^{-1}\, d\vec{H}_2 \end{pmatrix} \tag{4.12}$$

qui permettront d'obtenir $d\vec{U}_1$ et $d\vec{P}_1$. À ceci s'ajoute les deux équations pour la récupération des contributions des bulles :

$$\begin{cases} d\vec{U}_2 = B_{22}^{-1}\left(\, d\vec{H}_2 - B_{22}^{-1}B_{12}\, d\vec{U}_1\right) ; \\ d\vec{P}_2 = B_{22}^{-T}\left(\, d\vec{G}_2 - A_{22}B_{22}^{-1}\, d\vec{H}_2 - \left(A_{21} - A_{22}B_{22}^{-1}B_{12}\right)\, d\vec{U}_1 - B_{21}^T\, d\vec{P}_1\right). \end{cases} \tag{4.13}$$

À l'instar de la condensation pour l'élément MINI, la récupération des contributions des bulles impose le stockage d'une copie de ces équations pour chaque élément. Cependant, la même astuce que dans le cas de l'élément MINI peut être utilisée. On peut donc remplacer (4.13) par :

$$\begin{cases} d\vec{U}_2^n = B_{22}^{n\,-1}\left(d\vec{H}_2^{n-1} - B_{22}^{n\,-1} B_{12}^n \, d\vec{U}_1^{n-1}\right) ; \\ d\vec{P}_2^n = B_{22}^{n\,-T}\left(d\vec{G}_2^n - A_{22}^n B_{22}^{n\,-1} \, d\vec{H}_2^{\,n} - \left(A_{21}^n - A_{22}^n B_{22}^{n\,-1} B_{12}^n\right) \, d\vec{U}_1^{n-1} \right. \\ \qquad \left. - B_{21}^{n\,T} \, d\vec{P}_1^{n-1}\right). \end{cases} \tag{4.14}$$

Remarquons que dans ce cas, la structure de la matrice AB^TB est conservée.

4.3 La méthode d'Uzawa ou du lagrangien augmenté

La méthode d'Uzawa ou encore du lagrangien augmenté (Fortin et Glowinski, 1983) consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes de manière découplée. Soulignons que cette approche ne s'applique qu'aux systèmes linéaires dont la matrice a la structure AB^TB. Dans ces cas, l'algorithme s'écrit comme suit. Pour $\vec{U}_0$, $\vec{P}_{-1}$ et r un grand nombre *e.g.* $r = 10^{10}$ donnés, résoudre :

$$\begin{cases} (A + rB^TB)\vec{U}_k = \vec{G} - B^T\vec{P}_{k-1} + rB^T\vec{H} \, ; \\ \vec{P}_k = \vec{P}_{k-1} + r(B\vec{U}_k - \vec{H}) \end{cases} \tag{4.15}$$

jusqu'à convergence. On voit que cet algorithme permet de réduire la taille de la matrice du nombre d'inconnues en pression. Cependant, on remarque qu'il faut non seulement construire $A + rB^TB$, mais aussi B. Le problème est qu'en général la matrice $A + rB^TB$ ne peut pas être construite lors de l'assemblage. Il faut donc faire cette étape a posteriori et bien que les matrices A et B soient creuses, *i.e.* qu'elles contiennent une grande quantité de 0, rien ne garantit que $A + rB^TB$ le sera elle aussi. Le cas échéant, les coûts liés au stockage et à la résolution peuvent s'avérer plus importants qu'au départ. La méthode d'Uzawa devient particulièrement attrayante lorsqu'on utilise des éléments discontinus en pression *e.g.* $\mathrm{P2}^+/\mathrm{P1}^{\mathrm{D}}$ et $\mathrm{P1}^+/\mathrm{P0}$. En effet, dans ce cas la matrice $A + rB^TB$ reste creuse et la construction de B n'est pas nécessaire car on peut mettre à jour les

inconnues liées à la pression élément par élément. En somme, jusqu'à convergence on fait :

$$\begin{aligned} &1.\ \text{Assembler } (A + rB^TB)\,; \\ &2.\ \text{Résoudre } (A + rB^TB)\vec{U}_k = \vec{G} - B^T\vec{P}_{k-1} + rB^T\vec{H}\,; \\ &3.\ \text{Évaluer } \vec{P}_k = \vec{P}_{k-1} + r(B\vec{U}_k - \vec{H}) \text{ élément par élément.} \end{aligned} \tag{4.16}$$

En conclusion, il faut noter que l'algorithme présenté est en fait la méthode d'Uzawa appliquée au système du lagrangien augmenté (Fortin et Glowinski, 1983). L'algorithme original de la méthode d'Uzawa est de faire :

$$\begin{aligned} &1.\ \text{Résoudre } A\,\vec{U}_k = \vec{G} - B^T\vec{P}_{k-1}\,; \\ &2.\ \text{Évaluer } \vec{P}_k = \vec{P}_{k-1} + \omega(B\vec{U}_k - \vec{H}), \end{aligned} \tag{4.17}$$

jusqu'à convergence. Le choix de ω n'est pas simple et est contraint par la nature de la matrice A et par le spectre de $B^TA^{-1}B$ (Saad, 2003). Bien que ces deux algorithmes soient différents, les numériciens oeuvrant en mécanique des fluides ne font pas de distinction et associent la méthode d'Uzawa à la méthode (4.15).

4.4 Les méthodes itératives

Jusqu'à présent, nous nous sommes penchés sur différentes stratégies permettant de réduire la taille du système linéaire à résoudre afin d'être en mesure d'utiliser une méthode de résolution directe. Lorsque l'utilisation de ces stratégies ne réduit pas suffisamment la taille de la matrice assemblée pour permettre l'utilisation de ces méthodes, on se tourne généralement vers les méthodes itératives et en particulier vers les méthodes de Krylov.

4.4.1 Les méthodes de Krylov classiques

Soit $A\,\vec{X} = \vec{B}$ un système d'équations linéaires à résoudre. Étant donné $\vec{X}_0$ une approximation initiale de la solution de ce système, l'idée de ces méthodes est de construire une suite d'approximations $\vec{X}_n \in \vec{X}_0 + \boldsymbol{K}_n(A, \vec{R}_0)$, où $\vec{R}_0 = \vec{B} - A\,\vec{X}_0$.

Définition 4.1. Soit A une matrice $n \times n$ non singulière et $\vec{X} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\vec{0}\}$. Le n-ième sous-espace

de Krylov généré par A et $\vec{X}$ est défini par :

$$\boldsymbol{K}_n(A, \vec{X}) = \text{span}\{\vec{X}, A\,\vec{X}, A^2\vec{X}, \ldots, A^{n-1}\vec{X}\}.$$

L'avantage de cette approche est qu'elle nécessite seulement des produits matriciels et des opérations vectorielles. L'espace mémoire requis pour leur exécution s'en voit grandement réduit. Les méthodes les plus connues sont : CGS (Conjugate Gradient Squared), BiCG (Biconjugate Gradient), BiCGStab (Stabilized Biconjugate Gradient), QMR (Quasi-Minimal Residual), TFQMR (Transpose-Free Quasi-Minimal Residual) et GMRES (Generalized Minimal-Residual) On peut retrouver les algorithmes de toutes ces méthodes en consultant Saad (2003), Kelley (1995) et van der Vorst (2003).

Cependant, rien ne garantit qu'une méthode de Krylov convergera ni qu'elle sera plus rapide qu'une factorisation LU. La capacité de ces méthodes itératives à résoudre un problème donné est améliorée par l'utilisation d'un préconditionneur.

Définition 4.2. Un *préconditionneur* est une matrice non singulière peu coûteuse à factoriser ou à inverser et permettant d'améliorer le conditionnement d'une autre matrice. Soit $A\,\vec{X} = \vec{B}$ une équation matricielle et M un préconditionneur de A. On dit que M est un préconditionneur à droite si on résout

$$AM^{-1}\underbrace{(M\vec{X})}_{\vec{Y}} = \vec{B}$$

et à gauche si on résout

$$M^{-1}A\,\vec{X} = M^{-1}\vec{B}.$$

Dans les faits leur utilisation est indispensable. Dès qu'un problème de mécanique des fluides est le moindrement complexe, les méthodes de Krylov échouent la plupart du temps. Les préconditionneurs les plus simples sont les factorisations LU incomplètes ILU0 et ILUT (Saad, 2003). Soulignons que selon notre expérience, l'utilisation de ILU0 est généralement suffisante pour obtenir la convergence des méthodes de Krylov. Cependant, ce n'est pas toujours le cas et le cas échéant, il nous reste une dernière option.

4.4.2 Les méthodes de Krylov projetées

La dernière approche présentée est une modification des méthodes de Krylov qui exploite la structure de la matrice AB^TB. En suivant la démonstration d'existence et d'unicité des problèmes de point de selle généraux (Brenner et Scott, 1996), on peut identifier un découplage naturel pour résoudre le système (3.16). Considérons l'algorithme général suivant :

1. Trouver $\vec{U}_1 \in \text{im}(B^T)$ tel que $B\vec{U}_1 = \vec{H}$;
2. Trouver $U_0 \in \ker(B)$ tel que $P_{\ker(B)}(A\,\vec{U}_0) = P_{\ker(B)}(\vec{G} - A\,\vec{U}_1)$, où $P_{\ker(B)}$ est la projection orthogonale de $\mathbb{R}^n$ dans $\ker(B)$;
3. Trouver $\vec{P} \in \mathbb{R}^m$ tel que $B^T\vec{P} = \vec{G} - A(\vec{U}_0 + \vec{U}_1)$.

Les idées permettant de comprendre cet algorithme vont comme suit. Supposons que la matrice AB^TB soit telle que la sous-matrice A soit de dimension $n \times n$ et que la sous-matrice B soit de dimension $m \times n$ avec $m < n$ (c'est toujours le cas pour nos problèmes). Puisque nous sommes en dimension finie, si $\text{rang}(B) = m$ alors $\ker(B)$ et $\text{im}(B^T)$ forment une décomposition de $\mathbb{R}^n$ *i.e.* $\mathbb{R}^n = \ker(B) \oplus \text{im}(B^T)$. Ainsi, le vecteur solution $\vec{U} \in \mathbb{R}^n$ de (3.16) s'écrit de manière unique $\vec{U} = \vec{U}_0 + \vec{U}_1$ avec $\vec{U}_0 \in \ker(B)$ et $\vec{U}_1 \in \text{im}(B^T)$. La première étape de l'algorithme consiste à trouver la partie $\vec{U}_1 \in \text{im}(B^T)$. Ceci peut-être fait en résolvant $BB^T\,\vec{Q} = \vec{H}$ et en posant $\vec{U}_1 = B^T\,\vec{Q}$. En remplaçant dans (3.16), on trouve

$$\begin{cases} A\,\vec{U}_0 + B^T\vec{P} = \vec{G} - A\,\vec{U}_1; \\ \qquad B\,\vec{U}_0 = 0. \end{cases} \tag{4.18}$$

Soulignons que la seconde équation est immédiatement respectée car on a $\vec{U}_0 \in \ker(B)$. Concentrons notre attention sur la première équation de (4.18). En remarquant que $B^T\vec{P} \in \text{im}(B^T)$, on voit qu'en projetant chaque membre de cette équation dans $\ker(B)$ avec $P_{\ker(B)}$, l'équation devient

$$P_{\ker(B)}(A\,\vec{U}_0) = P_{\ker(B)}(\vec{G} - A\,\vec{U}_1). \tag{4.19}$$

En d'autres mots, on cherche $\vec{U}_0 \in \ker(B)$ tel que cette équation soit respectée. C'est la seconde étape de l'algorithme. Notons que pour que cette solution existe, il suffit que $\ker(A) \cap \ker(B) = \{\vec{0}\}$. Pour le moment acceptons qu'il soit possible de trouver une telle solution. En remplaçant le

vecteur $\vec{U}_0$ ainsi obtenu dans (4.18), il ne reste qu'à résoudre

$$B^T \vec{P} = \vec{G} - A\,\vec{U}_1 - A\,\vec{U}_0. \tag{4.20}$$

Ceci peut être fait en résolvant $BB^T\vec{P} = B(\vec{G} - A\,\vec{U}_1 - A\,\vec{U}_0)$, ce qui constitue la dernière étape de l'algorithme.

L'idée de projeter les méthodes itératives n'est pas nouvelle. Elle a d'abord été introduite par Coleman (1994) pour le gradient conjugué et a ensuite été étendue par Orban (2008) aux méthodes de Krylov. Dans ce qui suit, nous présentons une approche qui simplifie et généralise la construction de ces méthodes. Afin de présenter le tout rigoureusement, nous aurons besoin du théorème suivant.

Théorème 4.1. *Soit A une matrice $n \times n$ et B une matrice $m \times n$. Alors la matrice*

$$M = \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix}$$

est inversible si et seulement si les conditions suivantes sont respectées :

1. $\text{rang}(B) = m$;
2. $\ker(A) \cap \ker(B) = \{\vec{0}\}$;
3. $\text{im}(A\,|_{\ker(B)}) \cap \text{im}(B^T) = \{\vec{0}\}$, *où* $\text{im}(A\,|_{\ker(B)}) = \{\vec{V} \in \mathbb{R}^n \mid \vec{V} = A\,\vec{U},\, \vec{U} \in \ker(B)\}$.

Démonstration. Commençons par démontrer la nécessité. Montrons que si l'une ou l'autre des conditions n'est pas respectée alors M est singulière.

1. Si $\text{rang}(B) \neq m$, alors $\exists \vec{Q} \in \mathbb{R}^m \setminus \{\vec{0}\}$ tel que $B^T\vec{Q} = \vec{0}$. À l'aide de ce vecteur on peut écrire
$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \vec{Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \vec{0} \end{pmatrix}$$
ce qui entraîne que M est singulière.
2. Si l'hypothèse 2 est fausse, alors il existe $\vec{U} \in \ker(A) \cap \ker(B)$ tel que $\vec{U} \neq \vec{0}$. En utilisant

ce vecteur, on a que

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{U} \\ \vec{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \vec{0} \end{pmatrix},$$

ce qui entraîne que M est singulière.

3. Si l'hypothèse 3 est fausse, alors il existe $\vec{V} \in \text{im}(A\ |_{\ker(B)}) \cap \text{im}(B^T)$ tel que $\vec{V} \neq \vec{0}$. Puisque $\vec{V} \in \text{im}(A\ |_{\ker(B)}) \cap \text{im}(B^T)$, $\exists\, \vec{U} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\vec{0}\}$ et $\exists\, \vec{Q} \in \mathbb{R}^m \setminus \{\vec{0}\}$ tels que

$$\begin{cases} A\,\vec{U} = B^T\,\vec{Q}; \\ B\,\vec{U} = \vec{0} \end{cases}$$

qui peut s'écrire

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{U} \\ \text{-}\vec{Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \vec{0} \end{pmatrix}$$

ce qui entraîne que M est singulière.

Maintenant, montrons la suffisance *i.e.* si M est singulière alors au moins une condition n'est pas respectée. Puisque M est singulière, $\exists\, \vec{V} \in \mathbb{R}^{m+n} \setminus \{\vec{0}\}$ tel que $M\,\vec{V} = \vec{0}$. Écrivons

$$\vec{V} = \begin{pmatrix} \vec{U} \\ \text{-}\vec{Q} \end{pmatrix}$$

avec $\vec{U} \in \mathbb{R}^n$ et $\vec{Q} \in \mathbb{R}^m$. Puisque $\vec{V} \neq \vec{0}$, il y a trois cas possibles :

1. $\vec{U} = \vec{0}$ et $\vec{Q} \neq \vec{0}$;
2. $\vec{U} \neq \vec{0}$ et $\vec{Q} = \vec{0}$;
3. $\vec{U} \neq \vec{0}$ et $\vec{Q} \neq \vec{0}$.

En utilisant le fait que $M\,\vec{V} = \vec{0}$, ceci signifie que

$$\begin{cases} A\,\vec{U} - B^T\,\vec{Q} = \vec{0}; \\ \qquad\quad B\,\vec{U} = \vec{0}. \end{cases}$$

Le premier cas implique qu'il existe $\vec{Q} \neq \vec{0}$ tel que $B^T\,\vec{Q} = \vec{0}$ d'où $\text{rang}(B) \neq m$. Le second entraîne qu'il existe $\vec{U} \in \ker B \setminus \{\vec{0}\}$ tel que $A\,\vec{U} = \vec{0}$, ce qui est équivalent à $\ker(A) \cap \ker(B) \neq$

$\{\vec{0}\}$. Il reste le troisième cas. Si $B^T\,\vec{Q} = \vec{0}$, alors $\ker(A) \cap \ker(B) \neq \{\vec{0}\}$. Si $A\,\vec{U} = \vec{0}$, alors rang$(B) \neq m$. Enfin, si $A\,\vec{U} \neq \vec{0}$ et $B^T\,\vec{Q} \neq \vec{0}$, alors on a que $A\,\vec{U} = B^T\,\vec{Q} \neq \vec{0}$ et $B\,\vec{U} = \vec{0}$. Ceci implique que im$(A\,|_{\ker(B)}) \cap$ im$(B^T) \neq \{\vec{0}\}$.

Q.E.D.

Supposons que la matrice AB^TB de notre équation matricielle respecte les hypothèses de ce théorème (c'est toujours le cas pour nos problèmes) et considérons la matrice

$$I_{B^TB} = \begin{pmatrix} I & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix}. \tag{4.21}$$

Puisque B est plein rang, alors I_{B^TB} respecte elle aussi les hypothèses du théorème 4.1. Cependant, la matrice I_{B^TB} est une matrice particulière. En effet, on a :

1. $I_{B^TB} = I_{B^TB}^T$;
2. Soit $\vec{U} \in \mathbb{R}^n$, alors le sous-vecteur $\vec{U}_0$ de la solution de

$$\begin{pmatrix} I & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{U}_0 \\ \vec{Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{U} \\ \vec{0} \end{pmatrix} \tag{4.22}$$

   est la projection orthogonale de $\vec{U}$ dans $\ker(B)$. En effet, puisque $B\,\vec{U}_0 = \vec{0}$, *i.e.* $\vec{U}_0 \in \ker(B)$, on a que

$$\vec{U} = \underbrace{\vec{U}_0}_{\in \ker(B)} + \underbrace{B^T\vec{Q}}_{\in \text{im}(B^T)} ;$$

3. Soit $\vec{H} \in \mathbb{R}^m$, alors le sous-vecteur $\vec{U}_1$ de la solution de

$$\begin{pmatrix} I & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{U}_1 \\ \vec{Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \vec{H} \end{pmatrix} \tag{4.23}$$

   est solution de $B\,\vec{U}_1 = \vec{H}$.

4. Soit $\vec{S} \in \text{im}(B^T)$, alors le sous-vecteur $\vec{P}$ de la solution de

$$\begin{pmatrix} I & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{V} \\ \vec{P} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{S} \\ \vec{0} \end{pmatrix} \tag{4.24}$$

est la solution de $BB^T\ \vec{P} = B\ \vec{S}$. En effet, on a que

$$\vec{V} = \underbrace{\vec{S}}_{\in\ \text{im}(B^T)} - \underbrace{B^T\ \vec{P}}_{\in\ \text{im}(B^T)}$$

et

$$B\ \vec{V} = \vec{0},$$

ce qui entraîne que $\vec{V} \in \ker(B) \cap \text{im}(B^T) = \{\vec{0}\}$. Il s'ensuit que $B^T\ \vec{P} = \vec{S}$ et on déduit le résultat.

Sous ces hypothèses et à l'aide de la matrice I_{B^TB}, nous sommes en mesure d'écrire une démarche permettant de projeter facilement toutes les méthodes de Krylov. La première étape consiste à trouver $\vec{U}_1 \in \text{im}(B^T)$ tel que $B\ \vec{U}_1 = \vec{H}$. Ceci se fait en résolvant

$$\begin{pmatrix} I & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{U}_1 \\ \vec{Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \vec{H} \end{pmatrix}. \tag{4.25}$$

Pour la seconde étape, on cherche $\vec{U}_0 \in \ker(B)$ tel que $P_{\ker(B)}(A\ \vec{U}_0) = P_{\ker(B)}(\vec{G} - A\ \vec{U}_1)$. Pour ce faire, on choisit une méthode de Krylov. Sachant que ces méthodes construisent une suite d'approximations de la forme $\vec{X}_n \in \vec{X}_0 + \boldsymbol{K}_n(A, \vec{R}_0)$, où $\vec{R}_0 = \vec{G} - A\ \vec{U}_1 - A\ \vec{X}_0$ et que $\ker(B)$ est un espace vectoriel, on déduit immédiatement qu'il nous suffit de choisir $\vec{X}_0 \in \ker(B)$, *e.g.* $\vec{X}_0 = \vec{0}$ et de construire $\boldsymbol{K}_n(P_{\ker(B)} \circ A, P_{\ker(B)}(\vec{R}_0))$. En d'autres mots, pour une méthode de Krylov donnée, on prend $\vec{X}_0 \in \ker(B)$ et on projette le résidu initial dans $\ker B$, et on fait de même après chaque multiplication par A en utilisant (4.22). Ce faisant, nous avons $\vec{X}_n \in \vec{X}_0 + \boldsymbol{K}_n(P_{\ker(B)} \circ A, P_{\ker(B)}(\vec{R}_0)) \subset \ker(B)$. Enfin, $\ker(B)$ étant un espace vectoriel fermé si l'algorithme converge, il convergera dans $\ker(B)$ ce qui est bien ce que nous voulons. Pour la troisième étape, il suffit de remarquer que puisque $P_{\ker(B)}\big(\vec{G} - A(\vec{U}_0 + \vec{U}_1)\big) = \vec{0}$ et que $\mathbb{R}^n = \ker(B) \oplus \text{im}(B^T)$ alors $\vec{G} - A(\vec{U}_0 + \vec{U}_1) \in \text{im}(B^T)$. Il s'ensuit qu'on peut trouver $\vec{P}$ en

résolvant

$$\begin{pmatrix} I & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{U} \\ \vec{P} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{G} - A(\vec{U}_0 + \vec{U}_1) \\ \vec{0} \end{pmatrix}.$$

Bien qu'à première vue cette approche puisse sembler compliquée, elle fournit des méthodes de Krylov plus robustes que les versions classiques et ce sans préconditionnement. Soulignons que le fait de résoudre $P_{\ker(B)}(A\ \vec{U}_0) = P_{\ker(B)}(\vec{G} - A\ \vec{U}_1)$ dans $\ker(B)$ entraîne que la dimension de l'espace de Krylov nécessaire est réduite du $\text{rang}(B)$. On peut ainsi voir la projection comme un préconditionneur implicite. Ceci devient plus clair lorsqu'on regarde cette opération d'un autre point de vue. Soit Z une base orthogonale de $\ker(B)$. Résoudre $P_{\ker(B)}(A\,\vec{U}_0) = P_{\ker(B)}(\vec{G} - A\,\vec{U}_1)$ est alors équivalent à résoudre le système préconditionné $Z^T A Z \vec{V}_0 = Z^T(\vec{G} - A\,\vec{U}_1)$. Dans ce cas, on a que $\vec{U}_0 = Z\ \vec{V}_0$. Cette façon d'aborder la projection est exactement celle de Coleman (1994) et de Orban (2008). Bien que cette approche soit équivalente à la méthode proposée, elle rend la construction des méthodes projetées plus difficile.

Les méthodes projetées sont un peu plus coûteuses en mémoire que les méthodes de Krylov classiques. Cependant, puisque I_{B^TB} est symétrique, on peut stocker uniquement la partie triangulaire inférieure par exemple. Il n'en demeure pas moins que cette approche reste globalement moins coûteuse qu'une factorisation LU. Pour le moment, les méthodes projetées sont nos méthodes de «dernier recours». Elles réussissent généralement à résoudre le système linéaire lorsque les méthodes de Krylov classiques échouent ou stagnent et que l'utilisation de la factorisation LU est hors de portée.

4.4.3 Préconditionnement des méthodes de Krylov projetées

À priori, les méthodes projetées peuvent paraître difficiles à préconditionner car tout préconditionneur appliqué à la matrice AB^TB doit en préserver la structure. Le seul moyen d'arriver à cette fin est de préconditionner la matrice de part et d'autre. Ce faisant, on modifie la sous-matrice B nécessaire à la construction de la matrice I_{B^TB}, ce qui rend la construction de I_{B^TB} onéreuse. Pour le moment, nous ne connaissons pas de préconditionneur simple permettant d'atteindre cet

objectif. Cependant, si la matrice A possède la structure

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & 0 & B^T \\ 0 & A_{22} & 0 \\ B & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{4.26}$$

ce qui est le cas lorsqu'on on ajoute l'équation de transport aux équations de Navier-Stokes, alors on peut facilement préconditionner à gauche ou à droite cette matrice tout en conservant la structure souhaitée. Pour ce faire, il suffit de prendre un préconditionneur M pour le bloc A_{22} et de construire

$$I_{MI} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}. \tag{4.27}$$

La matrice I_{MI} ainsi définie est un préconditionneur possédant la propriété désirée. Notons qu'au niveau de la sous-matrice A, ce préconditionneur prend la forme

$$I_M = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix}. \tag{4.28}$$

Soulignons que si la matrice du système à résoudre possède la structure illustrée à l'équation (4.26), nous observons que les méthodes projetées perdent de leur efficacité. Ceci est dû au fait qu'au niveau de la sous-matrice A_{22}, une méthode projetée revient exactement à utiliser une méthode de Krylov classique. Comme nous le savons, ces méthodes ont besoin d'être préconditionnées pour performer. En utilisant le préconditioneur I_{MI}, on peut améliorer la performance de la méthode en agissant au niveau adéquat. Selon notre expérience, l'utilisation du préconditionneur I_{MI} est essentielle dès que la matrice possède la structure illustrée à l'équation (4.26). Dans le cas contraire, les méthodes projetées n'arrivent que rarement à résoudre le système. Enfin, le tableau 4.1 présente l'algorithme de la méthode de Krylov PBiCGStab préconditionnée et sa version projetée. Il permet d'illustrer la simplicité de la mise en œuvre de l'approche que nous proposons.

Tableau 4.1 Comparaison de l'algorithme de la méthode PBiCGStab préconditionnée et PBiCGStab préconditionnée projetée.

PBiCGStab préconditionnée	**PBiCGStab préconditionnée projetée**
Résolution de $A\,\vec{U} = \vec{B}$	Résolution de $\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{U} \\ \vec{P} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{G} \\ \vec{H} \end{pmatrix}$
	Étape 1
Choisir $\vec{U}$	Résoudre : $B\,\vec{U} = \vec{H}$ avec (4.23)
$\vec{R} = \vec{B} - A\,\vec{U}$	Projection : $\vec{R} = P_{\ker(B)}(\vec{G} - A\,\vec{U})$ avec (4.22)
	Étape 2
$\vec{R}_h = \vec{R}$	$\vec{R}_h = \vec{R}$
$\vec{W} = \vec{V} = d\vec{U} = \vec{0}$	$\vec{W} = \vec{V} = d\vec{U} = \vec{0}$
$\rho_1 = < \vec{R}_h, \vec{R} >$	$\rho_1 = < \vec{R}_h, \vec{R} >$
$\rho_0 = \alpha = \omega = 1$	$\rho_0 = \alpha = \omega = 1$
$k = 0$	$k = 0$
tant que $\|\vec{R}\|_2 > tol$	**tant que** $\|\vec{R}\|_2 > tol$
$k = k + 1$	$k = k + 1$
$\beta = \rho_k \alpha / (\rho_{k-1} \omega)$	$\beta = \rho_k \alpha / (\rho_{k-1} \omega)$
$\vec{W}^* = \vec{R} + \beta(\vec{W} - \omega \vec{V})$	$\vec{W}^* = \vec{R} + \beta(\vec{W} - \omega \vec{V})$
Préconditionnement : $\vec{W} = M^{-1}\vec{W}^*$	Préconditionnement : $\vec{W} = I_M^{-1}\vec{W}^*$
$\vec{V} = A\,\vec{W}$	Projection : $\vec{V} = P_{\ker(B)}(A\,\vec{W})$ avec (4.22)
$\alpha = \rho_k / < \vec{R}_h, \vec{V} >$	$\alpha = \rho_k / < \vec{R}_h, \vec{V} >$
$\vec{S}^* = \vec{R} - \alpha \vec{V}$	$\vec{S}^* = \vec{R} - \alpha \vec{V}$
Préconditionnement : $\vec{S} = M^{-1}\vec{S}^*$	Préconditionnement : $\vec{S} = I_M^{-1}\vec{S}^*$
$\vec{T} = A\,\vec{S}$	Projection : $\vec{T} = P_{\ker(B)}(A\,\vec{S})$ avec (4.22)
$\omega = < \vec{T}, \vec{S} > / \|\vec{S}\|_2$	$\omega = < \vec{T}, \vec{S} > / \|\vec{S}\|_2$
$\rho_k = -\omega < \vec{R}_h, \vec{T} >$	$\rho_k = -\omega < \vec{R}_h, \vec{T} >$
$d\vec{X} = \alpha \vec{W} + \omega \vec{S}$	$d\vec{X} = \alpha \vec{W} + \omega \vec{S}$
$\vec{R} = \vec{S} - \omega \vec{T}$	$\vec{R} = \vec{S} - \omega \vec{T}$
fin	**fin**
Préconditionnement : $d\vec{X}^* = M^{-1}\,d\vec{X}$	Préconditionnement : $d\vec{U}^* = I_M^{-1}\,d\vec{U}$
Évaluer : $\vec{U} = \vec{U} + d\vec{U}^*$	Évaluer : $\vec{U} = \vec{U} + d\vec{U}^*$
	Étape 3
	Résoudre : $B^T\vec{V} = f - A(\vec{U}_0 + \vec{U}_1)$ avec (4.24)

4.5 Comparaison des stratégies

En terminant, nous fournissons les résultats en temps et en mémoire des différentes stratégies pour la résolution d'un problème d'écoulement stratifié permanent discrétisé avec la combinaison d'éléments $P2^+/P1^D/P1$. Ce type de problème conduit à un système matriciel possédant la structure illustrée à l'équation (4.26). Comme on peut le constater au tableau 4.2, la stratégie qui résout

Tableau 4.2 Comparaison des différentes stratégies de résolution pour le problème d'un écoulement stratifié avec la combinaison d'éléments $P2^+/P1^D/P1$.

stratégie	inconnues	itérations	mémoire	temps
LU	837752	9	7,4 Go	1h 20m 50s
Uzawa + LU	726192	9	5,9 Go	1h 29m 30s
Condensation statique + LU	364402	12	5,8 Go	58m 10
GMRES(m)	837752	stagne à 2	2,3 Go	$\geq$ 25h
GMRES(m)+ILU0 à droite	837752	stagne à 4	2,3 Go	$\geq$ 16h
PGMRES(m)	837752	11	2,7 Go	11h 35m 52s
PGMRES(m)+ILU0 à droite	837752	10	2,7 Go	2h 21m 36s

le problème le plus rapidement est la condensation statique. Malgré que cette approche permette de réduire de plus de la moitié la taille de la matrice, on peut aussi remarquer que la mémoire requise demeure assez élevée. Soulignons que les quantités de mémoire du tableau 4.2 ont été estimées à l'aide de la fonction «top» de l'environnement Unix. La méthode d'Uzawa permet de réduire la dimension de la matrice d'environ 100000 DDL et nécessite approximativement la même quantité de mémoire que la condensation statique. Cependant, elle nécessite plus de temps de calcul. En fait, le temps d'exécution est comparable à la factorisation LU qui est l'approche qui nécessite la plus grande quantité de mémoire. Du côté de la méthode GMRES(m) avec ou sans préconditionnement, bien qu'elle nécessite la plus petite quantité de mémoire, elle n'est pas arrivée à résoudre le problème. Enfin, sa version projetée, PGMRES(m), de concert avec un préconditionneur construit selon l'expression (4.27), nous a permis de résoudre le problème en un temps acceptable avec peu de mémoire. Cette même méthode a permis de résoudre le problème sans préconditionnement. Ceci suggère que les méthodes de Krylov préconditionnées projetées permettent de résoudre des problèmes difficiles et parfois inaccessibles aux méthodes de Krylov classiques préconditionnées en un temps acceptable.

Chapitre 5

Retour sur la pseudo-concentration

Nous avons vu au chapitre 2 que la pseudo-concentration F était une approximation C^2 de la fonction indicatrice χ_{Ω_2} d'un certain ensemble Ω_2. Nous avons aussi mentionné que cette manière de définir F donnait lieu à plusieurs possibilités. Pour s'en convaincre, il suffit de considérer l'exemple présenté à la figure 5.1. Nous voyons qu'il est possible de construire des approximations plus ou moins précises de la fonction indicatrice de $\Omega_2 = [\text{-}1\ ,\ 0[$. Dans ce chapitre, nous allons formaliser la définition de la pseudo-concentration ainsi que le sens de son unicité. Nous allons aussi analyser l'impact de son utilisation sur la conservation de la masse. Les écoulements turbulents entraînent d'importantes déformations de ce marqueur. Ces questions sont donc de la plus grande importance.

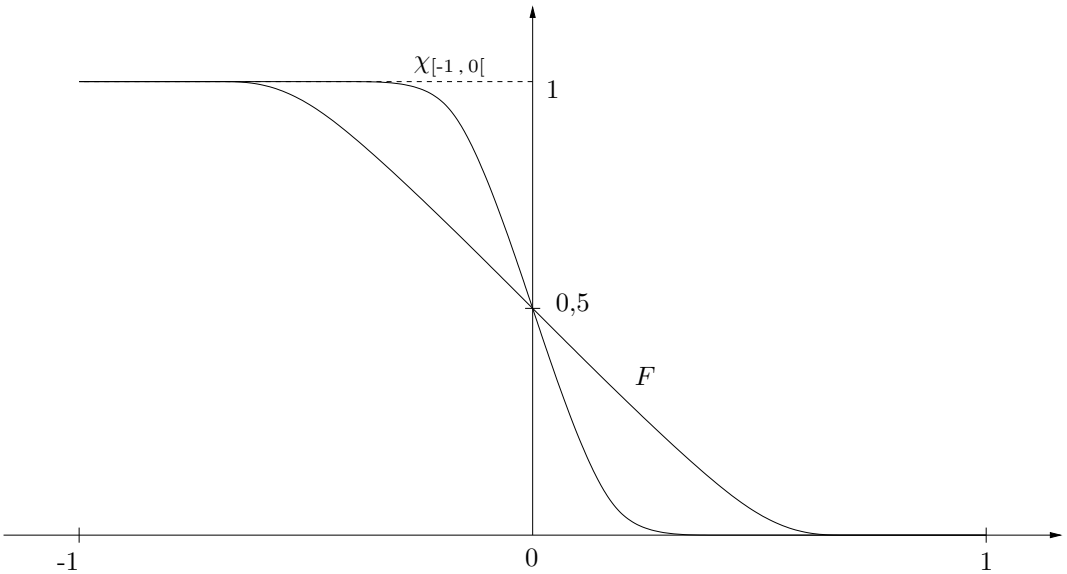


Figure 5.1 Approximations de la fonction indicatrice dans $\Omega_2 = [\text{-}1\ ,\ 0[$.

5.1 Définition et initialisation de la pseudo-concentration

5.1.1 Définition constructive de la pseudo-concentration

Soit Ω un domaine de $\mathbb{R}^3$, Ω_1 et Ω_2, une partition de Ω, $\varepsilon > 0$ petit (voir figure 5.2) et posons $\Gamma = \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2$.

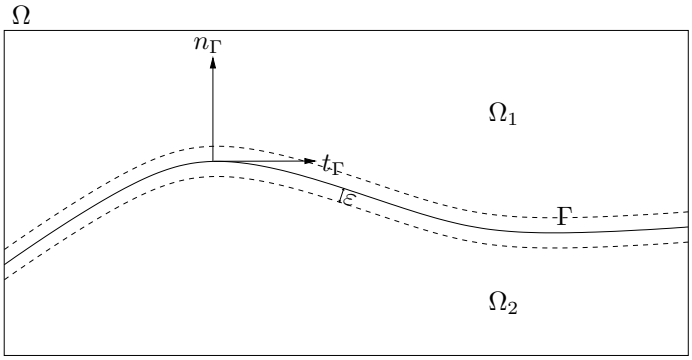


Figure 5.2 Représentation 2D d'un écoulement à surface libre avec la zone de transition de Γ (en pointillé).

Rappel 5.1. Soit E un ensemble non vide de $\mathbb{R}^3$ et $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3$. On définit la distance de $\boldsymbol{x}$ à E par :

$$\text{dist}(\boldsymbol{x}, E) = \inf \{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_2 \ \mid \ \boldsymbol{y} \in E\}.$$

À l'aide de cette distance, on définit une distance signée sur Ω par :

$$\sigma(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} \text{-dist}(\boldsymbol{x},\ \Gamma) & \text{si } \boldsymbol{x} \in \Omega_1; \\ \text{dist}(\boldsymbol{x},\ \Gamma) & \text{si } \boldsymbol{x} \in \Omega_2. \end{cases} \tag{5.1}$$

Cette distance nous permet de construire une partition de Ω constituée des 3 ensembles suivants :

1. $\Omega_{1,\varepsilon} = \{\boldsymbol{x} \in \Omega \mid \sigma(\boldsymbol{x}) < \text{-}\varepsilon\}$;
2. $\Omega_{2,\varepsilon} = \{\boldsymbol{x} \in \Omega \mid \sigma(\boldsymbol{x}) > \varepsilon\}$;
3. $\Gamma_\varepsilon = \{\boldsymbol{x} \in \Omega \mid -\varepsilon \leq \sigma(\boldsymbol{x}) \leq \varepsilon\}$.

Notons que par construction, on a $\Omega_{1,\varepsilon} \subset \Omega_1$, $\Omega_{2,\varepsilon} \subset \Omega_2$ et $\Gamma \subset \Gamma_\varepsilon$. Le troisième ensemble est la *zone de transition* et la valeur ε est la *demi-largeur de la zone de transition*.

Soit $f_\varepsilon \in C^2(\Gamma_\varepsilon,[0,1])$. Alors f_ε est une *fonction de transition* si elle respecte les conditions suivantes :

1. $f_\varepsilon(\partial\Gamma_\varepsilon \cap \partial\Omega_{1,\varepsilon}) = \{0\}$;
2. $f_\varepsilon(\Gamma) = \{\frac{1}{2}\}$;
3. $f_\varepsilon(\partial\Gamma_\varepsilon \cap \partial\Omega_{2,\varepsilon}) = \{1\}$;
4. $f'_\varepsilon(\partial\Gamma_\varepsilon \cap (\partial\Omega_{1,\varepsilon} \cup \partial\Omega_{2,\varepsilon})) = \{0\}$;
5. $f''_\varepsilon(\partial\Gamma_\varepsilon \cap (\partial\Omega_{1,\varepsilon} \cup \partial\Omega_{2,\varepsilon})) = \{0\}$.

Soulignons que la construction d'une telle fonction n'est pas une tâche facile. Notons $\mathcal{F}_\varepsilon$ l'ensemble de toutes les fonctions de transition définies sur Γ_ε. On définit alors la pseudo-concentration par :

$$F(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sigma(\boldsymbol{x}) < \text{-}\varepsilon; \\ 1 & \text{si } \sigma(\boldsymbol{x}) > \varepsilon; \\ f_\varepsilon(\sigma(\boldsymbol{x})) & \text{sinon,} \end{cases} \tag{5.2}$$

où $f_\varepsilon(\sigma(\boldsymbol{x})) \in \mathcal{F}_\varepsilon$. Elle est unique modulo la fonction de transition. En d'autres mots, deux pseudo-concentrations F_1 et F_2, définies de cette façon sur le même domaine, pour une même partition et pour un même ε sont considérées comme équivalentes. La fonction F telle que définie est bien une approximation C^2 de χ_{Ω_2}. Cependant, pour le moment, rien ne garantit que $\mathcal{F}_\varepsilon \neq \emptyset$. L'exemple suivant fournit une démarche systématique permettant de construire une fonction de transition F_ε.

Ajoutons quelque mots sur le fait que $f_\varepsilon \circ \sigma$ doive être dans C^2. Pour que ce soit bien le cas, il faut et il suffit que

$$\frac{\partial f_\varepsilon(\sigma)}{\partial x_i} = \frac{df_\varepsilon(\sigma)}{d\sigma}\frac{\partial\sigma}{\partial x_i} \tag{5.3}$$

et

$$\frac{\partial^2 f_\varepsilon(\sigma)}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{d^2 f_\varepsilon(\sigma)}{d\sigma^2}\frac{\partial\sigma}{\partial x_i}\frac{\partial\sigma}{\partial x_j} + \frac{df_\varepsilon(\sigma)}{d\sigma}\frac{\partial^2\sigma}{\partial x_i \partial x_j} \tag{5.4}$$

existent et soient continues. C'est le cas si f_ε est C^2 sur $\mathbb{R}$ et si $\sigma(\boldsymbol{x})$ est C^2 sur Γ_ε. On vérifie facilement que c'est bien le cas pour la première fonction. Toutefois, ce n'est pas si simple pour la seconde. En effet, l'écriture de l'expression analytique de cette fonction est généralement inconnue. On peut tout au plus affirmer qu'elle est continue. C'est pourquoi, en pratique, nous ferons

l'hypothèse que le fonction $f_\varepsilon \circ \sigma$ est bien dans C^2. Terminons en mentionnant qu'on tient compte de la régularité de F par rapport au temps par l'intermédiaire d'une formule aux différences.

5.1.2 Exemple de construction d'une fonction de transition

Montrons comment construire une fonction de transition dans le cas d'une sphère. Posons $\Omega = \mathbb{R}^3$. Soit

$$\Omega_1 = \{\boldsymbol{x} \in \Omega \mid \|\boldsymbol{x}\|_2 \leq 1\}$$

la boule unité fermée de $\mathbb{R}^3$ et

$$\Omega_2 = \{\boldsymbol{x} \in \Omega \mid \|\boldsymbol{x}\|_2 > 1\}$$

son complémentaire. Soit aussi

$$\Gamma = \{\boldsymbol{x} \in \Omega \mid \|\boldsymbol{x}\|_2 = 1\},$$

la sphère unité et

$$\Gamma_\varepsilon = \{\boldsymbol{x} \in \Omega \mid 1 - \varepsilon \leq \|\boldsymbol{x}\|_2 \leq 1 + \varepsilon\},$$

la zone de transition. Dans ce cas particulier, on peut exprimer analytiquement la distance à la surface de la sphère par

$$\text{dist}(\boldsymbol{x}, \Gamma) = \left|1 - \|\boldsymbol{x}\|_2\right|$$

et la distance signée par

$$\sigma(\boldsymbol{x}) = 1 - \|\boldsymbol{x}\|_2.$$

Considérons la fonction

$$f_\varepsilon(x) = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{x}{\varepsilon} + \frac{1}{\pi}\sin\left(\frac{\pi x}{\varepsilon}\right)\right) \tag{5.5}$$

définie sur $\mathbb{R}$ (Sussman *et al.*, 1998). Alors $f_\varepsilon \circ \sigma(\boldsymbol{x})$ est une fonction de transition et

$$F(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sigma(\boldsymbol{x}) < \text{-}\varepsilon; \\ 1 & \text{si } \sigma(\boldsymbol{x}) > \varepsilon; \\ \frac{1}{2}\left(1 + \dfrac{1 - \|\boldsymbol{x}\|_2}{\varepsilon} + \dfrac{1}{\pi}\sin\left(\dfrac{\pi(1 - \|\boldsymbol{x}\|_2)}{\varepsilon}\right)\right) & \text{sinon} \end{cases} \tag{5.6}$$

est la pseudo-concentration de la surface de la sphère.

5.1.3 Stratégie de recalcul de la pseudo-concentration

En pratique, lorsqu'on résout l'équation (2.16) pour la simulation des écoulements transitoires, on observe que la pseudo-concentration se diffuse et se contracte dans l'écoulement. Ceci ressemble à la contraction et la dilatation des ondes observées avec l'effet Doppler. Une stratégie permettant de recalibrer la pseudo-concentration consiste tout simplement à effectuer une mise à jour de F *i.e.* à la réinitialiser.

La stratégie de mise à jour que nous avons utilisée va comme suit. Soit Ω_h un maillage sur Ω et F_h la discrétisation de F sur ce maillage. Supposons que nous sommes à l'instant t et faisons les hypothèses suivantes :

1. F_h est continue sur chaque élément de Ω_h ;
2. La demi-largeur de la zone de transition de F est strictement plus grande que la taille des éléments *i.e.* $\varepsilon > \ h$;
3. Si F_h n'est pas constante sur une arête $(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2)$ et s'il existe $\boldsymbol{x}$ sur celle-ci tel que $F_h(\boldsymbol{x},t) - \frac{1}{2} = 0$, alors ce zéro est unique et de multiplicité 1.

Ces hypothèses nous permettent d'utiliser le théorème de la valeur intermédiaire pour éliminer les éléments qui n'intersectent pas la surface libre. Pour les autres, nous commençons par raffiner localement chacun de ces éléments et nous calculons à l'aide de la méthode de Newton les points d'intersection de la surface libre ($\boldsymbol{x}$ tels que $F(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{2}$) avec chaque sous élément (voir figure 5.3). Ce faisant, nous construisons un nuage de points situés sur la surface libre. Ensuite, à l'aide de la bibiothèque ANN (Approximate Nearest Neighbor) de Arya *et al.* (1998), nous reconstruisons la fonction distance et, de là, la pseudo-concentration. Une façon de procéder similaire est aussi utilisée par Marchandise (2006). Notons qu'afin de conserver la précision de l'approximation de la distance normale à la surface libre fournie par le raffinement local, il faut que la taille des éléments dans la zone de transition reste la même. Aussi, plus le nombre des sous-éléments est élevé, plus la réinitialisation sera précise. Pour notre part, chaque élément est subdivisé en 64 sous-éléments. Au delà de ce nombre (8^n, $n > 2$), le temps de calcul devient trop important.

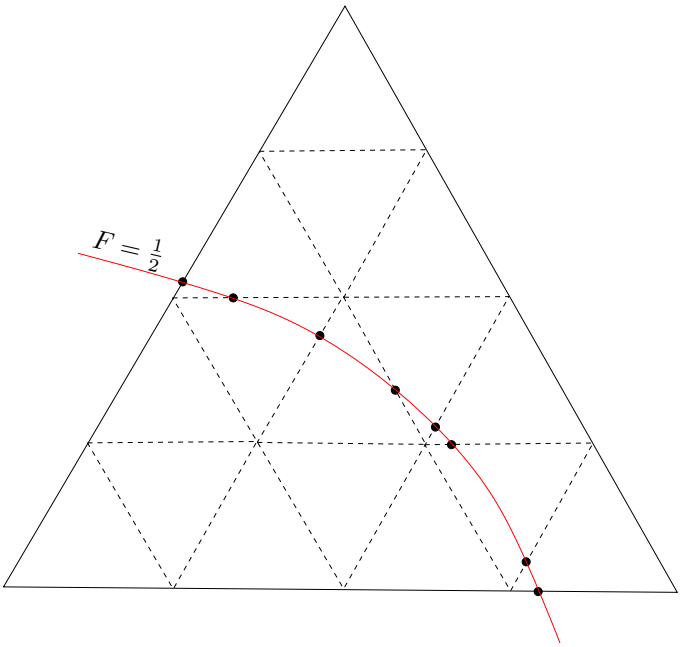


Figure 5.3 Représentation 2D de l'algorithme de mise à jour de F.

Cette stratégie de mise à jour permet de réinitialiser F en conservant le plus fidèlement possible l'emplacement de la surface libre. Toutefois, nous avons noté qu'une telle modification de la pseudo-concentration entraîne des variations de masse. Ceci à aussi été souligné par Desjardins *et al*. (2008). Hormis le fait que la conséquence inhérente à la mise à jour soit une légère modification de la position de la surface libre, une explication que l'on peut apporter est qu'en modifiant F, nous changeons par le fait même la solution du problème. Or la nouvelle pseudo-concentration n'est plus la solution du problème au pas de temps courant. Il en découle une erreur qui sera induite ou transportée dans la solution du prochain pas de temps. C'est pourquoi il est préférable à l'instar de Marchandise (2006), de limiter autant que possible les mises à jour de F.

Ceci dit, il faut se rappeler que les différentes quantités physiques dépendent de la pseudo-concentration. Si elle se diffuse ou se contracte, ce qui est inévitable, ces quantités seront altérées. Il faut alors s'assurer que la densité et la viscosité ne prennent pas des valeurs non physiques. Ceci peut être fait en imposant les contraintes suivantes :

1. $\rho(\boldsymbol{x}, t) > \max(\rho_1(\boldsymbol{x}, t), \rho_2(\boldsymbol{x}, t)) \Rightarrow \rho(\boldsymbol{x}, t) = \max(\rho_1(\boldsymbol{x}, t), \rho_2(\boldsymbol{x}, t))$;
2. $\rho(\boldsymbol{x}, t) < \min(\rho_1(\boldsymbol{x}, t), \rho_2(\boldsymbol{x}, t)) \Rightarrow \rho(\boldsymbol{x}, t) = \min(\rho_1(\boldsymbol{x}, t), \rho_2(\boldsymbol{x}, t))$;
3. $\mu(\boldsymbol{x}, t) > \max(\mu_1(\boldsymbol{x}, t), \mu_2(\boldsymbol{x}, t)) \Rightarrow \mu(\boldsymbol{x}, t) = \max(\mu_1(\boldsymbol{x}, t), \mu_2(\boldsymbol{x}, t))$;

4. $\mu(\boldsymbol{x}, t) < \min(\mu_1(\boldsymbol{x}, t), \mu_2(\boldsymbol{x}, t)) \Rightarrow \mu(\boldsymbol{x}, t) = \min(\mu_1(\boldsymbol{x}, t), \mu_2(\boldsymbol{x}, t))$.

Nous pouvons aussi utiliser la méthode de mise à jour de F pour construire $\rho(\boldsymbol{x}, t)$ et $\mu(\boldsymbol{x}, t)$ sans modifier F. Évidemment, ces contraintes induisent elles aussi de petites perturbations dans le système d'équations. Toutefois, selon notre expérience elles ne causent pas des problèmes majeurs *i.e.* pas autant qu'une modification de F.

5.1.4 Conservation de la masse et zone de transition

Nous allons approfondir la relation qui existe entre la quantité de matière des fluides et la zone de transition de F. Supposons que $\rho_2 > \rho_1$ et que ces quantités soient toutes deux constantes. On se place donc dans le meilleur cas possible, l'idée étant que si tout ne fonctionne pas bien dans ce cas, on ne peut s'attendre qu'à pire. Définissons la masse de fluide contenue dans une partie E du domaine au temps t par

$$M(E) = \int_E \rho(\boldsymbol{x}, t) d\boldsymbol{x} \tag{5.7}$$

et son volume par

$$V(E) = \int_E d\boldsymbol{x}. \tag{5.8}$$

Posons $\tilde{M}(\Omega_1) = \rho_1 V(\Omega_1)$ et $\tilde{M}(\Omega_2) = \rho_2 V(\Omega_2)$ les masses exactes des deux fluides et $\Delta\rho = \rho_2 - \rho_1$. Évaluons ensuite les masses approchées de chacun des fluides :

$$\begin{aligned}
M(\Omega_1) &= \int_{\Omega_1} \rho(x) d\boldsymbol{x} \\
&= \int_{\Omega_1} \rho_1 d\boldsymbol{x} + \Delta\rho \int_{\Omega_1} F(\boldsymbol{x}, t) d\boldsymbol{x} \quad \text{(de l'équation (2.12))} \\
&= \tilde{M}(\Omega_1) + \Delta\rho \int_{\Omega_1} F(\boldsymbol{x}, t) d\boldsymbol{x} \\
&= \tilde{M}(\Omega_1) + \Delta\rho \left(\int_{\Omega_1 \setminus \Gamma_\varepsilon} F(\boldsymbol{x}, t) d\boldsymbol{x} + \int_{\Omega_1 \cap \Gamma_\varepsilon} F(\boldsymbol{x}, t) d\boldsymbol{x} \right) \\
&= \tilde{M}(\Omega_1) + \Delta\rho \int_{\Omega_1 \cap \Gamma_\varepsilon} F(\boldsymbol{x}, t) d\boldsymbol{x}.
\end{aligned}$$

Dans cette démarche, nous avons utilisé le fait que $F \equiv 0$ sur $\Omega_1 \setminus \Gamma_\varepsilon$. Maintenant, en mettant à profit le fait que $0 \leq F(\boldsymbol{x}, t) \leq \frac{1}{2}$ sur $\Omega_1 \cap \Gamma_\varepsilon$, il s'ensuit que

$$\tilde{M}(\Omega_1) \leq M(\Omega_1) \leq \tilde{M}(\Omega_1) + \frac{\Delta\rho}{2} V(\Omega_1 \cap \Gamma_\varepsilon). \tag{5.9}$$

De cette équation, on obtient que

$$0 \leq \frac{M(\Omega_1) - \tilde{M}(\Omega_1)}{\tilde{M}(\Omega_1)} \leq \frac{\Delta\rho}{2} \frac{V(\Omega_1 \cap \Gamma_\varepsilon)}{\tilde{M}(\Omega_1)}.$$

En utilisant le fait que $\tilde{M}(\Omega_1) = \rho_1 V(\Omega_1)$, on déduit l'inégalité sur l'erreur relative sur la masse du premier fluide :

$$\frac{|M(\Omega_1) - \tilde{M}(\Omega_1)|}{\tilde{M}(\Omega_1)} \leq \left(\frac{\rho_2}{\rho_1} - 1 \right) \frac{V(\Omega_1 \cap \Gamma_\varepsilon)}{2\, V(\Omega_1)}. \tag{5.10}$$

En suivant une démarche similaire, on trouve que

$$\tilde{M}(\Omega_2) - \frac{\Delta\rho}{2} V(\Omega_2 \cap \Gamma_\varepsilon) \leq M(\Omega_2) \leq \tilde{M}(\Omega_2). \tag{5.11}$$

Enfin, on déduit l'inégalité sur l'erreur relative sur la masse du second fluide

$$\frac{|M(\Omega_2) - \tilde{M}(\Omega_2)|}{\tilde{M}(\Omega_2)} \leq \left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_2} \right) \frac{V(\Omega_2 \cap \Gamma_\varepsilon)}{2V(\Omega_2)}. \tag{5.12}$$

Il est aussi possible de déduire deux inégalités additionnelles sur la masse globale, notée $\tilde{M}(\Omega) = \tilde{M}(\Omega_1) + \tilde{M}(\Omega_2)$, en manipulant les inéquations (5.9) et (5.11). En effet, en sommant ces inéquations, on obtient

$$\tilde{M}(\Omega) - \Delta\rho \frac{V(\Omega_2 \cap \Gamma_\varepsilon)}{2} \leq M(\Omega) \leq \tilde{M}(\Omega) + \Delta\rho \frac{V(\Omega_1 \cap \Gamma_\varepsilon)}{2}. \tag{5.13}$$

Enfin, on déduit aussi une inégalité sur l'erreur relative de la masse globale :

$$\frac{|\tilde{M}(\Omega) - M(\Omega)|}{M(\Omega)} \leq \Delta\rho \frac{V(\Gamma_\varepsilon)}{2\, M(\Omega)}. \tag{5.14}$$

Les inégalités (5.9) à (5.14) font ressortir une relation étroite entre la densité de chaque fluide et la demi-largeur de la zone de transition ε. Soulignons que ces six inéquations nous montrent que si les deux fluides ont la même densité ou encore si la zone de transition est de taille nulle, alors on ne commet pas d'erreur. Les inéquations (5.10) et (5.12) montrent que nous perdons plus facilement le contrôle sur la masse des fluides dès que $\rho_2 \gg \rho_1$. De plus, les facteurs d'amplification $\left(\frac{\rho_2}{\rho_1} - 1\right)$ et $\left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_2}\right)$ confirment l'intuition qui suggère que le fluide de moindre densité est le plus affecté par la variation de la zone de transition Γ_ε. Enfin, de l'inéquation (5.14), on peu déduire un critère pour le choix de la taille de la zone de transition. En effet, elle nous permet de calculer la valeur de ε requise pour une précision et pour un ratio de densités donné. Pour le moment, nous n'avons pas exploré cette avenue. Le plus important à retenir est que le contrôle sur l'erreur commise se situe au niveau de la taille de la zone de transition. Le tout se résume à : plus le ratio des densités est grand, plus la taille de la zone de transition doit être petite.

5.1.5 Erreur commise sur la conservation de masse

Comme nous le savons déjà (voir section 2.2.2), l'utilisation de la pseudo-concentration permet de conserver l'incompressibilité des fluides. Considérons un problème du type : une bulle d'air qui monte dans un verre d'eau sous l'effet de la poussée d'Archimède. Dans ce cas, nous pouvons affirmer que la densité et la masse de chaque fluide est constante. Maintenant, supposons que l'on utilise la pseudo-concentration pour modéliser numériquement ce problème et étudions le problème de la conservation de la masse.

Posons $F_i(\boldsymbol{x}) = F(\boldsymbol{x}, t_i)$, $M_i(E) = \int\limits_E \rho(\boldsymbol{x}, t_i) d\boldsymbol{x}$ et $\Delta\rho = \rho_2 - \rho_1$. Puisque ρ_1 et ρ_2 sont constantes, on doit avoir que

$$M_{i+1}(\Omega) - M_i(\Omega) = \Delta\rho \int\limits_\Omega F_{i+1}(\boldsymbol{x}) - F_i(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} = 0. \tag{5.15}$$

Or, dans les faits, on sait que F se diffuse d'un pas de temps à l'autre. De plus, l'intégrale de la différence entre F_{i+1} et F_i ne s'annule pas en raison de la déformation de la région de transition de F à la surface libre au fil du temps. En somme, cette équation n'est jamais exactement respectée. Ceci se confirme dans la pratique où on observe un gain ou une perte de masse de chaque fluide. La question qui se pose est : dans quelle mesure pouvons-nous contrôler ce phénomène ? Afin de

mieux identifier les éléments en cause, continuons notre investigation.

Considérons un schéma d'intégration implicite en temps pour l'équation de transport (2.16) :

$$\frac{\alpha F_{i+1} - (\alpha+\beta)F_i + \beta F_{i-1}}{\Delta t} = -\boldsymbol{u}_{i+1} \cdot \nabla F_{i+1},$$

où $\alpha > \beta \geq 0$. Rappelons que le schéma d'Euler implicte ainsi que le schéma de Gear sont des cas particuliers de cette forme. En prenant comme convention que $\left(\frac{0}{\alpha}\right)^0 = 1$, on a que

$$\begin{aligned} F_{i+1} - F_i &= \frac{\beta}{\alpha}\left(F_i - F_{i-1}\right) - \frac{\Delta t}{\alpha}\boldsymbol{u}_{i+1} \cdot \nabla F_{i+1} \\ &= \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^i \left(F_1 - F_0\right) - \frac{\Delta t}{\alpha}\left(\sum_{n=0}^{i}\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^n \boldsymbol{u}_{i+1-n} \cdot \nabla F_{i+1-n}\right). \end{aligned} \tag{5.16}$$

Posons $\Delta F_i = F_{i+1} - F_i$ et $\Delta M_i = M_{i+1}(\Omega) - M_i(\Omega)$. Alors, on a que

$$\begin{aligned} |\Delta M_i| &= \Delta\rho \left| \int_\Omega \Delta F_i d\boldsymbol{x} \right| \\ &= \Delta\rho \left| \int_\Omega \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^i \Delta F_0 - \frac{\Delta t}{\alpha}\left(\sum_{n=0}^{i}\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^n \boldsymbol{u}_{i+1-n} \cdot \nabla F_{i+1-n}\right) d\boldsymbol{x} \right|. \end{aligned} \tag{5.17}$$

Puisque nous avons $\alpha > \beta \geq 0$, il s'en suit que $\frac{\beta}{\alpha} < 1$. Ainsi, pour i assez grand, nous avons que

$$|\Delta M_i| \approx \Delta\rho \frac{\Delta t}{\alpha} \left| \sum_{n=0}^{i}\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^n \int_\Omega \boldsymbol{u}_{i+1-n} \cdot \nabla F_{i+1-n} d\boldsymbol{x} \right|. \tag{5.18}$$

Si nous pouvions résoudre exactement l'équation de transport et si nous avions la possibilité d'éliminer la zone de transition, alors nous aurions que $\int_\Omega \boldsymbol{u}_i \cdot \nabla F_i \; d\boldsymbol{x} = 0, \forall i$. Ceci entraînerait immédiatement que $|\Delta M_i| = 0$. Néanmoins, nous pouvons obtenir une borne supérieure à

cette quantité. En effet, on a

$$\begin{aligned}\left|\int_{\Omega} \boldsymbol{u}_i \cdot \nabla F_i \, d\boldsymbol{x}\right| &= \left|\int_{\Gamma_\varepsilon^i} \boldsymbol{u}_i \cdot \nabla F_i \, d\boldsymbol{x}\right| \\ &\leq \int_{\Gamma_\varepsilon^i} |\boldsymbol{u}_i \cdot \nabla F_i| \, d\boldsymbol{x} \\ &\leq \sup_{\Gamma_\varepsilon^i} \{|\boldsymbol{u}_i \cdot \nabla F_i|\} \, V(\Gamma_\varepsilon^i),\end{aligned} \tag{5.19}$$

où Γ_ε^i est la zone de transition au i-ème pas de temps. Posons $A(E) = \int_E d\boldsymbol{x}$, l'aire de l'ensemble E. Il est raisonnable d'affirmer que $V(\Gamma_\varepsilon^i) \approx 2 \, A(\Gamma^i) \, \varepsilon$, ce qui revient à dire que $V(\Gamma_\varepsilon^i) = \mathcal{O}(\varepsilon)$. Ceci nous permet de conclure que $\left|\int_{\Omega} \boldsymbol{u}_i \cdot \nabla F_i \, d\boldsymbol{x}\right|$ est au moins linéaire en ε. En mettant ceci à profit dans l'équation (5.18), on obtient

$$\begin{aligned}|\Delta M_i| &\leq \left(\sum_{n=1}^{i+1} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^n \sup_{\Gamma_\varepsilon^n} \{|\boldsymbol{u}_n \cdot \nabla F_n|\} \, A(\Gamma^n)\right) \frac{\Delta t \, \Delta\rho \, (2\varepsilon)}{\alpha} \\ &\leq \left(\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^n\right) \max_{1 \leq n \leq i+1} \left\{\sup_{\Gamma_\varepsilon^n} \{|\boldsymbol{u}_n \cdot \nabla F_n|\} \, A(\Gamma^n)\right\} \frac{\Delta t \, \Delta\rho \, (2\varepsilon)}{\alpha} \\ &= \max_{1 \leq n \leq i+1} \left\{\sup_{\Gamma_\varepsilon^n} \{|\boldsymbol{u}_n \cdot \nabla F_n|\} \, A(\Gamma^n)\right\} \frac{\Delta t \, \Delta\rho \, (2\varepsilon)}{\alpha - \beta}.\end{aligned} \tag{5.20}$$

Quoique cette borne supérieure soit très grossière, elle exhibe tout de même les différents paramètres qu'il faut contrôler pour réduire les erreurs sur la conservation de la masse, soit le pas de temps et la largeur de la zone de transition (2ε). On voit immédiatement que si $\Delta t \to 0$ ou si $2\varepsilon \to 0$, alors l'erreur tend elle aussi vers 0. Du point de vu du problème discret, ceci signifie qu'il faut toujours favoriser un petit pas de temps et une petite zone de transition, ce qui implique des éléments de petite taille, du moins dans la zone de transition. Nous nous assurerons ainsi d'une meilleure discrétisation de l'équation de transport. Ajoutons que vu l'imprécision de notre borne supérieure, nous ne sommes pas en mesure de déduire des valeurs théoriques pour ces paramètres. Finalement, en se servant de l'équation (5.18), on peut déduire une borne supérieure sur la perte de masse totale

au temps t_{i+1}. En effet, on a que

$$\begin{aligned}
|M_{i+1} - M_0| &= \left| \sum_{k=0}^{i} \Delta M_k \right| \\
&= \Delta\rho \left| \sum_{k=0}^{i} \int_{\Omega} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^k \Delta F_0 - \frac{\Delta t}{\alpha} \left(\sum_{n=0}^{k} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^n \boldsymbol{u}_{k+1-n} \cdot \nabla F_{k+1-n} \right) d\boldsymbol{x} \right| \\
&\leq \frac{\alpha\,|\Delta M_0|}{\alpha - \beta} + \sum_{k=0}^{i} \sum_{n=0}^{k} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^n \left| \int_{\Omega} \boldsymbol{u}_{k+1-n} \cdot \nabla F_{k+1-n} d\boldsymbol{x} \right| \frac{\Delta t\ \Delta\rho}{\alpha} \qquad (5.21) \\
&\leq \frac{\alpha\,|\Delta M_0|}{\alpha - \beta} + \sum_{k=0}^{i} \max_{1 \leq n \leq i+1} \left\{ \sup_{\Gamma_\varepsilon^n} \{ |\boldsymbol{u}_n \cdot \nabla F_n| \}\, A(\Gamma^n) \right\} \frac{\Delta t\ \Delta\rho\ (2\varepsilon)}{\alpha - \beta} \\
&= \frac{\alpha\,|\Delta M_0|}{\alpha - \beta} + \max_{1 \leq n \leq i+1} \left\{ \sup_{\Gamma_\varepsilon^n} \{ |\boldsymbol{u}_n \cdot \nabla F_n| \}\, A(\Gamma^n) \right\} \frac{(i+1)\Delta t\ \Delta\rho\ (2\varepsilon)}{\alpha - \beta}.
\end{aligned}$$

Donc

$$|M_{i+1} - M_0| \leq \frac{\alpha\,|\Delta M_0|}{\alpha - \beta} + \max_{1 \leq n \leq i+1} \left\{ \sup_{\Gamma_\varepsilon^n} \{ |\boldsymbol{u}_n \cdot \nabla F_n| \}\, A(\Gamma^n) \right\} \frac{t_{i+1}\ \Delta\rho\ (2\varepsilon)}{\alpha - \beta}, \qquad (5.22)$$

ce qui confirme encore une fois ce que l'intuition suggère *i.e.* l'erreur augmente au fil du temps. Notre défi sera donc de mettre en place une méthodologie numérique permettant de contrôler ces erreurs, puisqu'elles sont clairement inévitables. Ce contrôle dépendra des ressources de calcul qui seront à notre disposition, particulièrement pour les simulations tridimensionnelles.

Une autre source d'erreur sur la conservation de la masse peut être identifiée au niveau de la mise à jour de la pseudo-concentration. En effet, lors de cette opération nous remplaçons F_i par $\tilde{F}_i = F_i + \delta F_i$, où δF_i est la correction apportée à F_i. Notons que par la nature de la pseudo-concentration, δF_i est une fonction qui vaut 0 sur tout le domaine sauf près de la zone de transition. Ainsi, aux pas de temps $i+1$ on résout :

$$\frac{\alpha F_{i+1} - (\alpha + \beta)\tilde{F}_i + \beta F_{i-1}}{\Delta t} + \boldsymbol{u}_{i+1} \cdot \nabla F_{i+1} = 0, \qquad (5.23)$$

ce qui peut être réécrit sous la forme :

$$\frac{\alpha F_{i+1} - (\alpha+\beta)F_i + \beta F_{i-1}}{\Delta t} + \boldsymbol{u}_{i+1} \cdot \nabla F_{i+1} = \frac{(\alpha+\beta)}{\Delta t}\delta F_i. \tag{5.24}$$

Notons que le membre de gauche de cette équation correspond à ce que nous aurions obtenu si nous n'avions pas effectué de mise à jour. La différence majeure réside dans le membre de droite qui n'est plus 0, mais une fonction. Celle-ci peut être vue comme un terme source concentré au niveau de la zone de transition. De là, on voit que la solution qu'on obtiendra sera biaisée. En d'autres mots, la correction induit une erreur qui sera transportée par la suite. Puisque le terme source agit principalement au niveau de la zone de transition, on peut s'attendre à une variation de masse plus importante après une mise à jour. Soulignons que dans ce qui précède, nous n'avons émis aucune hypothèse sur la stratégie de mise à jour. Il s'en suit que ce problème à lieu peu importe la stratégie utilisée. En somme, la meilleure façon d'agir est de tenter de ne pas effectuer de mises à jour ou du moins de le faire le moins souvent possible.

5.2 Modélisation de la tension superficielle

Au chapitre 2, nous avons souligné que ce terme mérite beaucoup d'attention. En effet, une mauvaise approximation de la courbure peut conduire à des aberrations physiques. La plus fréquente est l'apparition d'oscillations parasites (Dufour, 1999; Marchandise, 2006) dans le champ de vitesse à l'intérieur de la zone de transition. La présence des dérivées premières et secondes de F dans le calcul de l'approximation de la courbure suggère naturellement l'utilisation de polynômes d'interpolation qui sont au moins quadratiques. Cependant, pour des raisons de coût en mémoire et de temps de calcul, il est souhaitable de pouvoir utiliser des interpolants linéaires. Ce «tour de force» est possible en acceptant un léger surcoût pour reconstruire les dérivées. De plus, en accord avec les travaux de Marchandise (2006), il est préférable de reconstruire les dérivées même dans le cas d'interpolants de degré supérieur.

Remarque 5.1. Le choix du faible degré des polynômes d'interpolation a pour objectif de réduire la taille des systèmes linéaires à résoudre. Il faut aussi souligner que Marchandise (2006) utilise des polynômes de degré supérieur dans une stratégie de résolution découplée des équations

de conservation et de l'équation de transport. Comme nous utilisons une stratégie de résolution mixte couplée, cette approche devient trop coûteuse. C'est pourquoi nous nous concentrerons sur l'utilisation de polynômes linéaires et au plus quadratiques.

5.2.1 Reconstruction des dérivées de *F*

En accord avec l'équation (2.19), l'approximation de la courbure fait intervenir les dérivées première et seconde de F. Il est donc important que ces dernières soit bien approximées afin d'obtenir une bonne évaluation de la courbure. La reconstruction des dérivées pour arriver à cette fin n'est pas une idée nouvelle. En effet, une telle stratégie est utilisée par Marchandise (2006). Ici, nous ne faisons qu'un survol des différentes méthodes que nous avons testées. Les principaux ouvrages de référence qui nous ont servi sont le mémoire de Ciupercă (2005) et la thèse de Marchandise (2006). Dans ces deux cas, les reconstructions sont faites par cellule d'éléments (Zienkiewicz et Zhu, 1992a,b). Cette façon de procéder a pour principal attrait d'être locale.

Définition 5.1. Soient Ω un domaine, Ω_h un maillage sur ce domaine et s un nœud géométrique de Ω_h. On définit une cellule d'éléments en s par

$$P(s) = \{T \in \Omega_h \mid s \in T\}.$$

La figure 5.4 illustre une cellule d'éléments au nœud s pour un maillage composé d'éléments triangulaires. Il est à noter que dans cette figure, nous représentons non seulement les nœuds géométriques mais tous les nœuds de calcul. Avec cet objet, nous pouvons présenter l'idée de base pour la reconstruction d'une fonction quelconque.

Considérons une fonction f définie sur Ω de discrétisation f_h sur Ω_h. Alors, sur chaque cellule d'éléments, nous construisons une approximation de degré n à l'aide de la méthode des moindres carrés. Ensuite, en utilisant cette approximation, on redéfinit les valeurs de f_h aux nœuds intérieurs de la cellule (voir figure 5.4). Soulignons qu'avec cette procédure, les nœuds géométriques ne sont redéfinis qu'une seule fois, mais ce n'est pas le cas des autres nœuds, soit ceux sur les arrêtes et à l'intérieur des éléments qui appartiennent généralement à plus d'une cellule. Il s'ensuit que la redéfinition de f_h en ces points n'est pas unique. Pour résoudre ce problème, il est d'usage d'utiliser la moyenne arithmétique des différentes valeurs possibles. Aussi, qui dit moindres carrés

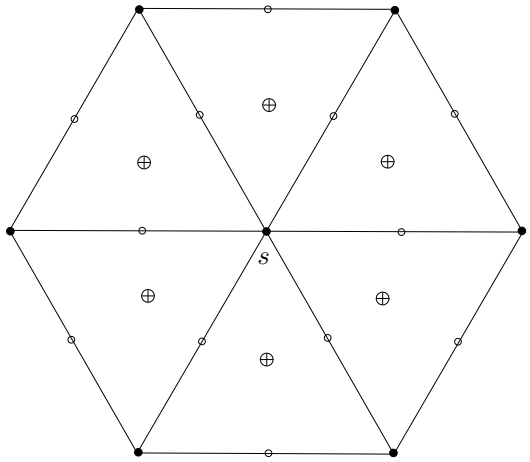


Figure 5.4 Cellule d'éléments pour un maillage triangulaire ($\cdot$: nœud géométrique, $\circ$: nœud de calcul sur une arrête et $\oplus$: nœud de calcul à l'intérieur d'un élément).

dit points d'échantillonnage. Ces points d'échantillonnage sont généralement choisis comme des points de Gauss dans chaque élément de la cellule. La raison principale qui justifie ce choix est qu'avec la méthode des éléments finis, il est déjà nécessaire de connaître f_h en ces points pour l'intégration numérique. En 2 dimensions, il est connu que les barycentres des éléments sont des points de superconvergence pour l'estimation d'erreur a posteriori (Zienkiewicz et Zhu, 1992a,b). Toutefois, aucun résultat similaire n'existe en 3D.

Nous avons testé cinq différentes méthodes de reconstruction des dérivées. Nous les présentons succinctement, en croissance de coût et de complexité.

1. **La double projection dans L_2 (DL2P)**

   La double projection dans L_2 (Ciupercă, 2005) est la moins coûteuse de toutes les reconstructions présentées. Cette méthode reconstruit les dérivées seulement aux nœuds géométriques. La reconstruction des dérivées premières est faite par moyenne pondérée

   $$f_h(s) = \frac{\sum\limits_{T \in P(s)} V(T) \int\limits_T f_h d\boldsymbol{x}}{\sum\limits_{T \in P(s)} V(T)}.$$

   Ensuite, en utilisant des polynômes d'interpolation linéaire, on reconstruit le hessien à partir du gradient reconstruit de la même manière.

2. **La simple approximation linéaire (SLF)**

   Cette méthode consiste à effectuer la reconstruction linéaire des dérivées premières de F (Ciupercă, 2005). Ceci nous permet de redéfinir ∇F à chaque nœud. Ensuite, en dérivant cette reconstruction selon chaque variable, on trouve une approximation du hessien en chaque nœud. Cette façon de procéder est assez simple et peu coûteuse.

3. **La double approximation linéaire (DLF)**

   La double approximation linéaire (Ciupercă, 2005) est l'amélioration directe de la simple approximation linéaire. L'approximation du gradient est la même. C'est au niveau du hessien que cette méthode diffère. En effet, dans cette méthode on ne se contente pas de simplement dériver le gradient pour obtenir le hessien. Dès que les dérivées du gradient sont calculées, on effectue une régression linéaire pour tenter d'en améliorer la qualité. Comme on peut s'y attendre, cette reconstruction est un peu plus coûteuse, mais les approximations sont de meilleure qualité.

4. **L'approximation quadratique (QF)**

   Avec l'approximation quadratique (Ciupercă, 2005), on ne reconstruit non pas le gradient de F, mais bien F elle même. Ensuite, on dérive cette régression quadratique pour obtenir les approximations des dérivées aux points désirés. Cette méthode a la particularité de retourner les dérivées exactes si F est a priori quadratique.

5. **Le développement de Taylor quadratique (MR)**

   L'idée à la base de la méthode va comme suit (Marchandise, 2006). On fait le développement de Taylor de F jusqu'au degré 2. Ensuite, on définit comme inconnues F et ses dérivées. On résout le tout au sens des moindres carrés et on trouve en une seule étape toutes les quantités reconstruites. Soulignons que cette approche est équivalente à l'approximation quadratique.

Au chapitre 8 nous ferons une comparaison de ces différentes approches afin d'identifier la méthode la mieux adaptée à nos besoins. Il faut souligner que dans tous les cas, ces méthodes de reconstruction utilisées avec des interpolants linéaires donnent une courbure présentant beaucoup d'oscillations. Afin de les réduire, nous avons eu recours à une étape de lissage à l'aide du filtre chapeau généralisé (Jansen, 1999).

Définition 5.2. Soient s un nœud d'un maillage Ω_h sur Ω, $P(s)$ une cellule d'élément en s et f une fonction définie et intégrable sur $P(s)$. On définit le filtre chapeau généralisé comme

$$\overline{f_h}(s) = \frac{1}{V\left(P(s)\right)} \int\limits_{P(s)} f_h dV.$$

En terminant, ajoutons que la reconstruction des dérivées, tout comme la mise à jour de F, a des conséquences sur la conservation de la masse. En effet, soit GF le gradient reconstruit suivant une méthode quelconque. Alors l'équation de transport n'est pas nécessairement respectée. Ceci engendre un problème de conservation de la masse. Il serait donc judicieux de tenter de trouver une solution qui nous permettrait de respecter l'équation de transport avec le gradient reconstruit. Voici une avenue qui pourrait résoudre ce problème.

Commençons par écrire la projection de GF dans $\boldsymbol{u}^{\perp}$,

$$\widehat{GF} = GF - (\boldsymbol{u} \cdot GF)\frac{\boldsymbol{u}}{\|\boldsymbol{u}\|_2^2}. \tag{5.25}$$

Ensuite, définissons

$$\widetilde{GF} = \widehat{GF} - \frac{\partial F}{\partial t}\frac{\boldsymbol{u}}{\|\boldsymbol{u}\|_2^2}. \tag{5.26}$$

Écrivons l'équation de transport (5.14) en substituant $\widetilde{GF}$ à ∇F. On a que

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \widetilde{GF} &= \frac{\partial F}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \left(\widehat{GF} - \frac{\partial F}{\partial t}\frac{\boldsymbol{u}}{\|\boldsymbol{u}\|_2^2}\right) \\
&= \frac{\partial F}{\partial t} + \underbrace{\boldsymbol{u} \cdot \widehat{GF}}_{0} - \frac{\partial F}{\partial t}\left(\frac{\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u}}{\|\boldsymbol{u}\|_2^2}\right) \\
&= 0,
\end{aligned}$$

ce qui signifie que le vecteur $\widetilde{GF}$ possède la propriété voulue. Cette stratégie semble théoriquement correcte et assez simple à implémenter. Toutefois, puisque notre but est de modéliser les écoulements turbulents à surface libre et non de résoudre la totalité des problèmes liés à la conservation de la masse, nous n'avons pas poursuivi dans cette direction. Cependant, c'est une avenue qui reste ouverte pour de futures améliorations du modèle.

Chapitre 6

Écoulements turbulents incompressibles

Dans la nature, la majorité des écoulements observés sont turbulents. Il est donc primordial d'être en mesure d'étudier ce type d'écoulement. Depuis Reynolds, trois grandes familles de modèles de simulations numériques ont vu le jour. Le premier est le modèle RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*), introduit par Reynolds lui-même. Le second, le modèle DNS (*Direct Numerical Simulation*), est basé sur le théorie de Kolmogorov. Enfin, le modèle LES (Large Eddy Simulation), fut initialement proposé par Deardoff (1970). Dans ce chapitre, nous allons présenter ces modèles en mettant l'emphase sur le troisième. Notons que dans ce qui suit, nous faisons l'hypothèse que la viscosité et la densité des fluides sont constantes. Dans la littérature, ces modèles sont généralement présentés sous cette hypothèse, qu'elle soit implicite ou explicite.

6.1 Les équations de Navier-Stokes moyennées (RANS)

La principale caractéristique d'un écoulement turbulent est que son champ de vitesse est aléatoire dans l'espace et le temps. Par exemple, si on fixe le temps et qu'on observe le champ de vitesse, on constate que celui-ci a un comportement imprévisible. Il en est de même si on porte notre attention sur un point particulier de l'espace et qu'on laisse le temps s'écouler. En d'autres mots, le champ de vitesse peut être considéré comme une variable aléatoire. Il devient donc naturel de parler du champ de vitesse moyen et de la *décomposition de Reynolds*,

$$\boldsymbol{u} = \langle \boldsymbol{u} \rangle + \boldsymbol{u}', \tag{6.1}$$

où $\langle \boldsymbol{u} \rangle$ est le *champ de vitesse moyen* et $\boldsymbol{u}'$ est le *champ des fluctuations*. Notons qu'une présentation complète de la description statistique des écoulements turbulents est disponible dans Pope (2001). Il est d'usage de supposer que $\langle \boldsymbol{u} \rangle$ est la moyenne d'ensemble des champs de vitesse

obtenus par un grand nombre de répétitions de l'écoulement *i.e.*

$$\langle \boldsymbol{u} \rangle(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{u}^i(\boldsymbol{x}, t).$$

Cette moyenne possède les propriétés suivantes aussi appelées *axiomes de Reynolds* :

1. Normalisation :
$$\langle 1 \rangle = 1\,; \tag{6.2}$$
2. Idempotence :
$$\langle \langle \boldsymbol{u} \rangle \rangle = \langle \boldsymbol{u} \rangle\,; \tag{6.3}$$
3. Linéarité :
$$\langle \boldsymbol{u} + \boldsymbol{v} \rangle = \langle \boldsymbol{u} \rangle + \langle \boldsymbol{v} \rangle\,; \tag{6.4}$$
4. Commutativité avec la dérivation :
$$\left\langle \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial s} \right\rangle = \frac{\partial \langle \boldsymbol{u} \rangle}{\partial s}, \text{ où } s = x_1, x_2, x_3, t. \tag{6.5}$$

On peut remarquer qu'à l'aide des propriétés 2 et 3, on a que

$$\langle \boldsymbol{u'} \rangle = \langle \boldsymbol{u} - \langle \boldsymbol{u} \rangle \rangle = 0.$$

En appliquant l'opérateur $\langle \cdot \rangle$ sur le système d'équations de Navier-Stokes, on obtient ce qu'on appelle la version moyennée :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \langle \boldsymbol{u} \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \boldsymbol{u} \rangle \otimes \langle \boldsymbol{u} \rangle) + \nabla \langle p \rangle - \nabla \cdot \left(\dfrac{2}{Re} \nabla^S \langle \boldsymbol{u} \rangle \right) + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \dfrac{1}{Fr^2} \boldsymbol{g}; \\ \nabla \cdot \langle \boldsymbol{u} \rangle = 0, \end{cases} \tag{6.6}$$

où

$$\boldsymbol{\sigma} = \langle \boldsymbol{u}' \otimes \boldsymbol{u}' \rangle \tag{6.7}$$

est le tenseur de Reynolds. Afin de pouvoir résoudre le système d'équations moyennées, nous devons faire appel à un modèle pour le tenseur de Reynolds. À l'aide de l'*hypothèse de la viscosité*

turbulente proposée par Boussinesq en 1877, nous obtenons

$$\langle \boldsymbol{u}' \otimes \boldsymbol{u}' \rangle - \frac{2}{3} tr(\langle \boldsymbol{u}' \otimes \boldsymbol{u}' \rangle) = -2\nu_t \nabla^S \langle \boldsymbol{u} \rangle. \tag{6.8}$$

En posant $\langle p^* \rangle = \langle p \rangle + \frac{2}{3} tr(\langle \boldsymbol{u}' \otimes \boldsymbol{u}' \rangle)$, que l'on note tout de même $\langle p \rangle$, on obtient les *équations de Navier-Stokes moyennes* sous leur forme commune :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \langle \boldsymbol{u} \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \boldsymbol{u} \rangle \otimes \langle \boldsymbol{u} \rangle) + \nabla \langle p \rangle - \nabla \cdot \left(2 \left(\dfrac{1}{Re} + \nu_t \right) \nabla^S \langle \boldsymbol{u} \rangle \right) = \dfrac{1}{Fr^2} \boldsymbol{g} \,; \\ \nabla \cdot \langle \boldsymbol{u} \rangle = 0. \end{cases} \tag{6.9}$$

Afin de pouvoir résoudre ce système, il ne reste qu'à fixer la valeur de ν_t. Parmi les différents modèles existants (Pope, 2001; Schiestel, 1998), le plus fréquemment rencontré est le modèle $k-\epsilon$ de Jones et Launder (1972). Il s'agit d'un modèle à deux équations : l'*équation de transport de l'énergie cinétique turbulente* et l'*équation du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente*. Elles sont résolues avec les équations moyennes afin de déterminer la viscosité turbulente

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}, \tag{6.10}$$

où C_μ est une constante dont la valeur est habituellement fixée à $0{,}09$, k est l'énergie cinétique et ϵ est le taux de variation de l'énergie turbulente. Plus de détails ainsi que certaines variantes du modèle peuvent être trouvées dans Pope (2001).

Le principal attrait de cette approche est qu'elle permet de grandement réduire la taille des systèmes à résoudre. En effet, suivant ce modèle on peut simuler des écoulements turbulents en utilisant des domaines en deux dimensions, ce qui constitue un gain considérable en temps de calcul et en espace mémoire. Cependant, ce modèle ne permet a priori d'obtenir que de l'information sur l'écoulement moyen. De plus, si nous voulons être cohérent avec la nature de la moyenne d'ensemble, alors nous ne pouvons simuler des écoulements transitoires que si cette dernière conserve la dépendance en temps. C'est le cas par exemple si la turbulence évolue lentement dans le temps ou si l'écoulement turbulent est soumis à une condition limite ou un terme source variant dans le temps. Ce sont les principales faiblesses de ce modèle. En effet, si la moyenne d'ensemble varie dans le temps alors elle n'est pas ergodique *i.e.* elle n'est pas égale à la moyenne temporelle.

La comparaison avec des statistiques expérimentales qui sont faites avec la moyenne temporelle est donc impossible. Si tel est l'objectif, il faut faire l'hypothèse d'ergodicité et laisser tomber la dépendance en temps. Ce faisant, on perd de l'information importante. En effet, les écoulements turbulents sont par nature tridimensionnels et transitoires. C'est d'ailleurs ce qui nous a permis d'affirmer que leur champ de vitesse est une variable aléatoire. En résumé, ce modèle peut être suffisant si on s'intéresse aux statistiques d'un écoulement turbulent, mais il devient insuffisant si on veut étudier les écoulements turbulents plus en détails.

6.2 Simulation numérique directe

À l'opposé du modèle RANS, la simulation numérique directe ne nécessite aucune modification des équations de Navier-Stokes. Cette approche consiste à résoudre directement les équations sur un maillage approprié afin de faire apparaître les comportements turbulents. Elle est le nec plus ultra en ce qui a trait à la qualité des résultats obtenus. Toutefois, tout ceci a un prix très élevé en ressources de calcul, ce qui en fait le modèle le plus coûteux.

Pour comprendre exactement sur quoi ce modèle est basé, nous devons mieux comprendre comment se comporte un écoulement turbulent. L'idée principale est basée sur le concept de cascade d'énergie de Richardson (Pope, 2001). De son point de vue, la turbulence peut être considérée comme un ensemble d'échelles de tailles différentes. Une échelle est conceptuellement un endroit de l'espace contenant un tourbillon turbulent. L'idée de Richardson est que les grandes échelles sont instables et qu'en se brisant, elles transfèrent leur énergie à des échelles de plus petites tailles qui, à leur tour, vont se briser et transmettre leur énergie à des échelles encore plus petites et ainsi de suite (voir figure 6.1). La question qui se pause est : quand ce processus prend-t-il fin ? En d'autres mots : quand les échelles seront-elles assez petites pour que la viscosité moléculaire dissipe cette énergie ?

La réponse à cette question se trouve dans la théorie de Kolmogorov (1941) (Zaleski, 1999; Pope, 2001; Prud'homme, 2006). Dans sa version la plus simple, cette théorie est constituée de deux hypothèses et d'une analyse dimensionnelle. Elle mène à la loi en -$5/3$ du spectre de densité d'énergie en fonction du nombre d'onde k de Kolmogorov (voir figure 6.2). Il découle de cette théorie que le rapport de taille des plus petites échelles est de l'ordre de $Re^{-3/4}$. Ceci implique

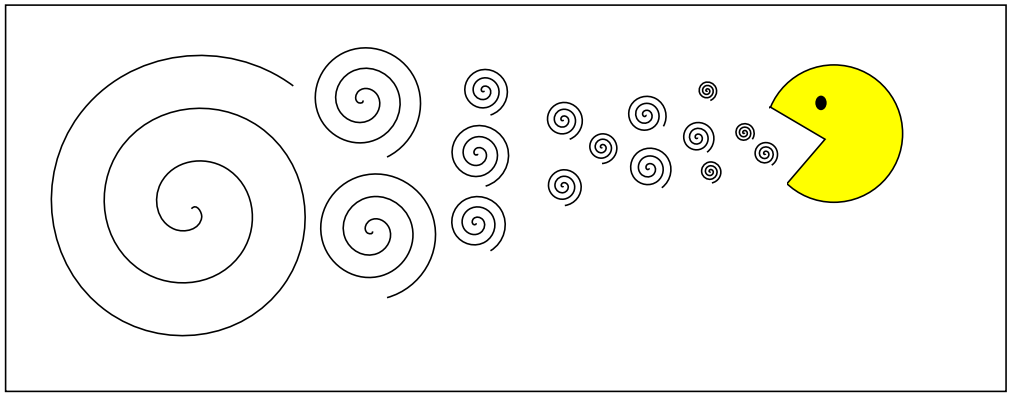


Figure 6.1 Illustration de la cascade d'énergie.

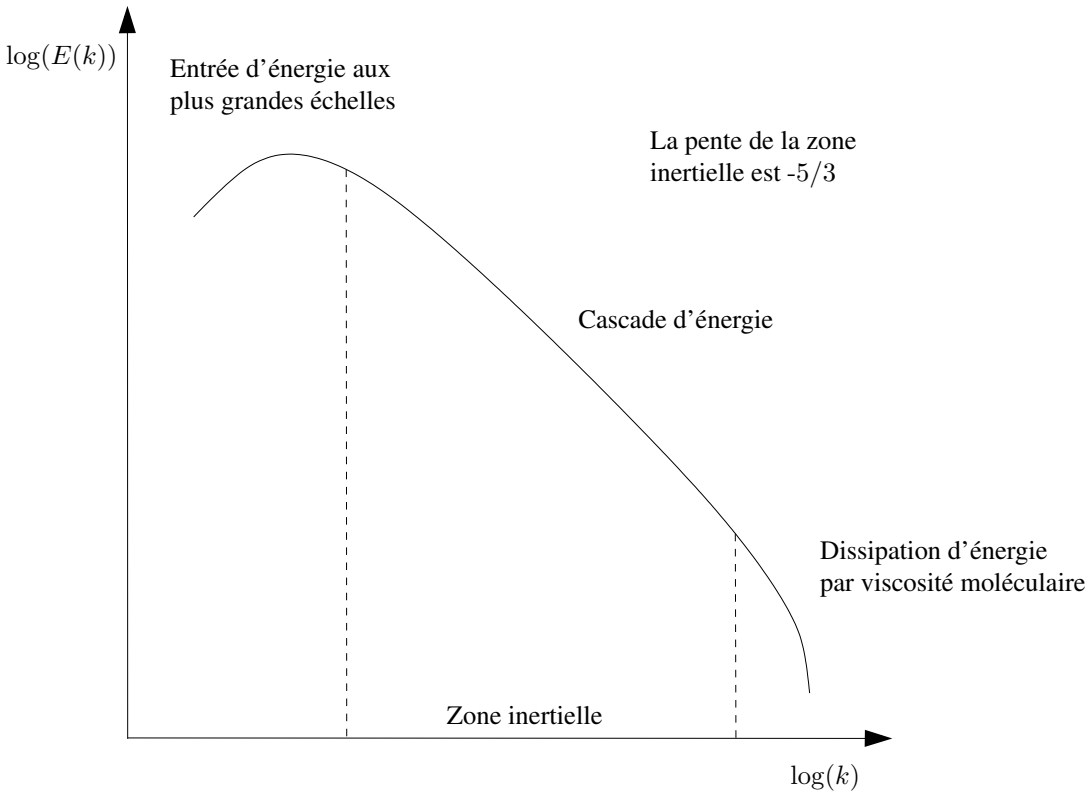


Figure 6.2 Loi en -$5/3$ de Kolmogorov.

que si nous voulons faire une simulation numérique directe, i.e. résoudre toutes les échelles d'un écoulement turbulent avec un code d'éléments finis, la taille des éléments que nous devrons utiliser devra être de cette grandeur. Ceci signifie qu'il faudra de l'ordre de $Re^{9/4}$ éléments pour faire une simulation 3-D. Puisque les problèmes d'intérêt ont des nombres de Reynolds de l'ordre de 10^6, on voit immédiatement que le coût en temps de calcul associé à ce type de simulation est énorme en supposant, bien entendu, que l'on ait accès à un ordinateur apte à gérer un problème de cette taille. En somme, cette approche n'est, pour le moment, possible que pour des problèmes d'une taille modérée.

6.3 La simulation des grandes échelles (LES)

Nous avons donc d'un côté le modèle RANS, une approche peu coûteuse en terme de temps de calcul, mais qui nous offre peu de contrôle sur la qualité et la quantité d'information obtenue. De l'autre côté nous avons le modèle DNS qui est très coûteux, voire même impossible à utiliser dans la plupart des cas, mais dont la qualité des résultats est en un sens optimale. Une question naturelle se pause : existe-t-il un juste milieu permettant de contrôler la qualité et la quantité des informations tout en ayant un coût raisonnable ? La réponse est oui et il s'agit de la simulation des grandes échelles.

L'idée de base de ce modèle est similaire à celle du modèle RANS. On décompose aussi le champ de vitesse en deux parties. Toutefois, cette décomposition ne s'effectue plus à l'aide d'une moyenne, mais par l'application d'un filtre par convolution, généralement effectuée dans l'espace. Ce faisant, on obtient une décomposition du champ de vitesse semblable à celle de Reynolds,

$$\boldsymbol{u} = \overline{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{u}'. \tag{6.11}$$

La partie filtrée $\overline{\boldsymbol{u}}$ est dite *résolue* et est définie par

$$\overline{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}, t) = \int_{\mathbf{R}^3} K(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\xi}) \boldsymbol{u}(\boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \tag{6.12}$$

où K est le noyau de convolution associé à un filtre donné. Cette notation un peu lourde est

habituellement remplacée par

$$\overline{\boldsymbol{u}} = K * \boldsymbol{u}. \tag{6.13}$$

La partie résiduelle $\boldsymbol{u}'$, appelée *sous-maille*, n'est rien d'autre que le reste entre le champ de vitesse et le champ de vitesse résolu.

Le filtre ne peut pas être choisi de façon arbitraire car son noyau de convolution K doit respecter les trois propriétés suivantes :

1. Normalisation :
$$\overline{1} = 1\,; \tag{6.14}$$

2. Linéarité :
$$\overline{\boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}} = \overline{\boldsymbol{u}} + \overline{\boldsymbol{v}}\,; \tag{6.15}$$

3. Commutativité avec la dérivation :
$$\overline{\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial s}} = \frac{\partial \overline{\boldsymbol{u}}}{\partial s}, \text{ où } s = x_1, x_2, x_3, t. \tag{6.16}$$

Remarque 6.1. Ces propriétés sont essentielles pour le filtrage des équations de Navier-Stokes. La propriété 3 n'est plus vraie dès que le domaine devient fini, ce qui fera apparaître une intégrale sur la frontière du domaine dont nous reparlerons après avoir dérivé le système d'équations de Navier-Stokes filtré.

À partir de maintenant, nous prendrons pour acquis que le filtre utilisé possède les propriétés énoncées et que notre domaine est $\mathbb{R}^3$. Voici trois noyaux couramment rencontrés dans la littérature :

1. Le filtre spectral :
$$K(\boldsymbol{x}) = \prod_{i=1}^{3} \frac{\sin\left(\frac{2\pi x_i}{\delta}\right)}{\pi x_i}\,; \tag{6.17}$$

2. Le filtre chapeau :
$$K(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} \frac{4}{3\delta^3} & \text{si } \|\boldsymbol{x}\|_2 \leq \delta\,; \\ 0 & \text{sinon}\,; \end{cases} \tag{6.18}$$

3. Le filtre gaussien :

$$K(\boldsymbol{x}) = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{3/2} \frac{1}{\delta^3} \exp\left(-\frac{\lambda \|\boldsymbol{x}\|_2^2}{\delta^2}\right), \tag{6.19}$$

où λ est une constante généralement fixée à 6.

Dans tous les cas, δ est la *largeur du filtre*. Notons que ce ne sont pas là les seuls filtres existants. À ceux-ci s'ajoutent les filtres différentiels que nous ne traiterons pas ici. Le lecteur intéressé pourra trouver une introduction à ce sujet dans Sagaut (2006). Ajoutons que pour les filtres présentés, la largeur du filtre est considérée constante. Certaines raisons, que nous verrons ultérieurement, suggèrent qu'il serait souhaitable de laisser la largeur de filtre varier. Cependant, ce faisant, plusieurs inégalités importantes ne tiennent plus et le cadre mathématique devient plutôt précaire.

6.3.1 Filtrage des équations de Navier-Stokes

La première étape dans la construction du modèle LES est de filtrer les équations de Navier-Stokes. Le résultat de cette démarche nous donnera à peu de choses près un système ayant la même forme que celui du modèle RANS. Quoiqu'il en soit, nous les dériverons en entier.

Commençons par l'équation de continuité. L'application du filtre donne :

$$\begin{aligned} & \overline{\nabla \cdot \boldsymbol{u}} = \overline{0} \\ \iff & \nabla \cdot \overline{\boldsymbol{u}} = 0 \quad \text{(propriétés 2 et 3).} \end{aligned} \tag{6.20}$$

Poursuivons avec l'équation de la conservation de la quantité de mouvement. C'est ici que le travail commence. L'application du filtre nous donne successivement

$$\begin{aligned} & \overline{\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}) + \nabla p - \nabla \cdot \left(\frac{2}{Re} \nabla^S \boldsymbol{u}\right)} = \frac{1}{Fr^2} \overline{\boldsymbol{g}} \\ \iff & \overline{\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}} + \overline{\nabla \cdot (\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u})} + \overline{\nabla p} - \overline{\nabla \cdot \left(\frac{2}{Re} \nabla^S \boldsymbol{u}\right)} = \frac{1}{Fr^2} \boldsymbol{g} \qquad \text{(propriétés 1 et 2)} \\ \iff & \frac{\partial \overline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}}) + \nabla \overline{p} - \nabla \cdot \left(\frac{2}{Re} \nabla^S \overline{\boldsymbol{u}}\right) = \frac{1}{Fr^2} \boldsymbol{g} \qquad \text{(propriétés 1 et 3)} \\ \iff & \frac{\partial \overline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\boldsymbol{u}} \otimes \overline{\boldsymbol{u}}) + \nabla \overline{p} - \nabla \cdot \left(\frac{2}{Re} \nabla^S \overline{\boldsymbol{u}}\right) + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{Fr^2} \boldsymbol{g}, \end{aligned} \tag{6.21}$$

où $\boldsymbol{\sigma} = \overline{\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}} - \overline{\boldsymbol{u}} \otimes \overline{\boldsymbol{u}}$ est aussi appelé le *tenseur de Reynolds*.

Arrivé à ce point, force est de constater qu'aucune des propriétés énoncées ne nous permet de traiter directement le terme de convection, c'est-à-dire comment passer de $\overline{\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}}$ à $\overline{\boldsymbol{u}} \otimes \overline{\boldsymbol{u}}$. Il s'ensuit que sous cette forme, le système d'équations de Navier-Stokes filtrées :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \overline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\boldsymbol{u}} \otimes \overline{\boldsymbol{u}}) + \nabla \overline{p} - \nabla \cdot \left(\dfrac{2}{Re} \nabla^S \overline{\boldsymbol{u}} \right) + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \dfrac{1}{Fr^2} \boldsymbol{g} \, ; \\ \nabla \cdot \overline{\boldsymbol{u}} = 0, \end{cases} \tag{6.22}$$

est impossible à résoudre. Pour y arriver, nous devons trouver un moyen de modéliser le tenseur de Reynolds $\boldsymbol{\sigma}$ en fonction de $\overline{\boldsymbol{u}}$.

6.3.2 Erreur de commutation

Dans ce qui précède, nous avons filtré les équations de Navier-Stokes en considérant tout $\mathbb{R}^3$. Cependant, dans la pratique, nous utiliserons un domaine fini $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Ce faisant, la commutativité entre l'opération de filtrage et la dérivation n'est plus respectée et une intégrale apparaît sur la frontière dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$A_\delta(\boldsymbol{u},p)(\boldsymbol{y},t) = \int_{\partial\Omega} K(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \left(2\mu \nabla^S \boldsymbol{u} - p\boldsymbol{\delta} \right) (\boldsymbol{x},t) \cdot \boldsymbol{n}_{\partial\Omega}(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}, \tag{6.23}$$

où $\partial\Omega$ est la frontière de Ω, $\boldsymbol{\delta}$ est le delta de Kronecker et $\boldsymbol{n}_{\partial\Omega}$ est la normale extérieure à la frontière de Ω. Quoiqu'il n'existe aucune preuve formelle bien établie que cette erreur soit toujours négligeable, il est d'usage de ne pas en tenir compte (John, 2004; Berselli *et al*., 2006) et nous irons dans cette direction. Ainsi, nous ne ferons pas de distinction entre les équations filtrées dans $\mathbb{R}^3$ ou dans un domaine fini Ω. Cependant, il faut rester conscient que cette erreur existe.

6.3.3 Modélisation du tenseur de Reynolds

Nous présentons deux approches pour modéliser le tenseur de Reynolds. La première, appelée *modèle de viscosité turbulente*, suit les grandes lignes du modèle RANS. La modélisation

du tenseur passe par l'hypothèse de Boussinesq qui s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma} - \frac{tr(\boldsymbol{\sigma})}{3}\boldsymbol{\delta} = -2\nu_T \nabla^S \cdot \overline{\boldsymbol{u}}, \tag{6.24}$$

où $\nu_T \geq 0$ est la viscosité turbulente. Dans la seconde, on s'attaque directement à la modélisation du tenseur $\overline{\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}}$. Par exemple, on commence par appliquer la *décomposition de Léonard* à $\overline{\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}}$, ce qui nous donne

$$\begin{aligned} \overline{\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}} &= \overline{(\overline{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{u}') \otimes (\overline{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{u}')} \\ &= \overline{\overline{\boldsymbol{u}} \otimes \overline{\boldsymbol{u}}} + \overline{\overline{\boldsymbol{u}} \otimes \boldsymbol{u}'} + \overline{\boldsymbol{u}' \otimes \overline{\boldsymbol{u}}} + \overline{\boldsymbol{u}' \otimes \boldsymbol{u}'}. \end{aligned} \tag{6.25}$$

De là, on applique la transformée de Fourier aux trois premiers termes. Cette opération a pour objectif de changer le produit de convolution en un produit arithmétique. Ensuite, on fait une approximation de la transformée de Fourier du noyau de convolution avec une série de Taylor ou avec des fonctions rationnelles. Suivant ce choix, on parlera du modèle *LES de Taylor* ou du modèle *LES rationnel*. En appliquant la transformée de Fourier inverse, on obtient une expression en fonction de $\overline{\boldsymbol{u}}$, ce qui règle le problème lié à ces trois termes. Il reste le dernier terme, $\overline{\boldsymbol{u}' \otimes \boldsymbol{u}'}$, qu'on modélise en utilisant la viscosité turbulente. Ces modèles sont détaillés dans John (2004) et d'autres types de modélisations sont présentés dans Sagaut (2006).

Remarque 6.2. L'utilisation du développement de Taylor ou des fonctions rationnelles présente un inconvénient majeur. En effet, même si la transformée de Fourier du noyau de convolution est bien approximée, il n'en est pas nécessairement de même pour son inverse (John, 2004; Berselli *et al*., 2006). Il s'ensuit que la modélisation du tenseur de Reynolds peut engendrer des problèmes d'inconsistances physiques importants. Par exemple, en utilisant le modèle LES de Taylor, il est possible d'obtenir une énergie infinie lors de la simulation d'un écoulement turbulent dans un canal ouvert (John, 2004)

Dans notre cas, nous nous concentrerons sur la première approche. Suivant celle-ci, la pression est redéfinie par

$$\tilde{p} = \overline{p} + \frac{tr(\boldsymbol{\sigma})}{3}, \tag{6.26}$$

que l'on continuera de noter $\overline{p}$. La pression que nous calculerons sera par conséquent biaisée. Nous

pouvons maintenant écrire les équations de Navier-Stokes de base pour le modèle LES :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \overline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\boldsymbol{u}} \otimes \overline{\boldsymbol{u}}) + \nabla \overline{p} - \nabla \cdot \left(2 \left(\dfrac{1}{Re} + \nu_T \right) \nabla^S \overline{\boldsymbol{u}} \right) = \dfrac{1}{Fr^2} \boldsymbol{g} \,; \\ \nabla \cdot \overline{\boldsymbol{u}} = 0, \end{cases} \tag{6.27}$$

où $\overline{p}$ provient de l'expression (6.26). Ces équations sont dites de base en ce sens que les équations des autres modèles LES s'obtiennent par l'ajout d'un terme (John, 2004).

Afin de fermer le système des équations filtrées, il ne reste qu'à fixer la valeur de la viscosité turbulente. Ceci se fait par l'intermédiaire du modèle de Smagorinsky :

$$\nu_t = (C_S \delta)^2 \| \nabla^S \overline{\boldsymbol{u}} \|_F \tag{6.28}$$

où C_S est la *constante de Smagorinsky* et $\| \nabla^S \overline{\boldsymbol{u}} \|_F = \sqrt{2 \nabla^S \overline{\boldsymbol{u}} : \nabla^S \overline{\boldsymbol{u}}}$ est la norme de Frobenius du tenseur du taux des déformations. La majorité des livres consultés sur le sujet (John, 2004; Pope, 2001; Bailly et Comte-Bellot, 2003; Berselli *et al*., 2006; Sagaut, 2006) s'entendent pour dire que ce modèle induit généralement trop de diffusion à la paroi, de sorte que si une trop grande valeur C_S est choisie, il peut arriver que le passage à la turbulence ne s'effectue pas. C'est le cas de la valeur $C_S = 0{,}17$ déduite par Lilly (1992) en se basant sur la théorie de Kolmogorov. La valeur de C_S la plus souvent rencontrée dans la littérature est $0{,}1$. Hormis ce problème, d'autres sources d'erreurs sont identifiées, mais cette fois elles sont liées à l'opération de filtrage et aux conditions frontières.

En pratique, le modèle LES est utilisé avec les conditions frontières physiques. Toutefois, ces conditions ne sont pas respectées du point de vue du champ de vitesse filtré. En effet, considérons un écoulement de Poiseuille avec des conditions de Dirichlet nulles aux parois et soit δ la largeur du filtre. La figure 6.3 montre que la vitesse filtrée en un point sur le bord dépend de la vitesse à l'intérieur du domaine. En somme, elle n'est pas nulle et ne correspond pas aux conditions frontières physiques. Le même type de raisonnement s'applique aussi aux conditions de type Neumann. Un moyen pour contourner ce problème est d'uliliser un modèle de décroissance de Van Driest pour faire tendre la viscosité turbulente à 0. Ceci se fait en posant

$$C_S = C_S(\boldsymbol{y}) = \left[C_S \delta \left(1 - e^{-y^+(\boldsymbol{y})/D} \right) \right]^2, \tag{6.29}$$

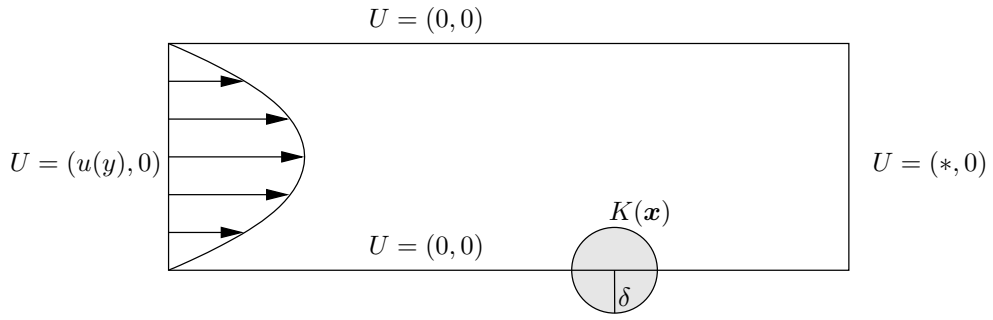


Figure 6.3 Filtrage à la paroi.

où $y^+(\boldsymbol{y})$ est la distance adimensionnelle à la paroi et $D = 25$ est la constante de Van Driest. Selon Berselli *et al*. (2006), ce procédé améliore les performances du modèle de Smagorinsky. Toutefois, d'un point de vue mathématique, les inégalités de Körn, Poincarré-Friedrichs et de Sobolev ne sont plus valides. Il en résulte que l'existence et l'unicité d'une solution faible selon la théorie de Leray avec ce modèle est un problème ouvert. À ceci s'ajoute le problème du calcul de y^+ (Berselli *et al*., 2006). En effet, pour effectuer ce calcul, nous avons besoin de connaître la distance à la frontière en tout point, ce qui limite l'utilisation de ce modèle aux problèmes à géométrie simple.

Une amélioration de ce modèle passe par l'évaluation dynamique de la viscosité turbulente. Introduite par Germano *et al*. (1991) et modifiée l'année suivante par Lilly (1992), cette stratégie consiste à filtrer les équations de Navier-Stokes à deux reprises en prenant un filtre, noté « $\widetilde{\ }$ », de largeur plus grande Δ, pour le second filtrage. Ceci nous donne deux formes pour l'équation du mouvement, soit

$$\frac{\partial \overline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\boldsymbol{u}} \otimes \overline{\boldsymbol{u}}) + \nabla \overline{p} - \nabla \cdot \left(\frac{2}{Re} \nabla^S \overline{\boldsymbol{u}} \right) + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_1 = 0 \tag{6.30}$$

et

$$\frac{\partial \widetilde{\overline{\boldsymbol{u}}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\widetilde{\overline{\boldsymbol{u}}} \otimes \widetilde{\overline{\boldsymbol{u}}}) + \nabla \widetilde{\overline{p}} - \nabla \cdot \left(\frac{2}{Re} \nabla^S \widetilde{\overline{\boldsymbol{u}}} \right) + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = 0$$

où $\boldsymbol{\sigma}_1 = \overline{\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}} - \overline{\boldsymbol{u}} \otimes \overline{\boldsymbol{u}}$ et $\boldsymbol{\sigma}_2 = \widetilde{\overline{\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}}} - \widetilde{\overline{\boldsymbol{u}}} \otimes \widetilde{\overline{\boldsymbol{u}}}$. L'idée de base de Germano *et al*. (1991) est de définir le tenseur

$$\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{\sigma}_1 - \widetilde{\boldsymbol{\sigma}_2} = \widetilde{\overline{\boldsymbol{u}} \otimes \overline{\boldsymbol{u}}} - \widetilde{\overline{\boldsymbol{u}}} \otimes \widetilde{\overline{\boldsymbol{u}}}. \tag{6.31}$$

Celui-ci est entièrement connu dès qu'on a en main le champ résolu pour le premier filtre. Ensuite

on suppose qu'on peut modéliser les tenseurs $\boldsymbol{\sigma}_1$ et $\boldsymbol{\sigma}_2$ avec un modèle de Smagorinsky en utilisant une même constante, *i.e.*

$$\boldsymbol{\sigma}_1 - \frac{tr(\boldsymbol{\sigma}_1)}{3}\boldsymbol{\delta} = -2\,C_D\,\delta^2\,\|\nabla^S\overline{\boldsymbol{u}}\|_F\,\nabla^S\overline{\boldsymbol{u}} = -2\,C_D\,\boldsymbol{\alpha} \tag{6.32}$$

et

$$\boldsymbol{\sigma}_2 - \frac{tr(\boldsymbol{\sigma}_2)}{3}\boldsymbol{\delta} = -2\,C_D\,\Delta^2\,\|\nabla^S\widetilde{\overline{\boldsymbol{u}}}\|_F\,\nabla^S\nabla^S\widetilde{\overline{\boldsymbol{u}}} = -2\,C_D\,\boldsymbol{\beta}$$

où $\Delta > \delta$. De là on déduit une fonction $C_D(\boldsymbol{x}, t)$ régissant dynamiquement la viscosité turbulente en imposant la *relation de Germano*,

$$\boldsymbol{\lambda}^d = \boldsymbol{\lambda} - \frac{tr(\boldsymbol{\lambda})}{3}\boldsymbol{\delta} = -2\,C_D\,\boldsymbol{\gamma}, \tag{6.33}$$

où $\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\beta} - \widetilde{\boldsymbol{\alpha}}$. En résolvant le tout au sens des moindres carrés, tel que proposé par Lilly (1992), on obtient

$$C_D(\boldsymbol{x}, t) = \frac{\boldsymbol{\lambda}^d : \boldsymbol{\gamma}}{2\,\boldsymbol{\gamma} : \boldsymbol{\gamma}}. \tag{6.34}$$

Selon la littérature, une bonne valeur pour la largeur du second filtre est $\Delta = 2\delta$.

En terminant, selon Germano *et al*. (1991), le modèle dynamique possède un comportement théoriquement correct à la paroi et ce, sans l'ajout d'une fonction de décroissance de type Van Driest ou autre. De plus, évaluée de cette façon, la viscosité turbulente peut prendre des valeurs négatives. Ceci permet de modéliser le «backscatter», *i.e.* le retour d'énergie des petites échelles vers les plus grandes. Par contre, il a aussi été mis en évidence que ces variations, lorsqu'elles sont trop importantes ou prolongées, entraînent une instabilité du modèle (Ghosal *et al*., 1995). C'est pourquoi, en pratique, on peut imposer $\mu + \rho\nu_T > 0$ (Sagaut, 2006) pour contrôler le tout.

Revenons sur l'équation (6.33). Techniquement, cette équation n'est pas tout à fait exacte. En

effet, si $C_D = C_D(\boldsymbol{x}, t)$ alors on a

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\lambda}^d &= \boldsymbol{\lambda} - \frac{tr(\boldsymbol{\lambda})}{3}\boldsymbol{\delta} \\
&= -2\, C_D\, \boldsymbol{\beta} + 2\,\widetilde{C_D\, \boldsymbol{\alpha}} \\
&\neq -2\, C_D\, (\boldsymbol{\beta} - \widetilde{\boldsymbol{\alpha}}) \\
&= -2\, C_D\, \boldsymbol{\gamma}.
\end{aligned} \tag{6.35}$$

En somme, pour avoir l'égalité à la ligne (6.34), il faut que C_D soit une fonction indépendante de la direction de filtrage. C'est pourquoi en pratique, l'utilisation de ce modèle est invariablement accompagnée de l'hypothèse de l'existence d'au moins une direction où la turbulence est homogène. Cette direction n'est pas filtrée et on suppose que C_D varie seulement dans cette direction. En suivant encore la suggestion de Lilly (1992), considérons

$$C_D(\boldsymbol{x}, t) = \left\langle \frac{\boldsymbol{\lambda}^d : \boldsymbol{\gamma}}{2\, \boldsymbol{\gamma} : \boldsymbol{\gamma}} \right\rangle, \tag{6.36}$$

où « $\langle\ \rangle$ » représente la moyenne prise dans la direction d'homogénéité. Soulignons que cette opération peut être faite facilement sur des maillages structurés. Cependant, pour les maillages non structurés, l'évaluation de la moyenne dans une direction d'homogénéité s'avère beaucoup plus difficile. Pour contourner ce problème, nous pouvons avoir recours à une moyenne temporelle ou encore à une moyenne locale (Sagaut, 2006).

Revenons sur l'idée de ne pas filtrer dans la direction d'homonénéité. Comme Ghosal *et al*. (1995) le soulignent, pour agir de la sorte, il faudrait résoudre toutes les échelles dans cette direction, ce qui est très coûteux en pratique. Pour pallier à ceci ainsi qu'à l'incohérence mathématique de l'équation (6.33), Ghosal *et al*. présentent une démarche rigoureuse en définissant $C_D(\boldsymbol{x}, t)$ comme étant la fonction minimisant la fonctionnelle

$$\mathcal{F}(C_D) = \int \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}, \tag{6.37}$$

où

$$\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\lambda} - \frac{tr(\boldsymbol{\lambda})}{3}\boldsymbol{\delta} - 2\,\widetilde{C_D\, \boldsymbol{\alpha}} + 2\, C_D\, \boldsymbol{\beta}. \tag{6.38}$$

Le résultat général de cette minimisation est une intégrale de Fredholm de seconde espèce :

$$f(\boldsymbol{x}) = C_D(\boldsymbol{x}) - \int \mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) C_D(\boldsymbol{y}) d\boldsymbol{x} \tag{6.39}$$

où :

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{x})} \left(\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{x}) : \int \boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{y}) K(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) d\boldsymbol{x} \right) ; \tag{6.40}$$

$$\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \frac{\mathcal{K}_A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) + \mathcal{K}_A(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}) + \mathcal{K}_S(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})}{\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x})} ; \tag{6.41}$$

$$\mathcal{K}_A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{y}) K(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) \text{ et} \tag{6.42}$$

$$\mathcal{K}_S(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{y}) : \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{x}) \int G(\boldsymbol{z} - \boldsymbol{x}) K(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) d\boldsymbol{x}. \tag{6.43}$$

On peut ajouter différentes contraintes à cette équation. Par exemple, on peut imposer la positivité de C_D. Il est à souligner que Ghosal *et al*. montrent que s'il existe une direction d'homogénéité, alors la solution du problème de minimisation coïncide avec celle de Germano *et al*. (1991). Quoique cette solution élimine les incohérences mathématiques, elle présente aussi un problème majeur. En effet, sa résolution numérique est coûteuse, ce qui en fait une option peu attrayante d'un point de vue pratique.

Une approche proposée par Piomelli et Liu (1995) consiste à approximer le C_D de la partie filtrée de (6.38), ce qui nous donne

$$\boldsymbol{\lambda}^d = -2\, C_D\, \boldsymbol{\beta} + 2\, \widetilde{C_D^*\, \boldsymbol{\alpha}} \tag{6.44}$$

où

$$C_D^*(\boldsymbol{x}, t_n) = C_D(\boldsymbol{x}, t_{n-1}) + \Delta t \frac{\partial C_D(\boldsymbol{x}, t_{n-1})}{\partial t} + \cdots.$$

Ils se limitent à des approximations d'ordre 1 ou 2. En utilisant cette extrapolation, on déduit que

$$C_D = \frac{\boldsymbol{\beta} : \left(2\, C_D^*\, \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\lambda}^d\right)}{2\boldsymbol{\beta} : \boldsymbol{\beta}}. \tag{6.45}$$

L'argument appuyant cette astuce est que la fonction C_D est une fonction qui varie très lentement dans le temps. Cette façon de faire est précise selon ces auteurs.

Malgré tout ce travail et la qualité des résultats qui s'y rattachent, il demeure que cette approche dynamique est toujours trop coûteuse d'un point de vue pratique. Néanmoins, il existe une manière de procéder qui est locale et de faible coût. C'est le modèle WALE (Wall-Adapting Local Eddy-viscosity) de Nicoud et Ducros (1999). Dans ce modèle, le calcul de la viscosité turbulente est basé sur le tenseur du gradient de la vitesse $\nabla \boldsymbol{u}$ en entier. Posons

$$\overline{\boldsymbol{\zeta}} = \frac{1}{2}\left(\nabla \overline{\boldsymbol{u}} + \nabla \overline{\boldsymbol{u}}^T\right),$$

la partie symétrique de ce tenseur (c'est le tenseur du taux des déformations) et

$$\overline{\boldsymbol{\omega}} = \frac{1}{2}\left(\nabla \overline{\boldsymbol{u}} - \nabla \overline{\boldsymbol{u}}^T\right),$$

sa partie anti-symétrique. À l'aide de ces tenseurs, on écrit la viscosité turbulente comme suit :

$$\nu_t = (C_\omega \delta)^2 \frac{(\boldsymbol{\zeta}^d : \boldsymbol{\zeta}^d)^{3/2}}{(\overline{\boldsymbol{\zeta}} : \overline{\boldsymbol{\zeta}})^{5/2} + (\boldsymbol{\zeta}^d : \boldsymbol{\zeta}^d)^{5/4},} \tag{6.46}$$

où C_ω est une vraie constante qui dépend de C_S et

$$\boldsymbol{\zeta}^d = \overline{\boldsymbol{\zeta}}\,\overline{\boldsymbol{\zeta}} - \frac{1}{3}(\overline{\boldsymbol{\zeta}} : \overline{\boldsymbol{\zeta}} - \overline{\boldsymbol{\omega}} : \overline{\boldsymbol{\omega}})\boldsymbol{\delta}.$$

Les auteurs affirment avoir obtenu leurs meilleurs résultats avec $C_\omega = 0{,}5$. Ils soulignent que comme tous les modèles qui utilisent une constante fixée a priori, la valeur de cette dernière est généralement liée à la taille des éléments. Toutefois, ils n'approfondissent pas cette question.

Il existe de nombreux autres modèles pour le calcul de la viscosité turbulente. Une revue bien étoffée de ceux-ci est présentée dans Sagaut (2006). Pour nos besoins, nous utiliserons principalement le modèle WALE, les raisons étant sa facilité d'implémentation et surtout son faible coût. De plus, selon ces auteurs, ce modèle possède un comportement théoriquement correct à la paroi. Puisque notre objectif est de modéliser des écoulements turbulents à surface libre dans le cas des fluides immiscibles, l'interface peut être vue comme une paroi souple et mobile. En se rappelant la théorie de Prandtl qui stipule que la turbulence prend naissance aux parois, on a intérêt à choisir un modèle de viscosité turbulente qui a un bon comportement à ce niveau. Il devient aussi évident

qu'un modèle de Smagorinsky avec une fonction de décroissance de type Van Driest n'est pas une option viable.

Chapitre 7

Écoulements turbulents à surface libre

Dans ce chapitre, nous présentons notre modèle pour la simulation des écoulements de fluides incompressibles immiscibles turbulents à surface libre. L'idée est en soi assez simple. Il suffit de concilier le modèle LES et la pseudo-concentration. Le premier et principal problème que nous pouvons envisager se situe au niveau des quantités physiques. En effet, dans les écoulements à surface libre, la densité et la viscosité ne sont plus des quantités constantes, et ce même si elles le sont pour chacun des fluides. Par conséquent, il nous faudra porter une attention particulière à cet aspect du modèle.

Quelques travaux commencent à être publiés sur l'étude des écoulements turbulents avec surface libre. Les principales contributions que nous avons repérées, suivant l'ordre chronologique, sont :

1. Scardovelli et Zaleski (1999) utilisent de concert le modèle de turbulence DNS et la capture d'interface à l'aide de la méthode VOF («Volume of Fluids ») pour étudier l'instabilité de Kelvin-Helmoltz ;
2. Yue *et al*. (2005) étudient des problèmes d'hydrologie grâce au modèle LES et à la capture d'interface à l'aide de la méthode «level-set » ;
3. Lamarque *et al*. (2010) suivent l'interface d'un fluide dans un mélangeur avec une approche lagrangienne et le modèle de turbulence $k - \epsilon$;
4. Kang et Sotiropoulos (2012) se concentrent sur les écoulements hydrologiques en alliant le modèle $k - \omega$ et la méthode «level-set » ;
5. Les travaux de Wane (2012) portent sur l'utilisation du modèle $k - \epsilon$ avec la méthode «level-set »pour l'étude de l'aquaplanage.

On peut donc voir que le développement de modèles numériques pour l'étude de ces écoulements est un domaine de recherche en émergence. Ceci peut expliquer l'absence de certaines justifications

lorsque vient le temps de montrer que ces modèles sont cohérents. Nous ferons donc un effort particulier pour montrer que le modèle proposé dans ce chapitre est, en effet, cohérent.

7.1 Système d'équations des écoulements turbulents à surface libre

Une approche naïve pour la modélisation des écoulements multifluides turbulents consisterait à tout simplement utiliser la pseudo-concentration avec le modèle LES pour définir la densité et la viscosité. En partant du fait que la densité globale définie à l'aide de F de concert avec l'équation de transport permettent de conserver la forme incompressible de l'équation de continuité, on pourrait être en droit de croire que le modèle LES pour les écoulements incompressibles s'applique directement. Étonnamment, cette façon de faire conduit au «bon» système d'équations. Toutefois, nous nous devons d'être plus rigoureux. C'est pourquoi, nous dériverons le système d'équations à partir des équations générales de Navier-Stokes en utilisant quelques ingrédients provenant du modèle LES pour les écoulements compressibles.

7.1.1 Simulation des grandes échelles des écoulements à surface libre

L'opération de filtration des équations de Navier-Stokes compressibles dans le cadre des écoulements à surface libre requiert un nouvel outil, le *filtre de Favre* (Lesieur *et al.*, 2005b) défini par

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}}, \tag{7.1}$$

où ϕ est une quantité quelconque. En utilisant ce filtre particulier et en suivant un cheminement similaire à celui utilisé pour le modèle LES, nous obtenons le système suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\left(\overline{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}\right)}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\overline{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}\otimes\tilde{\boldsymbol{u}}\right) + \nabla\cdot\boldsymbol{\tau} + \nabla\tilde{p} - \nabla\cdot\left(2\overline{\mu\nabla^S\boldsymbol{u}} - \dfrac{2}{3}\boldsymbol{\delta}\overline{\mu\nabla\cdot\boldsymbol{u}}\right) = \overline{\rho}\boldsymbol{g}\,; \\ \dfrac{\partial\overline{\rho}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\overline{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}\right) = 0, \end{cases} \tag{7.2}$$

où

$$\boldsymbol{\tau} = \overline{\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}} - \overline{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}} - \frac{1}{3} tr\left(\overline{\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}} - \overline{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}\right) \boldsymbol{\delta}$$

et

$$\tilde{p} = \overline{p} + \frac{1}{3} tr\left(\overline{\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}} - \overline{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}\right) \boldsymbol{\delta}.$$

Arrivé à ce point, on invoque la viscosité turbulente pour écrire

$$\boldsymbol{\tau} = -\overline{\rho}\nu_t \left(2\nabla^S \tilde{\boldsymbol{u}} - \frac{2}{3}\boldsymbol{\delta}\nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{u}}\right). \tag{7.3}$$

Enfin, il est d'usage de supposer qu'à haut nombre de Reynolds, le terme visqueux est de moindre importance et on peut écrire (Lesieur *et al*. (2005a), chap. 7) :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\left(\overline{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}\right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}\right) + \nabla\tilde{p} - \nabla \cdot \left(\left(\overline{\mu} + \overline{\rho}\nu_t\right)\left(2\nabla^S \tilde{\boldsymbol{u}} - \dfrac{2}{3}\boldsymbol{\delta}\nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{u}}\right)\right) = \overline{\rho}\boldsymbol{g}\,; \\ \dfrac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{\rho}\tilde{\boldsymbol{u}}\right) = 0. \end{cases} \tag{7.4}$$

Maintenant, nous allons plonger ce système d'équations dans le formalisme des écoulements à surface libre vu au chapitre 5. Afin d'alléger l'exposé, nous commencerons par prendre $\mathbb{R}^3$ comme domaine et nous reviendrons sur les points critiques par la suite. Soit $\varepsilon > 0$ la demi-largeur de la zone de transition, Ω_1 et Ω_2 une partition de $\mathbb{R}^3$ et F la pseudo-concentration définie sur ce domaine, pour cette partition et ce ε. Nous avons toujours que

$$\rho = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)F$$

et

$$\mu = \mu_1 + (\mu_2 - \mu_1)F.$$

Nous avons donc que $\overline{\rho}$ et $\overline{\mu}$ dépendent toutes deux de $\overline{F}$. Portons notre attention sur cette dernière fonction. Nous savons que F est une fonction marqueur qui partitionne notre domaine en trois sous-ensembles : $\Omega_{1,\varepsilon}$, Γ_ε et $\Omega_{2,\varepsilon}$. Rappelons aussi que F est une fonction deux fois différentiables telle que :

1. $F(\Omega_{1,\varepsilon}) = 1$;

2. $F(\Gamma_\varepsilon) = \ [0\ ,\ 1]\,;$
3. $F(\Omega_{2,\varepsilon}) = 0\,;$
4. $F^{-1}(\frac{1}{2}) = \Gamma$ (la surface libre).

Maintenant, étudions les propriétés de $\overline{F}$. Pour ce faire, restreignons l'ensemble des filtres admissibles en imposant la propriété supplémentaire suivante aux propriétés (6.14), (6.15) et (6.16) :

4. La positivité :

$$K(\boldsymbol{x}) \geq 0, \forall\, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3. \tag{7.5}$$

Notons que cette contrainte supplémentaire n'élimine que le filtre spectral de la liste présentée au chapitre 6. Maintenant définissons

$$\overline{B}(\boldsymbol{y}, \delta) = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_2 \leq \delta\}, \tag{7.6}$$

la boule fermée de rayon δ centrée en $\boldsymbol{y}$ et

$$K_\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) = \begin{cases} K(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) & \text{si } \boldsymbol{x} \in \overline{B}(\boldsymbol{y}, \delta); \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \tag{7.7}$$

la restriction du filtre K à $\overline{B}$. Posons $\eta = K * 1 - K_\delta * 1 = 1 - K_\delta * 1$. Puisque $0 \leq F \leq 1$ et que K et F sont des fonctions positives, on obtient que

$$\overline{F} = K * F \geq K * 0 = 0$$

et que

$$\overline{F} = K * F \leq K * 1 = 1.$$

En utilisant la commutativité de l'opération de filtrage avec la dérivation, de concert avec le fait

que F est C^2, on obtient que $\overline{F}$ est elle aussi C^2. Soit $\boldsymbol{y} \in \Omega_{1,\varepsilon}$ tel que $\overline{B}(\boldsymbol{y},\ \delta) \cap \Gamma_\varepsilon = \emptyset$, alors

$$\begin{aligned}(K * F)(\boldsymbol{y}) &= \int_{\mathbf{R}^3} K(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) F(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} \\ &\geq \int_{\overline{B}(\boldsymbol{y},\ \delta)} K(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) d\boldsymbol{x} \\ &\geq 1 - \eta.\end{aligned}$$

De même, soit $\boldsymbol{y} \in \Omega_{2,\varepsilon}$ tel que $\overline{B}(\boldsymbol{y}, \delta) \cap \Gamma_\varepsilon = \emptyset$, alors

$$\begin{aligned}(K * F)(\boldsymbol{y}) &= -(K * (1 - F))(\boldsymbol{y}) + (K * 1)(\boldsymbol{y}) \\ &\leq -(K_\delta * (1 - F))(\boldsymbol{y}) + 1 \\ &= -(K_\delta * 1)(\boldsymbol{y}) + 1 \\ &\leq -(1 - \eta) + 1 \\ &\leq \eta.\end{aligned}$$

Définissons les ensembles suivants :

$$\begin{aligned}\overline{\Omega}_{1,\varepsilon} &= \left\{\boldsymbol{x} \in \Omega_{1,\varepsilon} \mid \overline{B}(\boldsymbol{x},\ \delta) \cap \Gamma_\varepsilon = \emptyset\right\}\ ; \\ \overline{\Omega}_{2,\varepsilon} &= \left\{\boldsymbol{x} \in \Omega_{2,\varepsilon} \mid \overline{B}(\boldsymbol{x},\ \delta) \cap \Gamma_\varepsilon = \emptyset\right\} \text{ et} \\ \overline{\Gamma}_\varepsilon &= \Omega \setminus \left(\overline{\Omega}_{1,\varepsilon} \cup \overline{\Omega}_{2,\varepsilon}\right).\end{aligned}$$

Par construction, ces ensembles forment une partition de Ω. Faisons l'hypothèse supplémentaire que le filtre utilisé est tel que $\eta \ll 1$. C'est le cas, par exemple, du filtre chapeau et du filtre gaussien. On conclut que $\overline{F}$ est une fonction C^2 telle que

$$\overline{F}(\boldsymbol{x}) \approx 1, \forall\ \boldsymbol{x} \in \overline{\Omega}_{1,\varepsilon}$$

et

$$\overline{F}(\boldsymbol{x}) \approx 0, \forall\ \boldsymbol{x} \in \overline{\Omega}_{2,\varepsilon}.$$

En somme, $\overline{F}$ est une fonction qui ressemble beaucoup à F. Cependant, il n'est pas possible de

montrer que $\overline{F}(\frac{1}{2}) \approx F(\frac{1}{2})$. En effet, si on suppose que $\boldsymbol{y}$ est un point tel que $F(\boldsymbol{y}) = \frac{1}{2}$, on peut tout au plus affirmer que la surface libre va couper $\overline{B}(\boldsymbol{y},\ \delta)$ en deux parties en passant par son centre. Cependant, rien ne nous permet a priori de supposer que cette coupure scindera $\overline{B}(\boldsymbol{y},\ \delta)$ en 2 parties égales. On peut au mieux dire que $\overline{F}(\frac{1}{2})$ est un nombre compris entre 0 et 1. Quoique cette dernière approximation ne soit pas démontrable, nous pouvons tout de même en faire l'hypothèse. La justification va comme suit. Notons Γ_F, la surface libre définie par F et $\Gamma_{\overline{F}}$ celle définie par $\overline{F}$. Alors nous pouvons affirmer que ces deux ensembles sont assez près l'un de l'autre. En effet, nous savons que

$$\Gamma_F \subset \Gamma_\varepsilon \subset \overline{\Gamma}_\varepsilon$$

et que

$$\Gamma_{\overline{F}} \subset \overline{\Gamma}_\varepsilon.$$

Nous pouvons dès lors conclure que

$$\text{dist}(\Gamma_F,\ \Gamma_{\overline{F}}) \leq \varepsilon + \delta,$$

où $\text{dist}(*, *)$ désigne la distance entre 2 ensembles. De là il devient raisonnable de considérer $\overline{F}$ comme la pseudo-concentration définissant la même surface libre que F, mais dont la demi-largeur de la zone de transition est égale à celle de F, augmentée de la largeur du filtre, *i.e.* $\varepsilon + \delta$. Enfin, puisque ε peut être choisi arbitrairement petit, on infère que la demi-largeur de la zone de transition de $\overline{F}$ doit être supérieure ou égale à la largeur du filtre *i.e.* $\bar{\varepsilon} \geq \delta$. Ajoutons quelques mots sur $\overline{F}$ lorsque F dépend du temps. Puisque l'opération de filtrage s'effectue dans l'espace il s'ensuit que $\overline{F}$ dépend aussi du temps et que sa régularité découle de celle de F. En somme, F et $\overline{F}$ sont des fonctions de même nature.

Afin de terminer la construction du système d'équations, il nous reste à étudier l'équation de transport de la pseudo-concentration,

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla F = 0.$$

Ici nous pouvons emprunter deux avenues. La première consiste à dire que nous allons étudier la

surface libre définie par $\overline{F}$ et transportée par $\tilde{\boldsymbol{u}}$, ce qui nous permet immédiatement d'écrire

$$\frac{\partial \overline{F}}{\partial t} + \tilde{\boldsymbol{u}} \cdot \nabla \overline{F} = 0. \tag{7.8}$$

La seconde part de l'équation de transport filtrée et va comme suit :

$$\begin{aligned} & \overline{\frac{\partial F}{\partial t}} + \overline{\boldsymbol{u} \cdot \nabla F} = 0 \\ \iff & \frac{\partial \overline{F}}{\partial t} + \tilde{\boldsymbol{u}} \cdot \nabla \overline{F} = \tilde{\boldsymbol{u}} \cdot \nabla \overline{F} - \overline{\boldsymbol{u} \cdot \nabla F}. \end{aligned} \tag{7.9}$$

Arrivé à ce point, on se sert de l'hypothèse d'immiscibilité des fluides qui nous force à imposer $\tilde{\boldsymbol{u}} \cdot \nabla \overline{F} - \overline{\boldsymbol{u} \cdot \nabla F} = 0$, ce qui nous redonne l'équation (7.8).

L'importance de l'équation (7.8) tient dans le fait qu'elle nous permet de récupérer l'incompressibilité. Il s'en suit que le système d'équations que nous proposons pour les écoulements turbulents à surface libre s'écrit :

$$\begin{cases} \overline{\rho} \dfrac{\partial \tilde{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \overline{\rho} \nabla \cdot (\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}) + \nabla \tilde{p} - \nabla \cdot \left(2 \left(\dfrac{\overline{\mu}}{Re} + \overline{\rho} \nu_t \right) \nabla^S \tilde{\boldsymbol{u}} \right) = \dfrac{1}{Fr^2} \overline{\rho} \boldsymbol{g} \,; \\ \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = 0 \,; \\ \dfrac{\partial \overline{F}}{\partial t} + \tilde{\boldsymbol{u}} \cdot \nabla \overline{F} = 0. \end{cases} \tag{7.10}$$

Ajoutons quelques mots au sujet de la modélisation de la force capillaire dans un écoulement turbulent. Un fait important concernant cette force est qu'elle est entièrement déterminée par la géométrie de la surface libre et le coefficient de tension superficielle. Puisque dans notre modèle, la géométrie de la surface libre est définie par $\overline{F}$, nous pouvons encore approcher la force capillaire avec

$$\boldsymbol{f_v} = -\gamma \, \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \overline{F}}{\|\nabla \overline{F}\|_2} \right) \nabla \overline{F}. \tag{7.11}$$

En terminant, revenons sur le passage de $\mathbb{R}^3$ à un domaine fini Ω. En ce qui concerne les équations de Navier-Stokes, nous avons toujours l'apparition de l'erreur de commutation que nous négligeons. Cependant, au niveau de la pseudo-concentration, il y a un petit problème qui se pose près de la frontière. En effet, lorsque $F = 1$, le passage du filtre nous fournira des valeurs variant entre 1 et $\frac{1}{2}$ à l'intérieur du domaine dans une bande de largeur δ à la frontière. Toutefois, il est

acceptable de supposer que l'on puisse prolonger F dans une bande de largeur δ à l'extérieur du domaine de telle sorte que si $F(\overline{B}(\boldsymbol{y},\ \delta) \cap \Omega) = c$ alors $F(\Omega \setminus \overline{B}(\boldsymbol{y},\ \delta)) = c$, où c est 0 ou 1, tout en respectant les autres propriétés. Avec cette hypothèse supplémentaire, on voit que tout ce qui a été fait au niveau de la pseudo-concentration demeure valide.

Deuxième partie :

Vérification et validation numériques de la modélisation des écoulements turbulents à surface libre

Chapitre 8

Vérification de la modélisation de la force capillaire : Le problème de Young-Laplace

Le problème de Young-Laplace consiste à placer une bulle de forme quelconque à l'intérieur d'un fluide au repos. Sous l'effet de la tension superficielle, celle-ci doit prendre la géométrie d'énergie minimale *i.e.* une sphère. À ce moment, le champ de vitesse doit être nul et le saut en pression doit être, selon la loi de Young-Laplace,

$$\Delta p = \text{-}\gamma \nabla \cdot \boldsymbol{n}_\Gamma, \tag{8.1}$$

où γ est le coefficient de tension superficielle et n_Γ est la normale extérieure à la surface libre. Dans le cas particulier d'une sphère de rayon R, la *courbure moyenne*, $\text{-}\nabla \cdot \boldsymbol{n}_\Gamma$, est $\frac{2}{R}$. Notre objectif, afin de vérifier notre implémentation, est donc de retrouver le saut théorique en pression,

$$\Delta p = \frac{2\gamma}{R}, \tag{8.2}$$

donné par cette loi à l'état stationnaire.

8.1 Approximation analytique de la solution

Avant d'aborder la résolution numérique de ce problème, regardons ce que nous pouvons faire analytiquement. Supposons que l'état stationnaire est atteint. Nous avons alors que le champ de vitesse est nul. Ceci implique que l'expression (2.18) se réduit à

$$\nabla p = \gamma \kappa(F) \nabla F. \tag{8.3}$$

De plus, nous pouvons supposer que $\kappa(F) \approx \pm\frac{2}{R}$. La présence du «$\pm$» vient du fait que ∇F peut être indifféremment intérieur ou extérieur. Soulignons que cette dernière hypothèse n'a de sens que si la force capillaire est bien approximée. Dans le cas contraire, nous pouvons envisager que la pression affichera un comportement moins régulier (Shirani *et al*., 2005; Popinet, 2009). Tout ceci nous donne que la solution du problème doit être de la forme

$$p = \pm\frac{2\gamma}{R}F + c, \tag{8.4}$$

où c est une constante d'intégration. Bien que la solution soit somme toute assez simple à déduire de cette façon, la résolution numérique requiert un peu plus de réflexion. En effet, avec notre implémentation, le problème permanent n'a pas de solution numérique car le système global est singulier. Ceci est dû à la présence d'une sous-matrice nulle correspondant à l'équation de transport. La stratégie généralement adoptée pour contourner cette difficulté consiste à résoudre le problème transitoire. Cette astuce a pour objectif d'ajouter une matrice de masse à l'équation de transport ce qui rend le système global non singulier. En contre partie, cette façon de faire donne l'opportunité à des champs de vitesse parasites de se manifester (Jamet *et al*., 2002; Popinet, 2009). Ceux-ci, s'ils ne se résorbent pas, peuvent engendrer la détérioration de la solution à long terme (Williams *et al*., 1998; Shirani *et al*., 2005). Pour illustrer ceci, supposons que $\frac{\partial F}{\partial t}$ soit négligeable. Ainsi, on a que

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \boldsymbol{u}\cdot\nabla F = 0 \Longleftrightarrow \boldsymbol{u} \in \nabla F^{\perp}.$$

Ceci signifie que les seuls champs de vitesse acceptables sont ceux tangents à la surface libre. Maintenant, faisons l'hypothèse que $\boldsymbol{u}$ est tel que l'on puisse aussi négliger $\nabla\cdot\nabla\boldsymbol{u}$, $\nabla\cdot\boldsymbol{u}$ et $\nabla\cdot(\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u})$. En d'autres mots, nous supposons que nous sommes près de la solution. Alors notre système d'équations se réduit à

$$\rho\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla p = \gamma\kappa(F)\nabla F. \tag{8.5}$$

Puisque F et P sont ici des quantités indépendantes du temps à l'état stationnaire, il s'ensuit que

$$\boldsymbol{u} = \frac{1}{\rho}\left(\gamma\kappa(F)\nabla F - \nabla p\right)t + d, \tag{8.6}$$

où d est une constante d'intégration. Cette dernière équation met en évidence que toute erreur commise sur la solution du problème induit un champ de vitesse qui aura tendance à s'amplifier avec le temps, à moins que l'erreur ne tende vers 0. Évidemment, pour arriver à ce résultat, nous nous sommes placés dans un cadre très particulier. Cependant, en partant du fait que nous savons que la solution numérique n'a pas la précision absolue et que le champ de vitesse, la pression et la pseudo-concentration sont couplés, il est raisonnable de supposer qu'un tel comportement soit possible et qu'il puisse engendrer des oscillations de la surface libre qui se répercuteront au niveau de la pression et dont l'aboutissement sera la dégradation de la solution globale.

8.2 Résultats numériques

8.2.1 La bulle de géométrie sphérique

Nous débuterons en comparant les méthodes de reconstruction décrites à la section 5.2.1 pour un problème avec une bulle de géométrie sphérique (voir figure 8.1). Ceci nous permettra de vérifier avec quelle acuité chacune de ces méthodes permet de retrouver le saut en pression théorique.

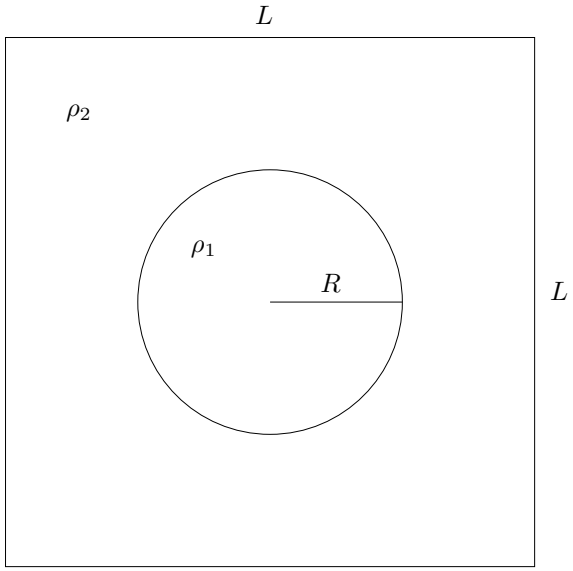


Figure 8.1 Problème de Young-Laplace.

Aussi, le fait de débuter avec cette condition initiale nous permet de mettre en évidence la présence de courants parasites et par le fait même, la qualité de la modélisation de la force capillaire.

Pour la résolution numérique, nous avons fixé $\rho_1 = \rho_2 = 1$, $\mu_1 = \mu_2 = 1$, $R = \frac{1}{4}$, $L = 1$ et $\gamma = \frac{1}{8}$. Des conditions de non glissement ont été imposées sur toutes les parois du domaine. Le choix du coefficient de tension superficielle est tel que le saut en pression soit 1. La demi-largeur de la zone de transition de F est de $0{,}25$ et la taille des éléments la discrétisant est $0{,}02$. Enfin, nous avons établi un nombre maximal de 100 pas de temps comme étant la durée acceptable pour atteindre l'état stationnaire. La solution est considérée comme étant stationnaire si la norme du résidu à l'initialisation du pas de temps courant respecte la précision voulue, ici 10^{-6}. Le schéma de Gear avec un pas de temps de $0{,}01$ a été utilisé pour la discrétisation en temps. Les tableaux 8.1, 8.2 et 8.3 présentent les résultats obtenus pour les 4 combinaisons d'éléments (voir Annexe A)

Tableau 8.1 Nombre de pas de temps pour atteindre l'état stationnaire pour le problème de Young-Laplace.

Nombre de pas de temps					
Éléments	Méthode de reconstruction				
($\boldsymbol{u}/P/F$)	DL2P	SLF	DLF	QF	MR
P1-bulle/P1/P1	4	8	7	NA	NA
P2/P1/P1	3	6	15	NA	NA
P1+/P0/P1	3	5	14	NA	NA
P2/P1/P2	3	5	5	65	54

Tableau 8.2 Ordre de grandeur de la norme du champ de vitesse pour le problème de Young-Laplace.

Norme du champ de vitesse					
Combinaison d'éléments	Méthode de reconstruction				
($\boldsymbol{u}/P/F$)	DL2P	SLF	DLF	QF	MR
P1-bulle/P1/P1	2×10^{-4}	8×10^{-4}	8×10^{-4}	1×10^{-3}	1×10^{-3}
P2/P1/P1	1×10^{-4}	4×10^{-4}	7×10^{-4}	1×10^{-3}	1×10^{-3}
P1+/P0/P1	1×10^{-4}	4×10^{-4}	6×10^{-4}	1×10^{-3}	1×10^{-3}
P2/P1/P2	1×10^{-4}	1×10^{-4}	1×10^{-4}	4×10^{-4}	5×10^{-4}

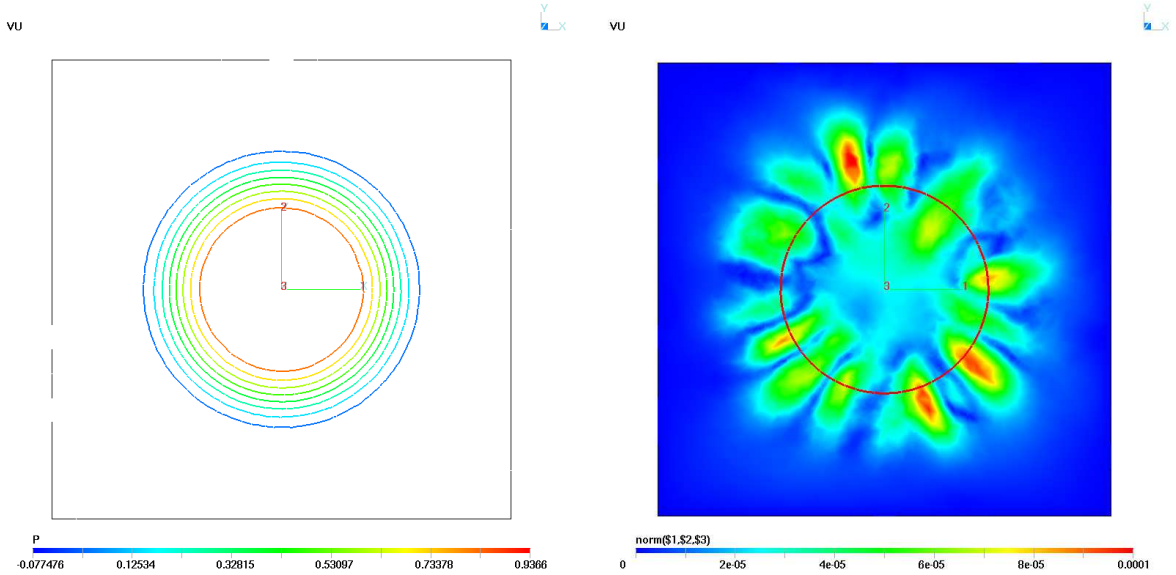
avec les 5 méthodes de reconstruction comparées. La notation «NA» présente dans le premier tableau signifie que le nombre maximum de pas de temps a été atteint.

Dans le tableau 8.1 nous pouvons constater que la méthode qui converge le plus rapidement pour tous les éléments testés est la méthode DL2P. A priori ce résultat est surprenant car cette méthode est la moins coûteuse et la moins précise. La seule hypothèse que nous puissions apporter

Tableau 8.3 Saut en pression pour le problème de Young-Laplace.

Saut en pression					
Combinaison d'éléments ($\boldsymbol{u}/P/F$)	Méthode de reconstruction				
	DL2P	SLF	DLF	QF	MR
P1-bulle/P1/P1	1,01	1,03	1,02	0,99	0,99
P2/P1/P1	1,01	1,03	1,02	0,99	0,99
P1+/P0/P1	1,01	1,03	1,02	0,99	0,99
P2/P1/P2	1,01	1,02	1,01	1,01	1,01

pour expliquer cette performance est que cette méthode est basée sur des moyennes pondérées. Elle permet donc de mieux réduire les oscillations numériques dans l'évaluation de la courbure comparativement aux autres méthodes. On obtient ainsi une approximation de la force capillaire de meilleure qualité. C'est d'ailleurs l'hypothèse qui semble pouvoir le mieux expliquer les résultats des tableaux 8.1 et 8.2. En effet, on remarque que plus on enrichit la reconstruction, plus le temps de convergence et l'ordre de grandeur des courants parasites augmentent. Cependant, ceci ne semble pas avoir la même incidence sur le saut en pression (voir tableau 8.3) qui est toujours retrouvé avec une erreur située entre 1% et 3%, même pour les cas où l'état stationnaire n'est pas atteint. De plus, soulignons que l'élément qui affiche le meilleur comportement avec toutes les méthodes est la combinaison P2/P1/P2. Dans tous les cas où l'état stationnaire a été atteint, la taille des courants parasites est de l'ordre de 10^{-4}. Cet ordre de grandeur est comparable à celui obtenu par Renardy et Renardy (2002) avec la méthode CSF. En utilisant la méthode de reconstruction DL2P avec les éléments P1-bulle/P1/P1 et P2/P1/P1 tout en diminuant de moitié la taille des éléments dans la zone de transition, nous avons obtenu des courants parasites de l'ordre de 4×10^{-5}. Dans les deux cas, l'état stationnaire est atteint en 2 pas de temps et le saut en pression reste 1,01. Une augmentation de la taille des éléments à 0,05 dans cette même zone pour la combinaison P2/P1/P1 avec la méthode DL2P ne permet pas d'atteindre l'état stationnaire, donne un saut en pression de 0,95 et des courants parasites de taille 5×10^{-5}. Ceci nous permet de conclure que la meilleure façon de contrôler l'ordre de grandeur des courants parasites est de raffiner le maillage dans la zone de transition. La figure 8.2 présente des courbes de niveau de la pression ainsi que les courants parasites autour de la surface libre. Ceci nous permet d'illustrer que leur présence ne semble pas affecter la régularité du saut en pression.



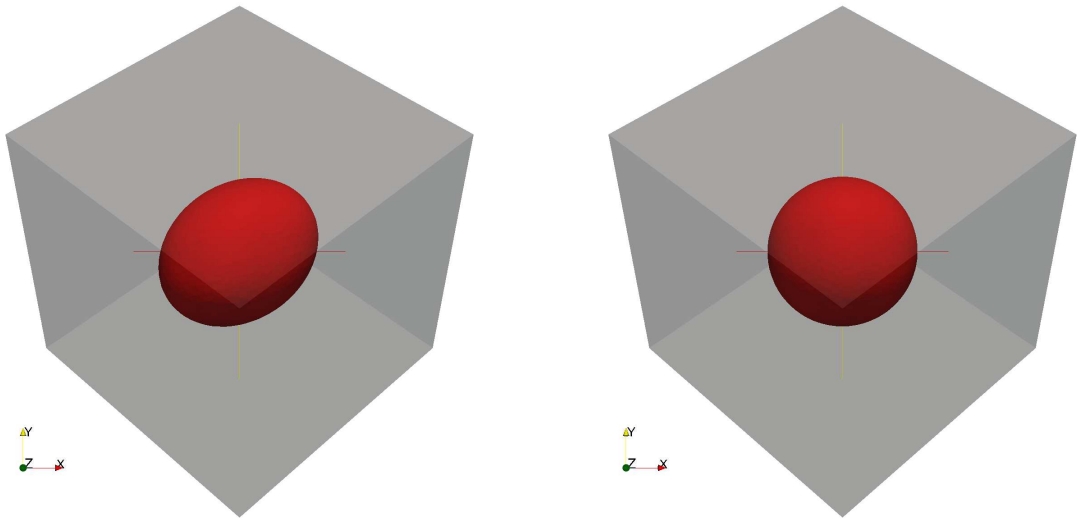
(a) Courbes de niveau de la pression (b) Courants parasites et isovaleur F=0,5 (cercle rouge)

Figure 8.2 Pression et vitesse dans le plan $z = 0$ (P1-bulle/P1/P1, DL2P et $h = 0{,}02$) pour le problème de Young-Laplace.

8.2.2 La bulle de géométrie ellipsoïdale

Une bulle de forme ellipsoïdale centrée en $(0{,}0{,}0)$ et de demi-axes $a = 0{,}3$ et $b = c = \frac{1}{8\sqrt{a}}$ est placée dans un récipient de forme cubique de côtés de longueur 1 (voir figure 8.3 (a)). Les dimensions des demi-axes sont telles que son volume soit équivalent à celui d'une sphère de rayon $\frac{1}{4}$. Comme précédemment, nous avons fixé le coefficient de la force capillaire à $\frac{1}{8}$ afin d'obtenir un saut théorique unitaire en pression. Nous avons utilisé l'élément P1-bulle/P1/P1 avec la méthode DL2P pour la résolution. La taille des éléments dans la zone de transtion est de 0,02. La densité et la viscosité de chaque fluide sont fixées à 1. Un pas de temps de 0,01 avec le schéma de Gear a été utilisé pour la discrétisation en temps. Enfin, des conditions de non glissement ont été imposées à toutes les parois.

L'état stationnaire a été atteint en 2554 pas de temps. À ce moment, la bulle arbore une géométrie sphérique (voir figure 8.3 (b)), le champ de vitesse est d'au plus 3×10^{-4} et le saut en pression est de 1,03 (voir figure 8.4). Notons que le champ de vitesse final a plus l'apparence d'un champ de vitesse résiduel que d'un champ de vitesse parasite. Nous avons tenté de réduire son intensité en diminuant la tolérance sur le résidu à 10^{-7}. Cependant, après 2790 pas de temps,



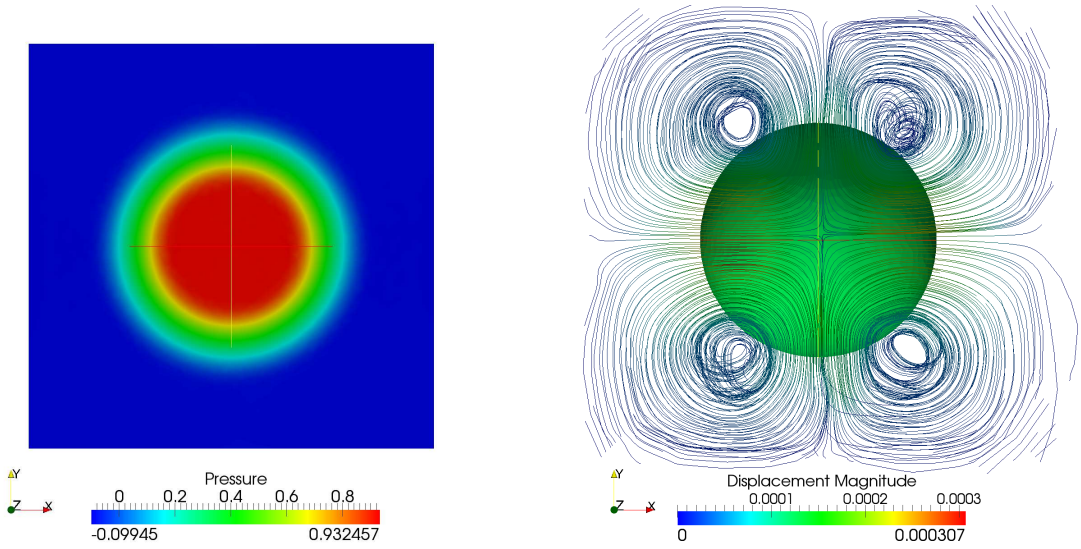
(a) Bulle initiale (b) Bulle finale

Figure 8.3 Géométrie initiale et finale de la bulle pour le problème de Young-Laplace.

celui-ci avait seulement diminué à 2×10^{-4}. En d'autres mots, le champ de vitesse diminue très lentement, ce qui suggère qu'il pourrait avoir tendance à s'estomper avec le temps.

Remarque 8.1. La distinction que nous faisons entre ces deux types de champ de vitesse est la suivante. Un champ de vitesse résiduel est de faible intensité et sa structure est liée à un déplacement de la surface libre sous l'effet de la tension superficielle pour atteindre un état d'équilibre. C'est le cas à la figure 8.4 (b). Un champ de vitesse parasite est de faible intensité, sans structure apparente et traverse la surface libre de manière aléatoire. C'est le cas à la figure 8.2 (b).

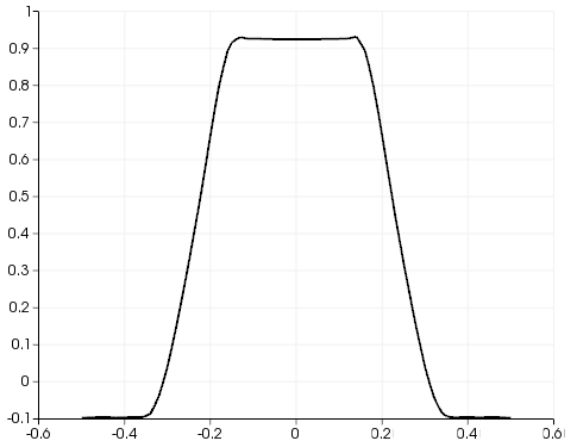
À la figure 8.5 (a), (b) et (c) nous présentons les graphes de la pression, de la courbure et de la force capillaire. Ces derniers nous permettent de montrer que la symétrie et la régularité de ces quantités sont retrouvées. Enfin, la figure 8.5 (d) montre la superposition de la pression et de la pseudo-concentration. On observe un bon accord entre la solution analytique approximative (voir équation (8.4)) et la solution numérique obtenue.



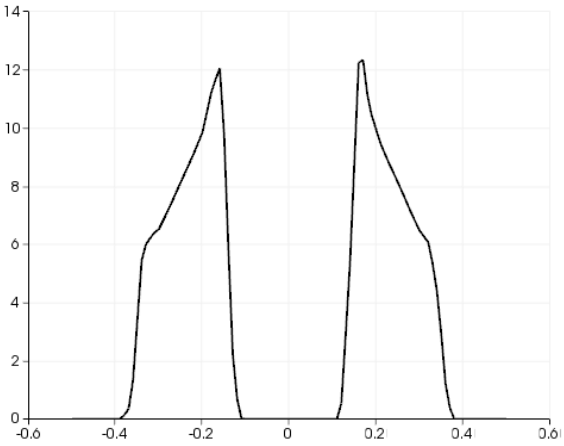
(a) Pression finale

(b) Champs de vitesse final

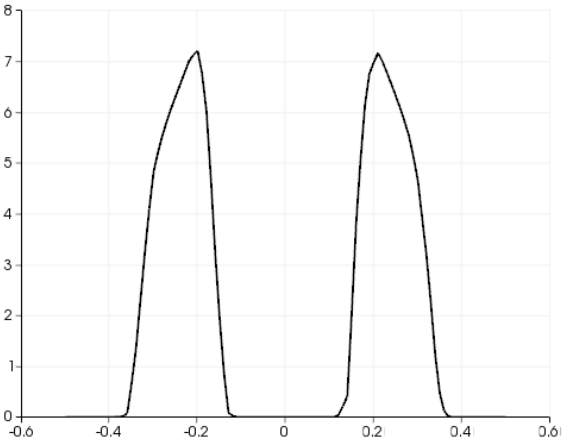
Figure 8.4 Pression et vitesse dans le plan $x - y$ pour le problème de Young-Laplace.



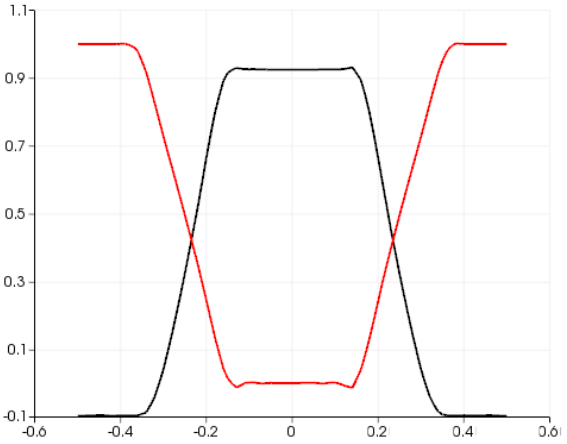
(a) Saut en pression



(b) Courbure



(c) Norme 2 (dans $\mathbb{R}^3$) de la force capillaire



(d) Comparaison de la pression (en noir) et de la pseudo-concentration (en rouge)

Figure 8.5 Graphe le long de l'axe des x pour le problème de Young-Laplace à l'état stationnaire.

Chapitre 9

Validation du modèle de capture d'interface : La dynamique des bulles

Dans ce chapitre, nous considérerons deux problèmes à surface libre avec tension superficielle. Le premier est la simulation d'une bulle en ascension libre dans un liquide et le second est la coalescence de deux bulles. Pour le premier, nous allons valider nos résultats à l'aide du diagramme de Grace (1973). Toutefois, en ce qui concerne le second problème, les données que l'on retrouve dans la littérature sont de nature plus qualitative que quantitative, que ce soit en 3 dimensions (Marchandise, 2006; de Sousa *et al*., 2004; Narayanan *et al*., 1974) ou bien en 2 dimensions (Tornberg et Engquist, 2000). Nous nous verrons donc contraints de nous limiter à ce type de validation pour ce problème.

9.1 La dynamique d'une bulle soumise à la poussée d'Archimède

9.1.1 Le diagramme de Grace

Le diagramme de Grace (1973) permet de caractériser la géométrie et le nombre de Reynolds terminal d'une bulle en ascension libre dans un liquide en fonction de deux nombres adimensionnels (voir figure 9.1). On peut remarquer que selon ce diagramme, il existe trois cas de figure. Soit la bulle conserve sa forme sphérique, soit elle prend une forme ellipsoïdale ou encore elle devient une calotte sphérique. Soulignons que dans leur publication de 1976, Grace *et al*. (1976) enrichissent quelque peu cet ensemble. Cependant, pour nos besoins, la figure 9.1 sera suffisante.

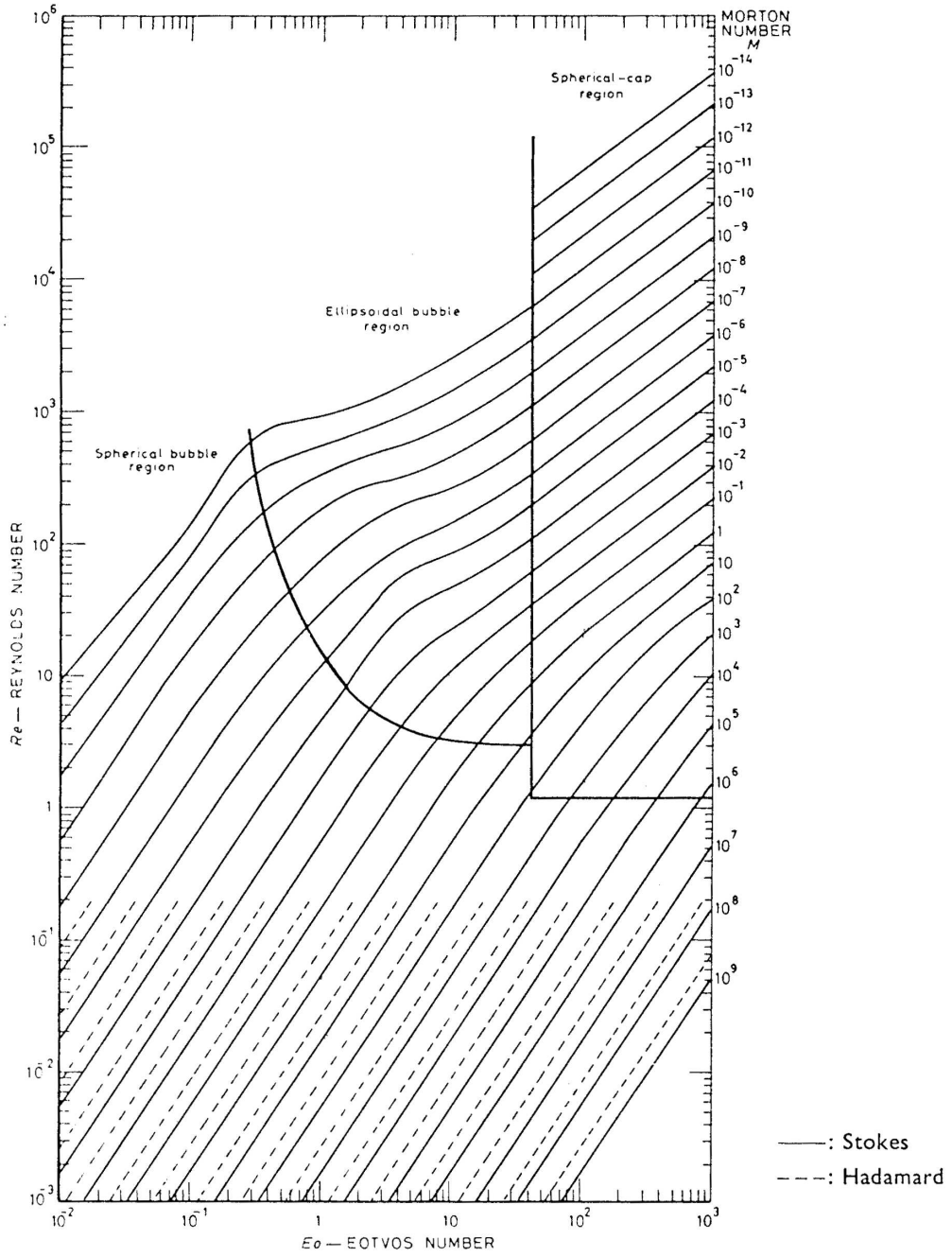


Figure 9.1 Diagramme tiré de Grace (1973).

Pour situer un point dans une région de déformation, on utilise le nombre de Morton :

$$Mo = \frac{We^3}{FrRe^4}, \tag{9.1}$$

où We est le nombre de Weber, Fr est le nombre de Froude et Re est le nombre de Reynolds, et le nombre de d'Eötvös :

$$Eo = \frac{\Delta\rho g L^2}{\gamma}, \tag{9.2}$$

où $\Delta\rho = \rho_2 - \rho_1$, g est la grandeur de l'accélération gravitationnelle, L est la longueur caractéristique et α est le coefficient de tension superficielle. À chaque point (Eo, Mo) correspond une déformation et un nombre de Reynolds terminal.

Ici, nous devons élaborer quelque peu sur l'adimensionnalisation utilisée. En effet, au chapitre 2, nous avons fixé notre adimensionnalisation en se basant sur le système d'équations (2.26). Ce dernier est basé sur le nombre de Reynolds (Re), le nombre de Froude (Fr) et le nombre de Weber (We). Il nous faut par conséquent fournir un moyen de faire correspondre les nombres de Morton et d'Eötvös aux nombres adimensionnels présents dans le système (2.26). Choisissons $U = \sqrt{gL}$ pour la vitesse caractéristique, $\Delta\rho$ pour la densité caractéristique et supposons que $\rho_2 \gg \rho_1$ de sorte que $\Delta\rho = \rho_2 - \rho_1 \approx \rho_2$. Alors on a que

$$We = \frac{\rho U^2 L}{\gamma} \approx \frac{\Delta\rho(\sqrt{gL})^2 L}{\gamma} = \frac{\Delta\rho g L^2}{\gamma} = Eo. \tag{9.3}$$

Il s'en suit que

$$Fr = \frac{U}{\sqrt{gL}} = 1 \tag{9.4}$$

et que

$$Re \approx \left(\frac{Eo^3}{Mo}\right)^{\frac{1}{4}}. \tag{9.5}$$

Remarque 9.1. Puisque $\rho_2 \gg \rho_1$, on peut supposer l'égalité dans les équations (9.3) et (9.5), et c'est ce que nous ferons implicitement par la suite.

Dans le but de valider le modèle de capture d'interface, nous avons mené trois simulations correspondant aux trois types de déformations présentes dans le diagramme de Grace. Les données adimensionnelles des trois problèmes étudiés sont présentées au tableau 9.1. La géométrie

du problème est la boîte de dimensions [-1,5 , 1,5] × [0 , 6] × [-1,5 , 1,5]. Les dimensions de cette boîte sont conformes à celles utilisées par Marchandise (2006). Selon la même auteure, la déformation de la bulle n'est plus affectée par les parois dès que la largeur et l'épaisseur de la boîte sont supérieures ou égales à trois fois le diamètre de la bulle. La condition initiale sur la surface libre est la sphère de rayon $0{,}5$ centrée en $(0, 1, 0)$. Une coupe selon le plan $z = 0$ du domaine est représentée à la figure 9.2.

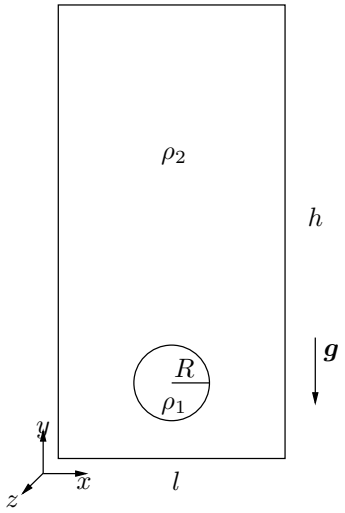


Figure 9.2 Coupe selon le plan $z = 0$ du domaine pour le problème de la bulle en ascension libre.

Tableau 9.1 Données adimensionnelles pour le problème de la bulle en ascension libre dans un fluide.

Déformation	ρ_1	μ_1	ρ_2	μ_2	$\boldsymbol{g}$	Fr	Eo	Mo
Sphérique	1,29e-3	1,56e-2	1	1	-$\boldsymbol{j}$	1	1	1
Ellipsoïdale	1,29e-3	1,56e-2	1	1	-$\boldsymbol{j}$	1	10	0,1
Calotte sphérique	1,29e-3	1,56e-2	1	1	-$\boldsymbol{j}$	1	100	1

La discrétisation en temps a été faite selon le schéma de Gear avec un indice de pas de temps de $0{,}025$. Des conditions de non glissement ont été imposées sur toutes les parois du domaine. La largeur de la zone de transition a été fixée à $0{,}06$. Un champ de vitesse nul ainsi qu'une pression nulle ont été imposés sur tout le domaine comme condition initiale. Le maillage est constitué de 555 101 éléments d'une taille allant de $0{,}05$ à $0{,}2$ (voir figure 9.3). Enfin, nous avons utilisé l'élément P1-bulle en vitesse, l'élément P1 en pression, l'élément P1 en pseudo-concentration et la reconstruction des dérivées a été effectuée avec la méthode DL2P.

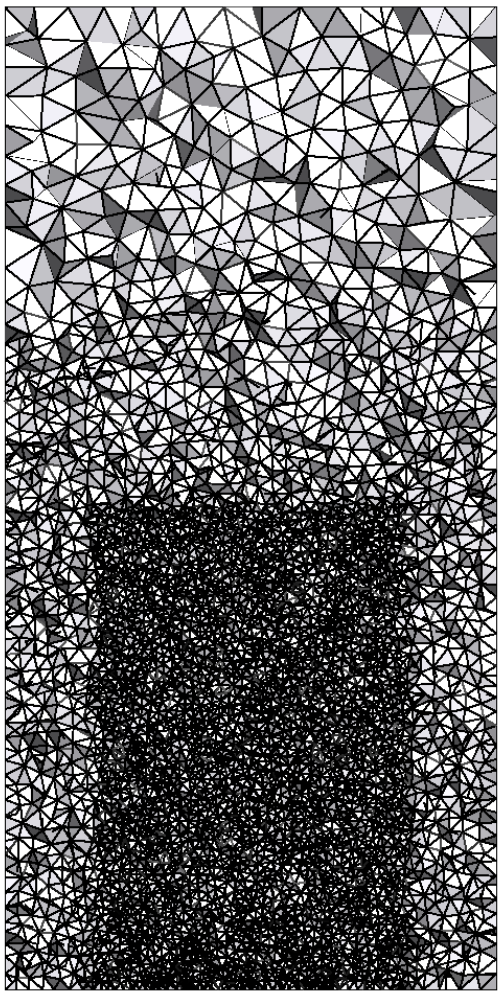
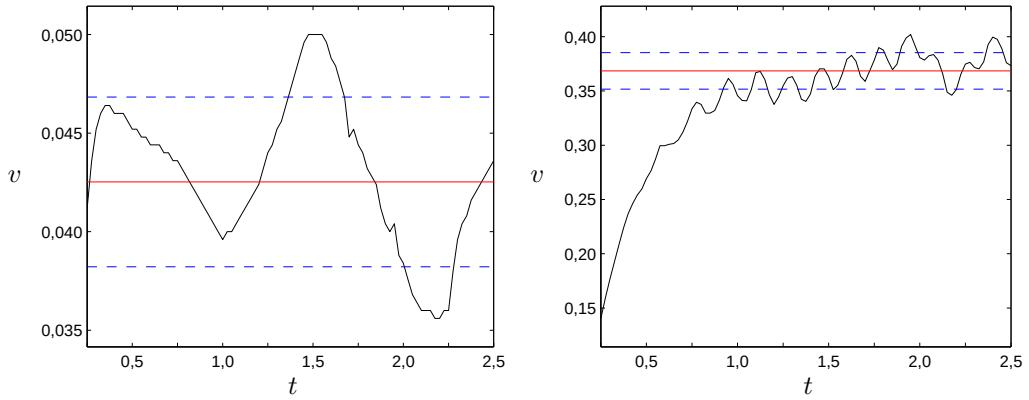


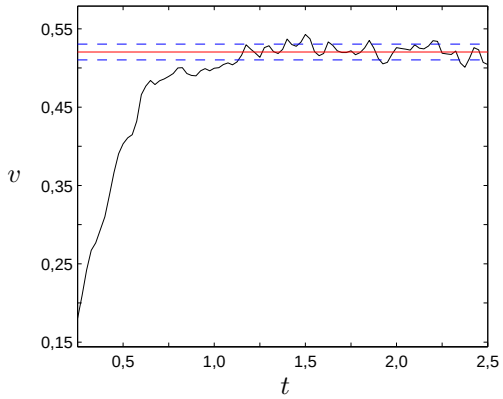
Figure 9.3 Coupe selon le plan $z = 0$ du maillage du domaine. La zone foncée contient des éléments de petite taille et correspond à la région où évolue la bulle en ascension libre.

9.1.2 Résultats numériques pour le problème du diagramme de Grace

La bulle qui est d'abord au repos monte en accélérant sous l'action de la poussée d'Archimède pour atteindre une vitesse d'ascension constante près de $t = 1$. La figure 9.4 illustre l'évolution de la vitesse d'ascension de la bulle dans le temps pour différentes valeurs des nombres d'Eötvös et de Morton. On peut voir le plateau atteint par la vitesse à partir de $t = 1$ aux figures 9.4 b)



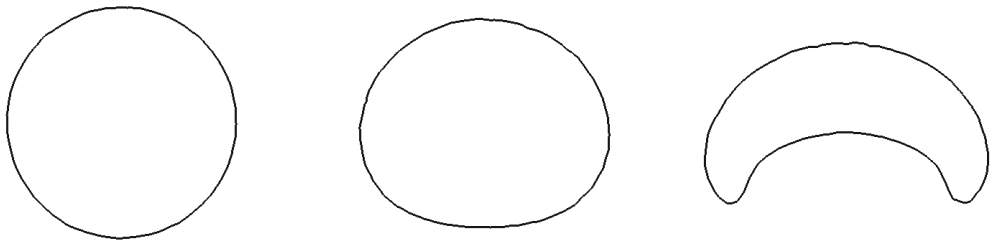
(a) $Eo = 1$ et $Mo = 1$ (b) $Eo = 10$ et $Mo = 0{,}1$



(c) $Eo = 100$ et $Mo = 1$

Figure 9.4 Évolution de la vitesse ascendante pour différents nombres d'Eötvös et de Morton (vitesse ascendante en noir, vitesse ascendante moyenne entre $t = 1$ et $t = 2{,}5$ en rouge et la vitesse ascendante moyenne plus ou moins l'écart type en pointillé bleu).

et c). Cependant, à la figure 9.4 a), on remarque que la vitesse oscille dès le départ autour d'une valeur constante. Ceci est dû au fait que la vitesse d'ascension est très faible et qu'elle est atteinte plus rapidement. Au temps $t = 2{,}5$ chaque bulle arbore la géométrie correcte (Grace, 1973) (voir figure 9.5). Comme nous l'avons fait remarquer à la figure 9.4, la vitesse d'ascension terminale n'est pas constante. Toutefois, nous pouvons évaluer la constante autour de laquelle elle oscille.



(a) $Eo = 1$ et $Mo = 1$ (b) $Eo = 10$ et $Mo = 0{,}1$ (c) $Eo = 100$ et $Mo = 1$

Figure 9.5 Géométrie des bulles à $t = 2{,}5$.

Pour ce faire, nous avons calculé la moyenne des vitesses dans l'intervalle de temps $[1\ ,\ 2{,}5]$, ce qui nous a permis de calculer le nombre de Reynolds terminal dans chacun des cas. La vitesse d'ascension moyenne ainsi que l'écart type sont tracés à la figure 9.4. Nous pouvons ainsi constater que les moyennes calculées sont représentatives des résultats. Comme on peut le voir au tableau

Tableau 9.2 Comparaison du nombre de Reynolds terminal calculé Re_c et du nombre de Reynolds terminal expérimental Re_e avec mise à jour de la pseudo-concentration. L'erreur relative entre ces deux valeurs $Er(Re)$ ainsi que l'erreur relative sur la conservation de la masse $Er(M)$ sont aussi fournies.

Forme	Eo	Mo	Re_c	Re_e	$Er(Re)$ (%)	$Er(M)$ (%)
Sphérique	1	1	0,0425	0,05	14,95	0,71
Ellipsoïdale	10	0,1	3,6849	4,6	19,89	3,29
Calotte Sphérique	100	1	16,4563	20,0	17,72	2,06

9.2, l'erreur relative entre le nombre de Reynolds terminal expérimental et le nombre de Reynolds terminal calculé varie de 15% à 20%. Toutefois, la taille de cette erreur peut être expliquée. En effet, selon Grace (1973), les courbes du diagramme de la figure 9.1 sont précises à 15% près, erreur à laquelle s'ajoute celle liée à la lecture du dit diagramme. Ceci permet de conclure que nos résultats sont en accord avec les données expérimentales. Néanmoins, il faut remarquer que dans tous les cas, nous sous-évaluons le nombre de Reynolds terminal, ce qui tend à montrer la présence d'une source d'imprécision non fortuite qu'il nous faudra expliquer dans le futur.

9.2 La coalescence de deux bulles

9.2.1 Description du problème

Pour ce problème, on place deux bulles sphériques légèrement séparées l'une au-dessus de l'autre dans un liquide. Sous l'effet de la poussée d'Archimède, ces dernières montent et éventuellement coalescent pour n'en former qu'une seule. Pour effectuer la simulation de ce problème, nous avons utilisé la même géométrie que pour le problème précédent soit la boîte de dimension $[\text{-}1,5\ ,\ 1,5] \times [0\ ,\ 6] \times [\text{-}1{,}5\ ,\ 1{,}5]$. En ce qui concerne les données physiques adimensionnelles, nous avons utilisé les mêmes que celles de de Sousa *et al*. (2004) qui sont présentées au tableau 9.3. La discrétisation en temps a été faite à l'aide du schéma de Gear avec un indice de pas de

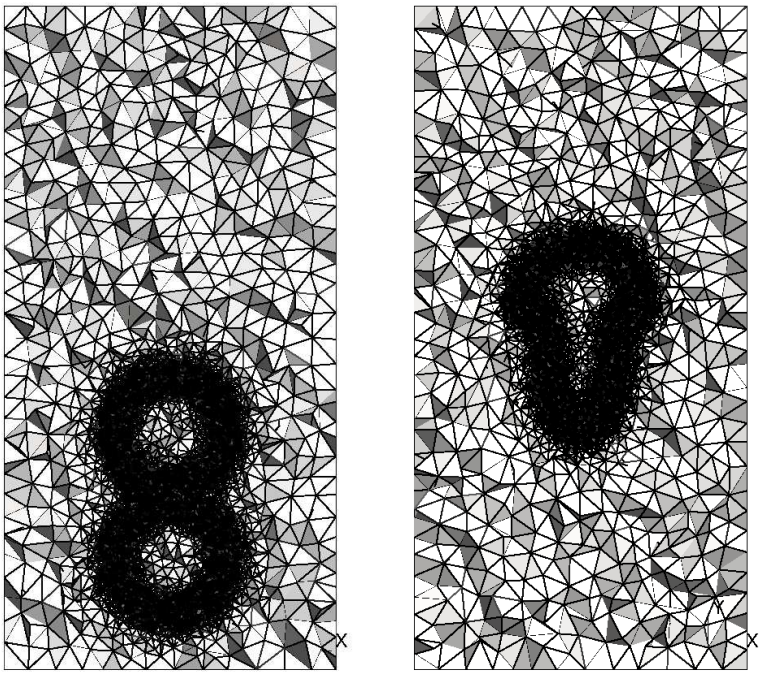
Tableau 9.3 Données adimensionnelles pour le problème de la coalescence de deux bulles dans un liquide.

ρ_1	μ_1	ρ_2	μ_2	$\boldsymbol{g}$	Fr	Re	We
0,5	0,5	1	1	-$\boldsymbol{j}$	1	30	100

temps de $0{,}01$. La demi-largeur de la zone de transition a été fixée à $0{,}06$. En ce qui concerne le maillage, la taille des éléments varie de $0{,}02$ à $0{,}2$. Pour ce problème, nous avons eu recours à la mise à jour de F, à la méthode DL2P pour la reconstruction des dérivées et à la capture adaptative d'interface. La capture adaptative d'interface consiste à raffiner le maillage autour de l'interface (Dufour, 1999), soit l'ensemble des points $\boldsymbol{x}$ du domaine vérifiant $F(\boldsymbol{x}) = 0{,}5 \pm \varepsilon$. Le nombre d'éléments varie de 930 373 à $t = 0$ à 655 451 à $t = 4{,}93$ (voir figure 9.6) Les éléments utilisés sont les mêmes que pour le cas du problème à une bulle.

9.2.2 Résultats numériques pour la coalescence

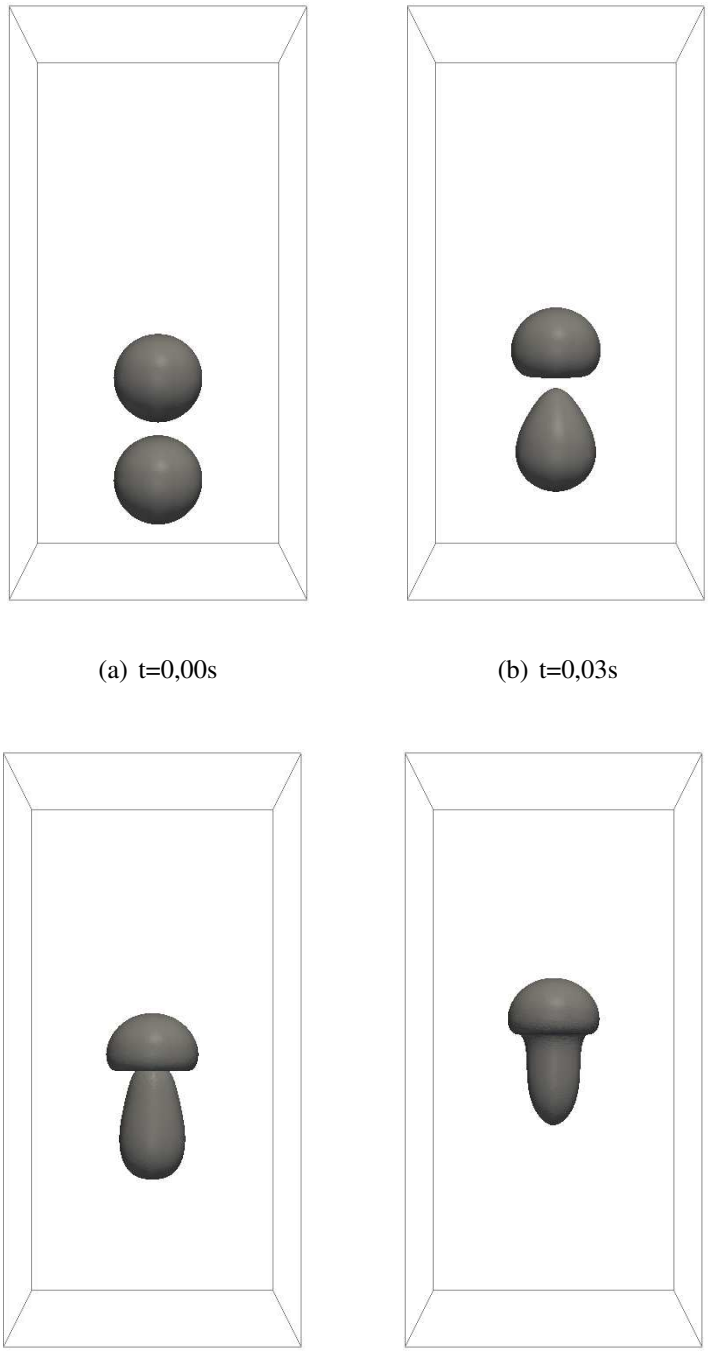
À la figure 9.7, nous présentons l'évolution du déplacement des bulles jusqu'à la coalescence. Les temps choisis sont comparables à ceux présentés dans de Sousa *et al*. (2004) et sont fournis en secondes (dimensionnelles) pour simplifier leur comparaison. Ceci nous permet d'affirmer que nos résultats et ceux de ce dernier sont qualitativement comparables à ces moments. Hormis le manque de données expérimentales ou théoriques sur ce problème, la principale raison pour laquelle nous ne pouvons faire qu'une comparaison qualitative est l'importance de l'erreur sur la conservation de



(a) Maillage initial (b) Maillage final

Figure 9.6 Maillages initial et final pour le problème de coalescence. Les zones foncées correspondent à des éléments de petites tailles situés autour de la surface libre. C'est le résultat de la capture adaptative d'interface (Dufour, 1999).

la masse par F. En effet, nous mesurons une erreur relative sur la masse de près de 39%. Cependant, nous pouvons affirmer que cette erreur n'est pas liée à la coalescence en soit. La figure 9.8 présente l'évolution de la somme du volume des bulles près de la coalescence. Nous estimons que celle-ci a lieu à $t = 3{,}39$. Ici, nous définissons la coalescence comme étant le moment où les iso-surfaces ($F = 0{,}5$) des deux bulles fusionnent. La courbe de la figure 9.8 présente deux variations importantes dont il faut identifier la cause. En effet, on peut remarquer deux brusques variations du volume dans les intervalles $t \in [3{,}38\ ,\ 3{,}39]$ et $t \in [3{,}41\ ,\ 3{,}42]$. Il s'avère que ces intervalles de temps correspondent à des cycles de remaillage. Ajoutons que l'historique complet de l'évolution de la masse montre le même comportement lors de toutes les adaptations de maillage. Ceci permet de confirmer que les pertes de volume enregistrées près de la coalescence ne sont pas dues à la coalescence elle-même, mais à l'adaptation. Par exemple, on peut constater que dans l'intervalle $t \in [3{,}39\ ,\ 3{,}41]$ qui se situe au cœur de la fusion des bulles, le volume ne varie presque pas. Nous attribuons les brusques variations de volume au fait que lors de l'adaptation, la fonction



(a) t=0,00s (b) t=0,03s

(c) t=0,06s (d) t=0,085s

Figure 9.7 Coalescence de deux bulles.

F est projetée d'un maillage à l'autre. Ceci revient à dire que nous remplaçons F_{i-1} et F_i par les approximations $\tilde{F}_{i-1} = F_{i-1}+\delta F_{i-1}$ et $\tilde{F}_i = F_i+\delta F_i$, ce qui nous place dans une situation similaire

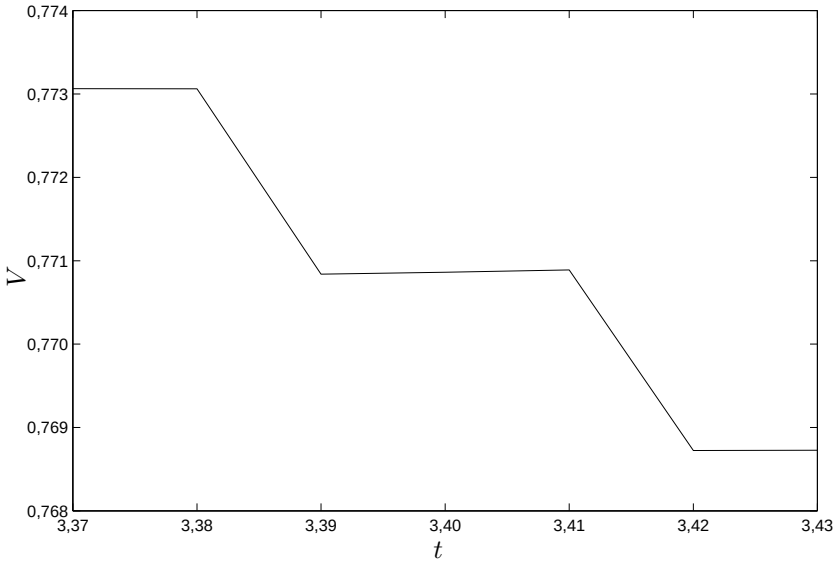


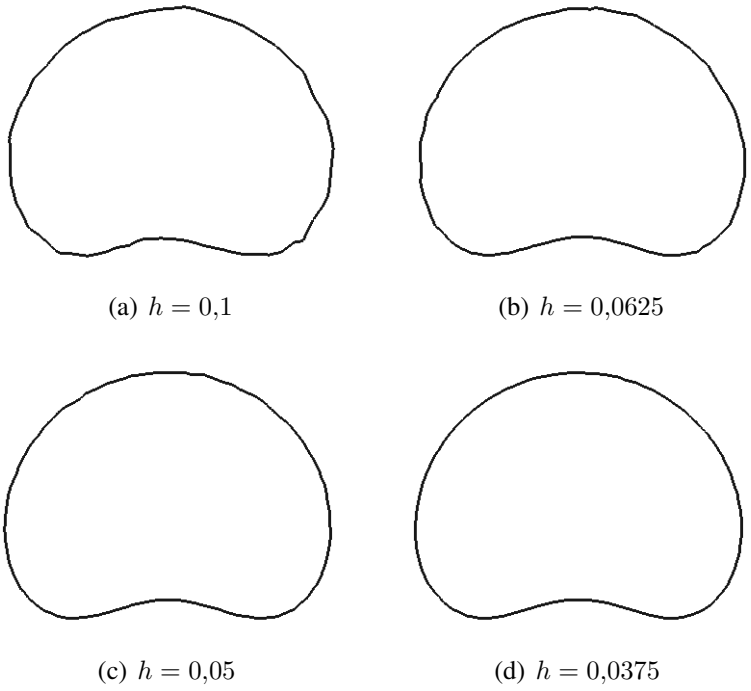
Figure 9.8 Variation du volume des bulles près de la coalescence.

à celle engendrée par la mise à jour, tel que vu au chapitre 5. De là, nous pouvons en déduire la même conclusion, c'est-à-dire qu'il est préférable d'éviter autant que possible de modifier la pseudo-concentration.

9.3 Retour sur la conservation de la masse

Comme nous l'avons précédemment identifié, tant d'un point de vue théorique que numérique, le problème majeur de notre modèle de capture d'interface se situe au niveau de la conservation de la masse à l'aide de F. Dans cette section, nous allons illustrer les relations qui existent entre la taille des éléments, la demi-largeur de la zone de transition de F, la mise à jour de F et la perte de masse.

Intuitivement, on peut être tenté d'affirmer que ce problème peut être résolu ou du moins contrôlé en réduisant la taille des éléments. La figure 9.9 présente la géométrie d'une bulle pour différentes tailles d'éléments au temps $t = 1$ pour $Eo = 100$ et $Mo = 1$. Comme on peut le constater, la diminution de la taille des éléments permet d'améliorer la précision de la définition de l'interface de la bulle, ce qui va dans le sens de notre hypothèse. Cependant, lorsqu'on porte notre attention sur l'évolution dans le temps de l'erreur sur la masse, on s'aperçoit que la masse n'est pas conservée. Selon la figure 9.10, le comportement observé n'est pas exactement celui attendu.



(a) $h = 0{,}1$ (b) $h = 0{,}0625$

(c) $h = 0{,}05$ (d) $h = 0{,}0375$

Figure 9.9 Géométrie d'une bulle d'air dans l'eau à $t = 1$ ($Eo = 100$ et $Mo = 1$).

En effet, la plus petite erreur mesurée correspond à la plus grande taille d'éléments. En excluant cette singularité, on observe tout de même que l'erreur diminue avec la taille des éléments. Toutefois, il semble que la clé de ce problème ne se résume pas à la taille des éléments. On peut s'en convaincre en regardant la figure 9.11. On observe bien que la diminution de la largeur de la zone de transition a un impact direct sur la conservation de la masse. En particulier, il semble que cette erreur adopte un comportement quadratique en ε. En effet, en se référant à l'équation (5.20), on en déduit que $\sup_{\Gamma_\varepsilon^n} \{|\boldsymbol{u}_n \cdot \nabla F_n|\} = \mathcal{O}(\varepsilon),\ \forall n$, ce qui nous donne que $|\Delta M_i| = \mathcal{O}(\Delta t\ \varepsilon^2)$. Mais puisque $\varepsilon = kh$, on pourrait être tenté de conclure que $|\Delta M_i| = \mathcal{O}(\Delta t\ h^2)$, ce qui revient à notre première hypothèse qui a été réfutée. Il ne faut donc pas cacher la constante k qui semble avoir un rôle important. C'est pour cette raison qu'il est préférable d'exprimer ΔM_i en fonction de ε.

Remarque 9.2. Il est capital de souligner le fait que le seul élément que nous avons utilisé pour F, pour des raisons de coût de cacul, est linéaire. Ceci signifie que rien ne nous permet, pour l'instant, de conclure qu'un élément de degré p pour F entraîne que $\Delta M_i = \mathcal{O}(\Delta t\ \varepsilon^{p+1})$.

Pour conclure, penchons-nous sur l'impact de la mise à jour de F sur la conservation de la

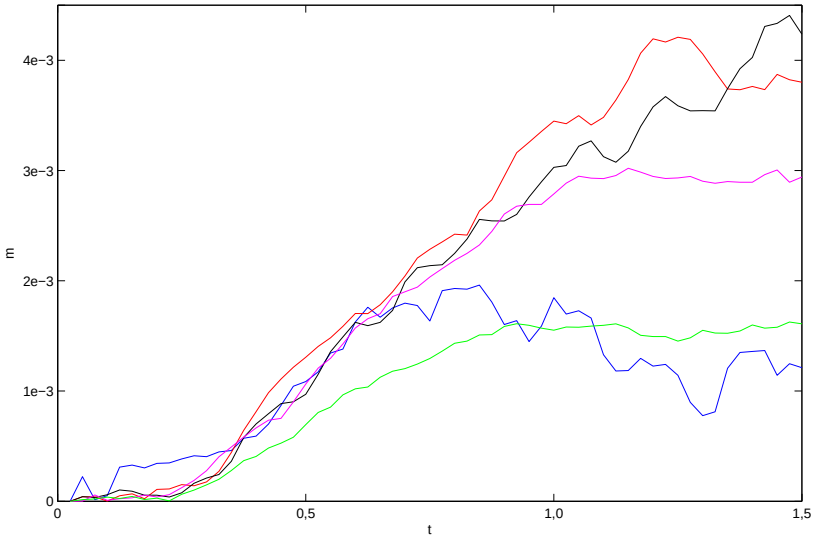


Figure 9.10 Évolution de l'erreur sur la masse pour $\varepsilon = 0{,}125$ ($h = 0{,}1$ en bleu, $h = 0{,}075$ en rouge, $h = 0{,}0625$ en noir, $h = 0{,}05$ en magenta et $h = 0{,}0375$ en vert).

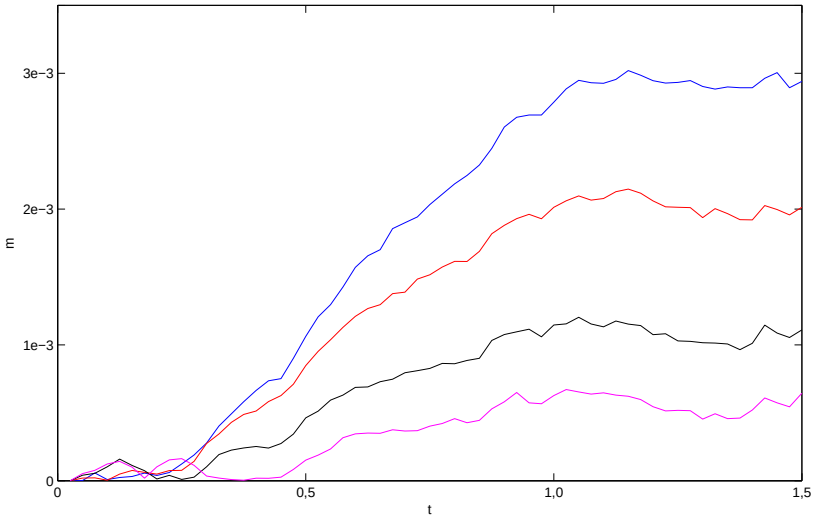


Figure 9.11 Évolution de l'erreur sur la masse pour $h = 0{,}05$ ($\varepsilon = 0{,}125$ en bleu, $\varepsilon = 0{,}1$ en rouge, $\varepsilon = 0{,}075$ en noir et $\varepsilon = 0{,}06$ en magenta).

masse. Afin de montrer l'importance de l'erreur engendrée par cette stratégie, nous avons refait les trois simulations de la section 9.1 en éliminant la mise à jour de F. En comparant le tableau 9.4 au tableau 9.2, on voit qu'ils diffèrent principalement par l'erreur relative sur la masse. En effet, on

Tableau 9.4 Comparaison du nombre de Reynolds terminal calculé (Re_c) et du nombre de Reynolds terminal expérimental (Re_e) sans mise à jour de la pseudo-concentration. L'erreur relative entre ces deux valeurs ($Er(Re)$) ainsi que l'erreur relative sur la conservation de la masse $Er(M)$ sont aussi fournies.

Forme	Eo	Mo	Re_c	Re_e	$Er(Re)$ (%)	$Er(M)$ (%)
Sphérique	1	1	0,0425	0,05	16,05	0,08
Ellipsoïdale	10	0,1	3,6852	4,6	19,87	0,21
Calotte Sphérique	100	1	15,9530	20,0	20,23	0,66

mesure une erreur relative sur la conservation de la masse de 4 à 15 fois moins élevée en évitant la mise à jour de F, ce qui confirme le résultat théorique du chapitre 4. Il faut donc éviter autant que possible de modifier artificiellement la pseudo-concentration afin d'éviter les pertes de masse numériques. Soulignons que dans toutes les simulations effectuées, nous avons posé $F = 0$ dans la bulle et $F = 1$ à l'extérieur. Une question se pose : est-ce que le choix $F = 1$ dans la bulle et $F = 0$ à l'extérieur de celle-ci a un impact sur la perte de masse ? Afin de répondre à cette question, nous avons refait la simulation du cas $Eo = 100$ et $Mo = 1$ avec mise à jour. Le résultat est que la bulle perd de la masse plutôt que d'en gagner et l'erreur sur la masse globale est 3,37%, soit 1% plus élevée que dans la première simulation. Ceci suggère que le «sens» n'a pas de réel impact. La grande conclusion que nous pouvons tirer en se basant sur toutes les observations que nous avons faites jusqu'à présent est que l'utilisation de la pseudo-concentration impose de fixer un maillage fin dès le départ, d'utiliser une largeur de transition aussi petite que possible et de ne pas altérer F artificiellement. Mentionnons que tout ceci n'est pas incompatible avec l'utilisation du modèle LES. En effet, ce dernier impose aussi l'utilisation d'un maillage fixe et préférablement constitué d'éléments de petite taille.

Chapitre 10

Validation du modèle de turbulence : Le problème de la marche descendante

Le problème de la marche descendante consiste en un fluide en écoulement dans un canal de hauteur initiale h et qui subit une brusque expansion de hauteur H (voir figure 10.1). On peut caractériser ce problème par le rapport entre la hauteur initiale h à l'entrée du canal et sa hauteur $h + H$ en sortie. On parle alors du problème de la marche descendante avec facteur d'expansion verticale de $h : (h + H)$.

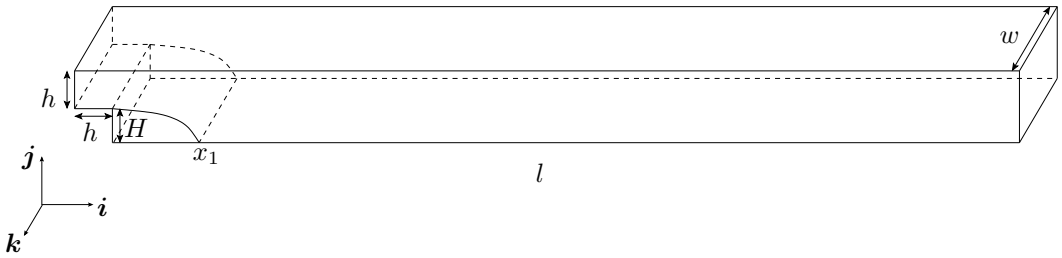


Figure 10.1 Géométrie du problème de la marche descendante (origine fixée au coin supérieur de la marche et au centre de la géométrie dans la direction $\boldsymbol{k}$).

Afin de valider notre implémentation du modèle LES, nous allons simuler cet écoulement en utilisant deux modèles de viscosité turbulente, celui de Smagorinsky et le modèle WALE. Notre objectif principal sera de retrouver numériquement la longueur de recollement expérimentale x_1 (voir figure 10.2) pour les nombres de Reynolds 100, 400, 1000 et 10000. Dans cette étude, la *longueur de recollement* est définie comme étant la valeur de x_1 qui est telle que $\langle \boldsymbol{u} \rangle (x_1, y_0, z_0) = 0$ où $\langle \boldsymbol{u} \rangle$ est la *vitesse moyenne* définie par :

$$\langle \boldsymbol{u} \rangle (\boldsymbol{x}) = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t) dt, \tag{10.1}$$

où y_0 est la position d'un plan parallèle à la paroi inférieure et z_0 est la position du plan de symétrie de la géométrie par rapport à $\boldsymbol{k}$. Cette longueur marque la fin de la zone de recirculation derrière la marche. Notons que ce problème est laminaire pour $Re < 1200$, que le passage à la turbulence s'effectue pour $1200 < Re < 6600$ et qu'il est turbulent pour $Re > 6600$ (Armaly *et al.*, 1983). Ajoutons que selon la littérature (Armaly *et al.*, 1983; Kim *et al.*, 1980), le régime turbulent est caractérisé par le fait que la longueur de recollement devient constante pour un facteur d'expansion verticale donné. Selon Kim *et al.* (1980), la longueur de recollement pour un facteur d'expansion verticale près de 2 se situe entre 6 et 8 (7 ± 1).

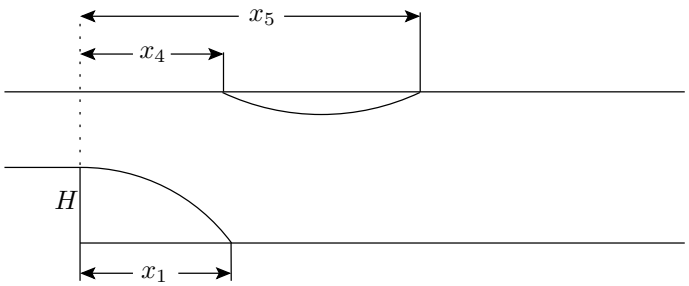


Figure 10.2 Longueur de recollement.

10.1 Description du problème et mesures importantes

La figure 10.1 représente la géométrie que nous avons utilisée. Il s'agit d'une tranche d'épaisseur w prise au centre de la géométrie réelle (expérimentale). En imposant une condition de glissement aux parois latérales, nous négligeons leur effet sur l'écoulement. Ce choix s'impose par le fait que la géométrie doit être beaucoup plus large que haute. Cette largeur n'est pas clairement déterminée, mais selon les résultats de Chiang et Sheu (1999), nous pouvons estimer qu'elle doit se situer entre $70h$ et $200h$. Au dessous de ces valeurs, la largeur du domaine influence la longueur de recollement (Chiang et Sheu, 1999). Soulignons que Chiang et Sheu sont les seuls à notre connaissance qui aient utilisé de telles largeurs de domaine. La majorité des travaux numériques sur le sujet sont en 2D.

Dans notre cas, nous avons utilisé $y_0 = -0{,}9375$, $z_0 = 0$ et la vitesse moyenne a été calculée

selon la formule du trapèze composée :

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{u} \rangle(\boldsymbol{x}) &\approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t_{n_0}}^{t_N} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t) dt \\ &\approx \frac{\delta t}{2\Delta t} \left\{ \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},\ t_{n_0}) + 2 \sum_{i=n_0+1}^{N-1} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t_i) + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t_N) \right\},\end{aligned} \tag{10.2}$$

où $\Delta t = t_N - t_{n_0}$, n_0 représente le pas de temps de départ, N identifie le pas de temps final et δt est la taille des pas de temps.

Remarque 10.1. Dans le cas où N est assez grand, l'approximation donnée par l'équation (10.2) peut être simplifiée à

$$\langle \boldsymbol{u} \rangle(\boldsymbol{x}) \approx \frac{1}{N - n_0} \sum_{i=n_0}^{N} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t_i).$$

De plus, si l'écoulement atteint l'état stationnaire *i.e.* s'il est indépendant du temps, alors $\langle \boldsymbol{u} \rangle(\boldsymbol{x})$ correspond au champ de vitesse à l'état stationnaire. En effet, dans ce cas, on a que

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t) = \begin{cases} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t) & \text{, si } t \in [0, t_N]\,; \\ \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t_N) & \text{, si } t \in]t_N, \infty[. \end{cases}$$

Il s'ensuit que

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{u} \rangle(\boldsymbol{x}) &= \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t) dt \\ &= \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \left\{ \int_0^{T_N} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t) dt + \int_{T_N}^T \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t_N) dt \right\} \\ &= \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \left\{ \int_0^{T_N} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t) dt + (T - T_N) \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t_N) \right\} \\ &= \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^{T_N} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t) dt + \lim_{T \to \infty} \frac{T - T_N}{T} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t_N) \\ &= \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t_N),\end{aligned}$$

ce qui est bien ce que nous venons d'affirmer.

Les valeurs de décollement x_4 et de recollement x_5 (voir figure 10.2) sont définies de manière similaire mais pour y_0, un plan parallèle à la paroi supérieure. Pour nos mesures, nous avons utilisé $y_0 = 0{,}9975$. Enfin, le nombre de Reynolds est donné par :

$$Re = \frac{\rho \left(\frac{4}{3} u_{max}\right) h}{\mu}.$$

Ajoutons que l'adimensionnalisation, la définition de la longueur de recollement ainsi que le facteur d'expansion verticale correspondent aux définitions d'Armaly *et al*. (1983). Nous avons répertorié les données adimensionnelles dont nous nous sommes servis dans le tableau 10.1 et les conditions limites dans le tableau 10.2. Le maillage utilisé pour toutes les simulations numériques effectuées était constitué de 498 625 éléments totalisant 736 083 inconnues. La discrétisation en temps a été faite avec le schéma de Gear. Le modèle de viscosité turbulente de Smagorinsky a été utilisé avec $C_S = 0{,}1$ et le modèle WALE avec $C_w = 0{,}1$. Pour ces deux modèles nous avons fixé la largeur de filtre à $\delta = 0{,}125$. Notons que les créateurs du modèle WALE, Nicoud et Ducros (1999), affirment que $C_w = 0{,}5$ est équivalent à $C_S = 0{,}17$. Cependant, dans notre cas ce choix entraînait la divergence ou encore la stagnation du solveur de notre code de simulation. Le choix $C_w = 0{,}1$ est le résultat d'une démarche par essais et erreurs.

Tableau 10.1 Données adimensionnelles pour le problème de la marche descendante.

ρ	μ	U_{max}	h	H	l	w
1	1	0,75	1	0,94	25	1

10.2 Démarche et résultats numériques

Nous avons tout d'abord résolu le problème en régime permanent pour $Re = 1$. Cette solution a ensuite servi de solution initiale pour le problème avec $Re = 100$. Dans ce cas, nous avons effectué la simulation transitoire avec un pas de temps de $0{,}1$ jusqu'à l'atteinte de l'état stationnaire. Ici l'*état stationnaire* signifie que la solution respecte le critère de convergence à l'initialisation du pas de temps. Ceci implique qu'à partir de ce moment, la solution devient «indépendante» du critère d'arrêt (10^{-6}). Enfin, cette solution a servi de solution initiale pour toutes les autres simulations, soit

Tableau 10.2 Conditions limites pour le problème de la marche descendante, exprimées en fonction de la base canonique de $\mathbb{R}^3$.

Entrée	$\boldsymbol{v} = \frac{4U_{max}}{3} y(y-h)\boldsymbol{i}$	(condition essentielle)
Sortie	$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{i} = 0$ (libre)	(condition naturelle libre)
Dessus et dessous	$\boldsymbol{v} = 0\boldsymbol{i} + 0\boldsymbol{j} + 0\boldsymbol{k}$	(condition de non glissement)
Côtés	$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{k} = 0$	(condition de glissement)

pour celles avec $Re = 400$, 1000 et 10000. Pour tous les nombres de Reynolds inférieurs ou égaux à 1000, l'état permanent a été atteint. Ceci est conforme au fait que pour ces nombres de Reynolds, le problème est laminaire. Dans ces cas, nous avons utilisé le champ de vitesse du dernier pas de temps. Pour le cas avec $Re = 10000$, seul le modèle WALE a donné des résultats et nous avons dû réduire le pas de temps à 0,01. La vitesse moyenne a été calculée selon l'approximation de l'équation (10.2).

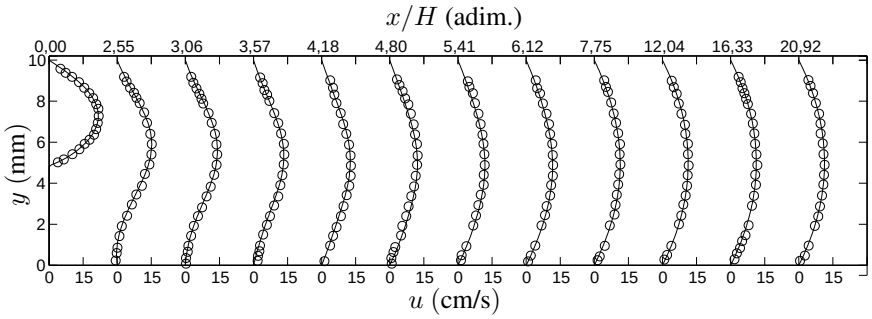
Le tableau 10.3 contient les longueurs de recollement que nous avons obtenues, ainsi que celles obtenues expérimentalement par Armaly *et al.* (1983) et numériquement par Petry et Awrunch (2006). Soulignons que la démarche que nous avons suivie est comparable à celle de Petry et Awrunch. La grande différence entre notre étude et celle de Petry et Awrunch réside dans le fait qu'ils modélisent un écoulement pour lequel la composante transversale de la vitesse (direction $\boldsymbol{k}$) est fixée à 0 dans tout le domaine. C'est en quelque sorte un écoulement 2D. Nos résultats sont en accord avec tous les résultats que l'on retrouve dans la littérature (voir tableau 10.3). Cependant, en ce qui concerne le cas $Re = 1000$, nous remarquons que la longueur de recollement est sous-évaluée. Toutefois, on retrouve ce même comportement numérique dans la littérature (Chiang et Sheu, 1999; Guerrero et Cotta, 1996). Chiang et Sheu (1999) étudient l'influence de la taille du maillage sur la longueur de recollement. Ils obtienent une valeur de x_1/H allant de 13,27 à 13,81. Ceci suggère qu'en raffinant notre maillage, nous pourrions améliorer notre approximation.

De plus, nous avons aussi mesuré la longueur de décollement x_4/H et la longueur de recollement x_5/H. Nous avons obtenu respectivement 10,51 et 23,07. Les valeurs expérimentales correspondantes sont respectivement $\approx 13{,}8$ et $\approx 23{,}0$. La figure 10.3 présente la comparaison des profils de vitesse obtenus numériquement pour $Re = 100$ et 1000. Encore une fois, nous pouvons remarquer la sous-évaluation de la longueur de recollement. Toutefois, ceci concorde encore avec le profil présenté par Guerrero et Cotta (1996).

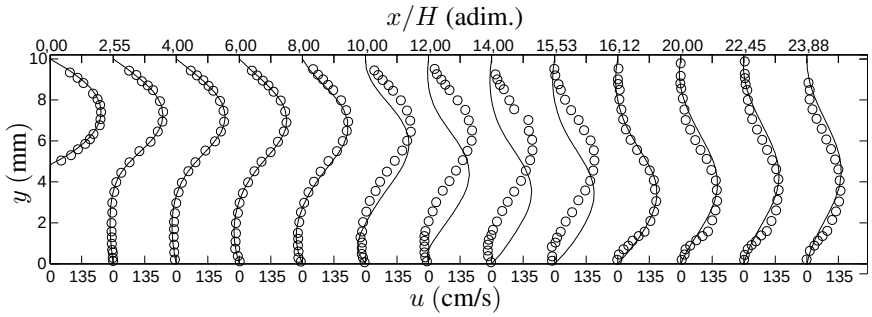
Tableau 10.3 Longueurs de recollement calculées pour le problème de la marche descendante pour différents nombres de Reynolds.

Longueurs de recollement (x_1/H)					
Re	Smagorinsky	WALE	Smagorinsky (Petry 2006)	Dynamique (Petry 2006)	Expérimental (Armaly et al. 1983)
100	2,65	2,67	2,74	2,89	3,00
400	7,34	7,74	7,60	7,90	8,00
1000	11,05	12,24	11,09	11,25	16,00

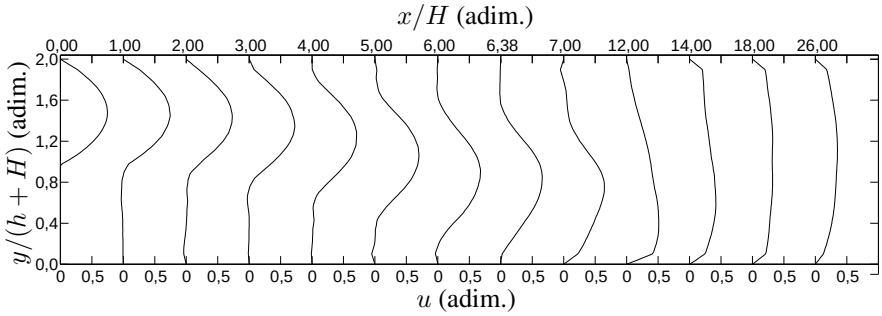
Pour $Re = 10000$, on trouve peu de résultats numériques dans la littérature où on évalue la longueur de recollement (Petry et Awrunch, 2006; Krishnamoorthy, 2007). Petry et Awrunch (2006) trouvent $x_1/H = 7,3$ et Krishnamoorthy (2007) situe cette même valeur entre 6 et 7. La figure 10.4 présente l'évolution de la longueur de recollement lorsqu'on fait varier t_{n_0} de 0 à 90 en fixant $t_N = 100$ et $\delta t = 1{,}0\text{e-}1$ dans le calcul de la moyenne selon l'équation (10.2). Cette démarche vise à éliminer le biais induit par les premiers pas de temps dans cette moyenne et d'en identifier la valeur la plus représentative. On voit que la longueur de recollement augmente jusqu'à $t_{n_0} \approx 40$ et qu'ensuite elle se stabilise entre $x/H = 6{,}30$ et $x/H = 6{,}60$. Ceci nous permet d'affirmer que $x_1/H \in [6{,}30\ ,\ 6{,}60]$. Soulignons que cet intervalle est inclus dans celui identifié par Kim *et al*. (1980), soit $[6\ ,\ 8]$. Ceci nous porte à croire que notre implémentation est validée. Enfin, les figure 10.5 et 10.6 montrent l'extrusion du champ de vitesse dans une coupe au centre de l'écoulement sur laquelle sont superposées différentes quantités d'intérêt. Ceci permet de constater le caractère tridimensionnel de l'écoulement. La figure 10.7 montre l'écoulement autour de la longueur de recollement à différents temps. Enfin, la figure 10.8 présente des surfaces de niveau de la pression, la figure 10.9 celles de la vitesse et la figure 10.10 illustre des lignes de courant de l'écoulement. Ces figures permettent d'apprécier la complexité de l'écoulement simulé.



(a) $Re = 100$



(b) $Re = 1000$



(c) $Re = 10000$

Figure 10.3 Profils de vitesse au centre de l'écoulement (o) données expérimentales (Armaly *et al.*, 1983) et (—) résultats numériques.

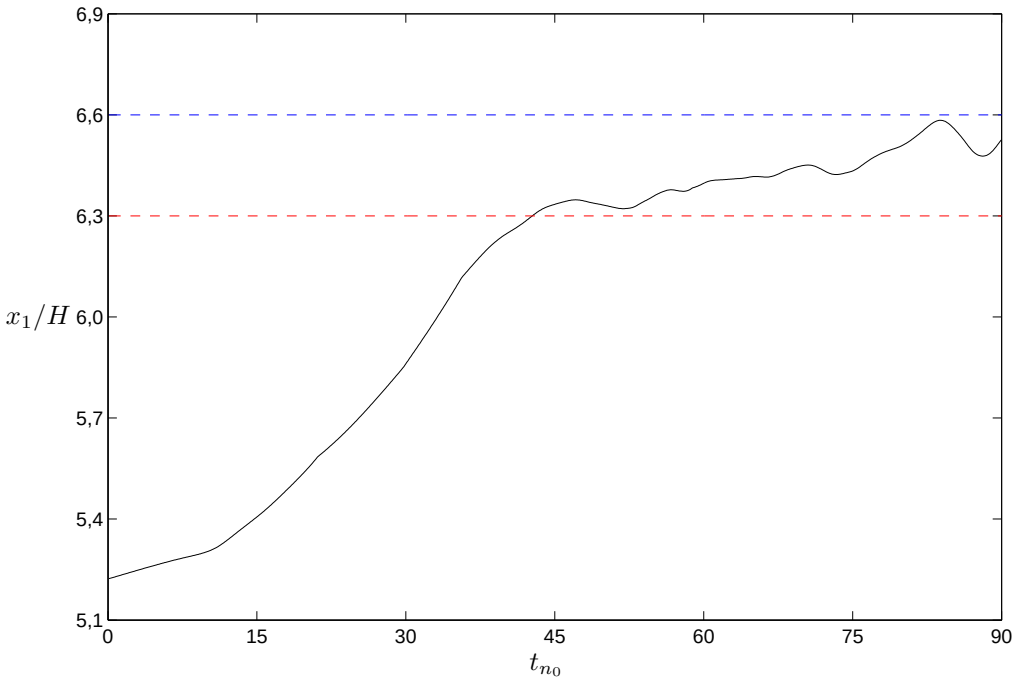
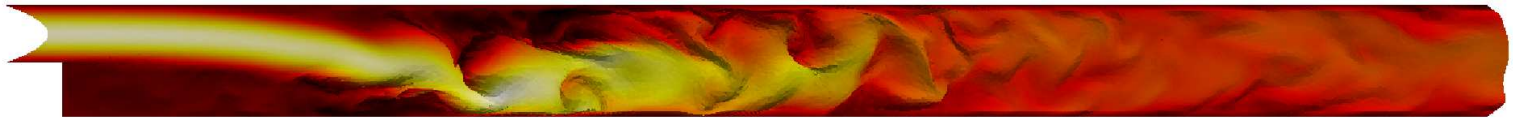
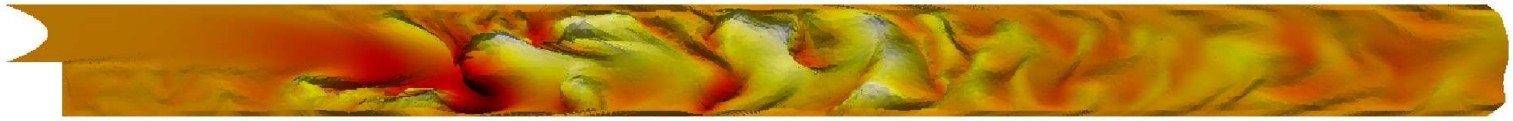


Figure 10.4 Évolution de la longueur de recollement en fonction du temps initial dans le calcul de la moyenne.

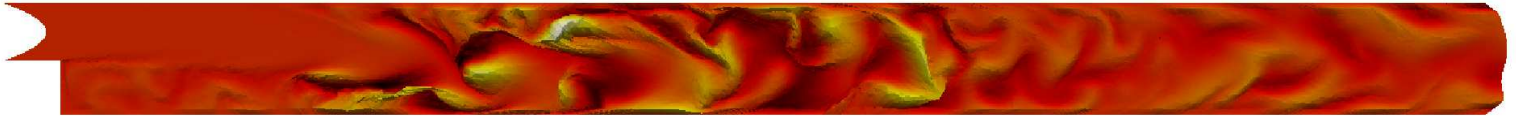
(a) Pression



(b) Vitesse : direction x



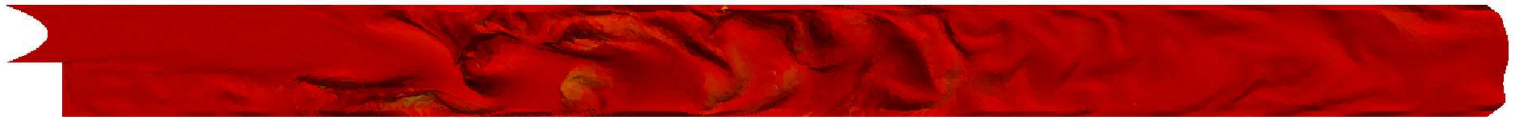
(c) Vitesse : direction y



(d) Vitesse : direction z

Figure 10.5 Pression et composantes de la vitesse présentées sur l'extrusion du champ de vitesse au centre de l'écoulement $(z = 0)$ (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc).

(a) Vorticité : direction x

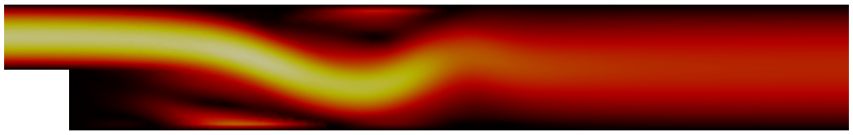


(b) Vorticité : direction y

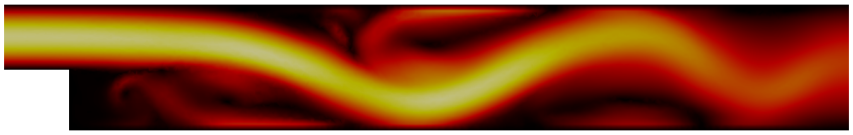
(c) Vorticité : direction z

Figure 10.6 Composantes du champ de vorticité présentées sur l'extrusion du champ de vitesse au centre de l'écoulement ($z = 0$) (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc).

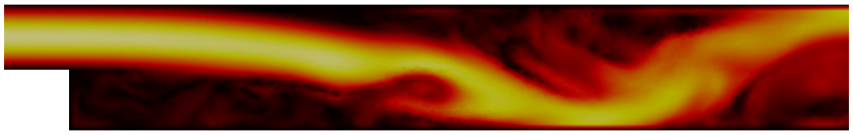
(a) $t = 0{,}0$



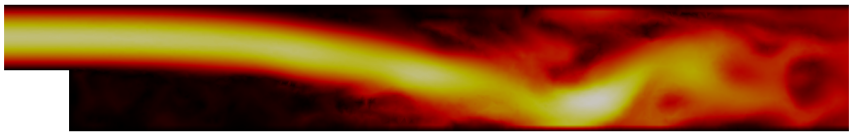
(b) $t = 12{,}5$



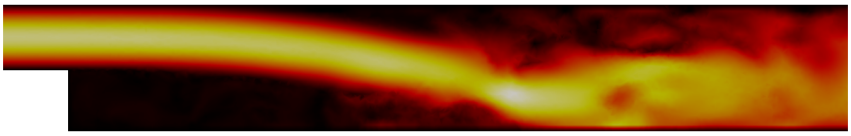
(c) $t = 25{,}0$



(d) $t = 50{,}0$



(e) $t = 75{,}0$



(f) $t = 100{,}0$

Figure 10.7 Évolution de la longueur de recollement suivant la norme du chapm de vitesse à différents temps (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc).

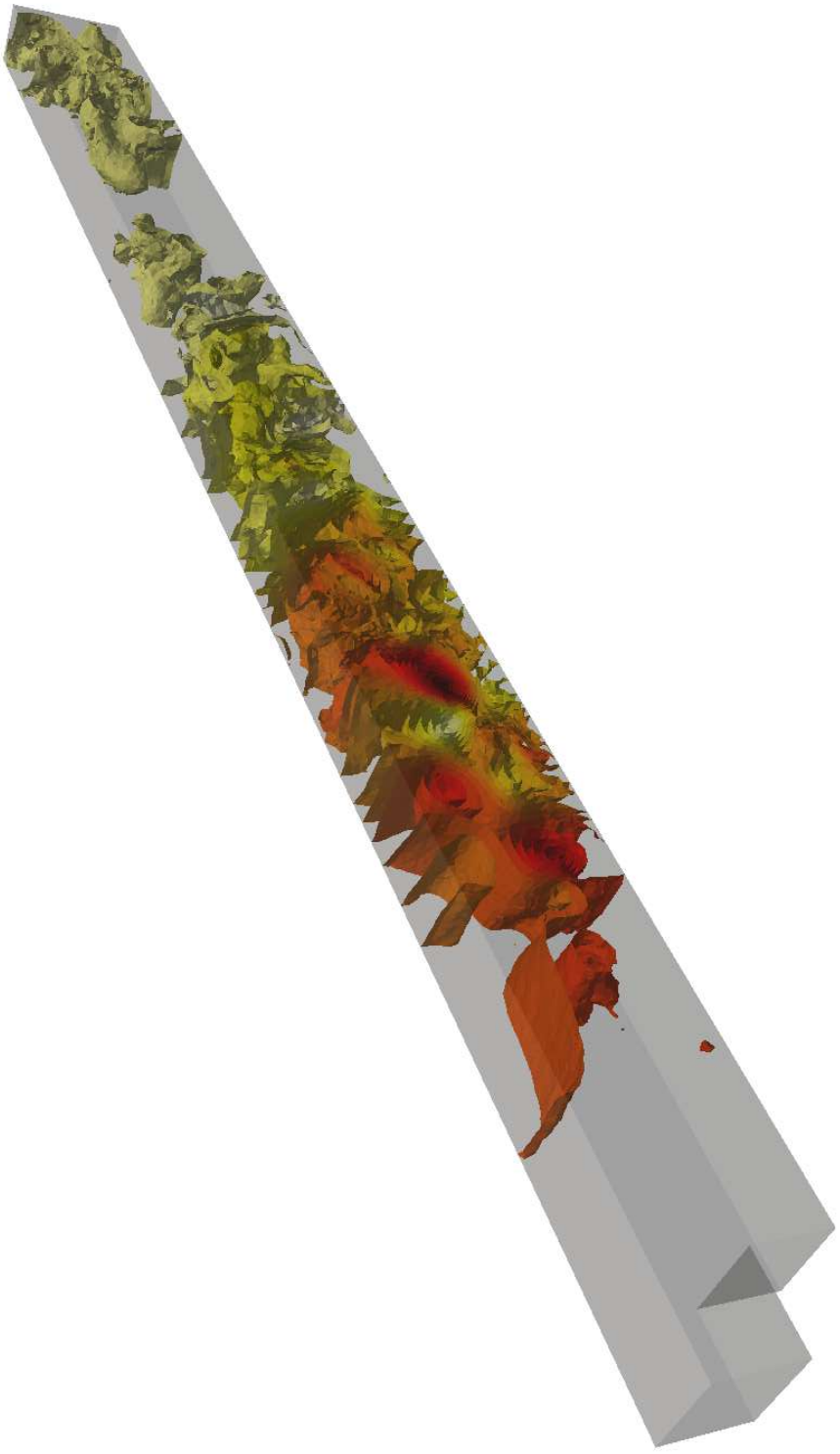


Figure 10.8 Surfaces de niveau de la pression (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc).

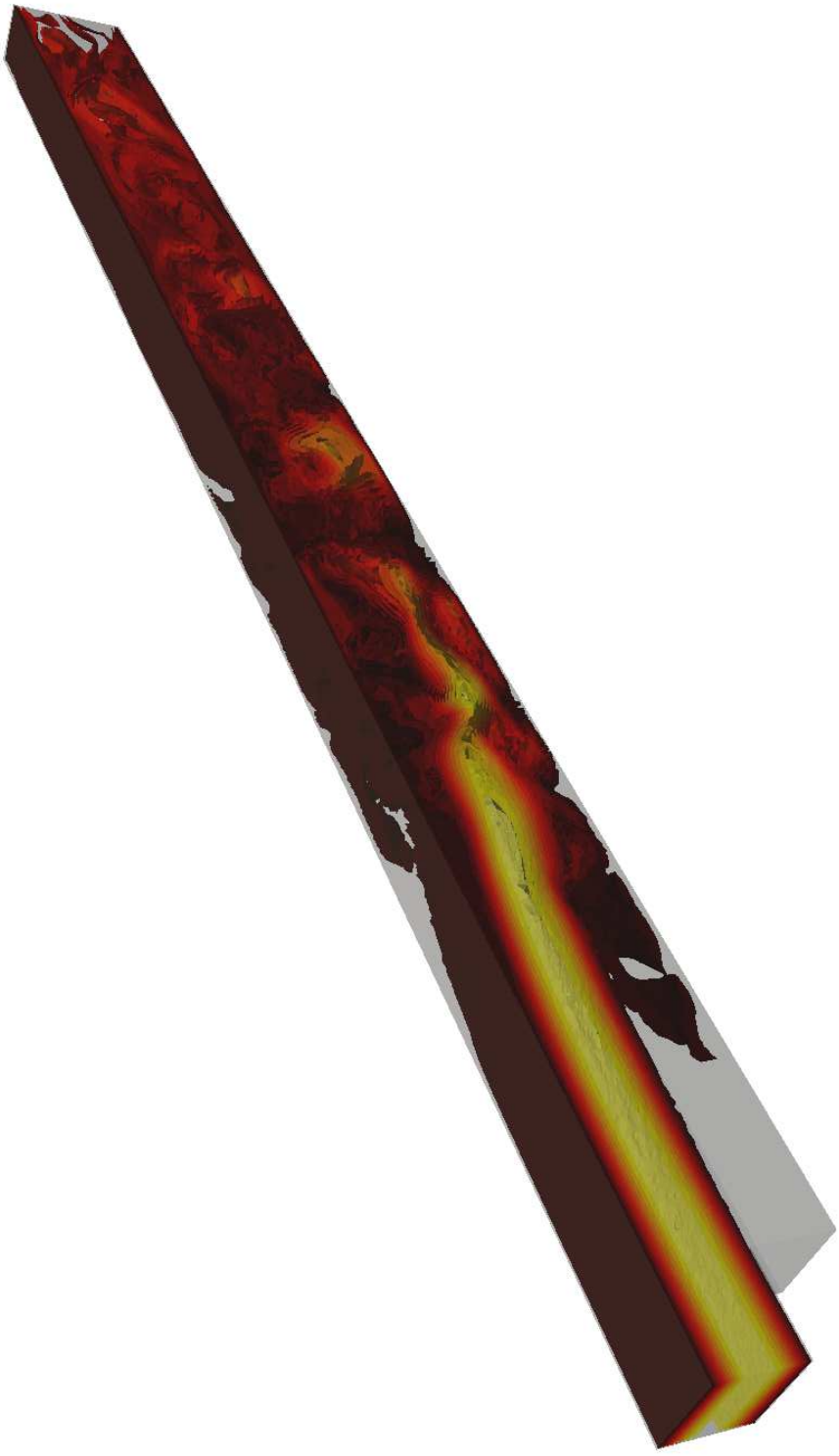


Figure 10.9 Isosurfaces de la vitesse (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc).

Figure 10.10 Lignes de courant de l'écoulement (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc).

Chapitre 11

Validation de la modélisation des écoulements turbulents à surface libre : L'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente

L'instabilité de Rayleigh-Taylor est engendrée par la superposition d'un fluide de densité forte ρ_2 sur un fluide de densité faible ρ_1. Sous l'action de la gravité, le fluide lourd descend et le fluide léger remonte. Nous nous intéressons à l'instabilité de l'interface. Lorsque l'écoulement généré par le déplacement des fluides devient turbulent, la demi-épaisseur de la couche de mélange définie par :

$$h(t) = \frac{h_{\max}(t) - h_{\min}(t)}{2}, \tag{11.1}$$

où $h_{\max}(t) = \max\{\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{j} \mid F(\boldsymbol{x}, t) = 0{,}5\}$ et $h_{\min}(t) = \min\{\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{j} \mid F(\boldsymbol{x}, t) = 0{,}5\}$ (voir figure 11.1), est régie par la loi quadratique (Ristorcelli et Clark, 2004; Cook *et al*., 2004) :

$$h(t) = \alpha A_t g t^2 + 2\sqrt{\alpha A_t g h_0}\, t + h_0, \tag{11.2}$$

où $A_t = \dfrac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1 + \rho_2}$ est le nombre d'Atwood, g est la grandeur de la gravité, h_0 est la hauteur initiale de l'interface et α est une constante. Dans la littérature, on ne retrouve pas de valeur unique ou universelle pour α. Ceci est bien illustré dans le tableau récapitulatif que l'on retrouve dans Glimm *et al*. (2001). Selon ce tableau, α varie de 0,01 à 0,06 théoriquement, de 0,05 à 0,077 expérimentalement et de 0,03 à 0,08 numériquement. Ajoutons que la borne inférieure numérique serait plutôt 0,02 d'après les résultats de Livescu *et al*. (2009).

Remarque 11.1. Le comportement asymptotique $h(t) \sim \alpha A_t g t^2$ est connu depuis Fermi, mais il est plus souvent lié aux noms de Youngs (1984) et Read (1984). Ajoutons que pour ces deux

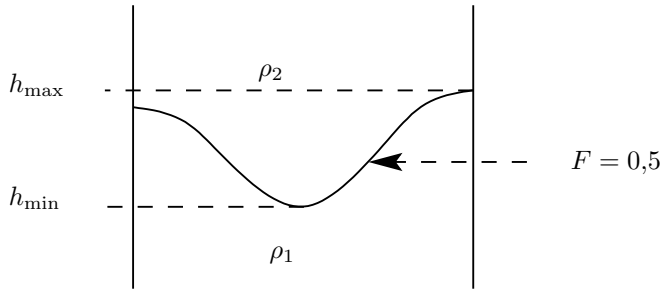


Figure 11.1 Hauteur de mélange pour le problème de l'instabilité de Rayleigh-Taylor.

auteurs, $h(t)$ n'est pas la demi-épaisseur de la couche de mélange, mais la hauteur de pénétration du fluide léger dans le fluide lourd. Bien que ce comportement soit asymptotique, il est courant dans la littérature de rencontrer les expressions $h(t) \approx \alpha A_t g t^2$ et même $h(t) = \alpha A_t g t^2$. Ce n'est qu'avec Ristorcelli et Clark (2004) et Cook *et al*. (2004) que la loi de croissance de $h(t)$ a été formulée sous la forme présentée à l'équation (11.2).

Afin de valider le système d'équations que nous proposons pour la simulation des écoulements turbulents à surface libre, nous avons modélisé trois variantes de l'instabilité dont les données adimensionnelles sont présentées au tableau 11.1. L'objectif est de retrouver la loi théorique avec une valeur de α près de celles énoncées précédemment. Soulignons que pour la troisième variante, nous avons utilisé les données physiques de l'eau et du chloroforme. Dans tous les cas, le nombre de Reynolds a été calculé comme :

$$Re = \frac{\rho_2 L \sqrt{gL}}{\mu_1}.$$

Il est important de souligner que ce nombre de Reynolds n'est pas calculé avec une vitesse et

Tableau 11.1 Données adimensionnelles pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente.

Variante	ρ_1	μ_1	ρ_2	μ_2	$\boldsymbol{g}$	A	Fr	Re
1	0,3333	1	1	1	-$\boldsymbol{j}$	0,5	1	3,2e4
2	0,3333	1	1	1	-$\boldsymbol{j}$	0,5	1	1,0e5
3	0,6743	1	1	0,5630	-$\boldsymbol{j}$	0,1945	1	1,4681e5

une longueur caractéristiques représentatives de l'écoulement. C'est pour cette raison que nous

fournissons le nombre de Reynolds terminal basé sur $h(t)$:

$$Re_h = \frac{\rho_2 h h'}{\mu_1}.$$

Toutes les simulations ont été effectuées sur le même maillage non structuré de 302 406 éléments d'une taille de 0,025. Nous avons utilisé l'élément MINI pour la vitesse, P1 pour la pression et P1 pour la pseudo-concentration. La géométrie du problème est la boîte $[\text{-}0{,}5\ ,\ 0{,}5] \times [\text{-}1{,}5\ ,\ 1{,}5] \times [\text{-}0{,}1\ ,\ 0{,}1]$ et la position initiale de l'interface est donnée par

$$F^{\text{-}1}(\{0{,}5\}) = \Big\{ \big(x,\ h_0 \cos(2\pi(x + 0{,}5))\big) \text{ t.q. } x \in [\text{-}0{,}5\ ,\ 0{,}5] \Big\} \times [\text{-}0{,}1\ ,\ 0{,}1] \times \{t_0\},$$

où $h_0 = 0{,}1$ (voir figure 11.2). Un champ de vitesse nul ainsi qu'une pression nulle ont été

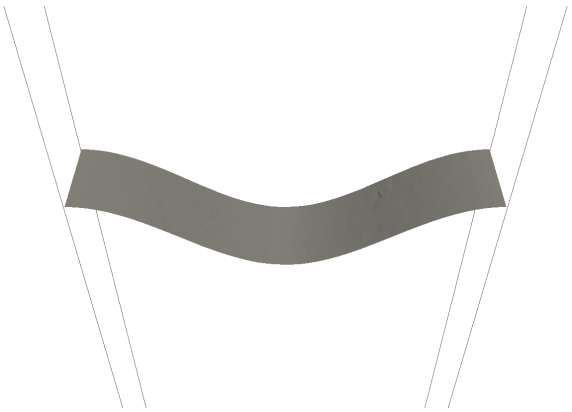


Figure 11.2 Position initiale de la surface libre pour les instabilités de Rayleigh-Taylor.

initialement imposés sur tout le domaine et les conditions limites utilisées sont fournies au tableau 11.2. La discrétisation en temps a été faite à l'aide du schéma de Gear avec un pas de temps de $0{,}01$. Le modèle de viscosité turbulente WALE a été utilisé avec $C_w = 0{,}1$ et $\delta = 0{,}04$. La demi-largeur de la zone de transition de la pseudo-concentration a été fixée à $\varepsilon = 0{,}04$, soit la même valeur que la largeur de filtre δ suggérée par la théorie. Enfin, la tension superficielle a été négligée.

Tableau 11.2 Conditions limites pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente exprimées en fonction des vecteurs de la base canonique de $\mathbb{R}^3$.

Dessus	$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{j} = 0$	(condition naturelle libre)
Dessous	$0\boldsymbol{i} + 0\boldsymbol{j} + 0\boldsymbol{k}$	(condition de non glissement)
Côtés $\perp \boldsymbol{k}$	$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{k} = 0$	(condition de glissement)
Côtés $\perp \boldsymbol{i}$	$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{i} = 0$	(condition de glissement)

11.1 Résultats numériques

Les trois variantes de l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente présentent un comportement similaire. On observe à la figure 11.3 que l'évolution de α, calculée selon la formule (Ristorcelli et Clark, 2004)

$$\alpha = \frac{h'^2}{4A_t g h}, \tag{11.3}$$

augmente et atteint une valeur maximale pour ensuite redescendre et se stabiliser autour d'une valeur constante. Ce comportement peut s'expliquer d'une part par le fait qu'au départ, le champ de vitesse et la position de la surface libre ne sont pas synchrones et d'autre part, par le fait que l'écoulement engendré n'est pas encore turbulent. La valeur qui nous intéresse est précisément celle autour de laquelle α oscille. Afin d'estimer cette quantité, nous avons fait une régression par rapport à la loi théorique (11.2). En d'autres mots, nous avons calculé la valeur de α minimisant

$$S(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{i=n_0}^{N} (\alpha A_t g {t_i}^2 + 2\sqrt{\alpha A_t g h_0}\, t_i + h_0 - h_i)^2, \tag{11.4}$$

où n_0 correspond à l'indice du pas de temps marquant le début de la stabilisation observée à la figure 11.3. Ceci nous a permis d'obtenir les valeurs de α optimales du tableau 11.3 où sont aussi inscrits les nombres de Reynolds terminaux pour nos trois simulations. Comme nous pouvons le constater, les valeurs de α obtenues sont en bon accord avec celles répertoriées par Glimm *et al.*

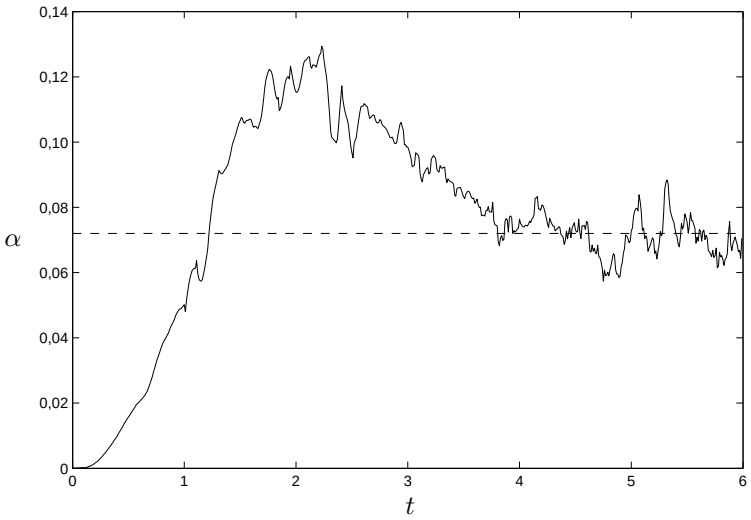


Figure 11.3 Variation de α (—) et α optimal (- -) pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor chloroforme-eau.

Tableau 11.3 Valeur de α optimale et nombre de Reynolds terminal pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente.

	Variante 1	Variante 2	Variante 3
α	0,080	0,084	0,072
Re_h	1,8e4	6,1e4	3,7e4

(2001) *i.e.* un α numérique variant de 0,03 à 0,08. En superposant l'évolution de la demi-épaisseur de mélange théorique pour la valeur de α optimale et celle obtenue numériquement (voir figure 11.4), on constate que les courbes commencent à se confondre près de $t = 3{,}5$. Ceci correspond au comportement de α présenté à la figure 11.3. Pour s'en convaincre, il suffit d'observer l'erreur relative entre les données théoriques et numériques (voir figure 11.5). En effet on note que pour $t \geq 3{,}5$, l'erreur descend sous 1%, ce qui illustre bien la correspondance entre la théorie et nos résultats.

Nous allons conclure ce chapitre avec quelques commentaires sur l'évolution de la surface libre. Puisque l'épaisseur de la couche de mélange a été calculée à partir de l'interface et que les résultats numériques sont conformes à la théorie, nous pouvons conclure que le modèle que nous utilisons pour capturer la surface libre a un comportement adéquat. La figure 11.6 montre l'état de la surface libre à différents pas de temps. On peut remarquer que cette dernière n'est pas seulement déformée dans le plan $z = 0$, mais bien dans toutes les directions. La figure 11.7 présente

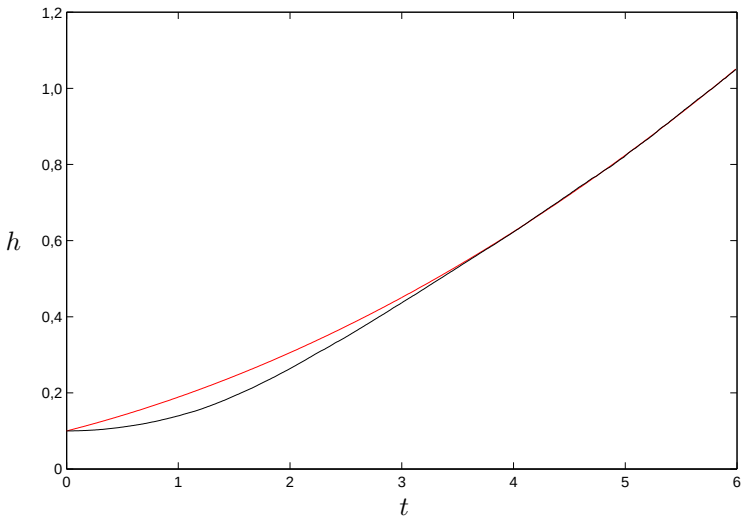


Figure 11.4 Courbe de croissance théorique (rouge) vs courbe numérique (noire) pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente.

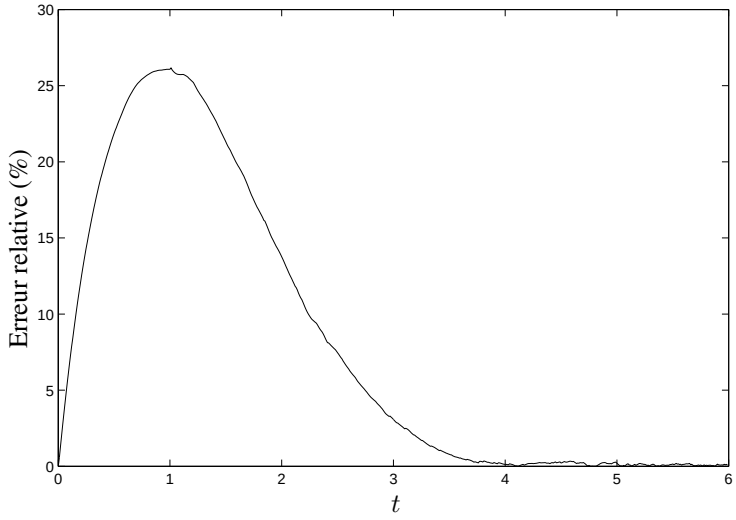


Figure 11.5 Erreur relative entre la courbe théorique et la courbe numérique pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente.

différents points de vues de la surface libre au temps $t = 6{,}5$. Ceci illustre d'une part la complexité de l'écoulement près de la surface libre et d'autre part le besoin de raffiner le maillage afin d'obtenir plus d'informations ou de l'information de meilleure qualité sur la dynamique de l'interface. Les lignes de courant de la figure 11.8 permettent d'identifier différentes grosses structures tourbillonnaires présentes dans l'écoulement. On peut entre autre y apercevoir les lignes de courant impliquées dans l'instabilité de la figure 11.7. Enfin, les figures 11.9 et 11.10 donnent un aperçu

(a) $t = 3$ (b) $t = 4$ (c) $t = 5$ (d) $t = 6,5$

Figure 11.6 Évolution de la surface libre pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente.

de chaque composante du champ de vitesse et de la vorticité dans une coupe au centre ($z = 0$) de l'écoulement.

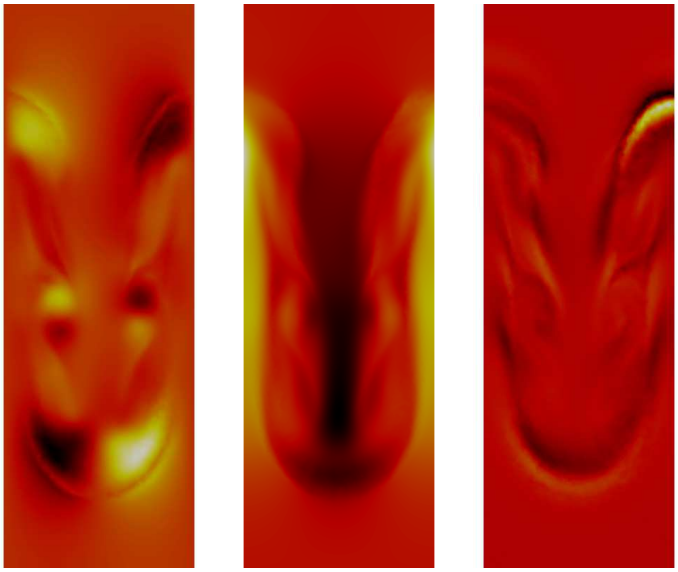
(a) Surface libre à $t = 6{,}5$ avec une rotation de 45˚selon y

(b) Coupe au centre de (a)

(c) Rotation de 45˚de (b)

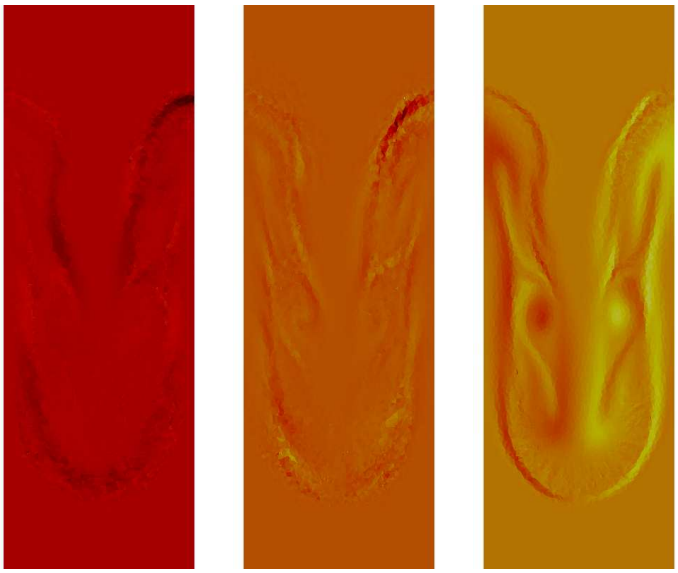
Figure 11.7 Seconde instabilité de Rayleigh-Taylor.

Figure 11.8 Lignes de courant de l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente à $t = 6{,}5$ (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc).



(a) Vitesse (x) (b) Vitesse (y) (c) Vitesse (z)

Figure 11.9 Champ de vitesse au centre de l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc).



(a) Vorticité (x) (b) Vorticité (y) (c) Vorticité (z)

Figure 11.10 Vorticité au centre de l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente (gradation de faible à élevée suivant les couleurs noir, rouge, jaune et blanc).

Chapitre 12

Conclusion

Un modèle numérique pour faire l'étude des écoulements turbulents à surface libre a été présenté. Dans cette étude, nous nous sommes concentrés sur les fluides incompressibles et immiscibles. Le modèle proposé est basé sur la simulation des grandes échelles et sur une stratégie eulérienne de capture d'interface, soit la méthode de la pseudo-concentration. Une justification mathématique rigoureuse établit la cohérence du modèle proposé au chapitre 7 de la thèse. Il s'agit d'une étape qui est souvent absente dans les communications scientifiques. La simulation des grandes échelles nous a permis d'étudier des problèmes de nature instationnaire sur des maillages de taille raisonnable dans un cadre de travail rigoureux. Nous avons aussi fait un effort particulier au chapitre 6 pour bien justifier notre choix du modèle WALE pour le calcul de la viscosité turbulente dans le cadre des problèmes à surface libre et nous avons expliqué pourquoi le modèle de Smagorinsky avec une fonction de décroissance de type Van Driest n'était pas une option viable.

La validation de la modélisation de la turbulence a été basée sur le problème de la marche descendante (voir chapitre 10), où nous avons cherché à retrouver numériquement la longueur de recollement pour différents nombres de Reynolds à l'aide de simulations transitoires. Nous avions accès à des données expérimentales pour $Re = 100$, 400, 1000 et $10\,000$. Bien que nous étions limités dans le nombre d'éléments que nous pouvions utiliser (une simulation prenait de un jour pour $Re = 100$ à quelques mois pour $Re = 10\,000$ sur un maillage de près de $500\,000$ éléments), les longueurs de recollement calculées correspondaient aux valeurs retrouvées dans la littérature. Bien que nous ayons obtenu une légère sous-évaluation de cette quantité par rapport aux données expérimentales utilisées dans cette étude, les quelques auteurs qui ont fait une étude numérique de ce problème ont aussi obtenu des approximations inférieures aux valeurs mesurées, du même ordre de grandeur que celles obtenues dans cette thèse. Le nombre limité d'études quantitatives pour ce problème a rendu notre tâche un peu difficile, mais les résultats que nous avons obtenus nous portent à être confiants que le modèle développé est valide. Des simulations avec un plus

grand nombre de degrés de liberté devraient nous permettre de confirmer cela et de voir si on s'approchera plus des mesures expérimentales.

La vérification et la validation du modèle numérique pour l'étude des écoulements turbulents multifluides ont été basées sur le problème de l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente (voir chapitre 11). Ce choix est justifié par les nombreux résultats théoriques, expérimentaux et numériques disponibles pour ce qui est de l'estimation de la demi-épaisseur de la couche de mélange de l'interface. De plus, puisque l'interface est soumise à d'importantes déformations, ce problème nous permettait aussi de vérifier comment la capture d'interface se comportait dans ce contexte. Les résultats obtenus ont été concluants avec une concordance quantitative avec la théorie et les autres résultats retrouvés dans la littérature. La topologie et la dynamique de la surface libre calculée montrent bien le caractère tridimensionnel et transitoire de cet écoulement turbulent.

Ce dernier problème nous a montré que la propriété de mélange associée à ce type d'écoulement génère d'importantes déformations du marqueur eulérien qui identifie la position de la surface libre. Différentes stratégies sont utilisées dans la littérature pour tenter de minimiser les déformations non physiques de ce marqueur. Une analyse mathématique rigoureuse (voir chapitre 5) a permis de mieux comprendre l'impact de ces différentes stratégies sur la conservation de la quantité de matière de chaque fluide en écoulement. Cette analyse nous a d'abord permis d'établir une relation étroite entre la densité des fluides en écoulement et la largeur de la zone de transition du marqueur eulérien. Cette analyse nous porte aussi à croire qu'il nous serait possible, pour un ratio de densités donné, de trouver une largeur de la région de transition qui serait optimale, i.e. qui minimiserait les pertes de masses. Mais pour le moment, nous savons que plus le ratio de densité est grand, plus la région de transition doit être fine. Ce résultat a été confirmé dans une autre analyse du phénomène où on observe une perte ou un gain de masse systématique lorsqu'on avance dans le temps. La conclusion de cette seconde analyse est qu'une réduction de la taille des pas de temps ou de la taille de la région de transition du marqueur permet de réduire les variations de masse. Il a aussi été démontré que la stratégie qui consiste à réinitialiser périodiquement le marqueur eulérien induit une erreur additionnelle qui est transportée dans le temps, indépendamment de la stratégie utilisée. Les stratégies d'adaptation de maillage induisent le même type d'erreur lors de l'interpolation du marqueur entre les maillages adaptés. La conclusion de cette analyse nous indique donc d'interférer le moins possible avec le marqueur transporté, la meilleur stratégie étant

d'utiliser un maillage fixe le plus fin possible pour toute la simulation. Nous reviendrons sur ce point lorsque nous discuterons des travaux futurs. La validation numérique de ces observations a été basée sur l'écoulement qui consiste en l'ascension libre d'une bulle de gaz dans un liquide en se basant sur les données fournies par le diagramme de Grace (voir chapitre 9). Nos résultats sont en accord avec les données de Grace avec une sous-estimation de la vitesse d'ascension qui peut maintenant être expliquée par l'analyse du chapitre 5. Nous avons aussi exécuté la simulation de deux bulles en ascension libre afin de montrer que le modèle proposé est en mesure de suivre la coalescence entre deux bulles et qu'il est en mesure de bien conserver la masse entre les fluides en écoulement. Même si ce problème est populaire dans la littérature numérique, aucunes données expérimentales ou numériques nous permettent de bien comparer quantitativement nos résultats. Ce problème nous a cependant aidé à tirer nos conclusions sur les techniques de mise à jour du marqueur, sur l'adaptation de maillage, sur la largeur de la région de transition du marqueur et sur la conservation de la masse.

Le modèle proposé prend aussi en compte l'influence de la tension superficielle. Le calcul de la force capillaire implique l'évaluation de la dérivée seconde du marqueur eulérien pour l'estimation de la courbure de la surface libre. Toujours au chapitre 5, différentes techniques de reconstruction des dérivées ont été présentées. Dans le cas des interpolants de degré peu élevé, une étape additionnelle de lissage à l'aide d'un filtre a été proposée. Comme pour les méthodes de mise à jour de la pseudo-concentration, nous avons observé que ces interventions ont aussi un effet sur la conservation de la masse. Une technique de reconstruction du gradient qui pourrait réduire ces problèmes de perte de masse est proposée à la fin du chapitre 5, mais sans être testée. Puisque nous n'avons pas pris en compte la force capillaire dans les écoulements turbulents à surface libre, nous avons décidé de ne pas poursuivre dans cette direction pour le moment. Ces stratégies ont été testées au chapitre 8 en se basant sur le problème de Young-Laplace. La modélisation numérique de ce problème est connue pour générer des courants parasites non physiques lorsqu'on approche de l'état stationnaire. Les différentes techniques de reconstruction pour différentes combinaisons d'éléments finis ont été comparées. La double projection dans L_2 est la technique qui a donné les meilleurs résultats avec la combinaison d'éléments P2/P1/P2, i.e. une convergence rapide et une force capillaire bien modélisée. Même si cette méthode est la plus simple, le fait qu'elle soit basée sur des moyennes pondérées semble mieux réduire les oscillations au niveau de l'approximation

numérique de la courbure. Les courants parasites observés étaient de l'ordre de 10^{-4} pour une taille d'éléments de $0{,}02$, ce qui est comparable aux résultats retrouvés dans la littérature. Diviser la taille des éléments par deux dans la zone de transition a permis d'obtenir des courants parasites de l'ordre de 10^{-5}, ce qui correspond à notre compréhension intuitive du comportement de ce modèle numérique.

Comme il a été mentionné précédemment, plusieurs des problèmes étudiés sont de grande envergure et nécessitent donc l'utilisation de maillages contenant un grand nombre de degrés de liberté. Puisque le calcul parallèle n'était pas un des objectifs de ce projet de recherche, des efforts ont plutôt été placés dans une utilisation astucieuse des méthodes itératives. L'avenue la plus intéressante nous a semblé être l'utilisation des méthodes de Krylov dites projetées, qui sont adaptées à la structure des matrices augmentées que nous obtenons dans le cadre de l'étude des écoulements incompressibles. Le professeur Orban du Département de mathématiques et de génie industriel avait déjà proposé une implémentation des méthodes TFQMR et BiCGStab projetées. Mais ces deux méthodes ne nous permettaient pas de résoudre plusieurs de nos problèmes discrets. Dans le cadre de ce projet (voir chapitre 4), une version simplifiée de la technique de projection a été developpée ce qui a permis de facilement l'appliquer à toutes les méthodes de Krylov. Cette approche a aussi facilité la mise en place d'une stratégie de préconditionnement. Ceci nous a permis de résoudre à moindres coûts les problèmes discrets rencontrés dans le cadre de ce projet. Les principales stratégies utilisées dans la littérature pour résoudre la matrice augmentée (factorisation LU, méthode d'Uzawa, condensation statique, méthodes de Krylov classiques avec et sans préconditionnement, méthodes projetées avec et sans préconditionnement) ont été comparées dans le cadre de la résolution d'un système linéaire provenant de la discrétisation d'un écoulement stratifié. On observe que les méthodes projetées préconditionnées utilisent beaucoup moins d'espace mémoire pour un temps de calcul un peu plus élevé.

Plusieurs stratégies numériques et problèmes de validation ont été explorés même s'ils n'ont pas été présentés dans cette thèse. Nous nous étions donnés comme contrainte de ne présenter que des problèmes pour lesquels nous pouvions affirmer que nous avions le contrôle sur tous les aspects de la modélisation. Par exemple, nous avons entamé l'étude du problème de la colonne d'eau. Ce problème simule, par exemple, l'écoulement de l'eau après l'effondrement soudain d'un barrage. Plusieurs données expérimentales et numériques sont disponibles pour ce problème qui

est populaire dans la littérature numérique. Même si nous étions en mesure de faire une simulation de ce problème qui aurait semblé réaliste, notre modèle actuel ne traite pas adéquatement le contact entre la surface libre (la pseudo-concentration) et les parois solides. Un modèle particulier doit gérer l'angle de contact entre le marqueur et la paroi. Nous avons donc choisi de ne pas inclure ce problème et de ne pas ajouter un chapitre sur le traitement numérique de cet angle de contact dans le cadre de ce projet de recherche, même si nous savons comment y parvenir. De plus, ce modèle nécessiterait probablement une discrétisation plus fine le long des parois solides, ce qui aurait encore augmenté les coûts de calcul qui étaient déjà à la limite de nos ressources informatiques. Nous avons aussi commencé l'étude du problème de la couche de mélange. Pour ce problème, deux fluides sont superposés et se déplacent avec une vitesse différente. Des tourbillons se développent à l'interface et leur nombre est connu théoriquement. Les études numériques que l'on retrouve dans la littérature utilisent des conditions périodiques aux frontières pour ce problème. Une méthodologie permettant l'imposition de ces conditions a été mise en œuvre mais elle est encore au niveau de la vérification. Et sans ces conditions, nous n'obtenons pas le nombre de tourbillons théorique. Le dernier problème que nous avons exploré est l'écoulement de Taylor-Couette turbulent avec ou sans surface libre. Ce problème nécessite aussi l'imposition de conditions périodiques et nous éprouvons encore certains problèmes de stabilité qui semblent attribuables, après vérification avec un autre code de simulation, à notre mauvaise compréhension du problème physique plutôt qu'à une limitation de notre modèle numérique. Nous avons aussi implémenté une méthode permettant l'imposition d'une condition de débit à l'entrée du domaine. L'idée derrière l'utilisation de telles conditions est que généralement, dans la simulation d'un écoulement turbulent, on ne connaît pas le profil de vitesse à l'entrée du domaine de calcul ou encore ce profil est sujet à des perturbations induites par l'écoulement lui-même. Ces conditions permettent de laisser le profil de vitesse en entrée s'adapter à l'écoulement. Pour le moment, cette technique a été testée pour des écoulements laminaires et les profils de vitesse obtenus sont conformes à la théorie. Le passage aux écoulements turbulents est imminent. Nous avons aussi implémenté une méthode de domaines fictifs afin d'étudier des problèmes avec parois mobiles qui peuvent induire des écoulements turbulents. Toutes ces composantes seront mises à profit à court et à moyen terme.

Cette étude sur la modélisation numérique des écoulements turbulents est la première de cette nature effectuée au Département de mathématiques et de génie industriel, ce qui nous a obligé à

mettre en œuvre les algorithmes dont nous avions besoin dans un nouveau code de simulation 3D. À l'aide de cet outil, il sera maintenant beaucoup plus facile d'élaborer les prochains projets de recherche sur les écoulements turbulents. En effet, l'écriture d'un code spécialement conçu pour l'étude de ces problèmes facilitera la tâche des prochains étudiants qui s'intéresseront à la turbulence. Le fait d'avoir un code ouvert facilitera aussi la prochaine grande étape du développement de ce code, soit le parallélisme. Pour plusieurs des problèmes que nous avons étudiés, nous étions à la limite des ressources informatiques à notre disposition. De plus, le modèle LES nous permet de faire une étude plus fine de la structure des tourbillons en raffinant le maillage. Mais la simulation des grandes échelles nous contraint à raffiner le maillage de façon uniforme pour que l'opération de filtrage soit cohérente. Ceci est compatible avec nos conclusions sur la conservation de la masse liée à l'utilisation d'un marqueur eulérien pour la capture des surfaces libres. En effet, nous devons éviter toute intervention au niveau de ce marqueur, que ce soit les mises à jour périodiques ou l'interpolation entre les maillages résultant d'une stratégie de raffinement local. Le meilleur modèle pour réduire ces erreurs est de raffiner uniformément et de façon importante le maillage utilisé pour ce type de simulation. Et pour ce faire, la seule option est d'appliquer une technique de décomposition de domaine et de distribuer les calculs sur un grand nombre de processeurs. De plus, cette stratégie de travailler sur des maillages fixes est compatible avec la nature des problèmes étudiés. Un écoulement turbulent est un système dynamique non linéaire chaotique. Il est par conséquent sensible aux conditions initiales. Or, lors du raffinement du maillage, les solutions de l'ancien maillage sont projetées sur le nouveau maillage. Cette opération induit une erreur. Qu'elle soit petite ou non n'a aucune importance, car la sensibilité aux conditions initiales va inexorablement l'amplifier et altérer la solution. L'utilisation de cette stratégie dans le but d'améliorer ou de mieux capturer des structures tourbillonnaires est un coup d'épée dans l'eau. En effet, une infime modification de la solution peut induire ou détruire des structures tourbillonnaires. C'est la nature même du chaos. Cette limitation est partagée par toute stratégie utilisant un modèle de turbulence non moyenné. C'est donc le prix à payer pour simuler des écoulements turbulents instationnaires à surface libre.

Nous avons déjà mentionné quelques problèmes d'écoulements turbulents sur lesquels nous travaillons déjà. Même s'il y a de plus en plus d'articles publiés qui portent sur la modélisation numérique de la turbulence, les études rigoureuses ne sont pas si nombreuses que ça et ce type d'écoulement est encore mal compris. Il s'agit donc toujours d'un domaine d'étude en pleine émer-

gence et une grande quantité de problèmes ne demandent qu'à être étudiés. Nous pourrions commencer par les problèmes de cette thèse, où nous nous sommes souvent limités à des géométries relativement petites puisque nos ressources de calcul étaient limitées. Par exemple, il serait intéressant d'élargir le canal pour le problème de la marche descendante afin de voir si ce paramètre influence la longueur de recollement. Même si l'instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente a été étudiée dans le cadre d'une simulation 3D, dans les faits, l'épaisseur de la géométrie était réduite au minimum. Comme nous l'avons déjà mentionné, il serait aussi important de vérifier nos hypothèses sur les problèmes de conservation de la masse en utilisant des maillages raffinés de façon uniforme. Notre code de simulation ouvert nous permettra aussi de facilement mettre en place une méthodologie pour faire l'étude de problèmes dits multiphysiques. On peut mentionner, par exemple, le problème de changement de phase décrit dans l'introduction de cette thèse. On peut aussi remarquer que tous les fluides étudiés dans ce projet étaient newtoniens (viscosité constante). Le sang est connu pour être viscoélastique et son écoulement peut devenir turbulent dans une sténose ou dans une valve artificielle par exemple. Ces problèmes multiphysiques pourraient difficilement être étudiés dans un code de simulation commercial et sans avoir une bonne connaissance de la modélisation de la turbulence.

Il y a plusieurs questions techniques liées aux composantes de notre modèle numérique qui ont aussi été soulevées dans le cadre de ce projet. Le développement de meilleurs préconditionneurs pour les méthodes de Krylov projetées sera toujours important. Quelle est l'influence de la méthode de stabilisation pour la discrétisation de l'équation de transport de la pseudo-concentration sur la perte de masse ? Est-ce que l'utilisation d'une méthode de Galerkin discontinue pourrait réduire ces pertes de masse ? La modélisation de l'angle de contact entre les surfaces libres et les parois solides nous permettrait d'étudier plusieurs problèmes industriels additionnels.

Références

AGASSANT, J., FORTIN, J. et DEMAY, Y. (1994). Precondition of stationary interfaces in coextrusion flows. *Polym. Eng. Sci.*, vol. 34, pp. 1101–1108.

ARMALY, B., DURST, F., PEREIRA, J. et SCHÖNUNG, B. (1983). Experimental and theoretical investigation of backward-facing step flow. *J. Fluid Mech.*, vol. 127, pp. 473–496.

ARYA, S., MOUNT, D. M., NETANYAHU, N. S., SILVERMAN, R. et WU, A. Y. (1998). An optimal algorithm for approximate nearest neighbor searching. *J. ACM*, 45, 891–923.

BAILLY, C. et COMTE-BELLOT, G. (2003). *Turbulence*. CNRS Editions.

BATCHELOR, G. (1967). *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press.

BERSELLI, L., ILIESCU, T. et LAYTON, W. (2006). *Mathematics of large eddy simulation of turbulent flows*. Springer.

BRACKBILL, J., KOTHE, D. et ZEMACH, C. (1992). A continuum method for modelling surface tension. *J. Comput. Phys.*, vol. 100, pp. 335–354.

BRENNER, S. C. et SCOTT, L. R. (1996). *The mathematical theory of finite element methods*. Springer.

BREZZI, F. (1974). On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers. *R.A.I.R.O.*, vol. 2, pp. 129–151.

BROOKS, A. et HUGHES, T. (1982). Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations of convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, vol. 32, pp. 199–259.

CHIANG, T. et SHEU, T. (1999). A numerical revisit of a backward-facing step flow problem. *Phys. Fluids*, vol. 11, pp. 862–874.

CIARLET, P. (1978). *The finite element method for elliptic problems*. North-Holland publishing company.

CIUPERCĂ, C. (2005). *Comparaison de méthodes de reconstruction quadratique pour l'adaptation de maillages anisotropes*. Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.

COLEMAN, T. (1994). Linearly constrained optimization and projected preconditioned conjugate gradient. J. Lewis, éditeur, *Proceedings of the fifth SIAM conference on applied linear algebra*. SIAM, pp. 118–122.

COOK, A., CABOT, W. et MILLER, P. (2004). The mixing transition in Rayleigh-Taylor instability. *J. Fluid Mech.*, vol. 511, pp. 333–362.

DAVIS, T. (2004). Algorithm 832 : UMFPACK, an unsymmetric-pattern multifrontal method. *ACM Transactions on Mathematical Software*, vol. 30, pp. 196–199.

DE SOUSA, F., MANGIAVACCHI, N., NONATO, L., CASTELO, A., TOMÉ, M., FERREIRA, V., CUMINATO, J. et MCKEE, S. (2004). A front-tracking/front-capturing for the simulation of 3D multi-fluid flows with free surfaces. *J. Comput. Phys.*, vol. 198, pp. 469–499.

DEARDOFF, J. (1970). A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers. *J. Fluid Mech.*, vol. 41, pp. 453–480.

DESJARDINS, O., MOUREAU, V. et PITSH, H. (2008). An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *J. Comput. Phys.*, vol. 227, pp. 8395–8416.

DOUGLAS, J. et WANG, J. (1989). An absolutely stabilized finite element method for the Stokes problem. *Math. Comp.*, vol. 52, pp. 495–508.

DUFF, I. (2004). Ma57 — A code for the solution of sparse symmetric definite and indefinite systems. *ACM Transactions on Mathematical Software*, vol. 30, pp. 118–144.

DUFOUR, S. (1999). *Méthodes d'éléments finis adaptatives pour les écoulements multifluides*. Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal.

FORTIN, M. et GLOWINSKI, R. (1983). *Augmented Lagrangian methods : Applications to the numerical solution of boundary-value problems*. North-Holland publishing company.

FRANCA, L. et FREY, S. (1992b). Stabilized finite element methods : II. The incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, vol. 99, pp. 209–233.

FRANCA, L., FREY, S. et HUGHES, T. (1992a). Stabilized finite element methods :
I. Application to the advective-diffusive model. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, vol. 95, pp. 253–276.

FRIES, T. et MATTIES, H. (2004). *A review of Petrov-Galerkin stabilization approches and an extension to meshfree methods*. Informatikbericht-Nr. 2004-1, Technische Universitat Braunschweig, Brunswick, Germany.

GERMANO, M., PIOMELLI, U., MOIN, P. et CABOT, H. (1991). A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids*, vol. 3, pp. 1760–1765.

GHOSAL, S., LUND, T., MOIN, P. et AKSELVOLL, K. (1995). A dynamic localization for large-eddy simulation of turbulent flows. *J. Fluid Mech.*, vol. 286, pp. 229–255.

GLIMM, J., GROVE, J., LI, X., OH, W. et SHARP, D. (2001). A critical analysis of Rayleigh-Taylor growth rates. *J. Comput. Phys.*, vol. 169, pp. 652–677.

GRACE, J. (1973). Shapes and velocities of bubbles rising in infinite liquids. *Trans. Intsn. Chem. Engrs.*, vol. 51, pp. 116–120.

GRACE, J., WAIREDI, T. et NGUYEN, T. (1976). Shapes and Velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids. *Trans. Intsn. Chem. Engrs.*, vol. 54, pp. 167–173.

GUERRERO, J. P. et COTTA, R. (1996). Benchmark integral transform results for flow over a backward-facing step. *Computer & Fluids*, vol. 25, pp. 527–540.

HUGHES, T., FRANCA, L. et BALESTRA, M. (1986). A new finite element formulation for computational fuid dynamics : V. Circumventing the Babuška-Brezzi condition : A stable Petrov-Galerkin formulation of the Stokes problem accomodating equal-order interpolation. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, vol. 59, pp. 85–99.

HUGHES, T., FRANCA, L. et HULBERT, G. (1989). A new finite element formulation for computational fluid dynamics : VII. The Galerin/least-squares method for advective-diffusive equations. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, vol. 73, pp. 173–189.

JAMET, D., TORRES, D. et BRACKBILL, J. (2002). On the theory and computation of surface tension : The elimination of parasitic currents through energy conservation in the second-gradient method. *J. Comput. Phys.*, vol. 182, pp. 262–276.

JANSEN, K. (1999). A stabilized finite element method for computing turbulence. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, vol. 174, pp. 299–317.

JOHN, V. (2004). *Large eddy simulation of turbulent incompressible flows*. Springer.

JONES, W. et LAUNDER, B. (1972). The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *Int. J. of Heat Mass Transfer*, vol. 15, pp. 301–314.

KANG, S. et SOTIROPOULOS, F. (2012). Numerical modeling of 3D turbulent free surface flow in natural waterways. *Advances in Water Ressources*, vol. 40, pp. 23–36.

KELLEY, C. (1995). *Iterative methods for linear and nonlinear equations*. SIAM.

KIM, J., KLINE, S. et JOHNSTON, J. (1980). Investigation of a reattaching turbulent shear layer flow over a backward-facing step. *ASME J. Fluids Engng.*, vol. 102, pp. 302–308.

KRISHNAMOORTHY, C. (2007). *Numerical analysis of backward-facing step flow preceeding a porous medium using Fluent*. Mémoire de maîtrise, Oklahoma State University.

LAMARQUE, N., ZOPPÉ, B., LEBAIGUE, O., DOLIAS, Y., BERTRAND, M. et DUCROS, F. (2010). Large-eddy simulation of the turbulent free-surface flow in an unbaffled stirred tank reactor. *Chemical Engineeging Science*, vol. 65, pp. 4307–4322.

LESIEUR, M., MÉTAIS, O. et COMPTE, P. (2005a). *Large eddy simulations of turbulence*. Cambridge University Press.

LESIEUR, M., MÉTAIS, O. et COMTE, P. (2005b). *Large eddy simulations of turbulence*. Cambridge University Press.

LILLY, D. (1992). A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. *Phys. Fluids A*, vol. 4, pp. 633–635.

LIVESCU, D., RISTORCELLI, J., GORE, R., DEAN, S., CABOT, W. et COOK, A. (2009). High-Reynolds number Rayleigh-Taylor turbulence. *Journal of Turbulence*, vol. 10, pp. 1–32.

MARCHANDISE, E. (2006). *Simulation of three-dimensional two-phase flows*. Thèse de doctorat, Université catholique de Louvain.

NARAYANAN, S., GOOSENS, L. et KOSSEN, N. (1974). Coalescence of two bubble rising in line at low Reynolds numbers. *Chemical Engineering Science*, vol. 29, pp. 2071–2082.

NICOUD, N. et DUCROS, F. (1999). Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow Turbulence and Combustion*, vol. 62, pp. 183–200.

ORBAN, D. (2008). *Projected Krylov methods for unsymetric augmented systems*. Montréal : GERAD. G-2008-46. cahier du GERAD.

PETRY, A. et AWRUNCH, A. (2006). Large eddy simulation of three-dimensional turbulent flows by the finite element method. *J. of the Braz. Soc. of Mech. Sci. & Eng.* , vol. XXVIII, pp. 224–232.

PIOMELLI, U. et LIU, J. (1995). Large-eddy simulation of rotating channel flows using a localized dynamic model. *Phys. Fluids*, vol. 7, pp. 839–848.

POPE, S. (2001). *Turbulent Flows*. Cambridge University Press.

POPINET, S. (2009). An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. *J. Comput. Phys.*, vol. 228, pp. 5838–5866.

PROBSTEIN, R. (1989). *Physicochemical hydrodynamics : An introduction*. Boston : Butterworth-Heinemann.

PRUD'HOMME, M. (2006). *Éléments de turbulence*. Presse Internationales Polytechnique.

RAVIART, P. (1981). *Les méthodes d'éléments finis en mécanique des fluides*. Notes de cours, Éditions Eyrolles.

READ, K. (1984). Experimental investigation of turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability. *Physica D*, vol. 12, pp. 45–58.

RENARDY, Y. et RENARDY, M. (2002). PROST : A parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method. *J. Comput. Phys.*, vol. 183, pp. 400–421.

RISTORCELLI, J. et CLARK, T. (2004). Rayleigh-Taylor turbulence : Self-similar analysis and direct numerical simulations. *J. Fluid Mech.*, vol. 507, pp. 213–253.

SAAD, Y. (2003). *Iterative methods for sparse linear systems (second edition)*. SIAM.

SAGAUT, P. (2006). *Large eddy simulation for incompressible flows (troisième édition)*. Springer.

SCARDOVELLI, R. et ZALESKI, S. (1999). Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, vol. 31, pp. 567–603.

SCHENK, O. et GÄRTNER, K. (2004). Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with PARDISO. *Journal of Future Generation Computer Systems*, vol. 20, pp. 475–487.

SCHIESTEL, R. (1998). *Les écoulements turbulents : Modélisation et simulation (deuxième édition)*. Paris : Hermes.

SCHLICHTING, H. et GERSTEN, K. (2000). *Boundary layer theory (huitième édition)*. Springer.

SHIRANI, E., ASHGRIZ, N. et MOSTAGHIMI, J. (2005). Interface pressure calculation based on conservation of mementum front capturing methods. *J. Comput. Phys.*, vol. 203, pp. 154–175.

SUSSMAN, M., FATEMI, E., SMEREKA, P. et OSHER, S. (1998). An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computer & Fluids*, vol. 27, pp. 663–680.

THOMPSON, E. (1986). Use of pseudo-concentration to follow creeping viscous flows during transient analysis. *Int. Numer. Methods Fluids*, vol. 6, pp. 749–761.

TORNBERG, A. et ENGQUIST, B. (2000). A finite elenent based level set method for multiphase flow applications. *Computing Visualisation in Science*, vol. 3, pp. 93–101.

VAN DER VORST, H. (2003). *Iterative Krylov methods for large linear systems*. Cambridge University Press.

WANE, B. (2012). *Adaptation de maillage et méthodes itératives avec applications aux écoulements à surfaces libres turbulents*. Thèse de doctorat, Université Laval.

WEATHERBURN, C. (1927). On differential invariants in geometry of surfaces with some applications to mathematical physics. *The Quarterly Journal of Pure and Applied Mathematics*, vol. 50, pp. 250–269.

WILLIAMS, M., KOTHE, D. et PUCKETT, E. (1998). *Convergence and accuracy of kernel-based continuum surface tension models*. Rapport technique LA-UR-98-2268, Los Alamos : Los Alamos National Laboratory.

XIAOYE, S. (2005). An overview of SuperLU : Algorithms, implementation, and user interface. *ACM Transactions on Mathematical Software*, vol. 31, pp. 302–325.

YOUNGS, D. (1984). Numerical simulation of turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability. *Physica D*, vol. 12, pp. 32–44.

YUE, W., LIN, C. et PATEL, V. (2005). Large eddy simulation of turbulent open-channel flow with free surface simulated by level set method. *Phys. Fluids*, vol. 17.

ZALESKI, S. (1999). *Introduction aux modèles de turbulence*. Notes de cours, Université Pierre et Marie Curie.

ZIENKIEWICZ, O. et ZHU, Z. (1992a). The superconvergent patch recovery and a posteriory error estimates. Part 1 : The recovery technique. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 33, pp.1331–1364.

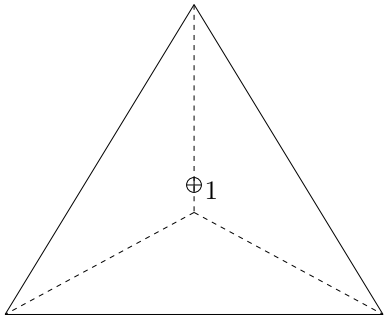
ZIENKIEWICZ, O. et ZHU, Z. (1992b). The superconvergent patch recovery and a posteriory error estimates. Part 2 : Error estimates and adaptivity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 33, pp.1365–1382.

Annexe A

Éléments finis 3-D

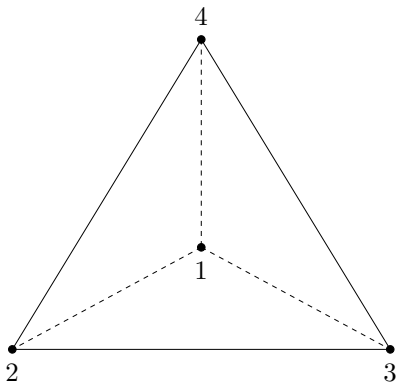
Dans cette annexe, nous donnons la spécification de chaque élément fini tétraédrique cité. Bien que ces éléments soient souvent cités dans la littérature, leur spécification n'est pas toujours fournie. C'est une pratique qui s'avère souvent frustrante pour celui qui débute dans le domaine de la simulation numérique avec éléments finis. C'est pourquoi cette annexe est présente.

Élément P0



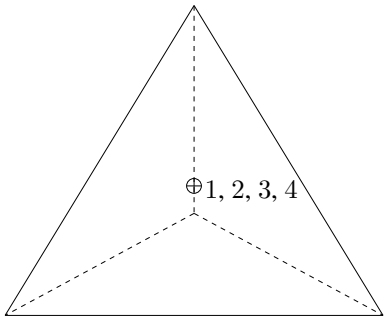
Nœuds	Coordonnées (N_i)	Fonctions d'interpolation (ϕ_i)
1	$\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$	1

Élément P1



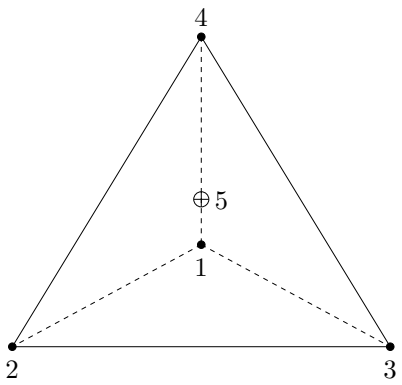
Nœuds	Coordonnées (N_i)	Fonctions d'interpolation (ϕ_i)
1	$(0, 0, 0)$	$1 - \xi - \eta - \zeta$
2	$(1, 0, 0)$	ξ
3	$(0, 1, 0)$	η
4	$(0, 0, 1)$	ζ

Élément P1$^{\mathbf{D}}$ (discontinu)



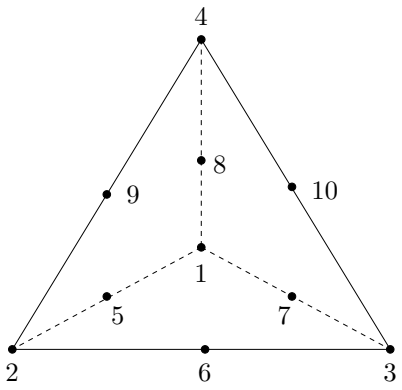
Nœuds	Coordonnées (N_i)	Fonctions d'interpolation (ϕ_i)
1	$\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$	1
2	$\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$	$\xi - \frac{1}{4}$
3	$\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$	$\eta - \frac{1}{4}$
4	$\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$	$\zeta - \frac{1}{4}$

Élément P1-bulle



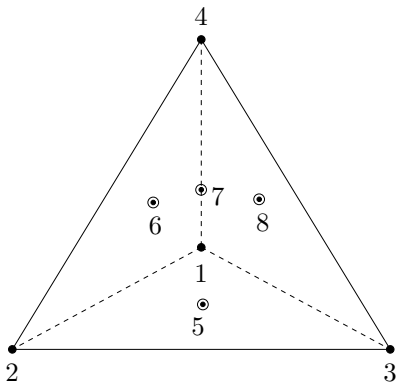
Nœuds	Coordonnées (N_i)	Fonctions d'interpolation (ϕ_i)
1	$(0, 0, 0)$	$1 - \xi - \eta - \zeta - 64(1 - \xi - \eta - \zeta)\xi\eta\zeta$
2	$(1, 0, 0)$	$\xi - 64(1 - \xi - \eta - \zeta)\xi\eta\zeta$
3	$(0, 1, 0)$	$\eta - 64(1 - \xi - \eta - \zeta)\xi\eta\zeta$
4	$(0, 0, 1)$	$\zeta - 64(1 - \xi - \eta - \zeta)\xi\eta\zeta$
5	$\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$	$256(1 - \xi - \eta - \zeta)\xi\eta\zeta$

Élément P2



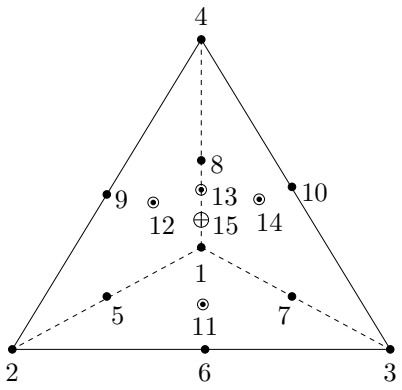
Nœuds	Coordonnées (N_i)	Fonctions d'interpolation (ϕ_i)
1	$(0, 0, 0)$	$1 - 3(\xi + \eta + \zeta) + 2(\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2) + 4(\xi\eta + \xi\zeta + \eta\zeta)$
2	$(1, 0, 0)$	$\xi(2\xi - 1)$
3	$(0, 1, 0)$	$\eta(2\eta - 1)$
4	$(0, 0, 1)$	$\zeta(2\zeta - 1)$
5	$\left(\frac{1}{2}, 0, 0\right)$	$4(\xi(1 - \xi - \eta - \zeta))$
6	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$4\xi\eta$
7	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	$4(\eta(1 - \xi - \eta - \zeta))$
8	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$4(\zeta(1 - \xi - \eta - \zeta))$
9	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$4\xi\zeta$
10	$\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$	$4\eta\zeta$

Élément P1$^+$



Nœuds	Coordonnées (N_i)	Fonctions d'interpolation (ϕ_i)
1	$(0, 0, 0)$	$\alpha - 9(\alpha\xi\eta + \alpha\xi\zeta + \alpha\eta\zeta)$
2	$(1, 0, 0)$	$\xi - 9(\alpha\xi\eta + \alpha\xi\zeta + \xi\eta\zeta)$
3	$(0, 1, 0)$	$\eta - 9(\alpha\xi\eta + \xi\eta\zeta + \alpha\eta\zeta)$
4	$(0, 0, 1)$	$\zeta - 9(\alpha\xi\zeta + \xi\eta\zeta + \alpha\eta\zeta)$
5	$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0)$	$27\alpha\xi\eta$
6	$(\frac{1}{3}, 0, \frac{1}{3})$	$27\alpha\xi\zeta$
7	$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$	$27\xi\eta\zeta$
8	$(0, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$	$27\alpha\eta\zeta$
		$\alpha = 1 - \xi - \eta - \zeta$

Élément P2$^+$



Nœuds	Coordonnées (N_i)	Fonctions d'interpolation (ϕ_i)
1	$(0, 0, 0)$	$\alpha - 2\alpha\xi + 3\alpha\xi\eta - 4\alpha\xi\eta\zeta + 3\alpha\xi\zeta - 2\alpha\eta + 3\alpha\eta\zeta - 2\alpha\zeta$
2	$(1, 0, 0)$	$\xi - 2\alpha\xi + 3\alpha\xi\eta - 4\alpha\xi\eta\zeta + 3\alpha\xi\zeta - 2\xi\eta + 3\xi\eta\zeta - 2\xi\zeta$
3	$(0, 1, 0)$	$\eta - 2\xi\eta + 3\alpha\xi\eta - 4\alpha\xi\eta\zeta + 3\xi\eta\zeta - 2\alpha\eta + 3\alpha\eta\zeta - 2\eta\zeta$
4	$(0, 0, 1)$	$\zeta - 2\alpha\zeta + 3\alpha\xi\zeta - 4\alpha\xi\eta\zeta + 3\alpha\eta\zeta - 2\xi\zeta + 3\xi\eta\zeta - 2\eta\zeta$
5	$\left(\frac{1}{2}, 0, 0\right)$	$4\alpha\xi - 12\alpha\xi\eta + 32\alpha\xi\eta\zeta - 12\alpha\xi\zeta$
6	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$4\xi\eta - 12\alpha\xi\eta + 32\alpha\xi\eta\zeta - 12\xi\eta\zeta$
7	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	$4\alpha\eta - 12\alpha\xi\eta + 32\alpha\xi\eta\zeta - 12\alpha\eta\zeta$
8	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$4\alpha\zeta - 12\alpha\xi\zeta + 32\alpha\xi\eta\zeta - 12\alpha\eta\zeta$
9	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$4\xi\zeta - 12\alpha\xi\zeta + 32\alpha\xi\eta\zeta - 12\xi\eta\zeta$
10	$\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$	$4\eta\zeta - 12\xi\eta\zeta + 32\alpha\xi\eta\zeta - 12\alpha\eta\zeta$
11	$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0)$	$27\alpha\xi\eta - 108\alpha\xi\eta\zeta$
12	$(\frac{1}{3}, 0, \frac{1}{3})$	$27\alpha\xi\zeta - 108\alpha\xi\eta\zeta$
13	$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$	$27\xi\eta\zeta - 108\alpha\xi\eta\zeta$
14	$(0, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$	$27\alpha\eta\zeta - 108\alpha\xi\eta\zeta$
15	$\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$	$256\alpha\xi\eta\zeta$
		$\alpha = 1 - \xi - \eta - \zeta$