

X-Mesh appliquée aux écoulements diphasiques

A. Quiriny¹, J-F. Remacle¹, J. Lambrechts¹, N. Moës^{2,3}

¹ iMMC, Université catholique de Louvain, {antoine.quiriny,jean-francois.remacle,jonathan.lambrechts}@uclouvain.be

² Nantes Université, École Centrale de Nantes

³ Institut Universitaire de France

Résumé — La modélisation précise des frontières et interfaces mobiles est une difficulté présente dans de nombreuses situations de la mécanique computationnelle. Nous utilisons une nouvelle approche, X-Mesh, pour simuler avec la méthode des éléments finis l'interaction entre deux écoulements immiscibles en gardant une description précise de l'interface sans régénération de maillage. La méthode est validée grâce à des problèmes complexes tels que l'élévation de bulles ou des vagues gravitationnelles. La qualité des résultats et l'efficacité de la méthode montrent le potentiel de cette approche pour simuler de tels phénomènes physiques.

Mots clés — Interface, Éléments finis, Écoulement diphasique

1 Introduction

De nombreuses techniques ont été développées pour simuler des interfaces : méthode Lagrangienne-Eulérienne arbitraire (ALE) [1], méthode de level set [2], méthodes diffuses [3], etc. Bien qu'elles présentent toutes des avantages intéressants, chacune de ces méthodes a des inconvénients : incapacité à prendre en compte les grands mouvements de l'interface ainsi que les changements de topologie, perte de la simplicité et de la robustesse de la méthode classique des éléments finis, sur-diffusion de l'interface, etc.. Très récemment, une nouvelle méthode de capture d'interface nommée X-Mesh a été développée et testée pour le problème de Stefan [4]. Nous nous intéressons à son application dans le cadre d'écoulement de deux fluides immiscibles. Dans un premier temps, nous posons le problème et les équations résolues et obtenons la formulation faible stabilisée. Ensuite nous décrivons le suivi de l'interface en expliquant successivement la technique de déformation du maillage d'X-Mesh, la résolution de l'équation de level set, le couplage entre X-Mesh et le solveur Navier-Stokes et enfin l'application de la tension de surface présente entre les deux fluides.

2 Les équations de Navier-Stokes stabilisées en éléments finis

Pour simuler nos écoulements diphasiques nous considérons deux fluides newtoniens et incompressibles, régis par les équations de Navier-Stokes. Dans cette section, les méthodes PSPG et SUPG nous permettent de développer une formulation faible stabilisée des équations de Navier-Stokes.

Les équations de Navier-Stokes dans le cas d'un fluide incompressible et newtonien sont les suivantes :

$$\begin{aligned}\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} &= -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0\end{aligned}\tag{1}$$

où $\mathbf{u}$ est le champ de vitesse $(u, v)^T$, p est la pression cinématique (ie. pression divisée par la densité ρ), $\mathbf{f}$ les forces à distance (la gravité) et ν la viscosité cinématique.

Les conditions frontières sur $\partial\Omega$ qui accompagnent ce problème correspondent à des conditions de Neumann sur $\partial\Omega_N$ et à des conditions de Dirichlet sur $\partial\Omega_D$:

$$\begin{aligned}\mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} & \text{on } \partial\Omega_D \\ (-p\mathbf{I} + \nu \nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{t} & \text{on } \partial\Omega_N\end{aligned}$$

avec $\mathbf{n}$ le vecteur unitaire normal sortant.

Considérons $\mathbf{S}_u^h$ et $\mathbf{S}_p^h$, les espaces de solution de $\mathbf{u}$ et p respectivement ainsi que leurs fonctions test $(\mathbf{v}^h, q^h) \in \mathbf{V}_u^h \times \mathbf{V}_p^h$. Pour des raisons de simplicité et de coût numérique, nous choisissons $\mathbf{P}_1$ l'espace des polynômes d'ordre 1 comme espace de solution et de fonctions test pour le champ de la vitesse $\mathbf{u}$ et la pression p . Ce choix ne permet pas d'obtenir une formulation d'éléments finis stable, des oscillations parasites de haute fréquence apparaissent. Différents schémas stabilisés existent pour résoudre ce problème, le plus populaire et celui utilisé ici est la méthode PSPG qui se base sur le résidu de l'équation 1 [5]. Le maillage se déforme en permanence et il faut le considérer dans les équations. La méthode ALE permet de prendre en compte ce déplacement en modifiant la vitesse d'advection avec la vitesse du maillage $\mathbf{u}_{mesh}$. La contribution au noeud i de la stabilisation PSPG correspond à :

$$\text{PSPG}_i = \sum_e \int_{\Omega^e} \left[\tau_{\text{PSPG}} \nabla q^h \right] \cdot \left[\partial_t \mathbf{u}^h + (\mathbf{u}^h - \mathbf{u}_{mesh}) \cdot \nabla \mathbf{u}^h - \nu \nabla^2 \mathbf{u}^h + \nabla p - \mathbf{f} \right]$$

où τ_{PSPG} est le coefficient de la méthode défini pour chaque élément [6].

Les écoulements diphasiques que nous cherchons à simuler sont dominés par l'advection, il est nécessaire de stabiliser le terme d'advection de nos équations. De nouveau, de nombreuses méthodes ont été proposées pour stabiliser l'advection. Nous utiliserons ici la plus courante : la méthode SUPG. La contribution au noeud i vaut :

$$\text{SUPG}_i = \sum_e \int_{\Omega^e} \left[\tau_{\text{SUPG}} \mathbf{u}^h \cdot \nabla \mathbf{v}^h \right] \cdot \left[\partial_t \mathbf{u}^h + (\mathbf{u}^h - \mathbf{u}_{mesh}) \cdot \nabla \mathbf{u}^h - \nu \nabla^2 \mathbf{u}^h + \nabla p - \mathbf{f} \right]$$

où τ_{SUPG} est le coefficient de la méthode choisis en fonction de la vitesse $\mathbf{u}$, du pas de temps Δt , de la viscosité ν et de la géométrie de chaque élément[6]. En considérant nos termes de stabilisation ainsi que le schéma d'intégration temporelle Euler implicite, la formulation faible de ce problème peut alors s'exprimer :

Trouver $(\mathbf{u}^h, p^h) \in \mathbf{S}_u^h \times \mathbf{S}_p^h$ tel que pour tout $(\mathbf{v}^h, q^h) \in \mathbf{V}_u^h \times \mathbf{V}_p^h$:

$$\begin{aligned} & \left(\int_{\Omega^{n+1}} \mathbf{u}_{n+1}^h \cdot \mathbf{v}_{n+1}^h d\mathbf{v} - \int_{\Omega^n} \mathbf{u}_n^h \cdot \mathbf{v}_n^h d\mathbf{v} \right) \frac{1}{\Delta t} + \int_{\Omega^{n+1}} \left((\mathbf{u}_{n+1}^h - \mathbf{u}_{mesh}) \cdot \nabla \mathbf{u}_{n+1}^h \right) \cdot \mathbf{v}_{n+1}^h d\mathbf{v} \\ & + \nu \int_{\Omega^{n+1}} \nabla \mathbf{u}_{n+1}^h : \nabla \mathbf{v}_{n+1}^h d\mathbf{v} - \int_{\Omega^{n+1}} p_{n+1}^h \left(\nabla \cdot \mathbf{v}_{n+1}^h \right) d\mathbf{v} \\ & = \int_{\Omega^{n+1}} \mathbf{f}_{n+1} \cdot \mathbf{v}_{n+1}^h d\mathbf{v} + \int_{\partial\Omega_N^{n+1}} \mathbf{t}_{n+1} \cdot \mathbf{v}_{n+1}^h ds + \text{SUPG}_{n+1} + \text{PSPG}_{n+1} \\ & \int_{\Omega^{n+1}} q_{n+1}^h \left(\nabla \cdot \mathbf{u}_{n+1}^h \right) d\mathbf{v} = 0 \end{aligned}$$

La discrétisation spatiale classique des éléments finis permet d'obtenir un système d'équation non-linéaire pour $\mathbf{u}^h$ et p^h ; ce système est résolu grâce à la méthode de Newton-Raphson.

3 Suivi d'interface

X-Mesh est une nouvelle approche qui combine les avantages des méthodes existantes, en laissant de côté leurs inconvénients. Cette section explique le fonctionnement de cette méthode appliquée aux écoulements diphasiques ; elle est divisée en 4 parties : la technique de déformation du maillage, l'advection de l'équation de levelset, le couplage avec le solveur Navier-Stokes et la simulation des effets de tension de surface.

3.1 X-Mesh

Dans cette méthode, un maillage se déforme avec une topologie fixe et des mouvements continus des nœuds pour correspondre en permanence aux interfaces d'intérêt, même dans le cas de changements topologiques des domaines de fluide. Pour atteindre cet objectif, la méthode autorise des éléments dégénérés, ce qui signifie qu'un triangle peut se déformer jusqu'à une arête ou même un point. Ceci permet au maillage de se déformer de manière continue dans le temps et assurer le relais du front. L'interface est transférée d'un nœud à un autre nœud situé à la même position permettant la propagation de l'interface à la façon d'une course relais.

La figure 1 illustre la méthode utilisée pour déplacer localement les nœuds d'un maillage afin de suivre un front mobile défini par une fonction de level set. La première étape consiste à marquer les nœuds actifs (b). Un nœud est considéré comme actif s'il se trouvait sur le front à la fin de l'itération précédente (a) ou si le signe de sa valeur de niveau a changé par rapport à l'itération précédente (b par rapport a). Ensuite, les potentiels points cibles de chaque nœud actif sont listés (c). Les points cibles sont l'emplacement des zéros du champ de level set interpolés le long d'une arête reliant le nœud actif à un nœud inactif. Les arêtes reliant deux nœuds actifs sont donc exclues. Ensuite, les nœuds actifs sont déplacés jusqu'à la position de leur cible la plus proche et composent les nouveaux nœuds du front (d). Les nœuds actifs sans cible sont retirés du front. Enfin, les positions de tous les nœuds, à l'exception des nœuds du front, sont relaxées vers leurs positions dans le maillage original [4].

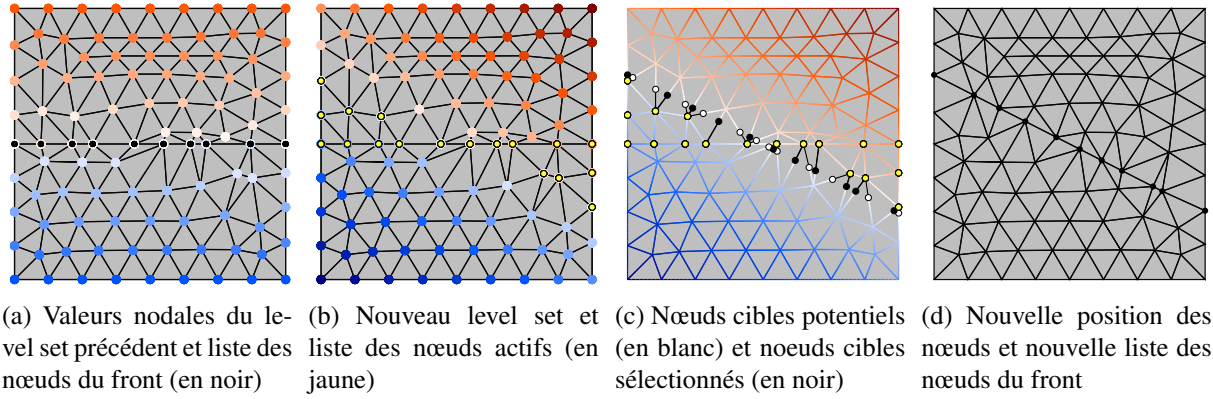


FIGURE 1 – Technique de déformation du maillage avec X-Mesh [4]

3.2 Advection du level set

Pour déplacer les nœuds du maillage, X-Mesh utilise un level set : une mesure de distance par rapport à l'interface. L'évolution du level set et donc de l'interface dans le temps est définie par l'équation d'advection de ϕ dans une formulation ALE :

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{\xi} + (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{mesh}) \cdot \nabla \phi = 0$$

où ξ est la variable spatiale du formalisme ALE, $\mathbf{u}$ est la vitesse d'advection et correspond au $\mathbf{u}$ des équations de Navier-Stokes et enfin $\mathbf{u}_{mesh}$ est la vitesse du maillage.

Pour résoudre cette équation, nous utilisons la méthode SUPG qui stabilise le terme d'advection et un schéma d'intégration temporelle de Crank-Nicholson. Soit $w^h \in \mathbf{V}_{\phi}^h$ la fonction test associée à ϕ . La formulation faible, où le formalisme ALE fait apparaître un second terme dans l'advection, peut alors s'écrire comme cela :

$$\left(\int_{\Omega^{n+1}} \phi_{n+1}^h \hat{w}_{n+1} d\mathbf{v} - \int_{\Omega^n} \phi_n^h \hat{w}_n d\mathbf{v} \right) \frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{2} \left(\int_{\Omega^n} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{mesh}) \cdot \nabla \phi_n^h \hat{w}_n d\mathbf{v} + \int_{\Omega^n} \phi_n^h \nabla \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{mesh}) \hat{w}_n \right) + \frac{1}{2} \left(\int_{\Omega^{n+1}} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{mesh}) \cdot \nabla \phi_{n+1}^h \hat{w}_{n+1} d\mathbf{v} + \int_{\Omega^{n+1}} \phi_{n+1}^h \nabla \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{mesh}) \hat{w}_{n+1} \right) = 0$$

avec $\hat{w} = w - \tau_{\text{SUPG}} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{mesh}}) \cdot \nabla w$ la fonction de test modifiée par la méthode SUPG.

La méthode des éléments finis permet ensuite de discrétiser spatialement le domaine et nous obtenons un système d'équation non-linéaire qui peut être résolu avec la méthode de Newton-Raphson.

3.3 Couplage X-Mesh et solveur Navier-Stokes

La première section décrit l'approche utilisée pour résoudre les équations de Navier-Stokes et ainsi obtenir le champ de vitesse sur le domaine. La section 3.2 montre comment sur base d'un champ de vitesse, il est possible d'advecter un level set et l'interface par la même occasion. La section 3.1 quant à elle illustre l'adaptation du maillage avec X-Mesh pour intercepter en permanence le front. Nous pouvons maintenant combiner ces éléments ensemble.

L'algorithme 1 décrit le couplage séquentiel entre le solveur fluide et le repositionnement de l'interface. On y retrouve une double boucle : la première correspond à la discrétisation temporelle, les équations de Navier-Stokes sont résolues via un solveur Newton-Raphson et on obtient $\mathbf{u}_n$. Cette vitesse va ensuite être utilisée dans la seconde boucle qui correspond à la résolution du système non-linéaire de l'advection du level set par la méthode de Newton-Raphson. Pour chaque solution intermédiaire ϕ_i , le maillage est déplacé pour prendre en compte le déplacement de l'interface. Lorsqu'on simule un pas de temps de n à $n+1$, nous avons donc deux maillages Ω^n et Ω^{n+1} qui sont conformes à l'interface aux deux temps n et $n+1$.

Le tableau 1 présente la vitesse d'onde de vagues gravitationnelles de faible amplitude simulées avec notre méthode et la vitesse théorique pour des longueurs d'onde et viscosités différentes. On observe bien une convergence des résultats lorsque la viscosité diminue en accord avec l'hypothèse théorique de faible oscillation.

TABLE 1 – Vitesse d'onde c pour une vague gravitationnelle entre deux fluides avec les densités $\rho = 1000$ et $\rho' = 100$, le rapport des viscosités $\frac{\nu}{\nu'} = 10$ et la gravité $g = 9.81$. La hauteur de la perturbation dépend de la longueur d'onde k choisie.

k	$\nu \cdot 10^{-3}$	c	c_{thorique}	erreur
2π	3.13	1.094	1.13	3.19%
6π	0.602	0.641	0.653	1.84%
2π	0.602	1.118	1.13	1.06%
2π	0.0602	1.13	1.13	0.022%

Algorithm 1 Couplage séquentiel

```

 $\mathbf{u}_0, p_0, \phi_0 \leftarrow$  initialisation
while  $n < n_{\text{max}}$  do
   $\mathbf{u}_n, p_n =$  Navier-Stokes( $\phi_{n-1}, \mathbf{u}_{n-1}, p_{n-1}, \mathbf{u}_{\text{mesh},n-1}$ )
  while  $d\phi_i > \text{tol}$  do
     $\phi_i =$  Advection( $\mathbf{u}_n, \mathbf{u}_{\text{mesh},i}, \phi_n$ )
     $x_i =$  X-Mesh( $\phi_n, \phi_i$ )
     $\mathbf{u}_{\text{mesh},i+1} = (x_i - x_{i-1}) \frac{1}{\Delta t}$ 
     $d\phi_i = \text{norm}(\phi_i - \phi_{i-1})$ 
  end while
   $\phi_n = \phi_i$ 
   $x_n = x_i$ 
   $\mathbf{u}_{\text{mesh},n} = (x_n - x_{n-1}) / \Delta t$ 
end while

```

3.4 Tension de surface

La tension de surface est simulée en prenant en compte les nœuds qui se trouvent sur l'interface. En utilisant un filtre de Savitzky-Golay[7] pour calculer la courbure aux nœuds, la tension de surface est moins sensible au bruit dans la position de l'interface. Cet algorithme correspond à l'approximation par la méthode des moindres carrés de la courbe avec un polynôme d'ordre bas. La courbure κ est ainsi obtenue et la tension de surface est calculée comme :

$$\mathbf{F}_{tension} = -\gamma\kappa\mathbf{n}$$

où γ est le coefficient de tension de surface, $\mathbf{F}_{tension}$ est la force due aux effets de tension de surface et $\mathbf{n}$ est la normale à la courbe définie par les nœuds.

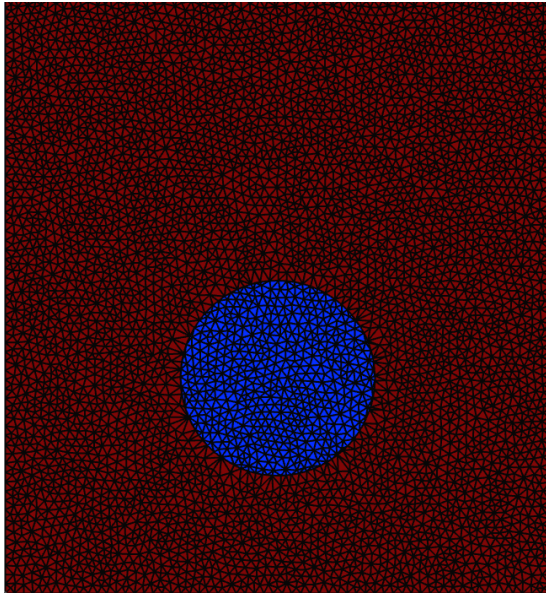
La figure 2 montre les effets de la tension de surface sur l'élévation d'une bulle. La forme finale prise par la bulle pour différentes valeurs des nombres d'Eötvös et de Morton correspond bien au diagramme expérimental de Grace [8].

4 Conclusion

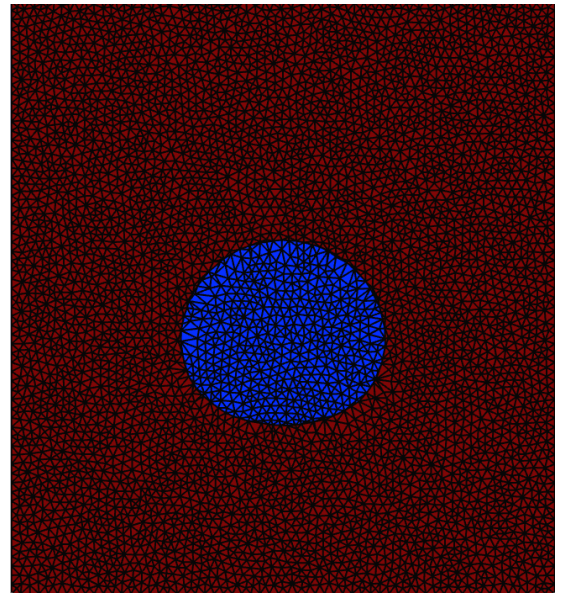
Le couplage d'X-Mesh et l'advection du level set à un solveur fluide permet d'obtenir des simulations d'écoulement diphasique en conservant une caractérisation de l'interface précise et ce pour des grands déplacements de cette dernière. Les résultats obtenus pour des simulations de vagues gravitationnelles et de bulles ont pu être validés avec les solutions analytiques ou bien des résultats expérimentaux. Bien qu'intéressante, cette approche et les résultats obtenus sont à un stade préliminaire. Pour s'assurer de la qualité de la méthode il faudra réaliser une étude approfondie de l'erreur ainsi que des tests sur la convergence spatiale et temporelle. La mesure de courbure de l'interface devra également faire l'objet d'études approfondies.

Références

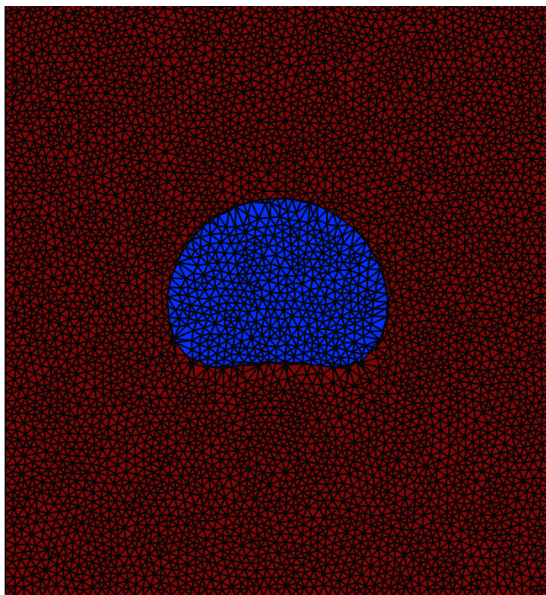
- [1] J. Donea, A. Huerta, J.-Ph. Ponthot, and A. Rodr'iguez-Ferran. *Arbitrary Lagrangian–Eulerian Methods*, chapter 14. Wiley, 2004.
- [2] A. Dervieux and F. Thomasset. *A finite element method for the simulation of a Rayleigh- Taylor instability*. In *Approximation Methods for Navier-Stokes Problems*, Lecture Notes in Mathematics 771, pages 145–158. Springer-Verlag, 1980.
- [3] C.W. Hirt and B.D. Nichols. *Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries*. *Journal of Computational Physics*, 39(1) :201–225, 1981.
- [4] N. Moes, J.-F. Remacle, J. Lambrechts, and B. Le. *The eXtreme Mesh deformation approach (X-MESH) for the Stefan phase-change model*. <http://arxiv.org/abs/2111.04179>, 2021
- [5] Hughes TJ, Franca LP, Balestra M *A new finite element formulation for computational fluid dynamics : V. circumventing the Babuzka–Brezzi condition : a stable Petrov–Galerkin formulation of the Stokes problem accommodating equal-order interpolations*. *Comput Methods Appl Mech Eng* 59(1) :85–99. 1986
- [6] Tezduyar T, Sathe S *Stabilization parameters in SUPG and PSPG formulations*. *J Comput Appl Mech* 4(1) :71–88, 2003
- [7] Abraham. Savitzky and M. J. E. Golay *Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures*. *Analytical Chemistry* 36 (8), 1627-1639, 1964
- [8] T. Wairegi and J.R. Grace *The behaviour of large drops in immiscible liquids*, *International Journal of Multi-phase Flow* 3 1, 67-77 1976



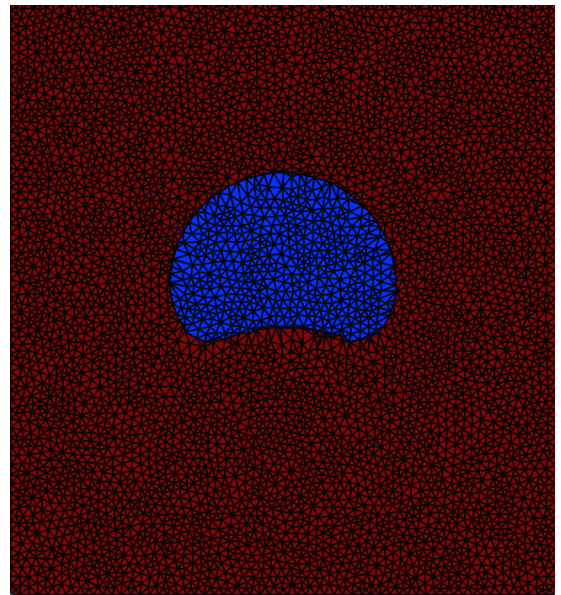
(a) $t = 0s$



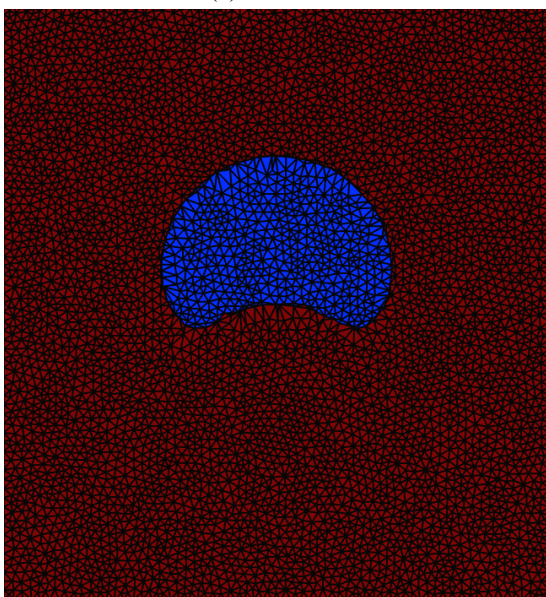
(b) $t = 0.57s$



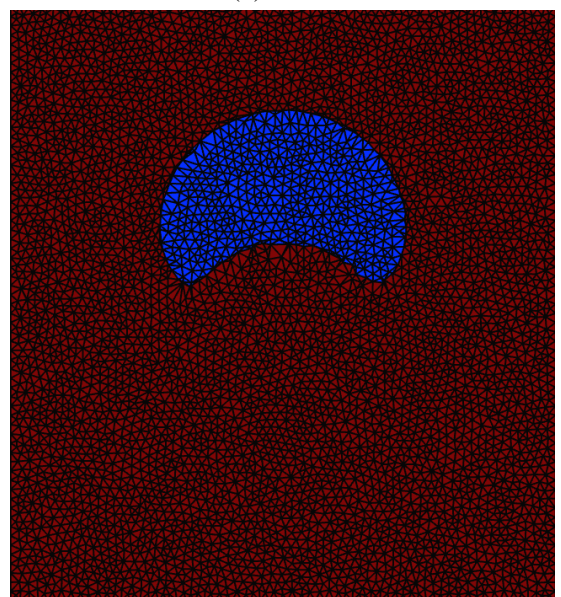
(c) $t = 0.85s$



(d) $t = 1s$



(e) $t = 1.12s$



(f) $t = 1.42s$

FIGURE 2 – Élévation d'une bulle pour $Eo = 100$ et $Mo = 1000$