

Contribution au calcul d'écoulements de fluides complexes

Huber Vincent

▶ **To cite this version:**

Huber Vincent. Contribution au calcul d'écoulements de fluides complexes. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, 2012. Français. NNT : . tel-00745794

HAL Id: tel-00745794

https://theses.hal.science/tel-00745794

Submitted on 26 Oct 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ACADÉMIE DE BORDEAUX

THÈSE DE DOCTORAT

présentée à

L'Université de Bordeaux 1
École doctorale de Mathématiques et Informatique

par

Vincent HUBER

pour obtenir le grade de

DOCTEUR
Spécialité : Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique

Contribution au calcul d'écoulements de fluides complexes.

Soutenue le 19 septembre 2012.

Après avis de :

M.	Didier BRESCH	Directeur de recherche - C.N.R.S.	Rapporteur
M.	Laurent CHUPIN	Professeur - Université Blaise Pascal	Rapporteur

Devant la commission d'examen formée de :

M.	Didier BRESCH	Directeur de recherche - C.N.R.S.	Rapporteur
M.	Laurent CHUPIN	Professeur - Université Blaise Pascal	Rapporteur
M.	Thierry COLIN	Professeur - Université de Bordeaux 1	Directeur
M.	Angelo IOLLO	Professeur - Université de Bordeaux 1	Président
M.	Olivier SAUT	Chargé de recherche - C.N.R.S.	Examinateur
M.	Julien DAMBRINE	Maître de conférences - Université de Poitiers	Examinateur

Equipe Projet INRIA MC2, INRIA - Centre Bordeaux Sud-Ouest
IMB, Institut de Mathématiques de Bordeaux UMR 5251

Mes remerciements s'adressent en premier lieu à Thierry Colin qui, malgré ses obligations prenantes, a su trouver les moyens *ad-hoc* pour m'aider à progresser. Ces trois années se sont passées sans d'autres difficultés que celles de la science, ceci lui est en grande partie du.

Didier Bresch et Laurent Chupin m'ont fait l'honneur d'accepter de rapporter ce manuscrit, je les en remercie vivement, pour la précision des remarques apportées, mais aussi pour la rapidité avec laquelle ils se sont acquittés de cette tâche.

Monsieur Gallice a été une grande source d'inspiration par ses travaux avec Manuel Latige, que je remercie pour les différentes discussions que nous avons pu avoir. C'est à partir des méthodes qu'ils ont développées que nous avons pu construire le schéma pour les écoulements bifluides.

Tout ce travail n'aurait pas vu le jour sans ceux accomplis en amont par Julien Dambrine qui a accepté de faire partie du jury. Je tiens à le remercier pour la patience avec laquelle il m'a mis le pied à l'étrier en fin de stage et début de thèse, ainsi que pour sa disponibilité et nos échanges, que ce soit à Bordeaux, Poitiers, en conférence ou simplement par mail.

C'est sous une forme d'admiration que je tiens à remercier Olivier Saut, et ce pour plusieurs raisons. La première est la qualité du code qu'il maintient et tient disponible à chacun. Cet environnement logiciel soumis aux aléas des différents intervenants et des modes informatiques est une réelle charge de travail, sa mise à disposition a été pour moi une précieuse aide au développement. La deuxième est sa déraisonnable disponibilité et son souci d'aider et d'aiguiller.

Angelo Iollo, en acceptant de faire partie du jury me fait un grand honneur. Sa disponibilité, son sérieux et son humour contagieux ont été de puissants auxiliaires ces trois années. Pour ces raisons, je lui adresse mes remerciements.

Je remercie aussi Charles-Henri Bruneau pour les discussions qu'il a bien voulu tenir avec moi, que ce soit pour les questions de pénalisation ou de simulation d'écoulement bifluide. Ces discussions m'ont permis de corriger des incompréhensions ou encore d'avancer un peu plus vite qu'espéré, merci.

Le bon déroulement d'un doctorat, c'est en plus du sérieux scientifique, un environnement plaisant. Ainsi, ces discussions informelles et possibilités de parler avec chacun a été pour moi une source de joie. C'est pourquoi je remercie toute l'équipe (Lisl, Mathieu, Michel, Clair, Iraj, Thomas, Yannick, Jessica, Julie, Michaël, Johana, Raphaël...), mais aussi Paul et Sandra, qui ont reçu mes plaintes régulièrement et m'ont aidé à faire le tri dans mes pensées.

Enfin, à celle qui a supporté les humeurs vagabondes d'un doctorant - la joie de trouver une solution qui s'avère le lendemain fausse - je ne peux dire que : « merci ».

Table des matières

Introduction **1**

I Introduction et positionnement du problème **5**

1 Modélisation à bas Reynolds **9**
1.1 Fluides visco-élastiques 11
1.1.1 Équations générales 11
1.1.2 Nombres sans dimension 14
1.1.3 Loi de comportement 16
1.1.3.1 Modélisation 16
1.1.3.2 Modèle d'Oldroyd-B 18
1.2 Écoulements bifluides 25
1.2.1 Effets de surfaces 25
1.2.1.1 Cas d'une interface sans propriété matérielle 27
1.2.1.2 Cas d'une interface douée de propriétés matérielles . 28
1.2.2 Le système de Stokes bifluide 30
1.2.2.1 Modèle à deux vitesses 30
1.2.2.2 Modèle à une vitesse 31
1.2.3 Description de l'interface 33
1.3 Les systèmes étudiés 33
1.3.1 Écoulement bifluide Newtonien 34
1.3.2 Écoulements monophasiques de fluides non Newtonien 34

2 Outils numériques **37**
2.1 Méthodes numériques pour le transport 39
2.1.1 Discrétisation temporelle 39
2.1.1.1 Schéma d'ordre 1 40
2.1.1.2 Schéma Runge Kutta d'ordre 3 40
2.1.2 Discrétisation spatiale 40

2.1.2.1 Schéma Upwind 41
2.1.2.2 Schéma Weno5 41
2.2 Repérage de l'interface 42
2.2.1 La fonction distance 43
2.2.2 Courbure, Normale 44
2.3 Redistanciation et extension de vitesse 44
2.3.1 Redistanciation 45
2.3.1.1 Algorithmes itératifs 45
2.3.1.2 Fast Marching 46
2.3.2 Extension de vitesse 46
2.4 Méthodes générales pour l'équation de Stokes 47
2.4.1 Lagrangien Augmenté 47
2.4.2 Pénalisation 48
2.5 Discrétisation du modèle d'Oldroyd-B 50
2.5.1 Discrétisation temporelle 50
2.5.2 Discrétisation spatiale : différences finies. 52

II Méthodes pour les écoulements bifluides 57

1 Questions de transport 61
1.1 Connexité 61
1.2 Tension de surface 63

2 Discrétisation du système de Stokes 67
2.1 Discrétisation de la tension de surface 68
2.2 Cas 2D 69
2.3 Cas Axisymétrique 70
2.4 Validation du solveur axisymétrique en monofluide 74

3 Méthode Volumes/Éléments finis mixtes 79
3.1 Discrétisation spatiale 80
3.1.1 Éléments finis : représentations des inconnues. 81
3.1.1.1 Vitesse 82
3.1.1.2 Pression 88
3.1.2 Volumes finis : calcul des flux 89
3.1.3 Structure de donnée 95
3.2 Tests et résultats numériques 96
3.2.1 Cas 2D sans interface 96

3.2.2 Cas 2D avec une interface : écoulement de Couette 96
3.2.3 Équation de Laplace 99
3.2.4 Cas axisymétrique sans interface 101
3.2.5 Cas axisymétrique avec une interface 103
3.3 Conclusion 104

4 Comparaison des deux méthodes 105
4.1 Cas 2D 105
4.2 Cas Axi monofluide 106
4.3 Discussion 106

5 Simulations d'évolution de gouttes 113
5.1 Évolution 2D bifluide 113
5.2 Évolution 3D-axisymétrique bifluide 114

III Schémas en temps pour les fluides visco-élastiques 127

1 Étude de stabilité - Dirichlet non homogènes 133

2 Stabilité du schéma 137
2.1 Cas continu 138
2.2 Cas totalement discret 146
2.3 Conclusion partielle 150

3 Résultats numériques 151
3.1 Validation : un écoulement de Poiseuille 152
3.2 Cas test de la contraction 4 :1 153
3.2.1 Influence du Weissenberg 153
3.2.2 Influence du ratio de viscosité dans la contraction 4 : 1 155
3.3 Conclusion 156

IV Architecture logicielle 167

1 *eLYSe* 171
1.1 Présentation générale 171
1.2 Exemple de programme 173
1.3 Investissement pour *eLYSe* 175
1.3.1 Correction 175

1.3.2 Ajout 175

Conclusion **181**

Bibliographie **184**

Introduction

Ce document est consacré à l'étude de schémas numériques en espace et en temps pour quelques écoulements de fluides, Newtonien ou non, en géométrie microfluidique.

Par définition, la microfluidique est l'étude des écoulements dans des capillaires de rayon allant de quelques centaines de microns au millimètre. A ces échelles, on peut alors utiliser les équations de Stokes pour étudier le comportement des fluides.

Nos études portants sur des aspects numériques, nous pouvons les généraliser à toutes classes d'écoulements pour les équations de Stokes, mais s'inscrivent dans une philosophie microfluidique du fait du laboratoire d'accueil.

Motivations

A la suite des travaux en microfluidique menés à Bordeaux, nous sommes amenés à nous pencher sur la simulation à ces échelles des écoulements d'un ou plusieurs fluides visqueux incompressibles et immiscibles, le cas échéant. L'intérêt que nous portons à ces échelles d'études provient de leur très grand champ d'application : écoulement de sang, de polymère, de sève... A ces échelles, l'approximation du Reynolds nul peut être envisagée, les effets inertiels étant alors négligeables devant les effets visqueux. Ainsi, l'équation de Stokes stationnaire sera utilisée pour la description des champs de vitesses et de pressions.

Écoulements bifluides

Dans [54], on trouve des simulations tridimensionnelles d'écoulements de gouttes en géométrie microfluidique. A ces échelles, deux effets physiques sont prédominants : ceux visqueux et ceux agissants sur l'interface. Sur l'interface, on trouve la tension de surface qui est une force surfacique dont l'action est de chercher à ramener une goutte vers la forme d'une sphère afin de minimiser l'énergie du système étudié. C'est cet effet que nous observons lorsque nous voyons un verre rempli au-delà de ses capacités.

On peut aussi trouver à l'interface l'effet des fluides visco-élastiques générant des discontinuité dans la contrainte, mais ayant globalement le même comportement que la tension de surface. Numériquement, la question des écoulements bifluides fait face à deux problématiques.

La première est la localisation de la surface de séparation des différents fluides. Cette surface est nommée interface. On peut soit utiliser des méthodes d'adaptations de maillages, mais en cas d'interface mobile, il est nécessaire de mailler à chaque itération le domaine [15], ce qui peut se révéler très coûteux en temps de calcul. Ainsi, utiliser un maillage cartésien, régulier ou non, permet de gagner en temps de calcul. Différentes méthodes numériques existent pour localiser cette interface sur maillage cartésien, comme les méthodes Volume-of-Fluid [37] ou Level-Set [50, 49, 33]. Ces méthodes ont été étudiées et présentées en détail dans [56]. En plus du repérage de l'interface, le calcul des flux dans un schéma volumes finis est très problématique. En effet, la connaissance de la position de l'interface ne suffit pas, car la viscosité peut y être discontinue, ou la vitesse non dérivable. Nous ne pouvons pas dès lors utiliser les inconnues de part et d'autre de l'interface, ceci menant à des calculs faux. Ainsi, on est amené à utiliser des artifices mathématiques permettant le calcul des flux.

La deuxième problématique est relative à la tension de surface. La principale difficulté est qu'il s'agit d'une force surfacique dans une simulation volumique. Habituellement [13, 54, 56, 8], la force surfacique est lissée afin de la rendre volumique, mais uniquement sur quelques mailles, bien qu'il existe des schémas numériques pour prendre en compte plus finement la tension de surface [24]. En effet, l'utilisation directe de l'expression surfacique rend facilement les calculs instables.

Le premier objectif de ce doctorat est l'étude, l'implémentation et la validation d'un schéma numérique d'ordre deux en espace pour la simulation des écoulements bifluides Newtoniens stationnaires à Reynolds nul avec tension de surface sur maillage colocalisé. Ceci sera traité à la deuxième partie du manuscrit.

Fluides visco-élastiques

Dans [13], l'auteur a focalisé son attention sur des écoulements très particuliers : les écoulements de micelles géantes. Les micelles géantes sont des polymères en suspension dilués dans un solvant, avec des propriétés mécaniques particulières. Outre l'aspect mémoire de ces dilutions - l'état de contrainte dépend du cisaillement et de l'historique de l'écoulement - la géométrie des polymères les uns par rapport aux autres peut grandement varier en fonction de l'écoulement. Ainsi,

au repos, ces polymères ont tendance à former des amas semblables à des pelotes de laine et proposent alors un comportement isotrope. Lors d'un cisaillement important, les molécules tendent à se réorganiser spatialement afin de s'aligner - comme des spaghettis dans l'emballage - afin de favoriser une direction à l'écoulement. Des effets physiques comme des bandes de cisaillement sont alors observés. Mathématiquement, on peut utiliser le modèle de Johnson-Segalman afin de simuler ces types d'écoulement. Le modèle de Johnson-Segalman [27] repose sur l'idée que le seul fluide étudié est la combinaison d'un fluide visqueux Newtonien avec un autre disposant d'une loi rhéologique donnée. Chacun de ces fluides présente une viscosité constante qui lui est propre. L'effet recherché lors de la simulation - l'apparition de bandes de cisaillement - correspond à la situation où le rapport des viscosités est petit (le seuil est variable, mais la limite est généralement prise à 1/8 [43]). En deçà de ce seuil, la contrainte n'est plus une fonction monotone du taux de cisaillement et permet alors l'apparition des effets recherchés. Il a été démontré dans [13] qu'une condition de stabilité sur le pas de temps dépendante de ce rapport de viscosité existe, et que la simulation numérique à de très petits rapports de viscosités devient impossible car trop coûteuse en temps de calcul.

On peut sans difficultés montrer que le modèle d'Oldroyd-B est une spécification du modèle de Johnson-Segalman. Bien que la contrainte reste une fonction monotone du cisaillement pour ce modèle [13, 42], on peut observer la même condition de stabilité pour ce modèle.

Le second objectif de ce manuscrit est de présenter différentes analyses de stabilité applicables au modèle d'Oldroyd-B pour différents schémas de discrétisation en temps et de proposer un nouveau schéma s'affranchissant de la condition en fonction du rapport des viscosités. Nous aborderons ces questions en troisième partie.

Plan

Ce manuscrit est divisé en quatre parties.

La première est dédiée à la présentation de l'environnement des études conduites. Ainsi, au premier chapitre sera abordée la question de la construction des modèles mathématiques alors qu'au second, on présentera les outils numériques préexistants à notre étude.

La deuxième partie du manuscrit s'attache à l'étude numérique des écoulements bifluides. Après un rappel des difficultés mathématiques et numériques de la simulation de tels écoulements au premier chapitre, nous présenterons l'implémentation

sur maillage MAC en géométrie 3D-axisymétrique ainsi que des tests de convergence en monofluide d'un tel solveur. Nous aborderons alors le premier objectif de la thèse au troisième chapitre par l'étude d'un schéma volumes finis/éléments finis mixte pour les écoulements bifluides, en 2D et 3D-axisymétrique et présenterons des tests de convergence pour ces deux configurations, en monofluide et bifluide. Au quatrième chapitre nous conduirons une étude de comparaison en axisymétrique des deux méthodes implémentées puis nous conclurons cette partie par la présentation du comportement de gouttes en géométrie microfluidique.

La troisième partie du manuscrit s'attache aux fluides complexes. Au premier chapitre, nous présenterons une étude de stabilité avec des conditions limites de type Dirichlet non homogènes puis une autre analyse sera menée au chapitre deux pour des conditions limites périodiques mais permettant la prise en compte de la discrétisation spatiale, ici sur maillage MAC. Enfin, nous présenterons des résultats numériques au troisième chapitre.

Par sa nature très technique, cette thèse nous mène à présenter l'environnement informatique utilisé et construit, c'est ce qui sera fait par la présentation de la librairie *eLYSe* en quatrième partie.

Première partie

Introduction et positionnement du problème

Introduction

Cette partie est consacrée à la présentation de modèles mathématiques pour la simulation de fluides, Newtoniens ou non ainsi qu'à la présentation d'outils numériques couramment utilisés pour étudier et résoudre ces modèles.

Au premier chapitre, après avoir présenté les équations régissants le comportement des fluides visco-élastiques, nous présenterons comment nous pouvons représenter un écoulement bifluide. Enfin, une synthèse sera proposée pour décrire le modèle général régissant l'écoulement de deux fluides visco-élastiques.

Au second chapitre, nous présenterons différents outils numériques utilisés pour résoudre le système d'équations ci-avant obtenu.

Chapitre 1

Modélisation mathématique d'écoulements à bas nombre de Reynolds

Sommaire

1.1 Fluides visco-élastiques 11
1.1.1 Équations générales 11
1.1.2 Nombres sans dimension 15
1.1.3 Loi de comportement 17
1.2 Écoulements bifluides 26
1.2.1 Effets de surfaces 27
1.2.2 Le système de Stokes bifluide 31
1.2.3 Description de l'interface 34
1.3 Les systèmes étudiés 34
1.3.1 Écoulement bifluide Newtonien 35
1.3.2 Écoulements monophasiques de fluides non Newtonien . . 35

Dans la suite des travaux qui ont eu lieu en mécanique à Bordeaux autour de la microfluidique [13, 54], nous allons étudier différentes difficultés relatives à la simulation de fluides non Newtonien ou encore d'écoulements bifluides à ces échelles.

On peut définir la microfluidique comme étant *une branche de la fluidique qui étudie et tente d'exploiter les mécanismes de l'écoulement des fluides, et de fabriquer des dispositifs qui, pour réaliser diverses fonctions, utilisent les liquides ou les gaz en quantité extrêmement petite, à travers des canaux aux dimensions micrométriques ou nanométriques* [54]. En d'autre terme, il s'agit de l'étude et de l'utilisation des données de la mécanique des fluides aux échelles sub-millimétriques.

L'intérêt pour cette science part - entre autre - d'un constat simple : la vitesse d'une réaction est fonction de la surface d'échange entre deux produits. Dit autrement, pour une quantité de réactifs donnée, il convient de chercher - afin d'accélérer une réaction - à maximiser le rapport "surface/volume". C'est dans cet esprit que sont étudiés aujourd'hui ce qu'il convient de nommer des *Labs on chip*, véritable laboratoire d'analyse dont la dimension est de l'ordre d'une pièce de monnaie. Par l'utilisation des canaux nanométriques, on cherche avec ces outils à minimiser le volume de réactif utilisé.

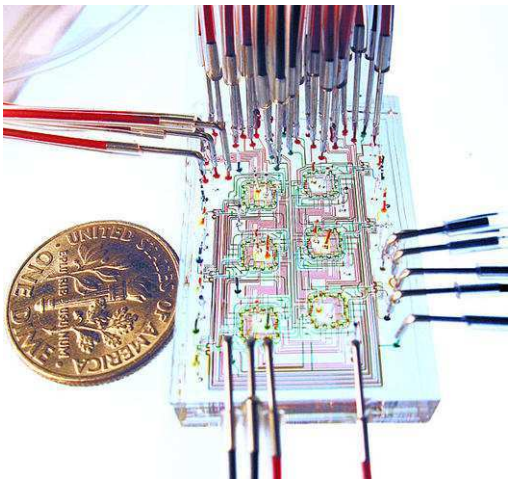


FIG. 1.1: Un laboratoire sur puce, source : Université de Standford

Un autre exemple de l'intérêt de ces échelles d'étude sont nos poumons : ces derniers sont composés d'alvéoles de petites tailles maximisant ainsi la surface d'échange entre l'air et notre sang. Un alvéole peut-être vu comme une bulle de rayon $0.1mm$, ce qui, en comptant 300 millions d'alvéoles par poumons représente une surface d'échange de $75m^2$. Si nos poumons étaient remplacés par un alvéole unique, ce dernier devrait avoir la forme d'une sphère de $2.44m$ de rayon, contenant alors $61.5m^3$ d'air, au lieu de $0.0025m^3$, ce qui représente un ratio de 4 pour 100 000.

Ces échelles d'études sont légions dans la nature, comme par exemple dans les végétaux et sont caractérisées par des écoulements à bas Reynolds.

Dans cette thèse, on considère deux types d'écoulements en géométrie microfluidique :

- les écoulements visco-élastiques,
- les écoulements bifluides.

Le but de ce chapitre est d'établir les systèmes d'équations régissant ces deux situations.

1.1 Fluides visco-élastiques

Nous nous attachons dans cette section à établir les équations générales et les lois de comportement relatives à la mécanique des fluides. Nous présenterons aussi certaines grandeurs caractéristiques permettant de classifier les écoulements par types.

1.1.1 Équations générales

Nous allons nous baser sur les équations de la mécanique des milieux continus puis les spécifier à notre environnement.

Conservation de la masse La loi de conservation de la masse s'écrit :

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot V = 0, \tag{1.1}$$

où ρ est la densité du milieu considéré, et $V \in \mathbb{R}^n, n = 2, 3$ le vecteur vitesse où ses composantes sont notées v_i, $i \in [1, n]$, avec

$$\frac{D}{Dt} = \partial_t + (V \cdot \nabla), \tag{1.2}$$

la dérivée particulaire.

Si la densité est constante (cas incompressible), on a

$$\nabla \cdot V = 0. \tag{1.3}$$

Cette condition sur la divergence de la vitesse est appelée la condition d'incompressibilité.

Tenseur des contraintes Nous définissons ici le tenseur des contraintes, objet décrivant les informations sur les efforts internes en un point. Par construction, dans le cas général, ce tenseur contient des termes élastiques et dissipatifs. On prend l'habitude, pour les fluides viscoélastiques, de séparer le terme de pression hydrostatique $-PI$ - avec I la matrice identité - des autres effets. On note ainsi :

$$\sigma = -PI + \sigma^{\nu} + \sigma^{E}, \tag{1.4}$$

où σ^{ν} est le tenseur des contraintes visqueuses et σ^{E} un tenseur contenant des effets élastiques, que nous spécifierons par la suite.

Dans le cas d'un liquide isotrope, la loi constitutive du tenseur des contraintes visqueuses s'écrit, avec η_s la viscosité dynamique et ξ la viscosité de compression, exprimées en Pascal par seconde ($Pa.s$), du liquide, en utilisant la convention de sommation d'Einstein :

$$\sigma_{ij}^{\nu} = 2\eta_s \left(D_{ij}\left[V\right] - (1/3)\,\delta_{ij} D_{kk}\left[V\right]\right) + \xi \delta_{ij} D_{kk}\left[V\right], \tag{1.5}$$

où

$$D_{ij}\left[V\right] = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right). \tag{1.6}$$

Couplée à la condition d'incompressibilité (1.3), la loi constitutive pour le tenseur visqueux conduit à :

$$\sigma^{\nu} = 2\eta_s D\left[V\right], \tag{1.7}$$

et ainsi, la viscosité de compression n'intervient pas dans le modèle.

Viscosité Le paramètre η_s, appelé viscosité dynamique est caractéristique du fluide, mesurable en appliquant, à un fluide contenu entre deux plaques de surface S chacune et d'espacement z un cisaillement constant $\partial_z v$ et en mesurant la force ainsi générée. La viscosité dynamique est alors obtenue par :

$$F = \eta_s S \partial_z v.$$

A partir de la viscosité dynamique, on peut définir la viscosité cinématique prenant en compte la masse volumique de l'espèce considérée, soit :

$$\nu = \frac{\eta_s}{\rho}.$$

Pour donner une idée du monde physique qui nous entoure, on donne des valeurs de viscosités dynamiques de certains fluides Fig: 1.2.

Corps	Température ($°C$)	Viscosité ($Pa.s$)
Eau	20	$1.002\ 10^{-3}$
Jus de raisin	20	2 à $5\ 10^{-3}$
Pétrole	20	$0.65\ 10^{-3}$
Miel	20	10
Bitume	20	10^{8}

FIG. 1.2: Quelques viscosités - source : Wikipedia

Ainsi, on observe que le bitume peut être modélisé comme un fluide - panta

rei [1] - mais une simulation de l'écoulement de bitume et d'eau ferait intervenir un ratio de viscosité de l'ordre de 10^{11}. On comprend aisément que numériquement, la simulation d'un tel écoulement posera des difficultés.

Visco-élasticité Nous cherchons à présent à décrire les phénomènes visco-élastiques, soit à donner une loi constitutive à σ^E. Nous pouvons modéliser de tels effets en considérant un assemblage en série : ressort amortisseur, tel que décrit en Fig: 1.3. Ainsi, nous pouvons considérer que la déformation totale est la somme des

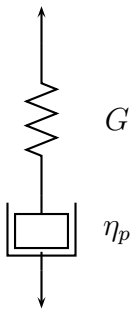


FIG. 1.3: Modèle de Maxwell à un seul temps de relaxation

déformations de ces deux éléments, et donc :

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma_E} + \dot{\gamma_\nu}, \tag{1.8}$$

où γ_E et γ_ν sont respectivement les déformations produites par le ressort et l'amortisseur. On pose ainsi, pour le ressort, que sa vitesse de déformation, considérant qu'il décrit un solide hookéen idéal est :

$$\sigma^E = G\gamma_E, \tag{1.9}$$

avec G le module de cisaillement élastique.

Pour l'amortisseur, nous aurons grâce à la loi de Newton :

$$\sigma^E = \eta_p \dot{\gamma_\nu}. \tag{1.10}$$

On dispose ainsi du modèle de Maxwell à un temps de relaxation que relie la

[1] Tout coule. En référence à Héraclite d'Éphèse.

contrainte à la déformation totale :

$$\sigma^E + \tau\dot{\sigma^E} = \eta_p\dot{\gamma}, \tag{1.11}$$

avec $\eta_p = G\tau$, où τ est le temps de relaxation de Maxwell. Ce modèle a été introduit par J.C. Maxwell en 1867 et contient l'essentiel de la viscoélasticité.

Imaginons qu'un élément matériel soit soumis à une rotation solide d'angle θ suivant l'axe z dans le repère orthonormé (x, y, z). Alors, si la rotation s'effectue en un temps très court devant le temps de relaxation, la réponse doit être élastique, et ainsi, on trouve :

$$\sigma^E = G\gamma,$$

ce qui donne pour un angle θ :

$$\sigma^E = G\begin{pmatrix} 2(\cos\theta - 1) & 0 & 0 \\ 0 & 2(\cos\theta - 1) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{1.12}$$

ce qui est inacceptable car on devrait trouver $\sigma^E = 0$ pour toute rotation solide. Ainsi, ce modèle souffre de lacunes et demande à généraliser la notion de tenseur de déformation, ce que nous détaillerons par la suite.

Conservation de la quantité de mouvement Une autre relation fondamentale de la mécanique des milieux continus est celle reliant le tenseur des déformations à la vitesse du milieu et aux forces extérieures. Il s'agit de la loi de conservation de la quantité de mouvement, laquelle s'écrit :

$$\rho\frac{DV}{Dt} = \nabla \cdot \sigma + \rho f, \tag{1.13}$$

où f désigne les forces volumiques - comme par exemple la gravité, V la vitesse Eulérienne, ρ la densité du fluide, et σ le tenseur des contraintes tel que défini en (1.4). C'est la spécification du tenseur σ par sa loi constitutive qui précisera le domaine d'étude : mécanique des solides, des fluides...

1.1.2 Nombres sans dimension

On peut ré-exprimer la conservation de la quantité de mouvement (1.13) à l'aide d'un adimensionnement, où on nomme η_0 la viscosité totale (la somme des viscosité

solvant et polymère), en posant :

$$\begin{aligned} V &= V_0 V^*, \\ \sigma &= \sigma_0 \sigma^* = \eta_0 \frac{V_0}{L} \sigma^*, \\ t &= \frac{L}{V_0} t^*, \end{aligned} \tag{1.14}$$

où L est une distance caractéristique (typiquement, pour un écoulement dans un tube, le rayon en entrée) et V_0 une vitesse caractéristique (la vitesse maximum de l'écoulement, la vitesse moyenne, ou encore le ratio de la distance caractéristique et du temps de relaxation...). Ces quantités conduisent à écrire, en omettant les astérisques pour plus de lisibilité :

$$\rho \left(\frac{V_0^2}{L} \frac{\partial V}{\partial t} + \frac{V_0^2}{L} \left(V \cdot \nabla \right) V \right) = \frac{\sigma_0}{L} \nabla \cdot \sigma + \rho f, \tag{1.15}$$

qu'on peut ré-écrire :

$$\rho \frac{V_0 L}{\eta_0} \frac{DV}{Dt} = \nabla \cdot \sigma + \frac{L^2}{\eta_0 V_0} \rho f. \tag{1.16}$$

On peut alors écrire (1.16) de la sorte :

$$\begin{aligned} \mathrm{Re} \frac{DV}{Dt} &= \nabla \cdot \sigma + \mathrm{ReFr}^{-2} f, \\ \nabla \cdot V &= 0, \end{aligned} \tag{1.17}$$

où on voit apparaître plusieurs nombres sans dimension qui peuvent nous servir à caractériser nos écoulements.

Froude Le nombre de Froude, qui quantifie le ratio des forces d'inertie et celles de volumes s'écrit ainsi :

$$\mathrm{Fr} = \frac{V_0}{\sqrt{L}}.$$

Aux échelles considérées, là où la vitesse est de l'ordre du centimètre par seconde et la taille caractéristique de l'ordre de $10^{-6} m$, le nombre de Froude est alors de l'ordre de 1.

Reynolds Le nombre de Reynolds quantifie l'importance des effets de diffusion par rapport à ceux de convection et est défini ainsi :

$$\mathrm{Re} = \frac{\rho V_0 L}{\eta_0}. \tag{1.18}$$

Si le domaine d'étude est un capillaire, pour les caractéristiques de l'eau (soit une viscosité dynamique de l'ordre de $10^{-3}P.s^{-1}$, aucune viscosité "solvant" et une densité de $10^3 Kg.m^{-3}$), alors le nombre de Reynolds est de l'ordre de 10^{-3}.

Ainsi, en simplifiant l'expression (1.17) par les termes devenus négligeables, considérant que Re $<< 1$, on obtient alors les équations de Stokes :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \sigma &= 0, \\ \nabla \cdot V &= 0. \end{aligned} \tag{1.19}$$

Ce qu'on écrit communément - sous forme dimensionnée, lorsque la viscosité est constante :

$$\begin{aligned} -\eta_s \Delta V + \nabla P &= \nabla \cdot \sigma^E, \\ \nabla \cdot V &= 0, \end{aligned} \tag{1.20}$$

système auquel nous rajouterons des conditions limites de type Dirichlet non homogènes pour la vitesse ainsi qu'une loi d'état pour σ^E afin de fermer le système.

1.1.3 Loi de comportement

Ce qui suit est dédié à la modélisation d'un fluide non Newtonien.

Nous avons donné une loi de comportement pour σ^E et montré que cette loi était insuffisante. Nous cherchons maintenant à modifier cette loi de comportement afin de la rendre exploitable. Ainsi, à partir de l'équation de Maxwell, nous allons construire le modèle d'Oldroyd-B.

1.1.3.1 Modélisation

On rappelle la définition d'un fluide Newtonien :

- dans un écoulement de cisaillement simple, les seules contraintes créées par l'écoulement sont des contraintes de cisaillement,
- la viscosité est indépendante de la vitesse de cisaillement,
- la viscosité est indépendante du temps et les contraintes s'annulent immédiatement lorsque la vitesse s'annule.

Ceci peut se résumer donc à : les contraintes de cisaillements sont proportionnelles au gradient de vitesse. La violation d'une de ces règles indique un effet non Newtonien.

Ainsi, un fluide non Newtonien est caractérisé par la possible non proportionnalité entre le taux de cisaillement et les contraintes visqueuses développées par ce dernier. Un exemple de fluide rhéofluidifiant est les micelles géantes dont la

réorganisation favorise le glissement, mais d'autres comportements peuvent être observés comme les fluides rhéo-épaississants, les fluides à seuils... Les fluides que nous

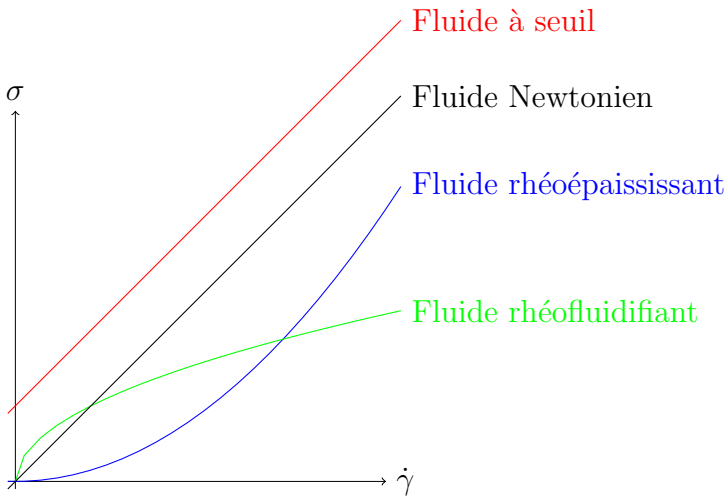


FIG. 1.4: Contrainte en fonction du cisaillement pour différents type de fluides

cherchons à simuler, bien que non Newtonien, ont une viscosité indépendante du cisaillement. C'est la propriété "mémoire" qui permet de classifier ces fluides comme étant non Newtonien. Le phénomène observé est l'apparition d'une forte première contrainte normale et d'une seconde contrainte normale quasi nulle [42].

Nous allons maintenant donner une construction du modèle de Maxwell. Après avoir montré comment on obtient les tenseurs de Green et de Finger, nous présenterons comment le modèle de Maxwell (1.11) peut être réécrit avec ce dernier tenseur pour arriver au modèle d'Oldroyd-B.

Rappel de tenseurs Imaginons un vecteur $d\vec{r}$ de $\Omega \in \mathbb{R}^3$ au temps t. Au temps $t+\delta t$, $\delta t > 0$, sous l'effet d'un déplacement, le vecteur $d\vec{r}$ devient $d\vec{r'}$. On peut noter donc :

$$d\vec{r'} = F(t+\delta t, t)d\vec{r}. \tag{1.21}$$

Par construction, le tenseur F contient les effets de rotation et déformation. D'après le théorème de décomposition polaire, on peut écrire que $F = VR$, où R est une matrice de rotation (telle que $R^{-1} = R^t$ et $det(R) = 1$) et V une matrice symétrique définie positive ($\forall \vec{a}, \vec{a} \cdot V \cdot \vec{a} \geq 0$)

Nous ne pouvons pas utiliser directement l'application F pour décrire le mouvement du vecteur $d\vec{r}$ car celle-ci fait intervenir une matrice de rotation, ce qui ne peut pas convenir au respect du principe d'objectivité. Ainsi, on va définir le tenseur de

Green comme étant égal à :

$$B = FF^t = V^2. \tag{1.22}$$

Du tenseur de Green, on défini le tenseur de Finger d'expression :

$$H = \frac{1}{2}(B - I) = \frac{1}{2}\left(V^2 - I\right). \tag{1.23}$$

On peut observer que ce tenseur dégénère vers le tenseur des déformations en cas de petites déformations.

L'intérêt de la construction de tels tenseurs est expliqué ci-après.

1.1.3.2 Modèle d'Oldroyd-B

Ces rappels effectués, nous pouvons nous focaliser sur la construction du modèle d'Oldroyd-B, encore appelé *modèle de Jeffrey convecté supérieur*.

De Maxwell à Oldroyd-B On rappelle le modèle de Maxwell à un temps de relaxation décrivant la contrainte non Newtonienne en fonction du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$, établi en (1.11), où on note maintenant σ^E, le tenseur générique élastique, σ_p afin de le spécifier au modèle étudié.

$$\sigma_p + \tau\dot{\sigma}_p = \eta_p\dot{\gamma}, \tag{1.24}$$

où τ est le temps de relaxation de Maxwell :

$$\tau = \frac{\eta_p}{G}. \tag{1.25}$$

Dans le cas ou le système est soumis à une contrainte de cisaillement soudaine à $t = 0$, avec un taux de cisaillement constant $\dot{\gamma}$, la solution du modèle de Maxwell est :

$$\sigma_p(t) = \eta_p\dot{\gamma}\left[1 - exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right]. \tag{1.26}$$

La forme générale de la solution du problème de Mawell est donnée par [42] :

$$\begin{aligned}\sigma_p(t) &= \frac{\eta_p}{\tau}\int_{-\infty}^{t} exp\left[-(t-t')/\tau\right]\dot{\gamma}(t')\,dt', \\ &= G\int_{-\infty}^{t}\frac{2}{\tau}exp\left[-(t-t')/\tau\right]\epsilon(t,t')\,dt'.\end{aligned} \tag{1.27}$$

On voit alors apparaitre le tenseur des déformations :

$$\epsilon\left(t,t'\right)=\frac{1}{2}\int_{t}^{t'}\dot{\gamma}\left(t''\right)dt''. \tag{1.28}$$

Ainsi, (1.29) n'est donc valable que pour les petites déformations.

Il est alors tentant de remplacer dans l'expression intégrale (1.27) du modèle de Maxwell le tenseur de Green par celui de Finger, donnant les mêmes résultats pour les petites déformations, mais respectant (voir : 1.1.1) le principe d'objectivité [2] et supportant les grandes déformations.

Ceci donne, sous forme intégrale :

$$\sigma_p\left(t\right)=G\int_{-\infty}^{t}\frac{2}{\tau}exp\left[-\left(t-t'\right)/\tau\right]H(t,t')dt'. \tag{1.29}$$

La forme différentielle de cette équation est :

$$\tau\dot{\sigma}_p=-\sigma_p+\tau\left(\nabla V\sigma+\sigma\nabla V^t\right)+2\eta_p D\left[V\right], \tag{1.30}$$

avec $\dot{}$ décrivant la dérivée particulaire. En utilisant la notation de dérivée convectée supérieure :

$$\overset{\triangledown}{\sigma_p}=\dot{\sigma}_p-\nabla V\sigma_p-\sigma_p\nabla V^t, \tag{1.31}$$

on note :

$$\tau\overset{\triangledown}{\sigma_p}+\sigma_p=2\eta_p D\left[V\right]. \tag{1.32}$$

On peut généraliser de la même façon l'équation de Maxwell (1.29) en utilisant le tenseur de Cauchy menant à la dérivée convectée inférieure :

$$\overset{\triangle}{\sigma_p}=\dot{\sigma}_p-\nabla V^t\sigma_p-\sigma_p\nabla V, \tag{1.33}$$

afin d'obtenir le modèle d'Oldroyd-A, mais ce dernier est connu pour produire des prédictions rhéologiques insatisfaisantes [42].

On notera que ces équations sont non linéaires alors que la loi de comportement local du matériau l'est, localement. Elles ne sont donc valables qu'en régime linéaire, c'est-à-dire lorsque $\dot{\gamma}<1/\tau$.

Comme précisé ci-avant, considérons le mélange d'un solvant, Newtonien par

[2] Le principe d'objectivité énonce qu'une équation constitutive ne peut dépendre du référentiel choisi.

essence, et d'un polymère fondu. Afin de modéliser ceci, nous considérons un assemblage parallèle constitué d'une part d'un assemblage en série d'un ressort et d'un piston et d'autre part d'un piston 1.5. La contrainte totale, soit le tenseur des

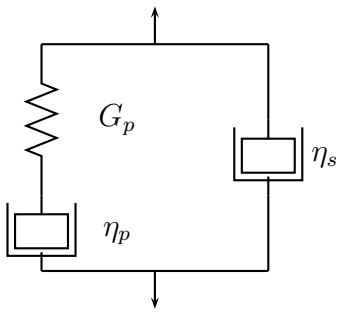


FIG. 1.5: Cellule de Jeffrey.

contraintes visqueuses σ, est donc la somme de la contrainte produite par le solvant, notée σ_s et de celle produite par le polymère, notée σ_p (notée σ^E en terme générique dans (1.4)). On a donc :

$$\sigma = \sigma_p + \sigma_s. \tag{1.34}$$

On considère que le solvant est un fluide Newtonien de viscosité η_s et que l'assemblage "masse-ressort" génère un tenseur décrivant les effets élastiques noté σ_p.

Ainsi, en prenant la divergence du tenseur total au regard de l'équation (1.19), on obtient :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \sigma &= \nabla \cdot \sigma_p + \nabla \cdot \sigma_s, \\ &= \nabla \cdot \sigma_p + \nabla \cdot \left(2\eta_s D\left[V\right] - PI\right), \\ &= \nabla \cdot \sigma_p + \nabla \cdot \left(2\eta_s D\left[V\right]\right) - \nabla P, \\ &= 0. \end{aligned} \tag{1.35}$$

Le modèle d'Oldroyd-B peut donc s'écrire comme suit, en ne considérant qu'un seul fluide non Newtonien et en omettant le rôle joué par les forces extérieures :

$$\begin{aligned} -\eta_s \Delta V + \nabla P &= \nabla \cdot \sigma_p, \\ \nabla \cdot V &= 0, \\ \tau \overset{\triangledown}{\sigma_p} + \sigma_p &= 2\eta_p D\left[V\right]. \end{aligned} \tag{1.36}$$

En posant :

$$\begin{aligned} t &= \frac{L}{V_0} t^* \\ V &= V^* V_0, \\ \sigma_p &= \eta_p \frac{V_0}{L} \sigma_p^*, \\ x &= L x^*, \\ P &= \frac{\eta_p V_0}{L} P^*, \end{aligned} \tag{1.37}$$

où V_0 et L sont les mêmes grandeurs caractéristiques que pour (1.14). Il convient de souligner qu'ici, l'adimensionnement est effectué pour σ_p uniquement par rapport à la viscosité η_p, et non la viscosité totale. On trouve alors (en omettant les astérisques) :

$$\begin{aligned} -\alpha \Delta V + \nabla P &= \nabla \cdot \sigma_p, \\ \nabla \cdot V &= 0, \\ \mathrm{We} \overset{\triangledown}{\sigma_p} + \sigma_p &= 2D\left[V\right], \end{aligned} \tag{1.38}$$

où $\alpha = \frac{\eta_s}{\eta_p}$ est le ratio des viscosités du solvant et du polymère, et où We est le nombre de Weissenberg, défini par :

$$\mathrm{We} = \frac{\tau V_0}{L}. \tag{1.39}$$

Ce nombre est parfois nommé *Nombre de Deborah* en référence à la prophétesse de l'ancien testament. On trouve en effet au livre des Juges, chapitre 5, verset 5 : *montes fluxerunt a facie Domini*, soit : les montagnes coulèrent devant le Seigneur. Il nous semble que le nombre de Deborah est plus à comprendre comme le temps caractéristique du matériau devant celui de la durée de l'expérience, là où le nombre de Weissenberg étudie le ratio du temps caractéristique du matériaux devant celui de la configuration de l'expérience.

On note que le nombre de Weissenberg est assimilable au produit du temps de relaxation par le cisaillement. Il se trouve que le modèle n'est valable que lorsque le cisaillement est petit devant l'inverse du temps de relaxation, et ainsi, ce modèle n'est valable physiquement qu'à petit nombre de Weissenberg.

Pour trouver le système (1.38), on a adimensionné σ_p en posant :

$$\sigma_p = \eta_p \frac{V_0}{L} \tilde{\sigma}_p.$$

Si on pose comme pour (1.14)

$$\sigma_p = (\eta_s + \eta_p) \frac{V_0}{L} \tilde{\sigma}_p,$$

alors on fait face à l'adimensionnement suivant :

$$\begin{aligned} -\frac{\eta_s}{\eta_s + \eta_p} \Delta V + \nabla P &= \nabla \cdot \sigma_p, \\ \nabla \cdot V &= 0, \\ \mathrm{We} \overset{\triangledown}{\sigma_p} + \sigma_p &= 2 \left(1 - \frac{\eta_s}{\eta_s + \eta_p} \right) D\left[V\right], \end{aligned} \tag{1.40}$$

On utilisera la version (1.38) pour l'analyse de stabilité, bien que la version (1.40) permette de comprendre le rôle joué par les viscosités dans chaque loi constitutive.

D'autres formulations pour le modèle d'Oldroyd-B existent. On souligne la suivante qui a été utilisée dans [26] : en partant de l'équation (1.34), on peut écrire :

$$\sigma_p = \sigma - 2\eta_s D\left[V\right], \tag{1.41}$$

ce qui conduit à écrire la loi constitutive ainsi :

$$\tau \overset{\triangledown}{\sigma} + \sigma = 2\left(\eta_s + \eta_p\right) \left(D\left[V\right] + \tau_r D\overset{\triangledown}{\left[V\right]} \right), \tag{1.42}$$

où τ_r est le temps de retard, défini comme :

$$\tau_r = \tau \frac{\eta_s}{\eta_s + \eta_p}. \tag{1.43}$$

Il est intéressant de noter que dans (1.40), le ratio $\frac{\eta_s}{\eta_s + \eta_p}$ correspond au ratio des temps de retard et de relaxation du fluide considéré.

Ainsi, on trouve que ce modèle est paramétré par deux quantités : le rapport des viscosités et le nombre de Weissenberg.
Les questions associées aux écoulements multiphasiques seront étudiées par la suite.

Nombre de Weissenberg En effectuant des simulations numériques sur des modèles adimensionnés, on observe que pour un nombre de Weissenberg un tant soit peu élevé, la simulation donne des résultats divergents. Dans la littérature relative à cette question, on trouve ceci :

The high-Weissenberg number problem (HWNP) has been the major obs-

tacle in computational rheology since the early 1970s. [18].

ou encore ceci :

Flows of viscoelastic fluids at high Weissenberg number promise to be at lease as complex as Newtonian flows at high Reynolds number. [44].

Ces deux citations sont les premières phrases de deux articles traitants du problème du haut Weissenberg. Le problème du haut Weissenberg est le suivant : pour une simulation numérique donnée, les résultats divergent exponentiellement lorsque le nombre de Weissenberg augmente.

Dans [18], Fattal et Kupferman ont identifié ce qui - très probablement - est la source de ce phénomène, soit une difficulté à approcher un comportement exponentiel par une reconstruction polynomiale due à la discrétisation spatiale.

Pour contourner cette barrière, les auteurs ont proposé une nouvelle formulation des équations de Maxwell convectées supérieures en utilisant la positivité du tenseur de conformation, lequel permet d'utiliser donc ce qui a été nommé la méthode *Log-Conf*, qui a été depuis largement testée [28, 55, 3]

La situation actuelle est la suivante : si la source de l'instabilité numérique a été identifiée, les résultats fournis, bien qu'issus de calcul à haut Weissenberg, ne sont pas suffisamment précis et ne donnent pas de résultats exploitables. Nous n'allons pas aborder dans ce manuscrit le problème du haut Weissenberg.

Cas des micelles géantes Dans les écoulements non Newtonien le cas des micelles géantes en solution représente un défi à la base de nos travaux. Les micelles sont des agrégats de molécules bipolaires (un pôle hydrophile, un autre hydrophobe) diluées dans un solvant. La forme prise par ces agrégats dépend de plusieurs paramètres, comme la concentration, la température, le taux de cisaillement... Au repos, c'est-à-dire sans cisaillement, ces agrégats s'enchevêtrent pour former un réseau élastique isotrope : on peut alors comparer la solution à une pelote de laine comme décrit en *a*) de Fig: 1.6. Si on imprime un cisaillement suffisant à l'écoulement, les micelles peuvent alors se recombiner et se casser pour se placer parallèlement les unes aux autres, donnants alors une direction privilégiée pour l'écoulement, celle du cisaillement. Suivant la configuration initiale, et considérant que le taux de cisaillement n'est pas partout le même - un écoulement de type Poiseuille permet de s'en convaincre, on peut voir apparaître des bandes de cisaillements. On peut aussi se référer à [6] pour l'étude des bandes de cisaillements dans des écoulements de mousses.

Comme nous l'avons dit, les micelles sont diluées dans un solvant. Le modèle choisis en [13] est celui de Johnson-Segalman diffusif qui décrit la contrainte interne

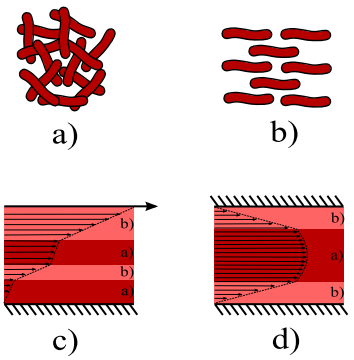


FIG. 1.6: Ecoulement de micelles géantes cylindriques - différents états. Source : [13]

comme la somme de la contrainte produite par le solvant et les micelles, menant au modèle suivant :

$$\begin{aligned} -\eta_s \Delta V + \nabla P &= \nabla \cdot \sigma_p, \\ \nabla \cdot V &= 0, \\ \dot{\sigma_p} + f_a\left(V, \sigma_p\right) + \frac{\sigma_p}{\tau} &= 2\, GD\left[V\right] + \mathbb{D}\Delta\sigma_p, \\ f_a\left(V, \sigma_p\right) &= \sigma_p \Omega\left[V\right] - \Omega\left[V\right]\sigma_p - a\left(\sigma_p D\left[V\right] + D\left[V\right]\sigma_p\right), \\ \Omega\left[V\right] &= \frac{\nabla V - \nabla V^t}{2}, \\ a &\in \left[-1; 1\right], \end{aligned} \tag{1.44}$$

où $\mathbb{D}$ un coefficient de diffusion et a un nombre compris entre $[-1, 1]$, choisi arbitrairement. C'est du paramètre a que dépend la limite de perte de monotonie de la contrainte en fonction du cisaillement [13]. Ce modèle dispose d'une grande faiblesse : son comportement en élongation. Si les points stationnaires en élongation subissent un taux d'élongation supérieur à $\frac{1}{\tau}$, alors le système est instable. Ainsi, le modèle n'est valide que pour des petits taux d'élongations. Afin de relaxer la contrainte, on procède à l'ajout d'un terme quadratique non linéaire, lequel ne change pas le caractère non monotone de la courbe de cisaillement/contrainte. Ainsi, le modèle complet étudié en [13] est :

$$\begin{aligned} -\eta_s \Delta V + \nabla P &= \nabla \cdot \sigma_p, \\ \nabla \cdot V &= 0, \\ \dot{\sigma_p} + f_a\left(V, \sigma_p\right) + \frac{\sigma_p}{\tau} + \kappa\frac{\sigma_p^2}{G\tau} &= 2\, GD\left[V\right] + \mathbb{D}\Delta\sigma_p, \end{aligned} \tag{1.45}$$

où κ est un terme sans dimension, généralement choisi inférieur à 1.

Si dans (1.45) nous utilisons la dérivée convectée supérieure en posant $a = 1$ et négligeons le terme de diffusion, nous obtenons le modèle décrit en (1.36) dont la formulation adimensionnée (1.38) fait apparaître deux grandeurs : le rapport des viscosités et le nombre de Weissenberg. Les questions relatives au nombre de Weissenberg ont été précisées ci-avant.

Rapport des viscosités Dans [43], Phillips et William font remarquer que - pour le modèle de Johnson-Segalman [27] dont le modèle d'Oldroyd-B est une spécification (1.38) - le tenseur des déformations est une fonction strictement croissante du taux de cisaillement tant que ce rapport est supérieur à 1/8 et que donc, un grand nombre de publications de la littérature [45, 43] se sont fixées ce ratio pour présenter leurs résultats, même pour le modèle d'Oldroyd-B, bien que pour ce modèle, cette valeur soit sans conséquence sur la relation monotone sus-décrite [13].

Dans le cas de la simulation des micelles géantes, c'est justement l'effet non monotone qui est recherché pour simuler la réorganisation spatiale des polymères dans le canal. Ainsi, les simulations sont menées à des ratios plus petits que 1/8.

On peut alors s'interroger sur l'effet que sa petitesse aura sur la robustesse du schéma numérique global, dans la mesure où l'influence de la vitesse dans l'équation de Stokes peut aller jusqu'à disparaitre avec α. En [13], il a été démontré qu'il existait une condition suffisante de stabilité dépendant de α. Cette limitation est de l'ordre du ratio de viscosité élevé au carré, ce qui devient très restrictif lorsque ce ratio tend vers zéro, c'est-à-dire lorsque l'on cherche à diminuer la concentration de solvant. **Le premier but de cette thèse est de proposer un schéma numérique stable indépendant de α, d'étudier mathématiquement ce schéma et de l'implémenter en géométrie réaliste.**

1.2 Écoulements bifluides

Cette section est consacrée à la présentation de la modélisation des écoulements bifluides. Nous allons tout d'abord présenter de manière générale les effets de surface, puis nous allons étudier le modèle de Stokes pour les écoulements bifluides. Nous préciserons alors la description de l'interface et enfin, nous préciserons les conditions d'interfaces utilisées dans la modélisation.

1.2.1 Effets de surfaces

Cette partie est largement inspirée du cours de J. Magnaudet donné du 25 au 31 Mai 1997 durant l'école de Printemps "Mécanique des Fluides Numérique" [34]

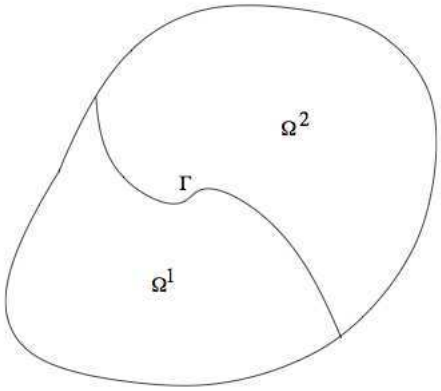


FIG. 1.7: Domaine de calcul

ainsi que de la thèse de S. Vincent [57].

Le lecteur intéressé pourra se rapporter à [25] pour une descriptions des conditions d'interfaces pour deux fluides Newtoniens.

Nous allons maintenant décrire les effets de surface qui peuvent intervenir en mécanique des fluides puis les spécifier à la situation à laquelle nous faisons face. Nous allons envisager deux cas : soit l'interface n'est pas douée de propriétés matérielles, soit elle l'est.

Nous avons vu que le tenseur des contraintes se décompose en différentes parties. Cette décomposition permet d'écrire dans l'équation de Stokes les effets non Newtoniens comme le jeu de contributions volumiques. Ainsi, que les fluides considérés soient Newtonien ou non, les effets présentés ici s'appliquent de la même sorte. Afin de simplifier cette étude, nous nous abstiendrons des effets non Newtoniens.

La simulation numérique des interfaces est un des domaines les plus difficiles en mécanique des fluides numériques pour les raisons suivantes :

- Le domaine de chaque phase est inconnu.
- La déformation d'une interface est régie par une condition limite qui fait intervenir directement la pression et non son gradient.
- La forme même de l'interface influe directement sur la rhéologie. C'est le cas par exemple de l'action de la tension de surface.
- Dans le cas des phénomènes d'adsorption-désorption de tensio actif sur l'interface ou de coalescence, nous nous trouvons à la limite des possibilités de description macroscopique.

Nous allons nous intéresser aux équations de transports aux interfaces. En premier lieu, nous nous focaliserons sur les interfaces dénuées de propriétés matérielles, c'est-à-dire où l'interface est "passive", où elle ne fait que subir l'écoulement. C'est

alors une zone de discontinuité pour - par exemple - la viscosité ou la pression. En second lieu, on s'attachera à la description de l'interface si cette dernière est douée de propriétés matérielles en ce que ces propriétés modifient le comportement de l'écoulement, comme c'est le cas en présence de tension de surface.

1.2.1.1 Cas d'une interface sans propriété matérielle

Commençons par donner l'équation de conservation d'une quantité Ψ dans une phase k (où $k = 1, 2$), notée Ψ_k :

$$\partial_t \Psi_k + \nabla \cdot (V_k \Psi_k) = \Psi_{sk} + \nabla \cdot \Psi_{Fk}, \tag{1.46}$$

où V_k représente la vitesse dans la phase k et où Ψ_{sk} et Ψ_{Fk} représentent respectivement les contributions volumiques et surfaciques en présence.
On peut - en consultant le tableau Tab: 1.8 - retrouver les équations de conservations de masse, d'énergie et de quantité de mouvement : où ρ_k est la masse volumique

	Ψ_k	Ψ_{sk}	Ψ_{Fk}
Masse	ρ_k	0	0
Quantité de mouvement	$\rho_k V_k$	$\rho_k g$	Σ_k
Énergie totale [3]	$\rho_k \left(e_k + V_k^2/2\right)$	$\rho_k g \cdot V_k$	$V_k \Sigma_k - q_k$

FIG. 1.8: Quantités relatives aux différentes lois de conservation.

de l'espèce présente dans la phase k, Σ désigne le tenseur des contraintes (soit une quantité équivalente à (1.4), que nous notons autrement pour plus de généricité), généralement décomposable en une partie en pression et une autre égale au tenseur des contraintes visqueuses (mais on peut décomposer autrement), g est une densité de forces volumiques, e est une densité massique d'énergie interne et q le vecteur courant de chaleur.

Imaginons maintenant une discontinuité de l'écoulement définie géométriquement de façon implicite par

$$\begin{aligned} F(x,t) &= 0, \\ x &\in \Omega. \end{aligned} \tag{1.47}$$

Si cette discontinuité - la ligne de niveau 0 de F - est animée d'une vitesse W, égale ou non à celle des fluides en présence, la dérivée de F suivant le mouvement de la discontinuité est identiquement nulle, ce qui nous donne une relation cinématique

liant l'évolution de F à celle de W, aux points où $F(x,t) = 0$:

$$\partial_t F + (W \cdot \nabla) F = 0. \tag{1.48}$$

Ainsi, à partir de la forme faible de (1.46), on montre qu'à la traversée d'une interface dénuée de propriété matérielle, on obtient la conservation de saut suivante :

$$\sum_{k=1,2} (\Psi_{Fk} \cdot n_k + \Psi_k (W - V_k) \cdot n_k) = 0, \tag{1.49}$$

où n_k désigne la normale unitaire sortante à la phase k. A partir de (1.49), on peut déduire - en utilisant le tableau Tab: 1.8 - les évolutions de masse, quantité de mouvement et d'énergie totale au travers d'une telle discontinuité.

1.2.1.2 Cas d'une interface douée de propriétés matérielles

Si l'interface est douée de propriétés matérielles, il peut y avoir diffusion de ces propriétés le long de l'interface, ou encore transfert entre les phases. Notre étude est rendue mathématiquement plus difficile par le fait que l'interface est une sous-variété de dimension 2 plongée dans un espace euclidien de dimension 3. Ainsi, nous devons introduire les opérateurs analogues au gradient et divergence pour la géométrie non-euclidienne : ∇_s et $\nabla_s \cdot$ On a par définition :

$$\begin{aligned} \nabla_s \cdot W &= \nabla \cdot W - \nabla (W \cdot n) \cdot n, \\ &= \nabla_s \cdot W_s + (W \cdot n) \nabla_s \cdot n, \end{aligned} \tag{1.50}$$

où n est la normale à l'interface et W_s la projection de W sur l'interface. Ces considérations sont nécessaires pour arriver au point suivant :

Remarque 1 *On démontre que localement, $\nabla_s \cdot n$ n'est autre que la courbure moyenne de l'interface.*

Nous avons maintenant besoin de nous doter de deux théorèmes pour décrire le transport d'une grandeur surfacique. Le premier est le théorème de Reynolds surfacique, qui s'écrit, pour toute densité surfacique Ψ_I, avec $\frac{D_s}{Dt}$ l'équivalent surfacique de la dérivée particulaire :

$$\begin{aligned} \frac{D_s}{D_t} \int_S \Psi_I dS &= \int_S \left(\frac{D_s \Psi_I}{Dt} + \Psi_I \nabla_s \cdot W \right) dS, \\ &= \int_S \left(\frac{\partial \Psi_I}{\partial t} + \nabla_s \cdot (\Psi_I W) \right) dS. \end{aligned} \tag{1.51}$$

On peut ré-écrire ce système grâce à l'équation (1.50) sous la forme :

$$\frac{D_s}{D_t}\int \Psi_I dS = \int \left(\frac{\partial \Psi_I}{\partial t} + \nabla_s \cdot (\Psi_I W_s) + \Psi_I \left(W \cdot n\right) \nabla_s \cdot n \right) dS \tag{1.52}$$

Le second est le théorème de Stokes permettant de relier l'intégrale du flux d'une quantité Ψ_{cl} défini sur un contour de normal n_v (où n_v est situé dans le plan localement tangent à l'interface) à une intégrale de surface, soit :

$$\int \Psi_{cl} \cdot n_v dl = \int_S \left(\nabla_s \cdot \Psi_{cl} - \left(\nabla_s \cdot n\right) \Psi_{cl} \cdot n\right) dS. \tag{1.53}$$

Dans le cas spécifique d'une densité surfacique Ψ_I qui n'échange pas avec les phases volumiques mais qui peut varier sous l'effet de forces surfaciques de densité Ψ_{sl} et de sources linéiques de densité Ψ_{cl}, on obtient grâce aux équations (1.52) et (1.53) :

$$\partial_t \Psi_I + \nabla_s \cdot (\Psi_I W_s) + \Psi_I \left(W \cdot n\right) \nabla_s \cdot n = \Psi_{sl} + \nabla_s \cdot \Psi_{cl} - \left(\nabla_s \cdot n\right) \Psi_{cl} \cdot n \tag{1.54}$$

Dans le cas général, l'interface est douée de propriétés matérielles et échange des flux avec les phases adjacentes. On donne alors l'équation générale de transport de la densité surfacique qui se trouve en combinant (1.54) avec l'équation (1.49) :

$$\begin{aligned}\partial_t \Psi_I + \nabla_s \cdot (\Psi_I W_s) + \Psi_I \left(W \cdot n\right) \nabla_s \cdot n = \Psi_{sl} + \nabla_s \cdot \Psi_{cl} - \left(\nabla_s \cdot n\right) \Psi_{cl} \cdot n \\ - \sum_{k=1,2} \left(\Psi_{Fk} \cdot n_k + \Psi_k \left(W - V_k\right) \cdot n_k\right).\end{aligned} \tag{1.55}$$

De l'équation (1.55), on peut retrouver tous les résultats sus-cités.

Si on considère que :

- l'état de contrainte est donné par un tenseur isotrope $\Psi_{cl} = \gamma I$, avec γ représentant la tension interfaciale - *supposée constante*,
- nous avons $W = V_k$, soit continuité de la vitesse à l'interface,
- l'interface est dénuée de masse ($\Psi_I = 0$),
- il n'y a pas de forces surfaciques (la force volumique dans l'équation de la conservation de la quantité de mouvement est continue à l'interface), soit $\Psi_{sl} = 0$,

on trouve, en notant, pour une quantité X définie sur Ω, notée X_1 dans Ω_1 et X_2 dans Ω_2, $[X] = X_1 - X_2$, et $n = -n_1 = n_2$ et où $\Sigma_k = \sigma$, tel que défini en (1.4) :

$$\begin{aligned} \gamma \left(\nabla_s \cdot n\right) n &= -\sum_{k=1,2} \Sigma_k \cdot n_k, \\ &= [\sigma]_\Gamma \cdot n. \end{aligned} \tag{1.56}$$

Ces résultats sont conformes à ceux utilisés dans [22].

De l'équation (1.56) on déduit, dans le cas statique (en supposant σ_p nul) l'équation de Laplace reliant la pression à l'intérieur et l'extérieur d'une bulle, par exemple, qui s'écrit :

$$[P] \cdot n = \gamma \left(\nabla_s \cdot n\right) n. \tag{1.57}$$

1.2.2 Le système de Stokes bifluide

Ce qui suit s'attache à une modélisation de l'équation de Stokes pour une simulation bifluide de fluides Newtonien ou non. Nous reprenons la notation σ_p pour toute contribution élastique.

L'objet de l'étude est de définir, à l'aide de conditions limites, de conditions d'interface et de l'équation de Stokes les champs de vitesse et de pression dans le domaine décrit - pour l'exemple - dans la figure 1.7. Nous présentons deux modèles équivalents, où nous rajoutons une force extérieure continue à l'interface pour plus de généricité, même si l'adimensionnement permet de négliger ce terme.

1.2.2.1 Modèle à deux vitesses

Soit $\Omega \in \mathbb{R}^n$, n valant 2 ou 3, de bord $\partial\Omega$, un domaine dans lequel sont présents deux fluides Newtoniens, nommés 1 et 2, séparés par une interface Γ, de sorte que chaque fluide occupe une sous partie du domaine, respectivement Ω_1 et Ω_2, tel que $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Gamma$. Soit F le vecteur représentant les forces extérieures *continues à l'interface*. Ces forces sont modélisées par une fonction continue et dérivable sur tout le domaine. Chaque fluide satisfait aux équations de Stokes, soit :

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \left(2\eta_1 D\left[V_1\right]\right) + \nabla P_1 &= F + \nabla \cdot \sigma_1^E, \\ \nabla \cdot V_1 &= 0, \text{dans } \Omega_1 \end{aligned} \tag{1.58}$$

et

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \left(2\eta_2 D\left[V_2\right]\right) + \nabla P_2 &= F + \nabla \cdot \sigma_2^E, \\ \nabla \cdot V_2 &= 0, \text{dans } \Omega_2, \end{aligned} \tag{1.59}$$

Cette modélisation en elle même n'est pas suffisante étant donné qu'aucune condition à l'interface n'est donnée, étant entendue que les conditions sur $\partial\Omega$ sont de type Dirichlet.

Conditions à l'interface Nous précisons maintenant les relations à l'interface en se basant sur les considérations d'effets de surface étudiés ci-avant.

Continuité de la vitesse Nous considérons que ces fluides ne peuvent pas glisser l'un sur l'autre, c'est-à-dire qu'à l'interface, la vitesse est continue. Nous notons :

$$\begin{aligned} [V]_\Gamma &= V_1 - V_2, \\ &= 0. \end{aligned} \tag{1.60}$$

Discontinuité du tenseur des contraintes Cette discontinuité s'écrit, d'après l'équation (1.56) :

$$[\sigma]_\Gamma \vec{n} = \gamma c \vec{n}, \tag{1.61}$$

où γ est le coefficient de tension de surface, c la courbure de l'interface et $\vec{n}$ la normale extérieure (du fluide 1 au fluide 2) le long de l'interface.

1.2.2.2 Modèle à une vitesse

Posons :

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma_1 \mathbb{1}_{\Omega_1} + \sigma_2 \mathbb{1}_{\Omega_2}, \\ V &= V_1 \mathbb{1}_{\Omega_1} + V_2 \mathbb{1}_{\Omega_2}, \\ P &= P_1 \mathbb{1}_{\Omega_1} + P_2 \mathbb{1}_{\Omega_2}, \\ \eta_s &= \eta_1 \mathbb{1}_{\Omega_1} + \eta_2 \mathbb{1}_{\Omega_2}, \end{aligned} \tag{1.62}$$

où la fonction indicatrice - $\mathbb{1}$ - vaut 1 si nous sommes dans le domaine considéré, zéro sinon :

$$\mathbb{1}_{\Omega_j}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \Omega_j, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{1.63}$$

On peut alors définir un système équivalent [10] à (1.58),(1.59) dans Ω, tel que :

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (2\eta_s D[V]) + \nabla P &= F - \delta_\Gamma \gamma c n + \nabla \cdot \sigma^E \\ \nabla \cdot V &= 0, \end{aligned} \tag{1.64}$$

avec δ_Γ la masse de Dirac le long de l'interface.

Démonstration [35] :
Nous avons, à partir de (1.19), en posant $n = n_1 = -n_2$[4] et en prenant σ au sens de (1.4) :

$$\begin{aligned}\int_{\partial\Omega} \sigma \cdot n ds &= \int_{\partial\Omega_1} \sigma_1 \cdot n ds + \int_{\partial\Omega_2} \sigma_2 \cdot n ds - \int_\Gamma \sigma_1 \cdot n_1 ds - \int_\Gamma \sigma_2 \cdot n_2 ds, \\ &= \int_{\Omega_1} \nabla \cdot \sigma_1 dv + \int_{\Omega_2} \nabla \cdot \sigma_2 dv - \int_\Gamma (\sigma_1 - \sigma_2) \cdot n ds, \\ &= \int_\Omega \nabla \cdot \sigma dv - \int_\Gamma \gamma c n ds, \\ &= -\int_\Omega F dv.\end{aligned} \tag{1.65}$$

Ainsi, on trouve :

$$\int_\Omega \nabla \cdot \sigma dv = \int_\Gamma \gamma c n ds - \int_\Omega F dv. \tag{1.66}$$

Ceci étant vrai pour tout domaine de contrôle Ω, nous avons :

$$\nabla \cdot \sigma = -F + \delta_\Gamma \gamma c n, \tag{1.67}$$

ce qui s'écrit :

$$-\nabla \cdot (2\eta D[V]) + \nabla P = F - \delta_\Gamma \gamma c n + \nabla \cdot \sigma_E. \tag{1.68}$$

En appliquant la même réflexion sur la divergence de la vitesse, en considérant la vitesse continue le long de l'interface, on trouve la même condition de divergence nulle sur tout le domaine, et ainsi, on forme le système (1.64)

C'est bien évidemment le modèle (1.64) qui sera utilisé puisqu'il suffit pour le résoudre de manière continue de connaître les normales et courbures, accessibles depuis la fonction level-set, ainsi que la répartition de la viscosité, elle aussi donnée par le signe de la fonction distance.

Il conviendra de donner le même soin à l'élaboration d'une loi constitutive pour σ^E sur Ω cohérente avec les conditions de sauts.

Nous présentons maintenant la méthode de description de l'interface.

[4] le choix de la normale étant arbitraire et n'intervenant que dans cette expression, on peut noter ce saut comme étant positif ou négatif.

1.2.3 Description de l'interface

On définit par Γ_0 la position de l'interface à l'instant $t = 0$, X la fonction indiquant la position d'une particule de fluide en fonction du temps, et on pose :

$$\begin{aligned} V\left(t, X\left(t\right)\right) &= \dot{X}\left(t\right), \\ X\left(0\right) &= X_0, \end{aligned} \tag{1.69}$$

la vitesse de l'écoulement V. On a alors, par définition :

$$\Gamma\left(t\right) = \left\{X\left(t\right) / X_0 \in \Gamma_0\right\}. \tag{1.70}$$

Cette écriture nous permet de disposer de la description de l'interface au cours du temps.

On se dote d'une fonction ϕ_0, telle que :

$$\left\{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 / \phi_0\left(x, y, z\right) = 0\right\} = \Gamma_0, \tag{1.71}$$

En résolvant l'équation :

$$\begin{aligned} \partial_t \phi + \left(V \cdot \nabla\right)\phi &= 0, \\ \phi\left(t = 0\right) &= \phi_0, \end{aligned} \tag{1.72}$$

on a alors le théorème suivant :

Théorème 1

$$\left\{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 / \phi\left(t, x, y, z\right) = 0\right\} = \Gamma\left(t\right). \tag{1.73}$$

Par définition de la fonction ϕ, on trouve que la normale à l'interface s'exprime par :

$$\vec{n}|_\Gamma = \left.\frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|}\right|_\Gamma, \tag{1.74}$$

où la norme du gradient à l'interface est nécessairement non nulle. La courbure est donnée, comme précisée dans la description des effets de surface, par :

$$c = \nabla \cdot \vec{n}. \tag{1.75}$$

1.3 Les systèmes étudiés

Ainsi, pour clore ce chapitre, nous présentons les deux modèles que nous allons étudier aux parties trois et quatre de ce manuscrit.

1.3.1 Écoulement bifluide Newtonien

Le premier modèle que nous étudierons est celui concernant les écoulements diphasiques incompressibles de fluides Newtoniens. Ainsi, le système est donné sur $\Omega \in \mathbb{R}^n, n = 2$ où 3 tel que $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_p \cup \Gamma$, où Γ est l'interface et Ω_p un sous domaine de Ω où nous imposons une vitesse $\bar{V}$ telle que $\nabla \cdot \bar{V} = 0$ (cette notion sera présentée au chapitre suivant) par :

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (2\eta D[V]) + \nabla P + \frac{\mathbb{1}_{\Omega_p}}{\epsilon}\left(V - \bar{V}\right) &= -\delta_\Gamma \gamma c n + F, \\ \nabla \cdot V &= 0, \\ \partial_t \phi + (V \cdot \nabla \phi) &= 0, \\ \phi(0) &= \phi^0. \end{aligned} \tag{1.76}$$

où la viscosité η est une constante par phase, F une force continue sur tout le domaine, ϵ un nombre petit devant η qui sera précisé dans la suite et la ligne de niveau 0 de la fonction ϕ décrit l'interface. On adjoint à ce système des conditions limites de type Dirichlet non homogène pour la vitesse.

Les deux dernières lignes de (1.76) permettent de simuler l'évolution d'une interface au cours du temps. Elles forment un système complet dont les outils numériques utiles à sa résolution sont donnés au chapitre qui suit.

La question étudiée à la deuxième partie de ce manuscrit est la mise au point d'un solveur d'ordre 2 sur grille structurée pour le système de Stokes diphasiques pour fluides Newtonien.

1.3.2 Écoulements monophasiques de fluides non Newtonien

Nous présentons maintenant le modèle qui nous servira de base dans les études de la troisième partie de ce manuscrit, à savoir celui régissant l'écoulement d'un fluide non Newtonien.

$$\begin{aligned} -\frac{\eta_s}{\eta_p}\Delta V + \nabla P &= \nabla \cdot \sigma_p, \\ \nabla \cdot V &= 0, \\ \mathrm{We}\overset{\triangledown}{\sigma_p} + \sigma_p &= 2D[V], \\ \sigma_p(0) &= \sigma_p^0, \end{aligned} \tag{1.77}$$

où η_s (resp. η_p) est la viscosité du solvant (resp. du polymère) et We le nombre de Weissenberg système toujours augmenté de conditions limites de type Dirichlet non

homogènes pour la vitesse.

La question étudiée à la troisième partie est la stabilité d'un tel modèle une fois discrétisé lorsque la viscosité du solvant tend vers zéro.

Chapitre 2

Outils numériques

Sommaire

2.1 Méthodes numériques pour le transport 39
2.1.1 Discrétisation temporelle 39
2.1.2 Discrétisation spatiale 41
2.2 Repérage de l'interface 43
2.2.1 La fonction distance 43
2.2.2 Courbure, Normale 44
2.3 Redistanciation et extension de vitesse 45
2.3.1 Redistanciation 45
2.3.2 Extension de vitesse 47
2.4 Méthodes générales pour l'équation de Stokes 47
2.4.1 Lagrangien Augmenté 47
2.4.2 Pénalisation 49
2.5 Discrétisation du modèle d'Oldroyd-B 50
2.5.1 Discrétisation temporelle 51
2.5.2 Discrétisation spatiale : différences finies. 52

Ce chapitre est consacré à la présentation d'outils numériques et de méthodologies utilisées durant ce doctorat. Nous allons présenter les différentes méthodes de transport utilisées, les techniques de suivi ou de capture d'interface ou encore l'algorithme général pour résoudre le problème de Stokes.

Toutes nos discrétisations sont effectuées sur maillage cartésien. Nous avons utilisé deux types principaux de maillages : les maillages MAC et les maillages colocalisés, présentés sur la figure 2.1.

Nous présentons un cadre générique pour notre étude, cherchant à regrouper toutes les composantes utilisées durant ce doctorat. Ce cadre doit donc contenir

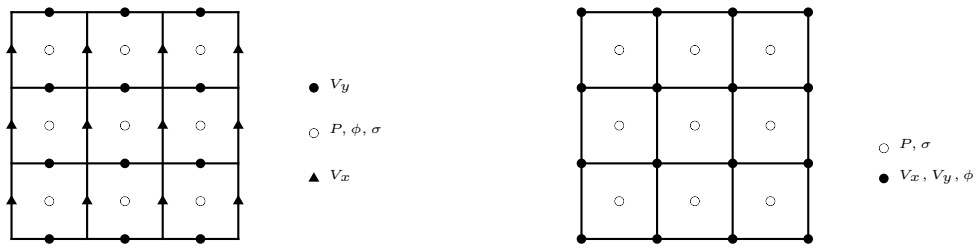


FIG. 2.1: Gauche : Maillage Mac [36], droite : maille colocalisé

tout ce qui touche à l'évolution d'une interface, à la simulation d'un fluide non Newtonien ou encore à la résolution de l'équation de Stokes. Nous mettons à disposition un domaine de calcul dans lequel nous disposons d'une interface décrite par la ligne de niveau zéro d'une fonction ϕ, comme présenté en Fig: 2.2.

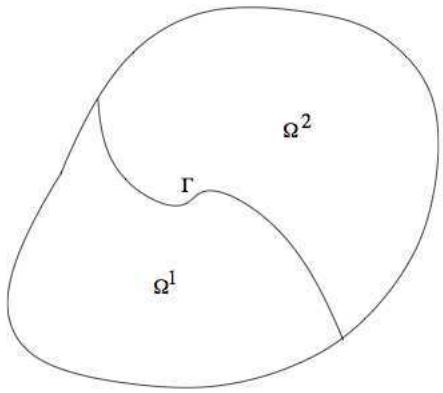


FIG. 2.2: Domaine de calcul

En premier lieu, nous allons nous intéresser à la discrétisation en temps et en espace pour l'équation de transport, laquelle intervient pour l'évolution de l'interface et dans la loi constitutive de σ_p. Ensuite, nous allons étudier une manière de suivre une interface et d'en extraire des informations, comme les normale et courbure, puis en troisième section, nous allons étudier comment conserver de bonnes propriétés numériques au cours des simulations pour l'interface. Nous aborderons ensuite les questions relatives à la résolution de l'équation de Stokes, puis nous finirons sur une discrétisation en temps et en espace pour la loi constitutive d'Oldroyd-B.

Toutes les simulations présentées dans cette thèse ont été effectuées en 2D ou

en 3D-axisymétrique. Nous allons donc nous restreindre à ce cadre dans ce texte sachant que toutes les méthodes sont extensibles en 3D cartésien. Les codes correspondants ont été développés dans la plateforme *eLYSe* de l'équipe MC2, plateforme orchestrée par Olvier Saut. On décrira dans la suite du manuscrit notre apport à cette plateforme.

2.1 Méthodes numériques pour le transport

Nous allons maintenant décrire les différentes méthodes numériques à notre disposition afin de résoudre une équation de transport avec un champ de vitesse continue, mais pas forcément dérivable, à divergence nulle, avec des conditions limites de type Dirichlet non homogènes. En effet, nous voyons apparaître cette équation plusieurs fois dans nos modélisations, notamment pour le transport de l'interface, mais aussi dans le terme de dérivée convectée supérieure du modèle d'Oldroyd-B.

Notre système s'écrit donc, avec un état initial quelconque noté $\tilde{\phi}$:

$$\begin{aligned} \partial_t \phi + (V \cdot \nabla)\, \phi = 0, \\ \phi\,(0) = \tilde{\phi}. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Toutes les méthodes sous-décrites ont été éprouvées et des tests de convergences sont présentés dans [13, 54, 56].

2.1.1 Discrétisation temporelle

Nous présentons dans la suite la discrétisation naturelle d'ordre 1 puis une discrétisation d'ordre plus élevé. Dans tous les cas, une formulation explicite est choisie, afin d'alléger l'exécution en s'affranchissant de l'inversion d'un système linéaire. Le choix d'une formulation explicite impose donc le respect de la condition CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) :

$$\delta t \leq \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} \frac{\max(|u_i|)}{h_i}}, \tag{2.2}$$

où n est la dimension du problème (2 ou 3) et h_i le pas d'espace dans la direction considérée. Nous notons que la signification numérique de cette condition est qu'une information contenue dans la maille courante ne peut pas être projetée dans autre chose qu'une maille voisine en une itération de transport. Cette remarque permet de comprendre qualitativement la condition CFL et de commencer à réfléchir à la

notion de stabilité du schéma d'Oldroyd-B complet qui sera présentée à la suite du manuscrit.

2.1.1.1 Schéma d'ordre 1

Le schéma le plus simple est le suivant :

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \delta t \left(V \cdot \nabla\right) \phi^n. \tag{2.3}$$

Ce schéma est stable sous condition CFL et s'avère être suffisant pour la simulation des écoulements. Cependant, nous avons à notre disposition des schémas plus performants déjà implémentés dans la librairie *eLYSe* [47], notamment le schéma Runge Kutta d'ordre 3.

2.1.1.2 Schéma Runge Kutta d'ordre 3

Ce schéma d'ordre 3 en temps s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned}
\phi^{n+\frac{1}{3},1} &= \phi^n - \delta t \left(V \cdot \nabla\right) \phi^n, \\
\phi^{n+\frac{1}{3},2} &= \frac{3}{4}\phi^{n+\frac{1}{3}} + \frac{1}{4}\phi^{n+\frac{1}{3},1} - \frac{\delta t}{4} \left(V \cdot \nabla\right) \phi^{n+\frac{1}{3},1}, \\
\phi^{n+\frac{1}{3}} &= \frac{1}{3}\phi^{n+\frac{1}{3}} + \frac{2}{3}\phi^{n+\frac{1}{3},2} - \frac{2\delta t}{3} \left(V \cdot \nabla\right) \phi^{n+\frac{1}{3},2}.
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Il induit de fait un coût numérique supérieur au schéma Upwind, mais sa facilité de mise en œuvre, la précision apportée ainsi que son très petit surcoût numérique en font un candidat de choix pour nos simulations.

Le lecteur intéressé pourra trouver des informations plus détaillées au sujet des schémas RK dans [21].

2.1.2 Discrétisation spatiale

Cette partie s'attache à présenter la discrétisation du terme $\left(V \cdot \nabla\right) \phi$. L'approche $1 - D$ permet de décrire le type de discrétisation, l'évolution vers le multi-D est naturelle.

Nous présentons ici le schéma le plus simple, nommé schéma Upwind, et le schéma choisi, le Weno5.

2.1.2.1 Schéma Upwind

Ce schéma décentré prend en compte la direction de l'écoulement, c'est-à-dire qu'une dérivée est calculée comme suit :

$$(\partial_x \phi)_{i,j} \approx \begin{cases} \frac{\phi_{i+1,j}-\phi_{i,j}}{\Delta x} & \text{si } \widetilde{V_{x_{i,j}}} < 0, \\ \frac{\phi_{i,j}-\phi_{i-1,j}}{\Delta x} & \text{si } \widetilde{V_{x_{i,j}}} > 0, \end{cases} \tag{2.5}$$

où

$$\widetilde{V_{x_{i,j}}} = \begin{cases} V_{x_{i,j}} & \text{pour un maillage colocalisé,} \\ \frac{V_{x_{i,j}}+V_{x_{i+1,j}}}{2} & \text{pour un maillage MAC,} \end{cases} \tag{2.6}$$

est la vitesse aux nœuds de discrétisation de la variable ϕ. Ce principe s'étend de la même manière aux autres directions.

Bien que très simple à mettre en place et surtout stable sous CFL, ce schéma est très dissipatif, et prend mal en compte les chocs aux interfaces. Nous allons donc nous pencher sur une autre classe de schéma : les schémas (W)ENO.

2.1.2.2 Schéma Weno5

Développé initialement par Harten et Osher [23] (1985), les schémas ENO (Essentiellement Non Oscillant) cherchent à avoir une représentation polynomiale du flux le plus régulier afin d'éviter les oscillations près des chocs comme on peut en trouver dans les schémas de type Lax-Wendroff ou Saute-Mouton. Malheureusement, le choix d'un stencil, à droite ou à gauche, peut mener à des calculs instables. Ainsi, en 1994 est proposée par Liu, Osher et Chan la méthode *Weighted* ENO, qui met en place une combinaison linéaire des différentes représentations des flux en fonction du sens de la vitesse. Notons ϕ_x^+ la dérivée par rapport à la variable x si la vitesse $\widetilde{V_x}$ est positive, ϕ_x^- sinon. Nous calculons d'abord 5 discrétisations décentrées de ϕ_x :

	ϕ_x^-	ϕ_x^+
v_1	$\frac{\phi_{i-2,j}-\phi_{i-3,j}}{\Delta x}$	$\frac{\phi_{i+3,j}-\phi_{i+2,j}}{\Delta x}$
v_2	$\frac{\phi_{i-1,j}-\phi_{i-2,j}}{\Delta x}$	$\frac{\phi_{i+2,j}-\phi_{i+1,j}}{\Delta x}$
v_3	$\frac{\phi_{i,j}-\phi_{i-1,j}}{\Delta x}$	$\frac{\phi_{i+1,j}-\phi_{i,j}}{\Delta x}$
v_4	$\frac{\phi_{i+1,j}-\phi_{i,j}}{\Delta x}$	$\frac{\phi_{i,j}-\phi_{i-1,j}}{\Delta x}$
v_5	$\frac{\phi_{i+2,j}-\phi_{i+1,j}}{\Delta x}$	$\frac{\phi_{i-1,j}-\phi_{i-2,j}}{\Delta x}$

Nous pouvons alors déterminer des coefficients [1] donnants des informations sur la régularité de la solution :

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{12}{13}\left(v_1 - 2v_2 + v_3\right)^2 + \frac{1}{4}\left(v_1 - 4v_2 + 3v_3\right)^2, \\ S_2 &= \frac{12}{13}\left(v_2 - 2v_3 + v_4\right)^2 + \frac{1}{4}\left(v_2 - v_4\right)^2, \\ S_3 &= \frac{12}{13}\left(v_3 - 2v_4 + v_5\right)^2 + \frac{1}{4}\left(3v_3 - 4v_4 + v_5\right)^2, \end{aligned} \tag{2.7}$$

et on définit finalement les poids :

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{10}\frac{1}{\left(\epsilon + S_1\right)^2}, w_1 = \frac{a_1}{a_1 + a_2 + a_3}, \\ a_2 &= \frac{6}{10}\frac{1}{\left(\epsilon + S_2\right)^2}, w_2 = \frac{a_2}{a_1 + a_2 + a_3}, \\ a_3 &= \frac{3}{10}\frac{1}{\left(\epsilon + S_3\right)^2}, w_3 = \frac{a_3}{a_1 + a_2 + a_3}, \end{aligned} \tag{2.8}$$

pour définir la dérivée comme suit :

$$\begin{aligned} \partial_x \phi \approx\ & w_1\left(\frac{v_1}{3} - \frac{7v_2}{6} + \frac{11v_3}{6}\right) \\ & + w_2\left(\frac{-v_2}{6} + \frac{5v_3}{6} + \frac{v_4}{3}\right) \\ & + w_3\left(\frac{v_3}{3} + \frac{5v_4}{6} - \frac{v_5}{6}\right). \end{aligned} \tag{2.9}$$

Le paramètre ϵ est à fixer à une *petite* valeur. Nous avons choisi de le définir comme ceci :

$$\epsilon = 1e^{-6} max\left(v_1^2, v_2^2, v_3^2, v_4^2, v_5^2\right) + 1e^{-99},$$

afin d'éviter le cas pathologique d'une division par zéro.

On pourra trouver une précision sur le comportement du schéma et le calcul des poids dans [53].

2.2 Repérage de l'interface

Un problème soulevé durant ce doctorat est le repérage de l'interface au cours du temps. Deux grandes classes de méthodes existent : les méthodes Lagrangiennes

[1] Des détails peuvent être trouvés en [32]

et les méthodes Eulériennes. Dans la première catégorie, l'interface est décrite par un objet qui sera transporté, alors que dans la seconde, c'est une fonction scalaire qui décrit l'interface, laquelle peut être transportée.

Dans la classe des méthodes Eulériennes, il existe deux grandes idées :

– le suivi de front,

– le suivi de volume.

L'idée sous-jacente au suivi de volume est la conservation du volume de chacune des phases au cours du temps.

Sa plus illustre expression est la méthode "Volume of Fluid" [37, 48] qui décrit - à l'aide d'une fonction scalaire - par une fraction volumique le volume de chaque phase présent dans une maille. Ainsi, les mailles occupées par deux phases simultanément auront une fraction volumique comprise entre 0 et 1. Robustes, ces méthodes permettent de connaître précisément la localisation de l'interface, mais souffrent de lacunes numériques dues à la présence de très fortes variations de la fonction scalaire à l'interface, aboutissant à des oscillations invalidants les résultats. Une autre difficulté - et la raison pour laquelle nous écartons cette méthode - est la difficile reconstruction de la normale et de la courbure au lieu de l'interface, ce qui est très pénalisant pour les problèmes où la tension de surface est prépondérante.

La méthode Level-Set introduite par Osher et Sethian (1988) [41] repose sur une représentation implicite de l'interface. Il s'agit de définir une fonction dont la ligne de niveau zéro décrit l'interface. Dotée de nombreuses qualités, cette méthode souffre cependant de perte de masse lors du transport. La suite de ce chapitre est dédiée à la présentation de cette méthode.

2.2.1 La fonction distance

On a défini par le théorème 1 l'interface Γ comme étant la ligne de niveau zéro d'une fonction. Il est utile de définir la fonction distance, ici signée par j, Ψ telle que :

$$\begin{aligned} \Psi(X,t) &= j(X) \min \|X - X_1\|_2 \forall X_1 \in \Gamma, \\ X &=\in \Omega, \\ t &=\in \mathbb{R}^+, \end{aligned} \tag{2.10}$$

avec :

$$j(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \Omega_1, \\ -1 & \text{si } x \in \Omega_2. \end{cases} \tag{2.11}$$

D'un point de vue précision numérique, comme on va le voir, il est agréable de travailler sur la fonction distance signée pour calculer la courbure. Malheureusement,

si ϕ_0, défini par (1.71) est égale à $\Psi(x,0)$, la propriété *fonction distance signée* de ϕ n'est pas conservée au cours du temps.

2.2.2 Courbure, Normale

Puisque l'interface Γ est donnée par la ligne de niveau zéro de la fonction ϕ - qui est la fonction distance signée à l'interface, la normale à l'interface est donnée par la restriction du gradient de ϕ normalisé à l'interface, soit :

$$\vec{n} = \left.\frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|}\right|_{\phi=0}. \tag{2.12}$$

Pour tout maillage, on posera, sans normalisation :

$$\begin{aligned} n_x^{i,j} &= \frac{\phi_{ij} - \phi_{i-1,j}}{\Delta x}, \\ n_y^{i,j} &= \frac{\phi_{ij} - \phi_{i,j-1}}{\Delta y}. \end{aligned} \tag{2.13}$$

La définition (2.12) n'est pas strictement respectée car les quantités ne sont pas normalisées. Cependant, les composantes de la normale ne sont pas données aux mêmes points de discrétisation, ainsi, on ne normalisera que les valeurs interpolées aux points souhaités des normales, lorsque nécessaire.

On sait que la courbure est donnée par :

$$c = \nabla \cdot \vec{n}, \tag{2.14}$$

ce qui, sur tout maillage, se note, avec la prise en compte de la normalisation, en dimension 2 :

$$c_{i,j} = \frac{\frac{n_x^{i,j} - n_x^{i-1,j}}{\Delta x} + \frac{n_y^{i,j} - n_y^{i,j-1}}{\Delta y}}{\frac{1}{2}\sqrt{\left(n_x^{i,j} + n_x^{i-1,j}\right)^2 + \left(n_y^{i,j} + n_y^{i,j-1}\right)^2}}. \tag{2.15}$$

Ainsi, si les normales sont discrétisées entre les points de discrétisation de ϕ, la courbure est approchée aux mêmes points que ϕ.

2.3 Redistanciation et extension de vitesse

La courbure et la normale sont des éléments clés pour le calcul de la tension de surface. Ces quantités peuvent être calculées avec une grande précision si la fonction level-set à l'instant t est identiquement égale (au moins dans un voisinage de

l'interface) à la fonction distance. Cette propriété n'est pas conservée par l'équation (1.72). Deux classes de méthodes existent : soit on transporte la fonction ϕ à la vitesse du fluide, et depuis la position de l'interface calculée à partir de la ligne de niveau 0 de ϕ, on calcule une nouvelle fonction $\tilde{\phi}$ qui soit la fonction distance ad-hoc, soit on calcule au préalable un champ de vitesse pour transporter la fonction ϕ tel que ce nouveau champ ait la même valeur que celle du fluide à l'interface et conserve par le transport la propriété fonction distance. On nomme redistanciation la première classe de méthode et extension de vitesse la seconde.

2.3.1 Redistanciation

Nous allons présenter différents algorithmes, dits de redistanciation, permettant - à partir d'une fonction dont la ligne de niveau zéro représente une interface - de construire une fonction distance.

Reconstruire une fonction distance signifie in fine disposer d'une fonction dont la norme du gradient est une constante.

2.3.1.1 Algorithmes itératifs

En 1994, Sussman, Smereka et Osher [33] proposent de résoudre une équation aux dérivées partielles permettant de modifier la position des lignes de niveau autour de l'interface. L'idée sous-jacente est de faire tendre, par un processus itératif, le gradient de la fonction vers celui d'une fonction distance. Imaginons une fonction f dont la ligne de niveau zéro représente une interface. Si nous résolvons :

$$\begin{aligned} \partial_{\tilde{t}}\tilde{\phi} + sgn\left(\tilde{\phi}\right)\left(\|\nabla\phi\| - 1\right) = 0, \\ \tilde{\phi}\left(x, \tilde{t} = 0\right) = f, \end{aligned} \tag{2.16}$$

avec sgn la fonction indiquant le signe de son argument et $\tilde{t}$ un temps fictif d'évolution. Lorsque $\tilde{t} \to +\infty$, $\tilde{\phi}$ converge vers une fonction vérifiant $\|\nabla\phi\| = 1$ et dont le signe est induit par celui $\tilde{\phi}\left(t = 0\right)$. On pose alors :

$$\phi = \tilde{\phi}\left(x, \tilde{t} \to \infty\right). \tag{2.17}$$

D'apparence évidente, cette technique pose des difficultés numériques, surtout pour le calcul du gradient à proximité de l'interface, lorsque les stencils sont de part et d'autre de l'interface.

Deux méthodes pour résoudre cette équation existent dans *eLYSe* : un schéma truly-upwind et un schéma Weno5.

2.3.1.2 Fast Marching

Une autre idée, proposée par Sethian [49, 50] est de recalculer, au sens de reconstruire, directement la fonction ϕ à partir de la position de l'interface, en résolvant l'équation eikonale :

$$\begin{aligned} \|\nabla\phi\|^2 &= 1, \\ \phi &= 0 \text{ sur l'interface.} \end{aligned} \tag{2.18}$$

Cette équation a l'avantage de pouvoir être résolue très rapidement par la méthode du Fast Marching, dans la mesure où chaque point est directement calculé : il n'y a pas de système évolutif en pseudo-temps. Nous pouvons en plus nous contraindre à cesser le calcul pour les points plus éloignés que quelques pas d'espace de l'interface dans la mesure où la normale ou encore le transport ne dépendent pas de valeurs trop éloignées.

La difficulté de l'algorithme est ce que l'on nomme l'initialisation, c'est-à-dire notre capacité à placer correctement les points à proximité de l'interface. Dans la mesure où leur position est "relativement juste" car ils ont été déplacés à une vitesse proche de la vitesse réelle de déplacement, ces points sont globalement bons. Le lecteur intéressé par le détail trouvera des précisions dans [54].

2.3.2 Extension de vitesse

Nous avons remarqué que le transport ne conserve pas la propriété fonction distance. Dit autrement, les trajectoires des points qui ne sont pas situés sur l'interface ne sont pas compatibles avec le respect de la propriété recherchée. Ainsi, si la ligne de niveau zéro est transportée à la bonne vitesse, les autres lignes de niveau sont transportées avec une vitesse n'ayant rien de valide au regard de la fonction distance. C'est d'ailleurs toute la raison de la procédure de redistanciation. Pour des raisons diverses, comme la difficulté de la reconstruction de la fonction distance, on peut être tenté de transporter la fonction ϕ avec une vitesse transportant de manière cohérente toute la fonction ϕ, au sens de "respectant la propriété *fonction-distance*". Cette idée se nomme "extension de vitesse", dans la mesure où un champ de vitesse sera étendu à partir de la vitesse que nous avons à l'interface.

Dans [2], les auteurs ont tenté de calculer ce nouveau champ de vitesse grâce aux informations disponibles au voisinage de l'interface. La première difficulté est de déterminer une loi d'extension valide, ceci n'est pas triviale. Sethian et Adalsteinsson proposent, à partir d'une fonction distance bien initialisée de reconstruire un champ

de vitesse en se basant sur le principe du Fast Marching, c'est-à-dire en résolvant :

$$\nabla\phi \cdot \nabla F^{ext} = 0, \tag{2.19}$$

et où F^{ext} est la vitesse étendue, telle que $F^{ext}|_{\Gamma} = V_{\Gamma}$. Le lecteur intéressé trouvera des détails dans [12]. Ceci n'a pas été un axe d'étude de ce doctorat car il nous a fallu d'abord progresser dans les études qui seront présentées dans la suite pour prétendre à de bons résultats avec cette méthode.

2.4 Méthodes générales pour l'équation de Stokes

2.4.1 Lagrangien Augmenté

La méthode du Lagrangien Augmenté [19] consiste en l'utilisation de la condition de la divergence nulle comme une contrainte linéaire dans un problème d'optimisation. Définissons l'ensemble U tel que

$$U = \left\{ v \in H_0^1(\Omega), \nabla \cdot v = 0 \right\}.$$

Trouver la solution au problème de Stokes revient à résoudre le problème suivant :

$$\text{Trouver u } \in U \text{ tel que } J(u) \leq J(v), \forall v \in U \tag{2.20}$$

où on définit

$$\begin{aligned} a(u,v) &= \sum_{i,j=1}^{N} \int_{\Omega} \partial_{x_j} u_i \partial_{x_j} v_i dx, \\ (f,v) &= \int_{\Omega} f \cdot v dx, \\ J(v) &= \frac{\eta}{2} a(v,v) - (f,v). \end{aligned} \tag{2.21}$$

Le problème (2.20) possède effectivement une solution d'après le théorème de Lax-Milgram. Ce problème consiste en la minimisation d'une fonction quadratique sous la contrainte linéaire $\nabla \cdot V = 0$. Il est donc naturel de modifier le problème (2.20) afin d'imposer cette contrainte comme multiplicateur de Lagrange pour obtenir le problème qui suit. Définissons la fonctionnelle $L(v,q)$ telle que, pour $v \in H_0^1(\Omega)$ et $p \in L^2(\Omega)$

$$\begin{aligned} L(v,q) &= J(v) - (q, \nabla \cdot v), \\ &= \frac{\eta}{2} a(v,v) - (f,v) - (q, \nabla \cdot v) + \frac{r}{2} |\nabla \cdot v|_0^2. \end{aligned} \tag{2.22}$$

$$\begin{gathered}\text{Trouver } (u,v) \in H_0^1(\Omega) \times L^2(\Omega) \text{ tel que} \\ L(u,v) \leq L(u,p) \leq L(v,p), \forall v \in V, \forall q \in L^2(\Omega)\end{gathered} \tag{2.23}$$

D'après le théorème de Hahn-Banach - à condition de respecter certaines conditions de régularité de la vitesse sur la frontière du domaine, le problème (2.23) admet une unique solution. On utilisera l'algorithme d'Uzawa que l'on rappelle en Algo: 1 pour la résolution. Le paramètre Tol est à fixer en fonction du maillage ou encore

Algorithme 1 Lagrangien Augmenté

Entrées: $F, \gamma, \phi, \eta, Tol, nbIterMax$

1: **tant que** $err > Tol$ ou $i > nbIterMax$ **faire**

2: résoudre le système linéaire :

$$-\nabla\left(2\eta D\left(V^{k+1}\right)\right) - r_1 \nabla\nabla \cdot V^{k+1} = F - \gamma c \delta_\Gamma \vec{n} + \nabla P^k \tag{2.24}$$

3: $P^{k+1} \leftarrow P^k - r_2 \nabla \cdot V^{k+1}$

4: $err = \frac{\|P^{k+1} - P^k\|_2^2}{\|P^k\|_2^2}$

5: $i \leftarrow i + 1$

6: **fin tant que**

du cas que nous voulons résoudre. Une technique utilisée durant ce doctorat est de fixer lors d'un premier calcul la tolérance à zéro afin d'estimer une tolérance numérique permettants d'obtenir un état quasistationnaire. C'est cette tolérance ainsi déterminée qui sera utilisée dans la suite des calculs.

Les paramètres r_1 et r_2 sont des paramètres à fixer par l'utilisateur. On posera durant ce doctorant que ces paramètres sont égaux à la viscosité (ou la moyenne des viscosités le cas échéant).

2.4.2 Pénalisation

La pénalisation est la méthode cherchant à imposer une vitesse en une sous partie du domaine de calcul. On peut être amené à vouloir imposer ces vitesses lorsqu'on fait face à une zone dont la vitesse est connue (généralement nulle pour simuler la présence d'un obstacle) ou lorsque - par exemple - un sous domaine du domaine de calcul obéit à une loi différente de celle du fluide. Mettons par exemple un objet en mouvement dont le champ de vitesse soit donné par un calcul extérieur, alors la pénalisation sera une méthode pour - tout en résolvant le système de Stokes sur tout le domaine - que cette sous partie soit correctement imposée.

Soit $\Omega_p \in \Omega$ le domaine pénalisé et $\bar{V}$ la vitesse objectif, à divergence nulle.

Nous allons étudier deux méthodes de pénalisation - toutes les deux d'ordre 1 en espace - présentants avantages et inconvénients chacune. La première est l'ajout dans le système de Stokes de ce terme :

$$\frac{\mathbb{1}_{\Omega_p}}{\epsilon}\left(V-\bar{V}\right), \tag{2.25}$$

avec ϵ un terme très petit devant 1. Numériquement, nous calculons en premier lieu la norme L^2 de la diagonale de la matrice du terme suivant :

$$-\nabla\cdot\left(2\eta D\left[V\right]\right)-r\nabla\nabla\cdot V,$$

puis nous posons qu'ϵ est égale à 10^{-10} fois cette norme. Ainsi, numériquement, cela revient à imposer là où $\mathbb{1}_{\Omega_p}=1$, $V=\bar{V}$. Cette méthode a l'immense avantage de permettre un traitement continu du domaine, sans avoir à rechercher si nous sommes en présence ou non du domaine pénalisé car il suffit de donner un masque à la routine d'intégration pour permettre un tel traitement. Lors de la résolution en parallèle par exemple, le traitement est fait de manière continue et donc le développement en est grandement simplifié. Par contre, si le système linéaire global (soit Stokes et pénalisation) est résolu avec une méthode itérative, alors le temps de calcul devient prohibitif. En effet, la présence de ce terme très petit détériore grandement le conditionnement de la matrice. Bien évidemment, lors de l'utilisation de méthodes directes - qui peuvent se montrer très nécessiteuses en mémoire - le problème du conditionnement disparaît.

La deuxième méthode de pénalisation est une gestion beaucoup plus brutale puisqu'il s'agit de découper numériquement le domaine en deux pour construire la matrice d'interpolation correspondant au système qui suit :

$$\begin{array}{c}-\nabla\cdot\left(2\eta D\left[V\right]\right)-r\nabla\nabla\cdot V \text{ si } \left(1-\mathbb{1}_{\Omega_p}\right)=1,\\ V-\bar{V} \text{ sinon.}\end{array} \tag{2.26}$$

Ainsi, nous imposons dans la matrice l'égalité de la vitesse calculée à celle désirée, on pourrait même soustraire ces équations du système, mais cela demanderait une gestion très fine de la mémoire. Cette manière de faire, bien moins élégante que la première, fournit les mêmes résultats mais oblige à tester la nature du domaine en cours d'assemblage, où alors à mettre en place des structures un peu plus compliquées pour le calcul. En revanche, cette méthode a l'avantage de ne pas générer un conditionnement trop fort, et ainsi, l'utilisation de méthodes itératives peut être envisagée.

Une comparaison des deux méthodes est donnée dans la quatrième partie du manuscrit.

2.5 Discrétisation du modèle d'Oldroyd-B

Dans cette partie, nous présentons les discrétisations temporelles et spatiales, respectivement en première et seconde partie, de la loi constitutive de la partie non Newtonienne d'un liquide polymère. Nous notons pour tout ce chapitre les quantités suivant ce formalisme, en utilisant lorsque possible la notation de Voigt :

$$\begin{aligned} V &= (u, v)^t \,, \\ \sigma_p &= \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \end{pmatrix} , \end{aligned} \tag{2.27}$$

pour les quantités 2D. Les quantités 3D-axi sont données par :

$$\begin{aligned} V &= (u, 0, v)^t \,, \\ \sigma_p &= \begin{pmatrix} \sigma_{rr} & 0 & \sigma_{rz} \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ \sigma_{rz} & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{rr} \\ \sigma_{rz} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{\theta\theta} \end{pmatrix} , \end{aligned} \tag{2.28}$$

où u est la vitesse radiale. Bien que la formulation 3D-axi ne fasse pas intervenir de vitesse angulaire, on voit apparaître dans nos équations le terme $\sigma_{\theta\theta}$, les termes non précisés étant nuls.

2.5.1 Discrétisation temporelle

Nous présentons ici une méthode de splitting pour calculer la partie non Newtonienne de l'écoulement. Le tenseur à calculer est le suivant, dans Ω :

$$\begin{aligned} \mathrm{We}\overset{\triangledown}{\sigma_p} + \sigma_p &= 2\ D\left[V\right], \\ \sigma_p(0) &= \sigma_p^0. \end{aligned} \tag{2.29}$$

Imaginons l'état du système connu à l'instant n.

En tout premier lieu, nous allons calculer le terme convectif en utilisant un solveur

RK3/Weno5, lequel a été précisé auparavant :

$$\partial_t \sigma_p + (V.\nabla)\,\sigma_p = 0, \tag{2.30}$$

en utilisant comme condition initiale l'état du tenseur σ_p au temps n, soit σ_p^n. On obtient donc la quantité $\sigma_p^{n+\frac{1}{3}}$ une fois le calcul effectué. Il est à noter que nous transportons chaque coefficient du tenseur σ_p indépendamment.

La deuxième partie du splitting porte sur le terme sous-décrit :

$$\partial_t \sigma_p - \left(\nabla V \sigma_p + \sigma_p \nabla V^t\right) = 0, \tag{2.31}$$

en utilisant comme condition initiale $\sigma_p^{n+\frac{1}{3}}$. On obtient donc, en utilisant un schéma explicite :

$$\sigma_p^{n+\frac{2}{3}} = \sigma_p^{n+\frac{1}{3}} + \delta t \left(\nabla V^n \sigma_p^{n+\frac{1}{3}} + \sigma_p^{n+\frac{1}{3}} \left(\nabla V^n\right)^t\right). \tag{2.32}$$

Et la partie linéaire est donnée par :

$$\mathrm{We}\partial_t \sigma_p + \sigma_p = 2D\left[V\right], \tag{2.33}$$

avec comme état initial considéré : $\sigma_p^{n+\frac{2}{3}}$.

Á ce stade là, il convient de noter que plusieurs discrétisations en temps peuvent être utilisées : implicite, explicite, exponentielle, θ-schéma... On propose donc d'écrire cette partie sous une forme générale, comme suit, des précisions seront données par la suite :

$$\sigma_p^{n+1} = \left(1 - f\left(\Delta t\right)\right)\sigma_p^{n+\frac{2}{3}} + 2f\left(\Delta t\right) D\ \ [V^n] \tag{2.34}$$

avec

$$f\left(\delta t\right) = \begin{cases} \frac{\delta t}{We} & \text{pour le schéma explicite,} \\ \frac{\delta t}{We+\delta t} & \text{pour le schéma implicite,} \\ 1 - e^{-\frac{\delta t}{We}} & \text{pour le schéma exponentiel.} \end{cases} \tag{2.35}$$

L'intérêt d'une telle écriture est de pouvoir passer d'un schéma à un autre sans avoir à modifier le programme une fois écrit et de pouvoir analyser le schéma sans se soucier de la discrétisation de ce terme.

Nous présentons à présent la discrétisation spatiale des différents éléments intervenant ci-dessus.

2.5.2 Discrétisation spatiale : différences finies.

Les discrétisations des différents opérateurs ne sont données que pour le maillage MAC, seul ce maillage ayant été utilisé pour la simulation de ce modèle durant le doctorat.

La première concerne la discrétisation du gradient de vitesse, intervenant dans l'équation (2.31), ici donnée en 2D :

$$\begin{aligned}
\nabla V &= \begin{pmatrix} \partial_x u & \partial_y u \\ \partial_x v & \partial_y v \end{pmatrix}, \\
\partial_x u &\approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x}, \\
\partial_y u &\approx \frac{(u_{i+1,j+1} + u_{i,j+1}) - (u_{i+1,j-1} + u_{i,j-1})}{4\Delta y}, \\
\partial_x v &\approx \frac{(v_{i+1,j+1} + v_{i+1,j}) - (v_{i-1,j+1} + v_{i-1,j})}{4\Delta x}, \\
\partial_y v &\approx \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\Delta y}.
\end{aligned} \tag{2.36}$$

La version cylindrique de cet opérateur ne réclame que l'ajout d'un terme noté $\frac{u}{r}$ puisque le gradient s'écrit :

$$\nabla V = \begin{pmatrix} \partial_x u & 0 & \partial_y u \\ 0 & \frac{u}{r} & 0 \\ \partial_x v & 0 & \partial_y v \end{pmatrix}, \tag{2.37}$$

qui se discrétise naturellement tel que :

$$\frac{u}{r} \approx \frac{u_{i+1,j} + u_{i,j}}{2\,(i + 1/2)\,\Delta r}. \tag{2.38}$$

Ainsi, sur maillage MAC, les dérivées sont toutes situées par construction aux nœuds pression. Nous sommes donc naturellement amenés à discrétiser σ_p en ce lieu là. Ceci nous permet d'éviter le cas pathologique d'une division par zéro sur l'axe de rotation dans le cas cylindrique lors du calcul de u/r.

La seconde discrétisation est la divergence de σ_p. Nous donnons la discrétisation

en 2D :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \sigma_p &= \begin{pmatrix} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} \\ \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} \end{pmatrix}, \\ &\approx \begin{pmatrix} \frac{\sigma_{xx}^{i,j} - \sigma_{xx}^{i-1,j}}{\Delta x} + \frac{\sigma_{xy}^{i,j+1} + \sigma_{xy}^{i,j-1} - \sigma_{xy}^{i-1,j+1} - \sigma_{xy}^{i-1,j-1}}{4\Delta y} \\ \frac{\sigma_{xy}^{i+1,j} + \sigma_{xy}^{i+1,j-1} - \sigma_{xy}^{i-1,j} - \sigma_{xy}^{i-1,j-1}}{4\Delta y} + \frac{\sigma_{yy}^{i,j} - \sigma_{yy}^{i,j-1}}{\Delta y} + \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.39}$$

On observe qu'en écriture axisymétrique, la divergence de σ_p est donnée par :

$$\nabla \cdot \sigma_p = \begin{pmatrix} \frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}}{r} + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} \\ 0 \\ \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial r} + \frac{\sigma_{rz}}{r} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \end{pmatrix}. \tag{2.40}$$

Cette quantité n'intervient que dans le problème de Stokes en qualité de force extérieure. La formulation cylindrique est connue pour présenter une singularité en $r = 0$, c'est pourquoi le système discrétisé sur maillage MAC est entièrement multiplié par le rayon afin d'éviter cette singularité, il faut alors calculer :

$$r\nabla \cdot \sigma_p \approx \begin{pmatrix} i\Delta r \left(\frac{\sigma_{rr}^{i,j} - \sigma_{rr}^{i-1,j}}{\Delta r} + \frac{\sigma_{rr}^{i,j} + \sigma_{rr}^{i-1,j} - \sigma_{\theta\theta}^{i,j} - \sigma_{\theta\theta}^{i-1,j}}{2i\Delta r} + \frac{\sigma_{rz}^{i,j+1} + \sigma_{rz}^{i,j-1} - \sigma_{rz}^{i-1,j+1} - \sigma_{rz}^{i-1,j-1}}{4\Delta z} \right) \\ 0 \\ (i+1/2)\,\Delta r \left(\frac{\sigma_{rz}^{i+1,j} + \sigma_{rz}^{i+1,j-1} - \sigma_{rz}^{i-1,j} - \sigma_{rz}^{i-1,j-1}}{4\Delta z} + \frac{\sigma_{rz}^{i,j} + \sigma_{rz}^{i,j-1}}{2(i+1/2)\Delta r} + \frac{\sigma_{zz}^{i,j} - \sigma_{zz}^{i,j-1}}{\Delta z} \right) \end{pmatrix}. \tag{2.41}$$

Par construction, σ_{rr} et $\sigma_{\theta\theta}$ sont des fonctions paires suivant r. Ainsi, lorsque $i = 0$, le terme $\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}$ est égal à zéro. D'autre part - bien que ce soit surprenant en axi - on observe que $\sigma_{\theta\theta}$ n'est pas nul et impacte le système en axi.

Pour toutes ces quantités, des extrapolations d'ordre un et deux ont été implémentées aux frontières du domaine afin d'imposer les conditions aux limites à l'ordre adéquate.

Conclusion partielle

Nous avons présenté dans cette partie la modélisation des fluides visqueux et spécifié les équations constatant les classes d'écoulements où l'approximation du Reynolds nul peut être effectué, ce qui est le cas pour la microfluidique. De même, nous avons montré comment nous pouvions disposer d'une modélisation continue d'un problème multi-phasique pour l'équation de Stokes. Des travaux ont déjà été menés à Bordeaux sur ces questions mais cela reste un sujet d'actualité concernant les points suivant :

- gestion des rapports de viscosité,
- gestion de la tension de surface.

En effet, si nous sommes en présence d'un de ces deux cas, la vitesse n'est plus dérivable à l'interface et la résolution numérique **à l'ordre deux** d'un tel système devient problématique. Dans [13, 54, 56], des solutions ont été proposées, consistants à moyenner la viscosité en des points inconnus ou encore à lisser la tension de surface afin de générer, d'une force surfacique, une force volumique. Cependant, comme nous le verrons, ces méthodes ne permettent pas d'obtenir des résolutions numériques à l'ordre deux en cas de ratio de viscosité trop important ou de tension de surface.
Récemment, dans [39, 58], de nouvelles formulations nommées "méthodes volumes finis/ éléments finis mixtes" ont été proposées pour les équations elliptiques. Ces formulations utilisent des représentations locales de la solutions en utilisant les conditions d'interfaces (saut, continuité...) et permettent d'obtenir, en norme L^2 et L^∞ l'ordre deux. **La seconde partie du manuscrit est dédiée à l'étude des écoulements bifluides, en présentant en premier lieu une implémentation 3D-axisymétrique sur maillage MAC de l'équation de stokes puis l'extension de la méthode mixte au problème de Stokes, en 2D et 3D-axisymétrique.**

Nous avons aussi dans cette partie présenté les équations permettant de simuler les fluides viscoélastiques en construisant le modèle d'Oldroyd-B. Ce modèle met en avant deux paramètres, un rapport de viscosité et le nombre de Weissenberg. Le

nombre de Weissenberg est connu et étudié [18] pour les difficultés en simulation qu'il génère, mais ne rentre pas dans le cadre de notre étude. Ainsi, nous avons restreint notre champ d'étude aux écoulements viscoélastiques à petit nombre de Weissenberg.

Nous avons aussi décrit l'évolution des micelles géantes par le modèle de Giesekus dont le modèle d'Oldroyd-B est une spécification. Les micelles géantes sont des polymères ayants la capacité de se réordonner spatialement, permettant ainsi de présenter une contrainte en cisaillement qui ne soit pas une fonction strictement croissante au regard du cisaillement. Afin d'observer ce caractère non monotone, ce qui est l'intérêt dans la simulation de telles micelles, nous devons faire face à de petits rapports de viscosités. Numériquement, ce rapport de viscosité est connu pour générer une condition nécessaire de stabilité, condition décrite en [13]. **La troisième partie de ce manuscrit s'attachera donc à chercher une méthode numérique pour s'affranchir de cette condition tout en conservant la stabilité.** Le deuxième chapitre de cette partie a été axé sur la présentation d'outils numériques classiques que nous mettons à notre disposition pour la suite de ce manuscrit.

Deuxième partie

Méthode mixte éléments finis/volumes finis d'ordre deux pour les écoulements bifluides

Introduction

Nous allons dans cette partie étudier le comportement des écoulements bifluides Newtonien. Considérons pour fixer les idées un tube dans lequel s'écoule de l'huile et de l'eau. Comme chacun sait, ces deux fluides sont immiscibles et possèdent des viscosités différentes.

De plus, à la surface de séparation - l'interface nommée Γ localisée par la fonction $\mathbb{1}_\Gamma$ - apparaît une force surfacique nommée *tension de surface* qui aux petites échelles joue un rôle considérable dans la dynamique de l'écoulement. Ainsi, le système étudié, construit en (1.76), est le suivant :

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (2\eta D\left[V\right]) + \nabla P &= F - \mathbb{1}\gamma c\vec{n}, \\ \nabla \cdot V &= 0. \end{aligned} \tag{42}$$

Système auquel il convient d'adjoindre des conditions limites pour la vitesse.

Dans les travaux qui ont précédés sur la question des écoulements bifluides, notamment à Bordeaux, la discrétisation spatiale a été exclusivement faite sur maillage MAC [13, 54]. L'intérêt d'une telle discrétisation est le comportement numérique très robuste en monofluide, connu et maîtrisé. En bifluide, cette discrétisation spatiale force l'utilisateur à utiliser des jeux de moyennes harmoniques pour la discrétisation de la viscosité, jeu provenant d'une évaluation $1D$ de la situation et ne trouvant pas de justification autre que l'extension au multi-D du cas $1D$. D'autre part, le terme de tension de surface était lissé, transformant ainsi un effet surfacique en effet volumique très localisé. De fait, le calcul auprès de l'interface était faussé par ce lissage.

Nous proposons dans cette partie une autre forme de discrétisation, où les variables en vitesses sont situées aux mêmes nœuds, formants les *mailles duales*, alors que les autres quantités sont au centre de ces mailles duales (σ^E et pression notamment). Nous suivons un raisonnement analogue à [39] dans lequel les auteurs proposent de donner à la solution une représentation locale basée sur les informations à notre disposition et d'utiliser cette représentation dans les intégrations dues à la méthode des volumes finis. Ainsi, nous pouvons munir la représentation d'informations diverses, notamment les conditions d'interface (continuité de la vitesse - ou non si on le désire, saut de la pression, discontinuité de la viscosité...). Connue pour fournir potentiellement des résultats inutilisables pour la pression (apparition de champs de pressions découplés de gradients identiques) cette méthode de discrétisation se révèle stabilisée - pour la pression - à cause de l'interface et des représentations. Cette méthode fait espérer deux points : l'ordre deux en espace, en norme L^2 et L^∞, mais aussi une matrice liée au système linéaire de bande connue

et constante, information très utile en algèbre linéaire pour le choix de la méthode de résolution ou encore de la méthode de stockage. Nous n'avons pas besoin en effet avec cette méthode de rajouter des points de discrétisations, la taille de notre système linéaire est connu.

Nous allons dans un premier chapitre présenter les difficultés relatives à la simulation d'une interface ainsi que de son transport. Le deuxième chapitre sera dévolu à la résolution de l'équation de Stokes sur maillage Cartésien décalé, en géométrique axisymmétrique. **Le troisième chapitre présentera la formulation d'une méthode mixte volumes finis/éléments finis sur maillage cartésien, laquelle a pour ambition de fournir des résultats numériques à l'ordre 2, en présence de ratio de viscosité de part et d'autre de l'interface ainsi que de tension de surface.**

Chapitre 1

Questions de transport

Sommaire

1.1 Connexité 61

1.2 Tension de surface 63

Ce chapitre a pour objectif de présenter deux effets dus à la présence de l'interface dans les simulations.

Le premier est relatif aux effets de ruptures de jet ou de coalescence de bulles et est un effet induit directement par le modèle : physiquement, on observe aisément des jets se rompre - à la sortie du robinet simplement - ou des bulles coalescer - dans la vinaigrette pour les applications courantes, mais aussi parfois, il est impossible de faire coalescer deux bulles sans intervention spécifique, voir Fig: 1.3. Le modèle utilisé pour simuler les écoulements multiphasiques ne dispose d'aucun mécanisme pour décrire ces phénomènes, il convient donc de préciser son comportement lorsque la situation critique - rupture ou coalescence - intervient.

Le second est un effet numérique, portant sur la stabilité du schéma en présence de tension de surface.

1.1 Connexité

Mathématiquement, une bulle est un objet connexe.

Proposition 1 *On dira qu'un espace topologique (X, O) est connexe s'il vérifie l'une des conditions suivantes :*

- *si X est la réunion de deux ouverts disjoints, alors l'un de ces deux ouverts est vide ou égale à X,*
- *si l'on considère $\{0; 1\}$ muni de la topologie discrète et $f : X \to \{0; 1\}$ une application continue, alors f est constante sur X,*

– *Les seuls ensembles à la fois ouverts et fermés de X sont X lui même et l'ensemble vide.*

On dispose aussi à propos des connexes du théorème suivant :

Théorème 1 *L'image d'un connexe par une application continue est un sous-ensemble connexe de l'espace image de cette application.*

Le transport par un champ de vitesse régulier est une application continue. Ainsi, si nous sommes en présence d'un champ de vitesse régulier, le transport ne permettra pas de simuler la coalescence de deux gouttes. La coalescence de bulle ou bien la rupture d'un jet s'accompagne forcément d'une singularité du champ de vitesse.

On trouve dans la littérature [54, 9] des exemples de coalescence ou de rupture de jet. La raison pour laquelle ces effets sont possibles est numérique, ils n'appartiennent pas au modèle : aucune loi pour la coalescence ou la rupture n'est intégrée au modèle, son comportement est presque imprévisible pour nous : la coalescence (resp. la rupture) peut intervenir ou non, cela dépend de la discrétisation. Dit autrement, le calcul discret commet suffisamment d'erreurs pour permettre d'éviter cette singularité.

Nous allons préciser deux points : le premier est le piège numérique de la singularité, le second est la raison pour laquelle la coalescence ou la rupture de jet peut être envisagée parfois numériquement.

Piège numérique L'application transport n'est numériquement stable que si nous posons que le pas de temps est inférieur à la CFL. Cette CFL s'écrit :

$$\delta t \leq \frac{h}{\max\left(|V|\right)} \tag{1.1}$$

où h est le pas d'espace.

La première version du piège est de chercher à raffiner le maillage lorsque deux interfaces sont très proches l'une de l'autre. Si le mouvement rapproche les interfaces l'une de l'autre, alors le raffinement sera toujours plus fin. Ainsi, h tendant vers 0 entrainera δt à faire de même : la simulation bute contre la singularité.

La deuxième version du piège est de tout simplement s'approcher au plus prêt de la singularité, soit à trouver une vitesse n'ayant rien à voir avec le monde physique. Cette dernière devenant très importante, de même que précédemment, le pas de temps tendra vers 0 : la simulation bute contre la singularité.

Forcer la coalescence ou la rupture Numériquement, le champ de vitesse n'est pas régulier. On peut dire qu'elle fait sauter la quantité transportée de maille en maille. Si la vitesse moyenne de l'écoulement est grande devant le champ de vitesse généré par la tension de surface, alors on peut être dans la situation où au temps n, la résolution de l'équation de Stokes sera envisageable - les interfaces étant suffisamment distantes, puis le transport de l'interface fera qu'au temps $n+1$, le même calcul pourra être fait, mais la coalescence sera déjà faite. C'est le cas lorsqu'on force deux bulles à rentrer simultanément dans un canal.

On peut aussi être dans le cas où le léger déplacement de l'interface provenant de l'initialisation de l'algorithme du Fast Marching [50] génère numériquement une coalescence.

On trouve physiquement ces comportements, c'est-à-dire que deux bulles côte-à-côte ne coalescent pas. Nous présentons une simulation 2D sur maillage MAC avec procédure de redistanciation où la coalescence n'est pas effectuée en Fig: 1.1. On présente aussi le cas d'une coaslescence réussit sur maillage colocalisé en Fig: 1.2. Le succès ou non de la coalescence n'est pas le fait de la discrétisation spatiale.

On pourra citer [5] pour le cas de deux bulles ne fusionnants pas dans le monde réel, sauf par un effet de chauffe ponctuelle via un laser, voir Fig: 1.3.

Ainsi, au vu des effets observés, nous ne chercherons pas plus à simuler des coalescences ou rupture de jet car le point à améliorer n'est pas numérique, mais vient directement du modèle.

1.2 Tension de surface

Nous avons précisé que le transport était numériquement stable à condition de respecter la CFL (1.1).

De la même manière, la tension de surface peut possiblement induire des effets indésirables. En effet, des ondes capillaires, des ondes petites à l'échelle de l'étude, sont susceptibles de se propager et surtout de s'amplifier, déstabilisant ainsi tout le calcul.

Condition de Brackbill, Kothe et Zemach Dans un article fondateur relatif à cette instabilité, Brackbill, Kothe et Zemach [7] cherchent à imposer au pas de temps de contenir les ondes capillaires, c'est-à-dire :

$$\frac{C_\gamma \delta t_s}{h} < \frac{1}{2} \tag{1.2}$$

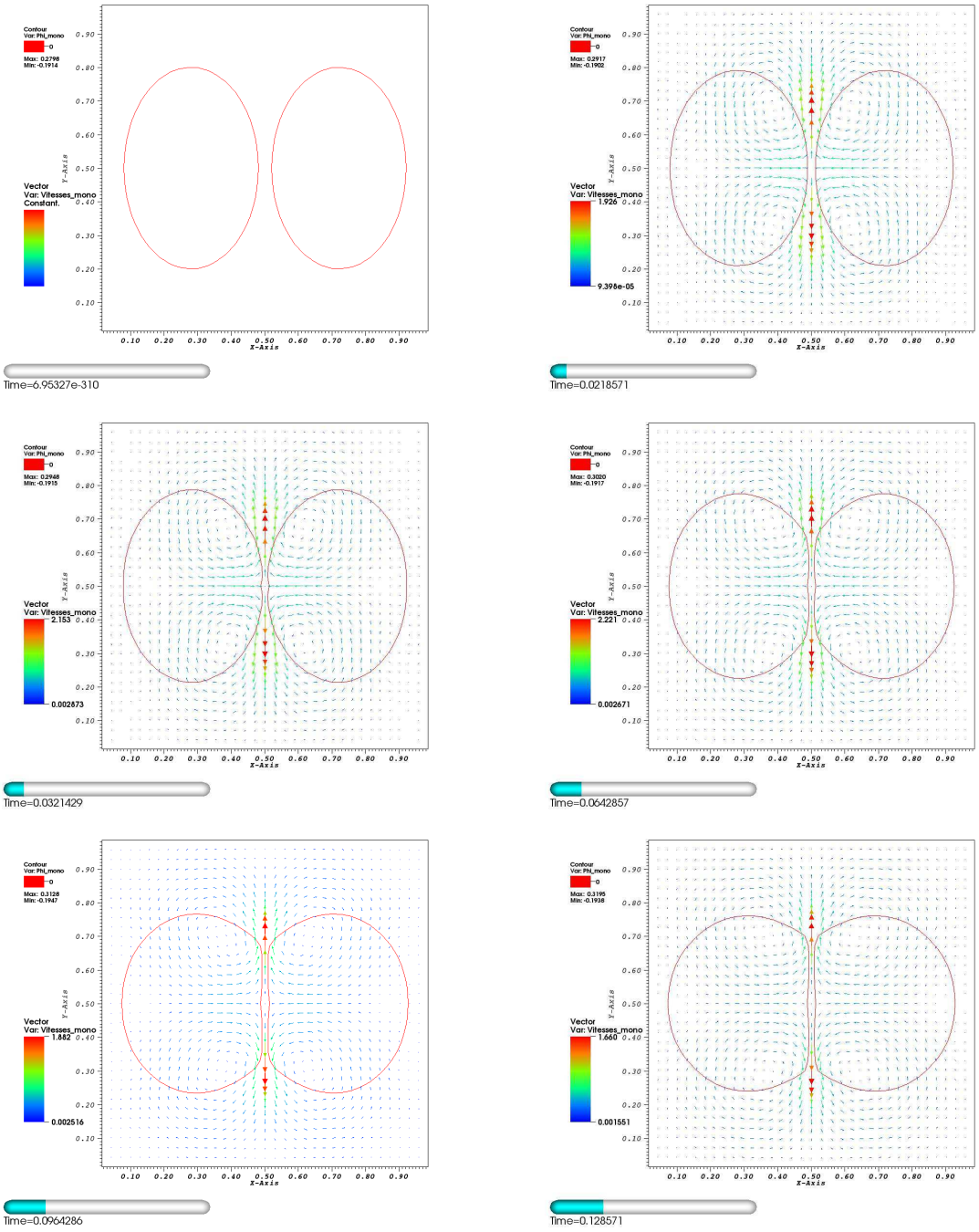


FIG. 1.1: Échec de la coalescence

Le coefficient C_γ est la vitesse de phase de l'onde capillaire. Il est demandé que ce ratio soit inférieur non pas à un, mais à un demi afin de prendre en compte aussi le cas où des ondes arriveraient simultanément dans une cellule, par deux arrêtes opposées en dimension 2 (deux faces opposées en dimension 3) On trouve dans [17]

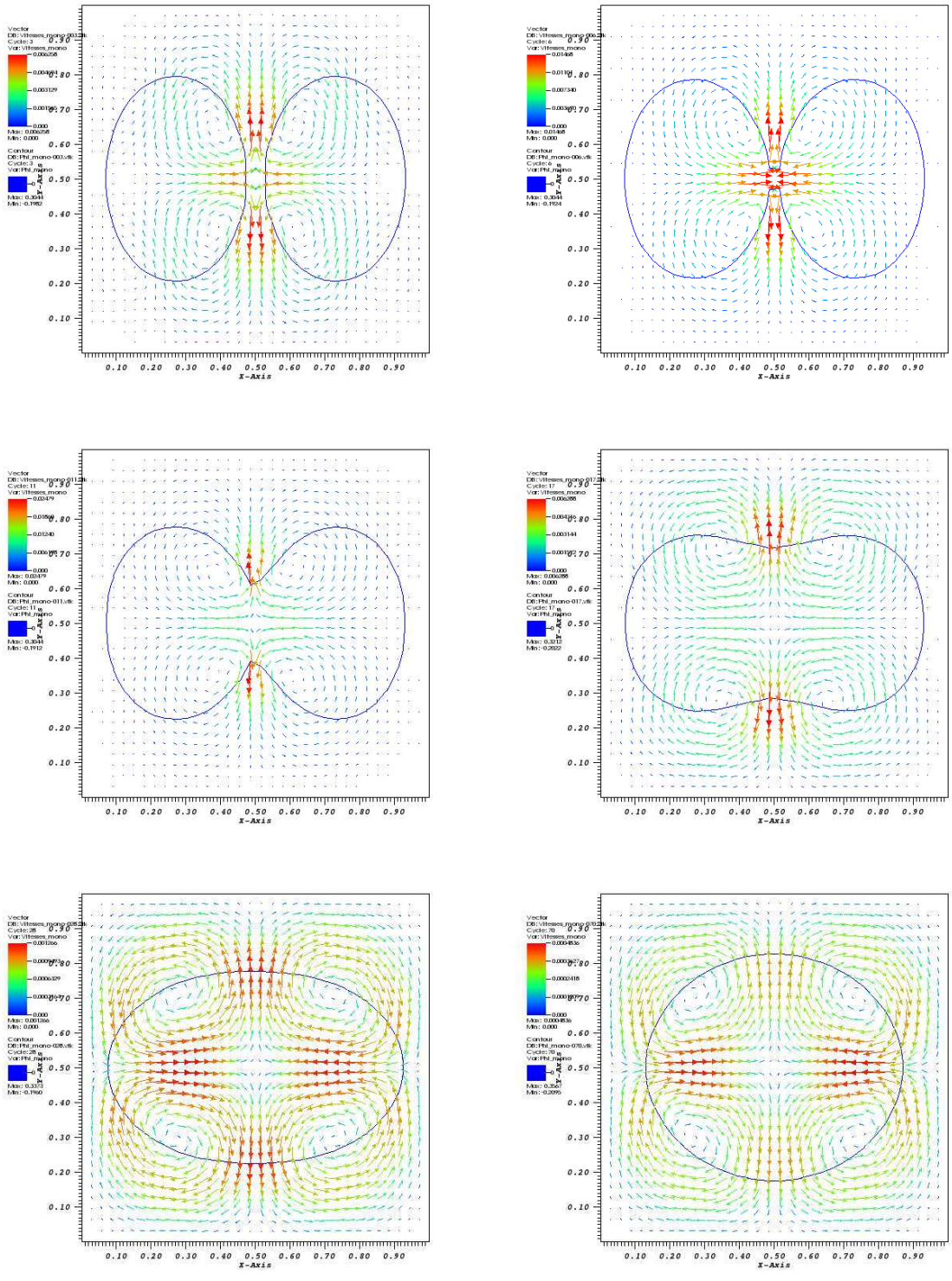


FIG. 1.2: Succès de la coalescence. On observe cependant une perte de symétrie au cours de la simulation.

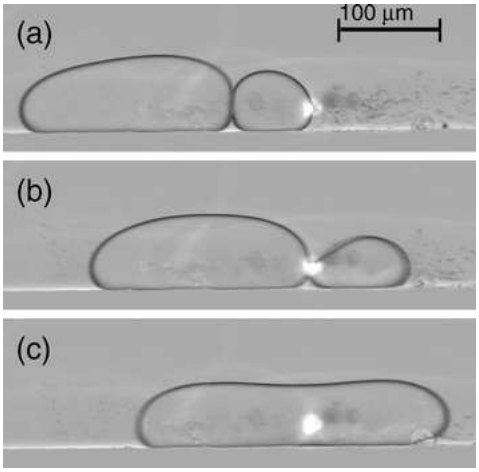


FIG. 1.3: Coalescence par chauffe ponctuelle de l'interface à l'aide d'un laser. L'écoulement va de gauche à droite, la coalescence a lieu au moment où les interfaces passent sur la source de chaleur. Source [5]

une estimation de cette valeur, soit :

$$C_\gamma = \sqrt{\frac{\gamma k}{\rho_1 + \rho_2}}, \tag{1.3}$$

avec γ la tension de surface, k le nombre d'onde et les ρ_i les densités des fluides. En cherchant à maximiser C_γ, c'est à dire en posant $k = \frac{\pi}{h}$, on trouve alors comme condition :

$$\delta t_s < \sqrt{\frac{\frac{(\rho_1+\rho_2)}{2} h^3}{2\pi\gamma}}. \tag{1.4}$$

Dérivation d'une condition de stabilité, Galusinski et Vigneaux [20] Du fait de la nature de notre étude, la condition donnée par Brackbill et al., extrêmement restrictive, peut être ré-écrite en prenant en compte la qualité *bas Reynolds* de notre écoulement. En effet, pour la classe d'écoulement à bas Reynolds, la forme de l'interface évolue généralement rapidement vers des profils stationnaires, surtout dans les canaux rectilignes. Dans [56, 20] C. Galusinski et P. Vigneaux ont démontré que l'on pouvait aussi poser comme condition de stabilité relative à la tension de surface :

$$\delta t \leq c \frac{max\,(\eta_1, \eta_2)}{\gamma} h, \tag{1.5}$$

où c est une constante à déterminer. Nos tests et la littérature nous indiquent que $c = 6$ est une bonne valeur.

Chapitre 2

Discrétisation du système de Stokes bifluide sur maillage MAC en 2D et 3D axisymétrique

Sommaire

2.1 Discrétisation de la tension de surface 70

2.2 Cas 2D 71

2.3 Cas Axisymétrique 72

2.4 Validation du solveur axisymétrique en monofluide . . . 76

On chercher à résoudre sur maillage MAC le système suivant définit dans $\Omega \in \mathbb{R}^n$:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (2\eta D[V]) + \nabla P &= F - \gamma c \delta_\Gamma n, \\ \nabla \cdot V &= 0, \end{aligned} \tag{2.1}$$

doté de conditions limites non homogènes pour la vitesse, avec F un champ continu dans Ω.

Par construction, la discrétisation sur maillage MAC est un schéma d'ordre deux en monofluide, c'est-à-dire sans tension de surface ni ratio de viscosité. On présente en Fig: 2.1 la structure spatiale de la discrétisation. On présentera en premier lieu la gestion de la tension de surface sur un tel maillage, puis après un bref aperçu des calculs en 2D, nous détaillerons l'implémentation en 3D-axi. Enfin, nous présenterons des tests de convergence en monofluide afin de valider le solveur 3D-axi. Les calculs en bifluide seront effectués dans les chapitres suivants.

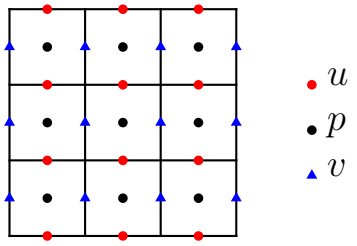


FIG. 2.1: Discrétisation MAC. $h = \Delta x = \Delta h$.

2.1 Discrétisation de la tension de surface

La tension de surface : sa difficulté réside dans le fait que l'interface est une variété de dimension $n-1$ plongée dans un espace Euclidien de dimension n. Autrement dit, nous sommes face à une force surfacique, là où nous ne pouvons que gérer des forces volumiques du fait du schéma.

Commençons notre étude en présentant quelques outils mathématiques : Nous utilisons un résultat présenté dans [51] s'énonçant, pour une fonction g continue et dérivable :

$$\int_{\mathbb{R}} g(x)\,\delta(f(x))\,dx = \frac{g(0)}{|f'(0)|}$$

où f est une fonction régulière qui ne s'annule qu'en zéro et δ la distribution de Dirac, définie par :

$$\langle \delta; \phi \rangle = \phi(0), \tag{2.2}$$

pour toute fonction continue.

Nous définissons aussi la fonction Heaviside :

$$H(x) = \begin{cases} 0, & \text{si x } \leq 0, \\ 1, & \text{sinon.} \end{cases} \tag{2.3}$$

La relation entre la masse de Dirac et la fonction Heaviside, au sens des distributions, est :

$$\delta(x) = H'(x) \tag{2.4}$$

ou encore :

$$\delta(\phi)\,\nabla(\phi) = \nabla H(\phi). \tag{2.5}$$

Il s'agit donc de gérer le terme de tension de surface grâce à un schéma Volumes-Finis :

$$\begin{aligned}\int_\Gamma \gamma c\, \vec{n}|_\Gamma \, dS &= \int_\Gamma \gamma c \frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|} ds, \\ &= \int_\Omega \gamma c \nabla\phi \delta\left(\phi\right) dx, \\ &= \int_\Omega \gamma c \nabla H\left(\phi\right) dx,\end{aligned} \tag{2.6}$$

Évidemment, ceci ne lisse en rien la tension de surface, et ainsi, au lieu d'utiliser la "vraie" version de la fonction Heaviside, nous utilisons une version lissée, soit :

$$H_\epsilon\left(x\right) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < -\epsilon \\ \frac{1}{2}\left(1 + \frac{x}{\epsilon} + \frac{sin\left(\pi\frac{x}{\epsilon}\right)}{\pi}\right) & \text{si } |x| \leq \epsilon \\ 1 & \text{si } x > \epsilon \end{cases} \tag{2.7}$$

Numériquement, on posera $\epsilon = 3/2h$, ce qui a pour effet de lisser la fonction Heaviside sur 3 mailles. On notera que ce n'est pas la seule méthode existante pour lisser une fonction Heaviside, d'autres se basent sur des représentations polynomiales ou exponentielles pour des résultats analogues. Afin d'implémenter ce schéma, on ajoutera au champ de force volumique le champ calculé par l'utilisation de la fonction Heaviside lissée.

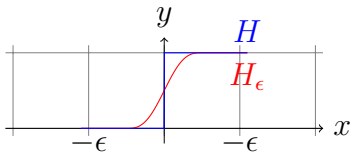


FIG. 2.2: Heaviside en bleu (trait plein), Heaviside lissée en rouge (gris)

2.2 Cas 2D

Afin de nous familiariser avec ces maillages, nous allons commencer par présenter le calcul de la divergence de la vitesse sur ces maillages, située aux nœuds pression. L'équation ci-après est la version discrète de celle donnée en Algo: 1.

$$P_{i,j}^{k+1} = P_{i,j}^{k} - r_2 \left(\frac{u_{i+1,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k+1}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1}^{k+1} - v_{i,j}^{k+1}}{\Delta y} \right). \tag{2.8}$$

Il convient de préciser que le point $P_{i,j}$ est situé au centre de la maille, $u_{i,j}$ sur l'arrête de gauche et $v_{i,j}$ sur l'arrête du bas, voir Fig: 2.1.

La partie centrale du problème est maintenant la mise sous forme matricielle de

$$-\nabla \cdot \left(2\eta D\left[V^{k+1}\right]\right) - r_1 \nabla\nabla \cdot V^{k+1} = -\nabla P^k + F + \gamma\, \vec{n}|_\Gamma\, \delta\,(\phi = 0) \tag{2.9}$$

Cette discrétisation est entièrement décrite par P. Vigneaux [56] ou encore S. Tancogne en 3D [54]. Nous allons nous intéresser à la formulation axisymétrique que nous avons implémentée dans *eLYSe* .

2.3 Cas Axisymétrique

Nous nous plaçons dans une repère cylindrique (r, θ, z), avec r le rayon, θ l'angle de rotation et z l'altitude, comme décrit en Fig: 2.3. Dans le cas axisymétrique,

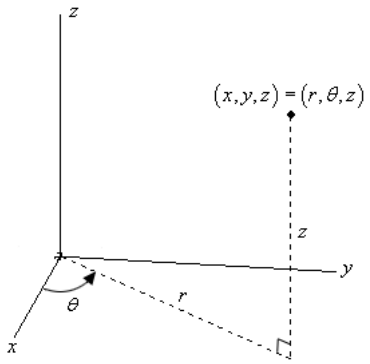


FIG. 2.3: Repère cylindrique

nous considérons qu'aucune variation θ n'intervient. Écrire ainsi nos équations nous amène à constater que le problème se réduit à une écriture en deux dimensions dans le plan (r, z).. Ainsi, l'intérêt d'une telle écriture est qu'elle permet à un coût de calcul 2D de faire face à un cas particulier 3D. Par symétrie, en écrivant $V = (V_r, V_z)^t$, où V_r est la vitesse radiale et V_z la vitesse verticale, nous avons que V_r est une fonction impaire et V_z est une fonction paire. D'autre part, il existe une singularité en $r = 0$ dans cette formulation, nous obligeant à multiplier le système par le rayon afin de l'éviter. Nous donnons ici une version semi-discrétisée de l'équation de Stokes écrite dans le formalisme du Lagrangien Augmenté exposé en première partie, au chapitre

2 :

$$
\begin{aligned}
-r\frac{\partial}{\partial r}\left(2\eta_s\frac{\partial V_r^{k+1}}{\partial r}\right) - r\frac{\partial}{\partial z}\left[\eta_s\left(\frac{\partial V_r^{k+1}}{\partial z}+\frac{\partial V_z^{k+1}}{\partial r}\right)\right] - 2\eta_s\left(\frac{\partial V_r^{k+1}}{\partial r}-\frac{V_r^{k+1}}{r}\right) \\
- r_1 r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial V_r^{k+1}}{\partial r}+\frac{V_r^{k+1}}{r}+\frac{\partial V_z^{k+1}}{\partial z}\right) = -r\frac{\partial P^k}{\partial r} + rF_r \\
-r\frac{\partial}{\partial z}\left(2\eta_s\frac{\partial V_z^{k+1}}{\partial z}\right) - r\frac{\partial}{\partial r}\left[\eta_s\left(\frac{\partial V_r^{k+1}}{\partial z}+\frac{\partial V_z^{k+1}}{\partial r}\right)\right] - \eta_s\left(\frac{\partial V_r^{k+1}}{\partial z}-\frac{\partial V_z^{k+1}}{\partial r}\right) \\
- r_1 r\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial V_r^{k+1}}{\partial r}+\frac{V_r^{k+1}}{r}+\frac{\partial V_z^{k+1}}{\partial z}\right) = -r\frac{\partial P^k}{\partial z} + rF_z \\
P^{k+1} = P^k - r_2\left(\frac{\partial V_r^{k+1}}{\partial r}+\frac{V_r^{k+1}}{r}+\frac{\partial V_z^{k+1}}{\partial z}\right)
\end{aligned}
\tag{2.10}
$$

où F contient les forces volumiques (comme la gravité) ainsi que les termes lissés de tension de surface, voir (2.7).

D'après la Fig: 2.1, on remarque que les points pressions ne sont pas placés sur le bord du domaine. Ainsi, lors de l'actualisation de la pression au calcul de la divergence de la vitesse, la division par le rayon n'entraine pas de singularité.

Ainsi écrit, le système à résoudre s'écrit de manière discrète :

$$
\begin{aligned}
-2\frac{\Delta z}{\Delta r}r_i^{V_r}\left[\eta_{i,j}\left(V_{r_{i+1,j}}^{k+1}-V_{r_{i,j}}^{k+1}\right)-\eta_{i-1,j}\left(V_{r_{i+1,j}}^{k+1}-V_{r_{i,j}}^{k+1}\right)\right] \\
-\Delta r r_i^{V_r}\left[\tilde{\eta}_{i,j+1}^{V_r}\left(\frac{V_{r_{i,j+1}}^{k+1}-V_{r_{i,j}}^{k+1}}{\Delta z}+\frac{V_{z_{i,j+1}}^{k+1}-V_{z_{i-1,j+1}}^{k+1}}{\Delta r}\right)-\tilde{\eta}_{i,j}^{V_r}\left(\frac{V_{r_{i,j}}^{k+1}-V_{r_{i,j-1}}^{k+1}}{\Delta z}+\frac{V_{z_{i,j}}^{k+1}-V_{z_{i-1,j}}^{k+1}}{\Delta r}\right)\right] \\
-2\eta_{i,j}^{V_r}\Delta z\left[\frac{V_{r_{i+1,j}}^{k+1}-V_{r_{i-1,j}}^{k+1}}{2}-\Delta r\frac{V_{r_{i,j}}^{k+1}}{r_i^{V_r}}\right] \\
-r_1 r_i^{V_r}\Delta z\left[\frac{V_{r_{i+1,j}}^{k+1}-2V_{r_{i,j}}^{k+1}+V_{r_{i-1,j}}^{k+1}}{\Delta r}+\frac{1}{2}\left(\frac{V_{r_{i,j}}^{k+1}+V_{r_{i+1,j}}^{k+1}}{r_i}-\frac{V_{r_{i-1,j}}^{k+1}+V_{r_{i,j}}^{k+1}}{r_{i-1}}\right)\right. \\
\left.+\frac{V_{z_{i,j+1}}^{k+1}-V_{z_{i-1,j+1}}^{k+1}+V_{z_{i-1,j}}^{k+1}-V_{z_{i,j}}^{k+1}}{\Delta z}\right] = -\Delta z r_i^{V_r}(P_{i,j}^k-P_{i-1,j}^k)+r_i^{V_r}F_r\Delta r\Delta z
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&-2\frac{\Delta r}{\Delta z}r_i^{V_z}\left[\eta_{i,j}\left(V_{z_{i,j+1}}^{k+1}-V_{z_{i,j}}^{k+1}\right)-\eta_{i,j-1}\left(V_{z_{i,j}}^{k+1}-V_{z_{i,j-1}}^{k+1}\right)\right]\\
&-\Delta z r_i^{V_z}\left[\tilde{\eta}_{i+1,j}^{V_z}\left(\frac{V_{r_{i+1,j}}^{k+1}-V_{r_{i+1,j-1}}^{k+1}}{\Delta z}+\frac{V_{z_{i+1,j}}^{k+1}-V_{z_{i,j}}^{k+1}}{\Delta r}\right)-\tilde{\eta}_{i,j}^{V_z}\left(\frac{V_{r_{i,j}}^{k+1}-V_{r_{i,j-1}}^{k+1}}{\Delta z}+\frac{V_{z_{i,j}}^{k+1}-V_{z_{i-1,j}}^{k+1}}{\Delta r}\right)\right]\\
&-\eta_{i,j}^{V_z}\Delta z\left[\frac{\Delta r}{2}\left(V_{r_{i,j}}^{k+1}+V_{r_{i+1,j}}^{k+1}-V_{r_{i,j-1}}^{k+1}-V_{r_{i+1,j-1}}^{k+1}\right)+\frac{\Delta z}{2}\left(V_{z_{i+1,j}}^{k+1}-V_{z_{i-1,j}}^{k+1}\right)\right]\\
&-r_1 r_i^{V_z}\Delta r\left[\frac{V_{r_{i+1,j}}^{k+1}-V_{r_{i,j}}^{k+1}+V_{r_{i,j-1}}^{k+1}-V_{r_{i+1,j-1}}^{k+1}}{\Delta r}+\frac{V_{r_{i,j}}^{k+1}-V_{r_{i,j-1}}^{k+1}+V_{r_{i+1,j}}^{k+1}-V_{r_{i+1,j-1}}^{k+1}}{2r_i}\right.\\
&\left.+\frac{V_{z_{i,j+1}}^{k+1}-2V_{z_{i-1,j}}^{k+1}+V_{z_{i,j-1}}^{k+1}}{\Delta z}\right]=-\Delta r r_i^{V_z}(P_{i,j}^k-P_{i,j-1}^k)+r_i^{V_z}F_z\Delta r\Delta z
\end{aligned}
$$

$$
P_{i,j}^{k+1}=P_{i,j}^k-r_2\left(\frac{V_{r_{i+1,j}}^{k+1}-V_{r_{i,j}}^{k+1}}{\Delta r}+\frac{V_{r_{i+1,j}}^{k+1}+V_{r_{i,j}}^{k+1}}{2r_i}+\frac{V_{z_{i,j+1}}^{k+1}-V_{z_{i,j}}^{k+1}}{\Delta z}\right)
$$

avec :

$$
\left|\begin{array}{l}
\eta_{i,j}^{V_r}=\frac{\eta_{i+1,j}+\eta_{i,j}}{2}\\
\eta_{i,j}^{V_z}=\frac{\eta_{i,j+1}+\eta_{i,j}}{2}\\
\tilde{\eta}_{i,j}^{V_r}=\frac{\eta_{i-1,j}\eta_{i-1,j-1}}{\eta_{i-1,j}+\eta_{i-1,j-1}}+\frac{\eta_{i,j-1}\eta_{i,j}}{\eta_{i,j-1}+\eta_{i,j}}\\
\tilde{\eta}_{i,j}^{V_z}=\frac{\eta_{i-1,j-1}\eta_{i,j-1}}{\eta_{i-1,j-1}+\eta_{i,j-1}}+\frac{\eta_{i-1,j}\eta_{i,j}}{\eta_{i-1,j}+\eta_{i,j}}
\end{array}\right|
\left|\begin{array}{l}
r_i^{V_r}=i\Delta r\\
r_i^{V_z}=\left(i+\frac{1}{2}\right)\Delta r\\
r_i=\left(i+\frac{1}{2}\right)\Delta r
\end{array}\right.
$$

Ces quantités - triviales en ce qui concerne les rayons - sont particulières pour les viscosités. En effet, l'idée est de disposer de la viscosité en des points du maillage où cette dernière n'est pas définie - tout en conservant les flux [14], ce qui interdit de se contenter de la position de l'interface pour déterminer la valeur de la viscosité. C'est la raison pour laquelle des moyennes sont effectuées. La raison pour laquelle nous préférons des moyennes harmoniques est basée sur la rechercher de la conservation des flux en équivalent 1D (soit par direction). Cette manière de faire n'est pas dictée par un impératif, numérique ou autre, et n'a pour intérêt que de reproduire le cas 1D. A notre connaissance, il n'existe pas de façon "canonique" de procéder.

Nous nous sommes placés dans un espace à deux dimensions, typiquement sur un rectangle, de dimension $[0,R]\times[0,Z]$, avec $r\in[0,R]$ et $z\in[0,Z]$, où R et Z sont des réels strictement positifs. En $r=0$, nous devons imposer des conditions de symétrie du fait de l'axe de rotation. Les autres bords seront munis de conditions de type Dirichlet.

Traitement de l'axe de symétrie En considérant la parité de chaque composante du vecteur vitesse, nous avons que la vitesse radiale sur l'axe de symétrie est

nulle. Nous imposons donc ce résultat comme une condition de Dirichlet pour cette composante. D'autre part, nous avons à prendre en compte la parité de V_z sur l'axe $r = 0$ lors de l'imposition des conditions limites. Ceci revient à poser :

$$\begin{aligned} V_{z_{i=-1,j}} &= V_{z_{i=0,j}}, \\ V_{r_{i=-1,j}} &= V_{r_{i=1,j}}. \end{aligned} \tag{2.11}$$

Ceci nous permet de traiter l'axe de rotation avec des conditions d'ordre 2.

Gestion de la condition de Dirichlet sur les bords Lorsque la composante considérée touche un des trois bords restants, c'est-à-dire que le point n'est pas situé à un demi pas d'espace du bord, nous imposons des conditions limites de type Dirichlet non homogène. Si la composante est située à un demi pas d'espace du bord (la vitesse radiale sur les bords haut et bas du domaine par exemple), nous imposons alors une condition limite - notée $cl(i)$, telle que définie sur la figure Fig: 2.4. On définit alors une extrapolation à l'ordre deux de la composante considérée pour assurer la valeur imposée sur le bord du domaine, telle que, pour le bord du bas par exemple :

$$V_{r_{i,-1}} = \frac{1}{3}\left(8cl(i) - 6V_{r_{i,0}} + V_{r_{i,1}}\right). \tag{2.12}$$

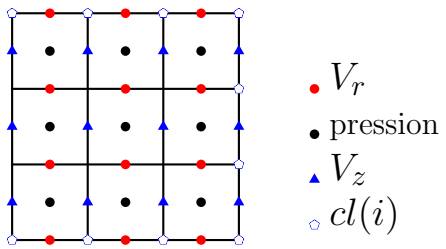


FIG. 2.4: Discrétisaion MAC avec les conditions limites

2.4 Validation du solveur axisymétrique en monofluide

Dans toute cette partie, $R = 4\ 10^{-4}m$ décrit le rayon du capillaire et la viscosité vaut $1\ 10^{-3}$, sauf indications contraires. Tous les cas tests sont faits sur un capillaire dont le rapport Z/R est de 5.
On s'attachera à montrer la convergence d'ordre 2 en espace pour les cas test suivants :

- Un cas sinusoïdal avec une vitesse radiale nulle,
- Un cas sinusoïdal complet,
- Un cas polynomial.

Nous avons mis en place une procédure pour nous permettre des simulations bifluides, mais nous ne présenterons ces résultats que dans le chapitre suivant, afin de les comparer au solveur décrit par la suite.

On cherche un champ de vitesse à divergence nulle avec les bonnes propriétés aux bords (vitesse nulle en $r = R$, parité respectée...). Pour ce faire, on se dote d'une fonction courant Ψ puis on pose :

$$\begin{cases} V_r(r,z) = -\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial \Psi(r,z)}{\partial z}, \\ V_z(r,z) = \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial \Psi(r,z)}{\partial r}. \end{cases} \tag{2.13}$$

On remarque qu'en écrivant la vitesse de cette sorte, on s'assure d'une divergence nulle, en effet :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot V &= \frac{\partial V_r}{\partial r} + \frac{V_r}{r} + \frac{\partial V_z}{\partial z}, \\ &= \frac{\partial}{\partial r}\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial \Psi(r,z)}{\partial z}\right) - \frac{\partial \Psi(r,z)}{r^2 \partial z} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \Psi(r,z)}{\partial r}\right), \\ &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial \Psi(r,z)}{\partial z} - \frac{1}{r}\frac{\partial^2 \Psi(r,z)}{\partial r \partial z} + \frac{-\Psi(r,z)}{r^2 \partial z} + \frac{1}{r}\frac{\partial^2 \Psi(r,z)}{\partial z \partial r}, \\ &= 0. \end{aligned} \tag{2.14}$$

Nous disposons donc du champ de vitesse sur tout le domaine une fois la fonction courant définie, il nous faut calculer les forces extérieures. Nous posons alors que le gradient de pression dans l'équation de Stokes est nul, et nous trouvons :

$$-\eta \Delta V = F. \tag{2.15}$$

Ainsi, en se donnant une fonction Ψ respectant les parités, on peut se construire différents tests de validation. Il convient tout de même de préciser que pour valider l'implémentation, il faut initialiser le champ de pression à une valeur éloignée d'une constante, car sinon la convergence est immédiate et le processus itératif n'est pas pris en compte.

Nous présentons dans la suite - pour différents cas test où la fonction Ψ sera choisie arbitrairement - les erreurs L^2 relatives. L'ordre de convergence est défini comme la racine carrée du rapport de l'erreur relative pour deux simulations dont les pas d'espace ont un rapport 2.

Cas sinusoïdal 1 On se dote de la fonction courant $\Psi = r^4 \cos^3 \tilde{r}$, avec $\tilde{r} = \frac{\pi r}{2R}$, on obtient donc :

$$\begin{cases} V(r,z) = \begin{pmatrix} 0 \\ r^2 \cos^2 \tilde{r}(4\cos\tilde{r} - 3\tilde{r}\sin\tilde{r}) \end{pmatrix}, \\ f1\,(r,z) = 0, \\ f2\,(r,z) = 16\cos^3\tilde{r} - 87\tilde{r}\sin\tilde{r}\cos^2\tilde{r} + 33\tilde{r}^2(3\sin^2\tilde{r} - 1)\cos\tilde{r} \\ \qquad\qquad + 3\tilde{r}^3\sin\tilde{r}(6\cos^2\tilde{r} - 3\sin^2\tilde{r} + 1). \end{cases} \tag{2.16}$$

La simulation d'un tel écoulement nous donne comme résultat :

Nr	Erreur relative L2	$\frac{L2}{Nr*Nz}$	Ordre de convergence de l'erreur L2
15	0,0266795	30,0145	
30	0,00774969	34,8736	1,78352
60	0,00216966	39,054	1,83667
120	0,000576782	41,5283	1,91137
240	0,000148794	42,8527	1,95471

On observe une convergence à l'ordre 2.

Cas sinusoïdal 2 On prend maintenant la même fonction courant que précédemment, mais on la multiplie par l'altitude dans le canal, soit : $\Psi(r,z) = zr^4 \cos^3 \tilde{r}$,

ce qui nous donne :

$$\begin{cases} V(r,z) = \begin{pmatrix} -r^3\cos^3\tilde{r} \\ zr^2\cos^2\tilde{r}(4\cos\tilde{r} - 3\tilde{r}\sin\tilde{r}) \end{pmatrix}, \\ f1\,(r,z) = r\cos\tilde{r}(8\cos^2\tilde{r} - 21\tilde{r}\sin\tilde{r}\cos\tilde{r} + 3\tilde{r}^3(3\sin^2\tilde{r} - 1), \\ f2\,(r,z) = z(16\cos^3\tilde{r} - 87\tilde{r}\sin\tilde{r}\cos^2\tilde{r} + 33\tilde{r}^2(3\sin^2\tilde{r} - 1)\cos\tilde{r}) \\ \qquad\qquad + z(3\tilde{r}^3\sin\tilde{r}(6\cos^2\tilde{r} - 3\sin^2\tilde{r} + 1)), \end{cases} \tag{2.17}$$

avec $f1$ et $f2$ les composantes du vecteur F.

La convergence sur ce cas test est donnée par le tableau qui suit.

Nr	Erreur relative L2	$\frac{L2}{Nr*Nz}$	Ordre de convergence de l'erreur L2
15	0,0258597	29,0921	
30	0,0074797	33,6587	1,78965
60	0,00208941	37,6093	1,83988
120	0,000554943	39,9559	1,91268
240	0,000143104	41,214	1,95528

On observe de la même manière une convergence à l'ordre 2.

Cas polynomial On se donne le jeu suivant, induit par le choix de Ψ :

$$\begin{cases} \Psi(r,z) = r^2z(R^2 - r^2)^2, \\ V(r,z) = \begin{pmatrix} -r(R^2 - r^2)^2 \\ 2(R^2 - 3r^2)(R^2 - r^2)z \end{pmatrix}. \end{cases} \tag{2.18}$$

Nous disposons donc d'un champ de vitesse nulle aux bords, à divergence nulle, respectant les conditions de parités. Les forces extérieures sont données par :

$$F = \begin{pmatrix} -8(2R^2 - 3r^2)r \\ 32(R^2 - 3r^2)z \end{pmatrix}. \tag{2.19}$$

Les résultats de convergence sont alors :

Nr	Erreur relative L2	$\frac{L2}{Nr*Nz}$	Ordre de convergence de l'erreur L2
15	0,00171802	1,93278	
30	0,000282471	1,27112	2,60457
60	5,35676e-05	0,964216	2,39867
120	1,15327e-05	0,830354	2,21563
240	2,68088e-06	0,772094	2,10495

Ce cas test converge de même à l'ordre 2.

Conclusions à propos du solveur axisymétrique de l'équation de Stokes Au vu des résultats de ces différents cas-tests, il semble acquis que le solveur se comporte de manière attendue en mono-fluide : c'est un schéma d'ordre 2 en norme L^2. Des cas-tests de convergence en bifluide seront effectués par la suite, pour les comparer au schéma numérique qui suit.

Chapitre 3

Méthode Volumes/Éléments finis mixtes

Sommaire

3.1 Discrétisation spatiale 82

3.1.1 Éléments finis : représentations des inconnues. 83

3.1.2 Volumes finis : calcul des flux 92

3.1.3 Structure de donnée 98

3.2 Tests et résultats numériques 98

3.2.1 Cas 2D sans interface 98

3.2.2 Cas 2D avec une interface : écoulement de Couette 99

3.2.3 Équation de Laplace 102

3.2.4 Cas axisymétrique sans interface 104

3.2.5 Cas axisymétrique avec une interface 105

3.3 Conclusion 106

On cherche à résoudre le même système qu'au chapitre précédent, voir (2.1), mais sur maillage colocalisé : les nœuds vitesses sont aux mêmes points. Ainsi, chaque fluide en présence est considéré Newtonien.

La méthode développée dans ce chapitre est directement inspirée de [39]. Elle consiste à construire une représentation éléments finis Q_1 par morceaux sur les mailles duales en imposant les conditions de sauts à travers l'interface si nécessaire sur cette représentation. On utilise ensuite ces représentations Q_1 par morceaux sur les mailles duales pour calculer les flux à travers les bords des mailles primales. Ces flux sont les quantités calculées par la formulation volumes finis. Nous allons maintenant détailler cette construction.

3.1 Discrétisation spatiale

Nous définissons la grille sur laquelle nous allons résoudre le problème comme décrit sur Fig: 3.1 :

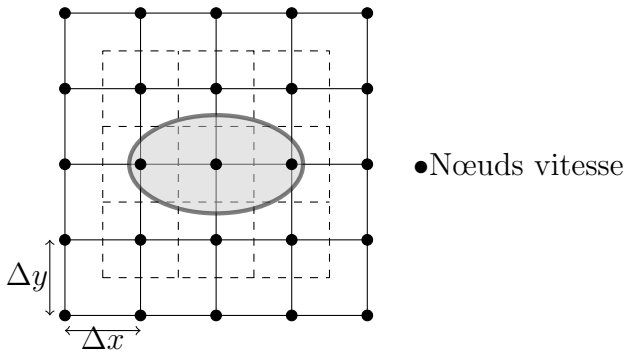


FIG. 3.1: En pointillé : maille primale, trait plein : maille duale, l'ellipse : l'interface

La vitesse est donnée au centre des mailles primales, soit $V_{i,j} \approx V\left(i\Delta x, j\Delta y\right)$ et la pression est donnée sur les mailles duales.

Nous présentons ici un zoom sur les mailles primales :

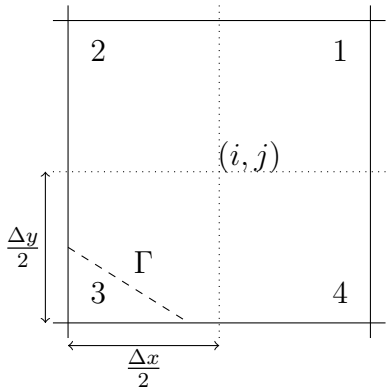


FIG. 3.2: Une maille primale. Numérotés de 1 à 4, les quarts de mailles duales. L'interface - en pointillé - passe au travers du quart de la troisième maille duale.

Étant donné que ce schéma est très dépendant de la configuration spatiale (la position et l'orientation de l'interface), nous nous focalisons sur la discrétisation spatiale au sein de la maille duale, donnée en Fig: 3.3. De cette discrétisation dépend le résultat de nos simulations.

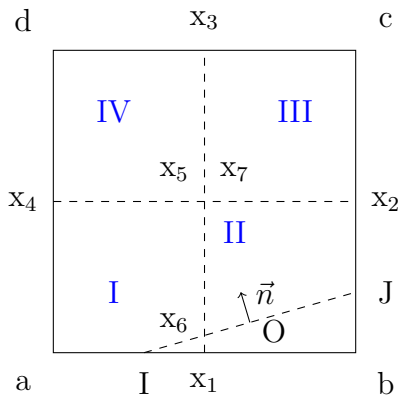


FIG. 3.3: Configuration d'une maille duale traversée (ou non) par l'interface. Les points variables sont x_6, x_7, I, J et O. Le point O est appelé par abus de langage le milieu de l'interface dans la maille duale. Le point x_6, (resp. x_7) est situé à l'intersection du segment $[x_1, x_3]$ (resp. $[x_4, x_2]$) avec l'interface - représentée ici par le segment $[I, J]$ - si présente, sinon ce point est confondu avec le point x_5.

Ainsi, par construction, les nœuds a,b,c, et d - les nœuds vitesse - portent les valeurs de la fonction ϕ. Pour calculer les normales et courbure, on suivra la procédure décrite en partie 1, chapitre 2. Ainsi, les normales verticales (n_y ou n_z) sont aux points x_2 et x_4 tandis que celles horizontales sont aux points x_1 et x3. On calcule ainsi les courbures aux nœuds vitesse. Si d'aventure nous nécessitions une valeur en dehors de ces points (la courbure au point O par exemple), elle sera calculée par interpolation bilinéaire.

3.1.1 Éléments finis : représentations des inconnues.

Le schéma de discrétisation repose entièrement sur la section qui suit. Le but de cette section est de montrer comment nous pouvons approcher la vitesse par une représentation Q_1 sur chaque maille duale. Ainsi, dans un premier temps, nous allons présenter la méthodologie pour exprimer le champ de vitesse dans tout le domaine puis celle utilisée pour exprimer la pression. La partie d'intégration montrera comment de la représentation ainsi formée, nous formons le système linéaire et enfin, on s'attachera à présenter la manière dont le code a été structuré afin de rendre le développement le plus aisé possible.

3.1.1.1 Vitesse

Nous allons nous attacher dès à présent à décrire la représentation de la vitesse dans chaque maille duale. Afin de ne pas confondre les différentes quantités, nous noterons avec un tilde les représentations.

Nous sommes face à deux situations :

– soit la maille duale est coupée par l'interface,
– soit la maille duale est entièrement immergée dans un domaine.

Maille duale libre d'interface La représentation de la vitesse est basée uniquement sur les nœuds a,b,c et d (voir Fig : Fig: 3.3), ce qui nous amène naturellement à utiliser une représentation bilinéaire.

$$\widetilde{V}(x,y) = \alpha + \beta(x - x_0) + \gamma(y - y_0) + \delta(x - x_0)(y - y_0), \tag{3.1}$$

où le point central est donc le point x_5, comme décrit sur Fig: 3.3 : $x_5 = O = (x_0, y_0)^t$, et où chaque lettre grecque représente ici un vecteur. Ainsi, les huit coefficients sont uniquement déterminés par les valeurs aux nœuds. Nous posons, par commodité de notation :

$$\widetilde{V^{k+1}} = f_1\left(V_c^{k+1}\right), \tag{3.2}$$

où V_c^{k+1} représente la valeur de la vitesse aux différents coins de la maille duale, au temps $k+1$ du Lagrangien Augmenté. Cette représentation est la même que celle utilisée par Oevermann et Klein [39]. Ainsi, lorsque nous intégrerons les quatre représentations adjacentes à la maille primale Fig: 3.2, nous disposerons d'un stencil à deux fois neuf points.

Maille duale coupée par l'interface Au lieu d'utiliser l'équation (3.1) nous la ré-écrivons sous la forme :

$$\begin{aligned}\widetilde{V^{k+1}} &= \mathbb{1}_{\Omega_1}\widetilde{V_1^{k+1}} + \mathbb{1}_{\Omega_2}\widetilde{V_2^{k+1}},\\ &= \alpha + \beta(x - x_0) + \gamma(y - y_0) + \delta(x - x_0)(y - y_0),\end{aligned} \tag{3.3}$$

afin d'unifier les notations, avec comme origine du repère local le point O (et non x_5 dans le cas libre d'interface).

La quantité $\widetilde{V_1^{k+1}}$ définit la représentation de la vitesse dans Ω_1 au temps fictif

$k+1$. Nous définissons chaque lettre grecque de la sorte :

$$\alpha = \mathbb{1}_{\Omega_1} \begin{pmatrix} \alpha_1^1 \\ \alpha_2^1 \end{pmatrix} + \mathbb{1}_{\Omega_2} \begin{pmatrix} \alpha_1^2 \\ \alpha_2^2 \end{pmatrix}, \tag{3.4}$$

où α_1^2 est la première composante du vecteur $\vec{\alpha}$ évaluée dans Ω_2.

Ainsi, pour une maille duale traversée par l'interface, la représentation est basée sur les quatre nœuds du maillage, la condition de continuité de la vitesse et le saut du tenseur des contraintes le long de l'interface. On peut grâce à ceci définir une représentation $bi - Q_1$ pour la vitesse, comme celle donnée par (3.3), ainsi, nous avons 18 inconnues dans cette représentation. L'idée de la représentation bi-Q_1 est de donner sur chaque partie de la maille duale une représentation Q_1.

En premier lieu, nous imposons à la représentation la valeur des nœuds, soit par exemple, au nœuds $a = (x_a, y_a)$:

$$\begin{aligned} \widetilde{V^{k+1}}(a) &= V_c^{k+1}, \\ &= \alpha + \beta (x_a - x_0) + \gamma (y_a - y_0) + \delta (x_a - x_0)(y_a - y_0). \end{aligned} \tag{3.5}$$

Le système (3.5) nous fournit *in fine* 8 équations que le jeu des indicatrices définit dans l'équation (3.3) permet de traiter sans spécifier la phase considérée.

Afin d'imposer la condition de continuité de la vitesse à l'interface, nous définissons justement cette vitesse le long de l'interface par une paramétrisation, telle que $\tilde{V}_\Gamma = \tilde{V}(X(t), Y(t))$ avec, pour $t \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} X(t) &= -tn_y + x_0, \\ Y(t) &= tn_x + y_0, \end{aligned} \tag{3.6}$$

où $\vec{n} = (n_x, n_y)^t$ est la normale unitaire à l'interface obtenue par interpolation au nœud O depuis les valeurs calculées par différences finies depuis la fonction distance. L'interface par maille duale est donc représentée par un segment, ce qui est une approximation suffisante d'un arc de cercle. La normale sur l'interface n'est pas constante sur l'arc de cercle, mais l'est sur le segment. Nous avons choisi d'utiliser la normale au point O.

Cette formulation nous permet donc d'écrire :

$$\vec{V}_\Gamma(t) = \vec{\alpha} + t\left(-\vec{\beta} n_y + \vec{\gamma} n_x\right) + t^2 \vec{\delta} n_x n_y. \tag{3.7}$$

Cette expression est quadratique en t, nous avons deux composantes pour la vitesse (u et v), ainsi, afin d'imposer la continuité pour tout t, nous disposons de 6 équations :

$$\begin{aligned} \left[\vec{\alpha}\right]_\Gamma &= 0, \\ \left[-\vec{\beta}n_y + \vec{\gamma}n_x\right]_\Gamma &= 0, \\ \left[\vec{\delta}\right]_\Gamma &= 0. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Afin de fixer les idées à propos de (3.8), nous donnons les deux premières équations, qui s'écrivent sous cette forme :

$$\begin{aligned} \alpha_1^1 - \alpha_1^2 &= 0, \\ \alpha_2^1 - \alpha_2^2 &= 0. \end{aligned} \tag{3.9}$$

Les deux dernières équations ont été simplifiées par $n_x n_y$. En effet, le cas de normales horizontales ou verticales devient pathologique si on n'effectue pas cette simplification car l'équation disparaît.

Nous nous attachons maintenant à décrire le saut du tenseur des contraintes le long de l'interface. Le tenseur des contraintes contient des informations à propos de la vitesse, mais aussi de la pression. Afin de le rendre utilisable dans la formulation, nous allons nous baser sur les relations données par le Lagrangien Augmenté (raison pour laquelle nous définissons la représentation au temps $k+1$), lequel nous précise ceci :

$$P^{k+1} = P^k - r_2 \nabla \cdot V^{k+1},$$

ainsi, en écrivant le saut de σ grâce à sa décomposition, nous trouvons (pour deux fluides Newtoniens) :

$$\begin{aligned} \left[\sigma \cdot \vec{n}\right]_\Gamma &= \gamma c \vec{n}, \\ \left[2\eta D\left[V\right] - \nabla P\right]_\Gamma \cdot \vec{n} &= \gamma c \vec{n}, \\ \left[2\eta D\left[V^{k+1}\right] - \nabla P^{k+1}\right]_\Gamma \cdot \vec{n} &= \gamma c \vec{n}, \\ \left[\left(2\eta D\left[V^{k+1}\right] + r_2 \nabla \cdot V^{k+1}\right) \cdot \vec{n}\right]_\Gamma &= \gamma c \vec{n} - \left[P^k\right]_\Gamma \cdot \vec{n}. \end{aligned} \tag{3.10}$$

Le saut le long de l'interface est homogène à une dérivée de la vitesse, ce qui implique donc que nous faisons face à une relation linéaire en fonction du paramètre t de la paramétrisation. Ainsi, le problème se décompose en un système de quatre équations, qui sont, en posant que la tension de surface et la pression sont des constantes sur

les mailles duales, en utilisant des opérateurs 2D :

$$\begin{aligned}
\left[\left(\left(2\eta + r_2\right)\beta_1 + r_2\gamma_2\right)n_x + \eta\left(\beta_2 + \gamma_1\right)n_y\right] &= \gamma c n_x - \left[P^k\right]_\Gamma n_x, \\
\left[\eta\left(\beta_2 + \gamma_1\right)n_x + \left(\left(2\eta + r_2\right)\gamma_2 + r_2\beta_1\right)n_y\right] &= \gamma c n_y - \left[P^k\right]_\Gamma n_y, \\
\left[\left(\left(2\eta + r_2\right)n_x\delta_1 - r_2 n_y\delta_2\right)n_x + \eta\left(-\delta_1 n_y + \delta_2 n_x\right)n_y\right] &= 0, \\
\left[\eta\left(-\delta_1 n_y + \delta_2 n_x\right)n_x + \left(-\left(2\eta + r_2\right)n_y\delta_2 + r_2 n_x\delta_1\right)n_y\right] &= 0.
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Résumons l'état de notre étude. Nous disposons de :

- deux fois quatre équations pour les nœuds - voir (3.5),
- deux fois trois équations relatives à la condition de continuité de la vitesse - voir (3.8),
- deux fois deux équations relatives au saut du tenseur des contraintes - voir (3.10).

Nous sommes donc en présence de dix-huit équations pour seize inconnues. On remarque que les équations en t du saut de σ peuvent commettre une redite avec celle en t^2 de la continuité de la vitesse en fonction de l'orientation de la normale. Les cas pathologiques sont les suivants : $n_x = \pm n_y$, $n_x = 0$ ou $n_y = 0$, c'est-à-dire lorsque l'interface est verticale, horizontale ou diagonale. On observe immédiatement que le saut de la partie en t de (3.11) devient combinaison linéaire des équations en t^2 de la condition de continuité de la vitesse. Ainsi, pour éviter ces cas pathologiques, nous avons fait le choix de favoriser la continuité de la vitesse en évinçant l'équation en t du saut de σ. Il en résulte que le saut de σ ne sera imposé que pour $t = 0$, soit uniquement au point O de la discrétisation des mailles duales.

Nous donnons l'évaluation du saut de σ pour un cas axisymétrique, évaluée au point O :

$$\begin{aligned}
\left[\left(\left(2\eta + r_2\right)\beta_1 + r_2\gamma_2\right)n_x + \eta\left(\beta_2 + \gamma_1\right)n_y + r_2\frac{\alpha_1}{r}\right] &= \gamma c n_x - \left[P^k\right]_\Gamma n_x, \\
\left[\eta\left(\beta_2 + \gamma_1\right)n_x + \left(\left(2\eta + r_2\right)\gamma_2 + r_2\beta_1\right)n_y + r_2\frac{\alpha_1}{r}\right] &= \gamma c n_y - \left[P^k\right]_\Gamma n_y.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

En effet, pour le calcul de la représentation, seul ce saut est modifié, les relations aux coins des mailles duales et la continuité de la vitesse ne sont pas impactées. On note la possible présence d'une singularité en $r = 0$. Cependant, pour atteindre cette singularité, il faut que le point O soit confondu avec l'axe de symétrie, ce qui n'arrive jamais. En effet, pour que le point O soit exactement sur cet axe, il faut qu'aux points a et d, la fonction ϕ soit nulle, et dans ce cas là, la maille duale est considérée non traversée par l'interface.

Nous sommes face à un système linéaire 16×16 à inverser, par maille duale

traversée par l'interface. Sur un maillage très fin, on comprend rapidement que le nombre de systèmes à résoudre peut devenir prohibitif, chaque système étant unique car dépendant de la position de l'interface. Chercher à paralléliser les calculs à ce niveau est un axe intéressant pour tenter de gagner du temps de calcul. Nous notons, afin de fixer les idées, le système 16×16 de la sorte.

$$MX = b. \tag{3.13}$$

Le vecteur b contient les coefficients de $\tilde{V}$ et le vecteur X contient donc les coefficients relatifs à la représentation, soit :

$$X = \begin{pmatrix} \alpha_1^+ \\ \alpha_1^+ \\ \alpha_1^- \\ \alpha_1^- \\ \beta_1^+ \\ \beta_2^+ \\ \beta_1^- \\ \beta_2^- \\ \gamma_1^+ \\ \gamma_2^+ \\ \gamma_1^- \\ \gamma_2^- \\ \delta_1^+ \\ \delta_2^+ \\ \delta_1^- \\ \delta_2^- \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} u_{i,j} \\ v_{i,j} \\ u_{i+1,j} \\ v_{i+1,j} \\ u_{i+1,j+1} \\ v_{i+1,j+1} \\ u_{i,j+1} \\ v_{i,j+1} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ (\gamma c_{ij} - (P^+ - P^-))\, n_x \\ (\gamma c_{ij} - (P^+ - P^-))\, n_y \end{pmatrix} \tag{3.14}$$

Grâce à ce système linéaire, nous pouvons écrire, par exemple :

$$\alpha_1^+ = \sum_{j=0}^{7} M_{0j}^{-1} b_j + \sum_{j=14}^{15} M_{0j}^{-1} b_j. \tag{3.15}$$

L'utilisation de la normale au point O nous permet de ne pas nous intéresser à l'orientation de l'interface. De plus, en écrivant les équations aux nœuds avec des indicatrices, nous n'avons pas à nous soucier de la phase dans laquelle nous sommes. Par exemple, au point a, nous écrivons :

$$\tilde{V} = \mathbb{1}_{\Omega_1}(a)\, \tilde{V}_1 + \mathbb{1}_{\Omega_2}(a)\, \tilde{V}_2, \tag{3.16}$$

avec la fonction $\mathbb{1}_{\Omega_1}$ définie telle que :

$$\mathbb{1}_{\Omega_1}(X) = \begin{cases} 1 & \text{si } X \in \Omega_1 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{3.17}$$

Nous pouvons donc écrire, en généralisant l'équation (3.15) :

$$\widetilde{V^{k+1}} = f_1\left(V_c^{k+1}\right) + f_2\ \left(\gamma c\vec{n} - \left[P^k\right]_\Gamma \cdot \vec{n}\right). \tag{3.18}$$

De plus, nous pouvons unifier nos notations en posant $f_2 = 0$ lorsque l'interface ne coupe pas la maille duale.

Nous avons vu que l'utilisation du formalisme du Lagrangien Augmenté nous forçait à définir la représentation pour chaque pas de pseudo temps du Lagrangien Augmenté. Par contre, nous remarquons que durant tout l'algorithme du Lagrangien Augmenté, la position de l'interface étant constante, la matrice M du système (3.13) est constante. Ainsi, c'est uniquement le second membre de cette relation qui est variable en fonction du pseudo-temps. Cette remarque prendra tout son sens pour l'intégration des représentations mais nous rassure déjà sur le temps de calcul qui reste là contrôlé.

Nous avons donc maintenant à notre disposition une collection de représentations sur tout le domaine, par maille duale. Lorsque nous ne sommes pas en présence d'interface, la vitesse est continue d'une maille duale à l'autre, car nous utilisons une représentation bi-linéaire. Par contre, lorsque nous regardons la continuité de la vitesse entre deux mailles duales traversées par l'interface, étant donnée que la continuité de la vitesse aux points I et J n'a pas été forcée, un léger saut peut apparaître. Jusqu'à présent, nous n'avons pas trouvé de manière de forcer la continuité de la vitesse dans ce cas, ce qui - nous le suspectons - peut grandement affaiblir la qualité de nos calculs à fort ratio de viscosité. Une piste à explorer est l'imposition de l'égalité de la vitesse de part et d'autre du bord de la maille en cherchant à conserver une représentation basée uniquement sur une maille duale. Cependant, ce but semble difficile à atteindre car sans passer d'informations d'une maille duale à l'autre, nous ne voyons pas comment nous y prendre.

Un point intéressant à souligner est que le système de représentation est suffisamment robuste pour permettre de traiter le cas ou l'interface sort du domaine.

Enfin, nous notons que pour la résolution en présence de fluides non Newtoniens, il convient de prendre en compte le saut de σ^E de la même manière qu'est traitée la tension de surface.

3.1.1.2 Pression

La méthode des volumes finis exprime la pression comme une constante par maille duale, mais le jeu de l'intégration de son gradient au second membre du Lagrangien Augmenté nous fait apparaître l'intégrale d'une représentation Q_1 sur la maille primale. Il n'est pas nécessaire de définir cette représentation, elle est implicite et se fait naturellement. Il convient cependant de déterminer la pression dans les mailles duales. En premier lieu, lorsque nous ne sommes pas en présence d'une interface, nous calculons donc la valeur de la divergence de la représentation au point x_5, donnée ici pour la version 2D :

$$\begin{aligned} \widetilde{P^{k+1}} &= \widetilde{P^k} - r_1 \nabla \cdot \overline{\widetilde{V^{k+1}}}, \\ &= \widetilde{P^k} - r_1 \left(\beta_2 + \gamma_1\right). \end{aligned} \tag{3.19}$$

Il est intéressant de noter que - tous calculs faits - cela revient à écrire (en prenant les notations de Fig: 3.3) :

$$\left(\nabla \cdot V^{k+1}\right)_{i+1/2,j+1/2} = \frac{b_1 + c_1 - a_1 - d_1}{2\Delta x} + \frac{c_2 + d_2 - a_2 - b_2}{2\Delta y}, \tag{3.20}$$

où $b_1 = u_{i+1,j}$ et $c_2 = v_{i+1,j+1}$, soit ce que nous poserions naturellement. Ce type de discrétisation est connu pour produire des instabilités en pression, dans la mesure ou l'intégration du gradient de pression ne sera définie ainsi que par quatre nœuds (pour la maille (i,j), il s'agira des points $(i-1,j-1), (i+1,j-1), (i+1,j+1)$ et $(i-1,j+1)$), au lieu de neuf comme espéré. Cette situation, qui peut s'avérer très dommageable, peut mener in fine à la génération de deux champs de pression parfaitement découplés et dont le gradient numérique converge vers la même valeur. Afin de disposer d'un seul champ de pression, on peut mettre en place des stratégies de couplage des deux champs générés, ce qui stabilise le calcul en le faussant légèrement.

En axisymétrique, l'équation (3.19) s'écrit :

$$\begin{aligned} \widetilde{P^{k+1}} &= \widetilde{P^k} - r_1 \nabla \cdot \overline{\widetilde{V^{k+1}}}, \\ &= \widetilde{P^k} - r_1 \left(\beta_2 + \gamma_1 + \frac{\alpha_1}{r}\right). \end{aligned} \tag{3.21}$$

Nous avons placé la pression lors de l'absence d'interface au centre des mailles, la division par le rayon n'entrainera donc pas de singularité.

Si nous sommes dans une maille duale traversée par l'interface, nous calculons la divergence de la représentation au point x_5, ce qui donc dégénère naturellement

vers le cas sans interface :

$$\widetilde{P^{k+1}} = \widetilde{P^k} - r_1 \left(\beta_2 + \gamma_1 + (x_5 - x_0)\,\delta_2 + (y_5 - y_0)\,\delta_1\right). \tag{3.22}$$

Ainsi, nous avons - pour une même maille duale - deux pressions, définies au point x_5.

La version axisymétrique de (3.22) est :

$$\begin{aligned}\widetilde{P^{k+1}} = \widetilde{P^k} &- r_1 \left(\beta_2 + \gamma_1 + (x_5 - x_0)\,\delta_2 + (y_5 - y_0)\,\delta_1\right) \\ &- r_1 \left(\frac{\alpha_1 + \beta_1 (x_5 - x_0) + \gamma_1 (y_5 - y_0) + \delta_1 (x_5 - x_0)(y_5 - y_0)}{x_0}\right).\end{aligned} \tag{3.23}$$

Très paradoxalement, la présence de l'interface va stabiliser le système, liant de fait le calcul des deux champs de pression cités ci-dessus.

On notera que le calcul peut aussi être effectué en posant que la valeur de la pression est celle au point O, possibilité qui dégénère aussi vers le cas sans interface.

Ainsi, l'utilisation de l'équation (3.18) combinée à celle générale du Lagrangien Augmenté nous produit le système suivant :

$$\begin{aligned}-\nabla \cdot (2\eta D(f_1)) - r_2 \nabla\nabla \cdot f_1 = F - \gamma c \delta(\phi)\,\vec{n} - \nabla\widetilde{P^k} + \nabla \cdot (2\eta D(f_2)) + r_2 \nabla\nabla \cdot f_2, \\ \widetilde{P^{k+1}} = \widetilde{P^k} - r_1 \nabla \cdot \widetilde{V^{k+1}}.\end{aligned} \tag{3.24}$$

Ceci nous enseigne que la matrice du Lagrangien Augmenté n'est remplie que - après intégration - d'informations issues de la matrice M de représentation de la vitesse. Comme nous l'avons fait remarquer, cette matrice est constante, ainsi la matrice du Lagrangien Augmenté l'est de même. Cette remarque prend toute son importance quand on sait que le Lagrangien Augmenté peut - dans certains cas (solutions mal initialisées, géométrie complexe, domaine très étendu...) mettre des milliers d'itérations à converger. Ainsi, cette matrice étant constante, nous gagnerons du temps à l'inverser une fois pour toute de manière exacte, c'est-à-dire utiliser un solveur direct et non un solveur itératif.

3.1.2 Volumes finis : calcul des flux

Cas 2D Nous avons maintenant à notre disposition une représentation de la vitesse et de la pression. La méthode d'intégration est précisée car cette dernière diffère grandement du maillage MAC.

Penchons nous sur la construction de la matrice dans le cas 2D. Il s'agit de discrétiser en espace le terme suivant - où les termes de pseudo temps, pour des raisons de légèreté des notations, sont omis :

$$-\nabla \cdot (2\eta D[V]) - r\nabla\nabla \cdot V.$$

Si on applique un schéma volumes finis, nous trouvons donc, avec $\vec{n}$ la normale au contour de la cellule ij (notée C_{ij}) :

$$\begin{aligned}
-\int_{C_{ij}} (\nabla \cdot (2\eta D[V]) + r(\nabla\nabla \cdot V) I) &= -\int_{\partial C_{ij}} (2\eta D[V]) \cdot \vec{n} - r\int_{\partial C_{ij}} (\nabla \cdot V) \cdot \vec{n}, \\
&= -\int_{\partial C_{ij}} \left(2\eta \begin{pmatrix} \partial_x u & \frac{1}{2}(\partial_y u + \partial_x v) \\ \frac{1}{2}(\partial_y u + \partial_x v) & \partial_y v \end{pmatrix} \right) \cdot \vec{n} \\
&\quad - r\int_{\partial C_{ij}} (\partial_x u + \partial_y v) \cdot \vec{n}.
\end{aligned}$$

Nous prenons maintenant la représentation de vitesse et calculons ses différentes dérivées, en posant $X = x - x_0$ et $Y = y - y_0$:

$$\begin{aligned}
\tilde{V}(x,y) &= \alpha + \beta X + \gamma Y + \delta XY, \\
\nabla \cdot V &= \beta_2 + \gamma_1 + \delta_2 X + \delta_1 Y, \\
D[V] &= \begin{pmatrix} \beta_1 + \delta_1 Y & \frac{1}{2}(\gamma_1 + \beta_2 + \delta_1 X + \delta_2 Y) \\ \frac{1}{2}(\gamma_1 + \beta_2 + \delta_1 X + \delta_2 Y) & \gamma_2 + \delta_2 X \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Puisque nous ne savons pas si nous intégrons sur tout le bord de la cellule ou juste une partie - étant donné qu'on peut être amené à utiliser soit V_1 soit V_2 suivant le domaine courant (Ω_1 où Ω_2), nous devons disposer d'une méthode d'intégration générique, en intégrant de x_1 à x_2 lorsque $\vec{n} = (0, \pm 1)^t$ et en appliquant le même raisonnement sur les autres faces.

Par construction, η est une constante par phase, nous avons donc à calculer :

$$\begin{aligned}
&n_1 \int_{y_1}^{y_2} \begin{pmatrix} (2\eta + r)(\beta_1 + \delta_1 Y) + r(\gamma_2 + \delta_2 X) \\ \eta(\gamma_1 + \ \beta_2 + \ \delta_1 X + \delta_2 Y) \end{pmatrix} dy \\
&+n_2 \int_{x_1}^{x_2} \begin{pmatrix} \eta(\gamma_1 + \ \beta_2 + \ \delta_1 X + \delta_2 Y) \\ (2\eta + r)(\gamma_2 + \delta_2 X) + r(\beta_1 + \delta_1 Y) \end{pmatrix} dx \\
&= n_1 (y_2 - y_1) \begin{pmatrix} (2\eta + r)\left(\beta_1 + \delta_1 \frac{y_1 + y_2 - 2y_0}{2}\right) + r(\gamma_2 + \delta_2 X) \\ \eta\left(\gamma_1 + \ \beta_2 + \ \delta_1 X + \delta_2 \frac{y_1 + y_2 - 2y_0}{2}\right) \end{pmatrix} \\
&+n_2 (x_2 - x_1) \begin{pmatrix} \eta\left(\gamma_1 + \ \beta_2 + \ \delta_1 \frac{x_1 + x_2 - 2x_0}{2} + \delta_2 Y\right) \\ (2\eta + r)\left(\gamma_2 + \delta_2 \frac{x_1 + x_2 - 2x_0}{2}\right) + r(\beta_1 + \delta_1 Y) \end{pmatrix} dx.
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Le but de la manœuvre est de construire un système linéaire, qu'on notera

$$\mathbb{M} Y = S \tag{3.27}$$

afin de déterminer un champ de vitesse au temps $k+1$, contenu donc dans le vecteur Y. Notre vitesse est une représentation basée - entre autre - sur la valeur aux nœuds de la vitesse au temps $k+1$, vitesse inconnue. On peut cependant intégrer la représentation de vitesse (bien que l'on ne la connaisse pas) ; en effet, en phase 1, on trouve :

$$\begin{aligned}
&\left(\gamma_1 + \ \beta_2 + \ \delta_1 X + \delta_2 \frac{y_1 + y_2 - 2y_0}{2}\right) \\
&= \sum_{j=0}^{7} M_{8j}^{-1} b_j + \sum_{j=14}^{15} M_{8j}^{-1} b_j + \sum_{j=0}^{7} M_{5j}^{-1} b_j + \sum_{j=14}^{15} M_{5j}^{-1} b_j \\
&+ X \left(\sum_{j=0}^{7} M_{12j}^{-1} b_j + \sum_{j=14}^{15} M_{12j}^{-1} b_j \right) \\
&+ \left(\frac{y_1 + y_2 - 2y_0}{2} \sum_{j=0}^{7} M_{14j}^{-1} b_j + \sum_{j=14}^{15} M_{14j}^{-1} b_j \right) \\
&= \sum_{j=0}^{7} \left(M_{8j}^{-1} + M_{5j}^{-1} + X M_{12j}^{-1} + \frac{y_1 + y_2 - 2y_0}{2} M_{14j}^{-1} \right) b_j \\
&+ \sum_{j=14}^{15} \left(M_{8j}^{-1} + M_{5j}^{-1} + X M_{12j}^{-1} + \frac{y_1 + y_2 - 2y_0}{2} M_{14j}^{-1} \right) b_j.
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Ainsi, d'après le jeu de numérotation, l'influence du terme $u_{i+1,j}$ dans la matrice du

système linéaire (3.27), classée en troisième ligne dans le système (3.13) est :

$$\eta\left(M_{8,3}^{-1}+M_{5,3}^{-1}+XM_{12,3}^{-1}+\frac{y_1+y_2-2y_0}{2}M_{14,3}^{-1}\right)$$

en le multipliant par la bonne valeur de la normale, suivant la face sur laquelle nous avons intégré le système et en utilisant la viscosité de la phase considérée.

On prendra soin de noter que

$$\eta\left(M_{8,14}^{-1}+M_{5,14}^{-1}+XM_{12,14}^{-1}+\frac{y_1+y_2-2y_0}{2}M_{14,14}^{-1}\right)b_{14}$$

doit être mis au second membre, dans la mesure ou $b_{14}=\left(\gamma c-\left[P^k\right]_\Gamma\right)n_x$, comme nous l'avons indiqué au système (3.24). Il s'agit de la valeur de la pression au temps k, ceci doit être mis au second membre.

Afin de rendre le code le plus générique possible, nous avons défini pour les mailles duales non traversées par l'interface le même système (3.27) en calculant deux fois le champ de vitesse associé à la maille duale. Il faut ceci dit prendre en compte les termes du second membre qui diffèrent. Cette approche permet de n'écrire qu'une seule méthode d'intégration. Nous présentons les stencils obtenus une fois intégration faite pour un stencil libre (c'est-à-dire quatre mailles duales non traversées par l'interface) sur un maillage ou $\Delta x=\Delta y=1$. La symétrie des stencils nous permet d'être confiant dans l'implémentation, mais seul le processus de validation nous permettra d'en être certain.

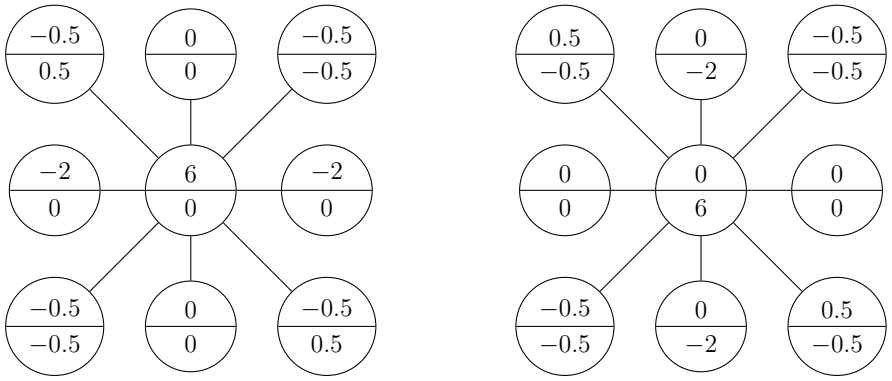


FIG. 3.4: Stencils pour $\Delta x=\Delta y=1$ sur maillage colocalisé - cas 2D - Les paramètres du Lagrangien Augmenté sont égales à la viscosité. Si les paramètres diffèrent de la viscosité, le stencil se renforce pour faire disparaître certains termes nuls.

L'intégration de la pression est largement plus simple dans la mesure ou il s'agit

d'intégrer :

$$\int_{C_{ij}} \nabla P = \int_{\partial C_{ij}} P\vec{n}. \tag{3.29}$$

Ainsi, lors de l'intégration sur les bords de la maille primale, nous prenons en compte la pression dans chacune des mailles duales, en prenant soin d'intégrer par domaine.

Il ne reste plus que l'intégrale de la tension de surface. Nous avons - sur maillage MAC - défini une fonction Heaviside lissée afin de transformer une force surfacique en force volumique locale. Le défaut de cette approche est justement de lisser l'effet de la tension de surface. L'intérêt de cette approche est d'avoir des calculs qui ne divergent pas. Notre méthode est capable - et même a besoin - d'intégrer la tension de surface directement sur l'interface, simplement parce que nous prenons cette intégrale sur l'interface lors du calcul de la représentation de la vitesse à l'équation (3.10).

Cas Axi Le cas axi revient exactement au même, il convient juste de prendre en compte la différence des opérateurs différentiels ainsi que de prendre garde aux divisions par zéro lorsque nous intégrons en $r = 0$, ce qui nous donne :

$$\begin{aligned} -\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r}\left(2\eta\frac{\partial V_r}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\eta\left[\partial_r V_z + \partial_z V_r\right]\right) + 2\eta\frac{\partial_r V_r - \frac{V_r}{r}}{r} \\ \frac{\partial}{\partial r}\left(\eta\left[\partial_r V_z + \partial_z V_r\right]\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(2\eta\partial_z V_z\right) + \frac{\eta}{r}\left[\partial_r V_z + \partial_z V_r\right] \end{pmatrix} - s\begin{pmatrix} \partial_r\left(\partial_r V_r + \frac{V_r}{r} + \partial_z V_z\right) \\ \partial_z\left(\partial_r V_r + \frac{V_r}{r} + \partial_z V_z\right) \end{pmatrix} \\ = -\begin{pmatrix} \partial_r P \\ \partial_z P \end{pmatrix} - \gamma c\delta\left(\phi\right)\begin{pmatrix} n_r \\ n_z \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{3.30}$$

On note que :

$$\partial_r \frac{V_r}{r} = -\frac{V_r}{r^2} + \frac{\partial_r V_r}{r}. \tag{3.31}$$

Afin de disposer uniquement d'intégrale de bords, nous multiplions la seconde ligne par r :

$$\begin{aligned} -\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r}2\eta\left(\frac{\partial V_r}{\partial r} + \frac{V_r}{r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\eta\left[\partial_r V_z + \partial_z V_r\right]\right) \\ \frac{\partial}{\partial r}r\eta\left[\partial_r V_z + \partial_z V_r\right] + \frac{\partial}{\partial z}\left(2\eta r\partial_z V_z\right) \end{pmatrix} - s\begin{pmatrix} \partial_r\left(\partial_r V_r + \frac{V_r}{r} + \partial_z V_z\right) \\ r\partial_z\left(\partial_r V_r + \frac{V_r}{r} + \partial_z V_z\right) \end{pmatrix} \\ = -\begin{pmatrix} \partial_r P \\ r\partial_z P \end{pmatrix} - \gamma c\delta\left(\phi\right)\begin{pmatrix} n_r \\ rn_z \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{3.32}$$

puis, en omettant le signe et se focalisant sur l'intégration, nous trouvons :

$$\begin{pmatrix} \left[\int_z \left(2\eta + s\right)\left(\partial_r V_r + \frac{V_r}{r}\right) + s\partial_z V_z\right]_{r_1}^{r_2} + \left[\int_r \eta\left[\partial_r V_z + \partial_z V_r\right]\right]_{z_1}^{z_2} \\ \left[\int_z r\eta\left[\partial_r V_z + \partial_z V_r\right]\right]_{r_1}^{r_2} + \left[\int_r \left(\left(2\eta + s\right)r\partial_z V_z\right) + sr\left(\partial_r V_r + \frac{V_r}{r}\right)\right]_{z_1}^{z_2} \end{pmatrix}. \tag{3.33}$$

On note les intégrales données par la suite ainsi, pour f - ici - une fonction régulière de $\mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{R}$:

$$\int f\vec{n}drdz = \begin{pmatrix} \left[\int_z f dz\right]_{r_1}^{r_2} \\ \left[\int_r f dr\right]_{z_1}^{z_2} \end{pmatrix} \tag{3.34}$$

En remplaçant dans l'expression la vitesse par sa représentation, nous trouvons, par ligne :

$$\begin{aligned} &\left[\int_z (2\eta+s)\left((\beta_1+\delta_1 Z)+\frac{\alpha_1+\beta_1 R+\gamma_1 Z+\delta_1 RZ}{r}\right)+s\left(\gamma_2+\delta_2 R\right)\right]_{r_1}^{r_2} \\ &\qquad +\left[\int_r \eta\left[(\beta_2+\delta_2 Z)+(\gamma_1+\delta_1 R)\right]\right]_{z_1}^{z_2} \end{aligned} \tag{3.35}$$

$$\begin{aligned} &\left[\int_z r\eta\left[(\beta_2+\delta_2 Z)+(\gamma_1+\delta_1 R)\right]\right]_{r_1}^{r_2} \\ &+\left[\int_r \left((2\eta+s)\, r\left(\gamma_2+\delta_2 R\right)\right)+s\left(r\left(\beta_1+\delta_1 Z\right)+\alpha_1+\beta_1 R+\gamma_1 Z+\delta_1 RZ\right)\right]_{z_1}^{z_2} \end{aligned} \tag{3.36}$$

Soit, une fois intégrée, par ligne :

$$\begin{aligned} &\left[(z_2-z_1)\left((2\eta+s)\left(\beta_1+\frac{\alpha_1+\beta_1 R}{r}\right)+s\left(\gamma_2+\delta_2 R\right)\right)\right]_{r_1}^{r_2} \\ &\quad +\left[(z_2-z_1)\,\frac{z_1+z_2-2z_0}{2}\,(2\eta+s)\left(\delta_1+\frac{\gamma_1+\delta_1 R}{r}\right)\right]_{r_1}^{r_2} \\ &+\left[\left(r_2-r_1\right)\eta\left[\beta_2+\delta_2 Z+\gamma_1\right]\right]_{z_1}^{z_2}+\left[(r_2-r_1)\,\frac{r_1+r_2-2r_0}{2}\eta\delta_1\right]_{z_1}^{z_2} \end{aligned} \tag{3.37}$$

$$\begin{aligned} &\left[\left(z_2-z_1\right)r\eta\left[\beta_2+\gamma_1+\delta_1 R\right]\right]_{r_1}^{r_2}+\left[(z_2-z_1)\,\frac{z_1+z_2-2z_0}{2}r\eta\delta_2\right]_{r_1}^{r_2} \\ &\qquad +\left[\left(r_2-r_1\right)s(\,\alpha_1+\gamma_1 Z\,)\right]_{z_1}^{z_2} \\ &\qquad +\left[(r_2-r_1)\,s\frac{r_1+r_2-2r_0}{2}\left(\beta_1+\delta_1 Z\right)\right]_{z_1}^{z_2} \\ &\qquad +\left[(r_2-r_1)\,\frac{r_1+r_2}{2}\left((2\eta+s)\,\gamma_2+s\left(\beta_1+\delta_1 Z\right)\right)\right]_{z_1}^{z_2} \\ &\quad +\left[(r_2-r_1)\,\frac{2\left(r_1^2+r_1 r_2+r_2^2\right)-3r_0\left(r_1+r_2\right)}{6}\left(2\eta+s\right)\delta_2\right]_{z_1}^{z_2} \end{aligned} \tag{3.38}$$

et de la même manière, à partir de cette expression, nous pouvons calculer l'influence des différentes valeurs du champ de vitesse, en appliquant le même raisonnement qu'en (3.28). Afin de calculer la pression, nous devons avoir accès à la divergence de

la vitesse, soit :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot V &= \partial_r V_r + \partial_z V_z + \frac{V_r}{r}, \\ &= \beta_1 + \delta_1 Z + \gamma_2 + \delta_2 R + \frac{1}{r}\left(\alpha_1 + \beta_1 R + \gamma_1 Z + \delta_1 RZ\right).\end{aligned} \tag{3.39}$$

Nous calculons cette divergence au point x_5, ainsi la division par r ne pose pas de problème, et le schéma est cohérent.

Conclusion sur l'intégration La représentation sur maillage colocalisé permet de prendre en compte les conditions d'interface de manière bien plus précise que sur maillage MAC. L'assemblage de la matrice finale est alourdi par le jeu des intégrations mais ne doit être effectué qu'une seule fois.

Dans la mesure où ce schéma numérique repose très fortement sur la normale à l'interface, particulièrement lors du calcul de la représentation de la vitesse, il est impératif de disposer d'une fonction distance bien calculée, et l'utilisation - dans les cas d'évolution - de méthodes de redistanciation devient incontournable.

Enfin, l'utilisation de la représentation nous fournit une information inaccessible sur maillage MAC : la valeur de la vitesse sur l'interface.

Gestion des forces extérieures Nous pouvons faire face à deux situations : ou le champ de forces extérieures est une fonction analytique ou c'est une fonction discrète. Si la fonction est discrète, son intégrale - par maille primale - est égale à l'aire de la maille primale multipliée par la valeur de la fonction au centre de la maille primale. Si la fonction est analytique, nous pouvons appliquer une intégration numérique plus précise d'après la formule des trapèzes. De plus, nous pouvons facilement d'après [16], calculer les volumes d'intégration et les valeurs de la fonction aux extrémités des volumes. Bien que sans effet sur l'ordre, l'utilisation d'une intégration numérique permet de minimiser l'erreur du calcul.

3.1.3 Structure de donnée

Afin de faciliter le développement, nous avons défini une structure *maille duale* contenant toutes les informations relatives à une maille :

- le volume des différentes phases respectives,
- la liste des points,
- la matrice de calcul de la représentation

De plus, nous avons défini une classe de gestion des points sur un maillage. Un point est donc défini par sa position, son nom, la valeur de la fonction ϕ à sa

position (obtenue le cas échéant par interpolation), la valeur de la normale... De plus, cette classe nous fournit toutes les méthodes nécessaires pour calculer des distances, normes et autres quantités nécessaires.

3.2 Tests et résultats numériques

Nous allons maintenant présenter les résultats fournis par cette méthode, afin de valider nos résultats numériques, mais uniquement pour des écoulements de fluides Newtoniens. La difficulté de l'intégration de la tension de surface étant celle du saut de σ^E, il n'y a pas d'intérêt à rajouter ce terme dans nos études.

3.2.1 Cas 2D sans interface

Le premier test conduit est un test monophasique, afin de s'assurer que le solveur est aussi bon que celui sur maillage MAC.

$$V = \begin{pmatrix} -y\,(y-1)\,(2y-1)\,x^2\,(x-1)^2 \\ x\,(x-1)\,(2x-1)\,y^2\,(y-1)^2 \end{pmatrix}$$
$$F = \eta \begin{pmatrix} 2\,(2y-1)\left(6\left((yx)^2 - y^2x - yx^2 - x^3 + yx\right) + y\,(y-1) + 3x^2\,(x^2+1)\right) \\ -2\,(2x-1)\left(6\left((yx)^2 - x^2y - xy^2 + xy - y^3\right) + x\,(x-1) + 3y^2\,(y^+1)\right) \end{pmatrix} \tag{3.40}$$

La convergence de la vitesse est donnée en Fig: 3.5. Sans surprise, nous obtenons l'ordre deux.

Il est maintenant intéressant de comparer les résultats donnés en Fig: 3.5 avec ceux que nous donneraient le même cas test sur maillage MAC, donnés en page 98 : On observe le même comportement entre les deux schémas : même ordre de grandeur de l'erreur et même ordre de convergence.

3.2.2 Cas 2D avec une interface : écoulement de Couette

La confrontation du schéma numérique à un cas test analytique bifluide s'est montré très problématique. Nous avons donc défini un cas test tel que présenté en Fig: 3.7.

Ceci représente la coupe d'un cylindre infini où Ω_p est un solide rigide immobile, Ω_1 est un espace occupé par un fluide doté de sa propre viscosité η_1 et Ω_2 l'est par un autre fluide de viscosité η_2. La frontière commune à Ω_1 et Ω_2 est appelée

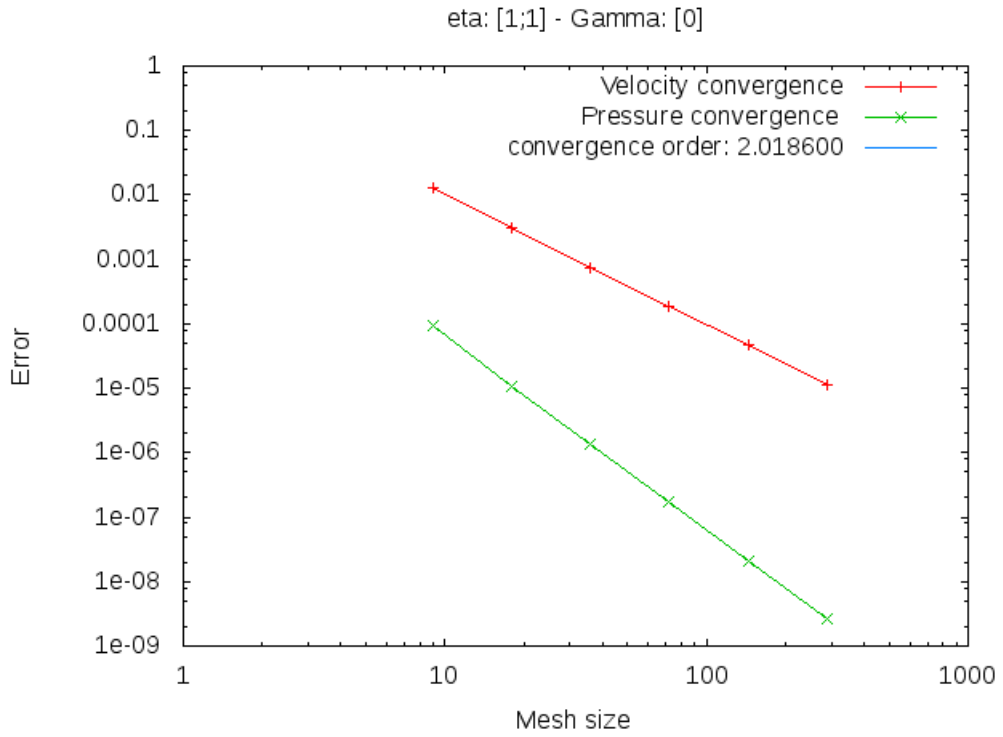


FIG. 3.5: L'ordre de convergence en norme L^2 est de 2.0186

l'interface Γ et est douée de propriété matérielle, soit une tension de surface γ. Nous proposons d'imposer une vitesse angulaire V_θ constante sur tout l'extérieur du domaine, permettant de garder à l'interface la forme d'un cercle, soit $V_\theta\left(r = r_3\right) = k$, où k est un paramètre, et d'imposer une condition de vitesse nulle sur l'obstacle, soit $V_\theta\left(r = r_1\right) = 0$. Nous imposons aux autres composantes de la vitesse la valeur 0. Si nous écrivons les équations de Stokes dans cette configuration, nous trouvons, en éliminant tous les termes nuls et en posant que la pression est une constante :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{r^2}\partial_r\left(r^3\partial_r\frac{V_\theta}{r}\right) &= 0, \\ V_\theta &= ar - \frac{b}{2r}. \end{aligned} \tag{3.41}$$

Ainsi, par morceaux, la vitesse est définie par deux paramètres, quatre donc en tout.

Si nous rajoutons la condition de continuité de la vitesse le long de l'interface, nous trouvons :

$$[V_\theta] = 0. \tag{3.42}$$

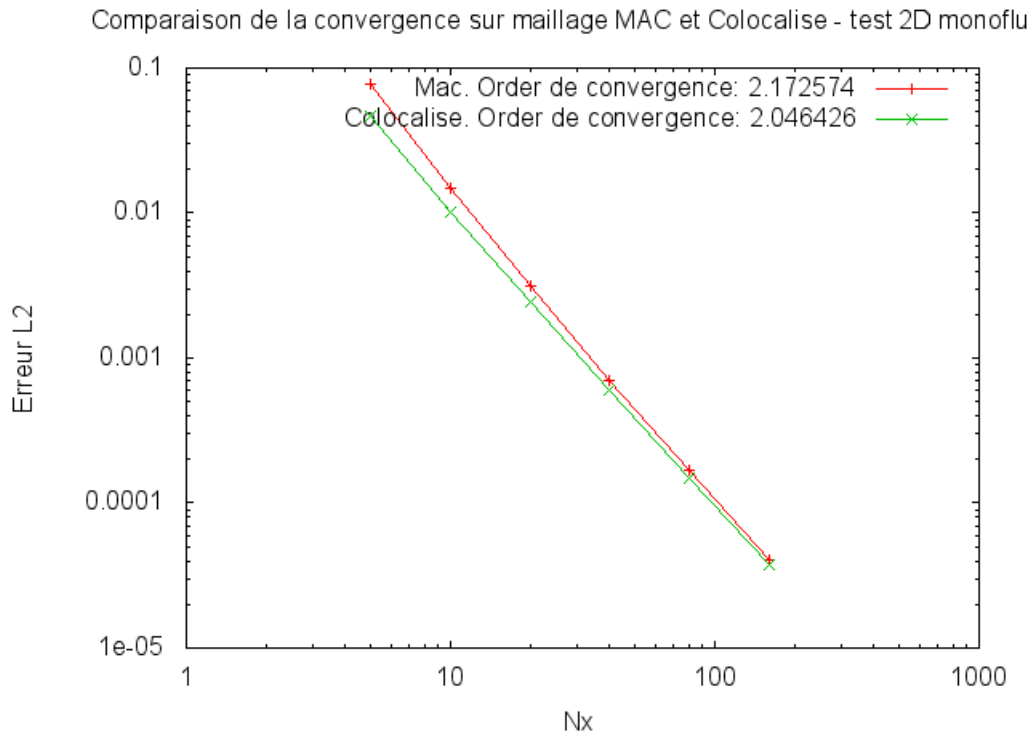


FIG. 3.6: Comparaison de la convergence monofluide 2D sur maillage MAC et colocalisé

De plus, le saut du tenseur des contraintes, avec ou sans saut de pression s'écrit :

$$\begin{aligned} \left[\eta r \partial_r \frac{V_\theta}{r}\right] &= 0, \\ [P] &= \gamma c. \end{aligned} \tag{3.43}$$

Nous sommes dans une configuration cylindrique, soit réellement 3D, la courbure s'exprime donc comme la moyenne de l'inverse des rayons principaux de courbure. Comme nous sommes dans un tube, le premier rayon est égale au rayon de l'interface, soit r_2, le second tend vers l'infini.

Nous avons quatre coefficients à déterminer (en définissant un champ de vitesse par phase), en considérant les conditions limites et de raccords, nous pouvons déterminer la vitesse angulaire dans tout le domaine.

L'idée maintenant est de projeter cette vitesse en 2D sur le carré bleu (gris foncé sur une imprimante noir&blanc). Nous calculons alors le champ de vitesse (V_x, V_y), projection de V_θ dans le rectangle sur un repère cartésien. Ainsi, nous disposons de conditions limites (V_x, V_y) et surtout de la vitesse exact par le système linaire induit

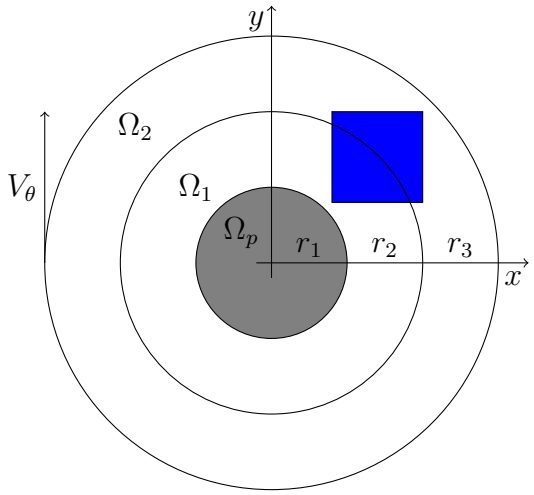


FIG. 3.7: Configuration cylindrique

Nx	$\|U\|_2^2$	$\|V\|_2^2$	$\|\vec{U}\|_2^2$	Ordre	$[p]$	$\frac{[p]-\gamma c}{\gamma c}$
5	0.00203127	0.00203828	0.0176535		1.37078	0.0271457
10	0.000527806	0.000517274	0.00384658	1.97	1.34055	0.00449395
20	0.000122458	0.000120758	0.00240158	2.07	1.33761	0.00228695
40	2.74747e-05	2.8467e-05	0.000665112	2.08	1.33477	0.000162662
80	6.95606e-06	6.88105e-06	0.000220026	2.01	1.33458	2.218e-05
160	2.01727e-06	1.57603e-06	6.67604e-05	1.95	1.33434	0.000158253

FIG. 3.8: Ratio de viscosité = 1 : 20, $\gamma = 1$ - Écoulement de Couette cylindrique tel que défini par Fig: 3.7. Maillage colocalisé.

par les équations (3.41), (3.42) et (3.43), en tout point du domaine.

Le solveur se comporte donc comme présenté en Fig: 3.8. Ainsi, avec un rapport de viscosité de 20 et de la tension de surface, l'ordre deux est obtenu.

On peut voir sur les figures Fig: 3.9,Fig: 3.10,Fig: 3.11 l'intérêt du solveur : on arrive à connaître la valeur de la vitesse *sur* l'interface grâce à la représentation, voir les détails sur les figures Fig: 3.12.

3.2.3 Équation de Laplace

Nous proposons maintenant de soumettre à notre solveur une autre configuration.

Si nous imposons des conditions limites nulles en 2D dans un carré unité, avec ou sans ratio de viscosité, mais avec de la tension de surface, nous obtenons l'équation de Laplace, reliant le saut de pression à la tension de surface. Nous posons que

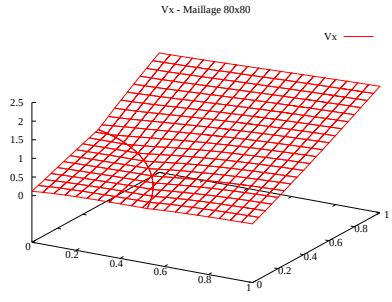


FIG. 3.9: Rendu de la représentation - V_x

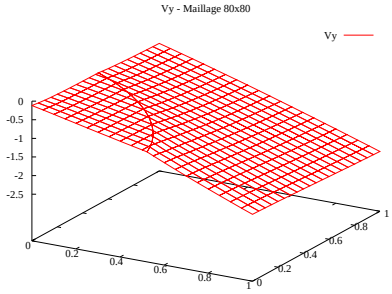


FIG. 3.10: Rendu de la représentation - V_y

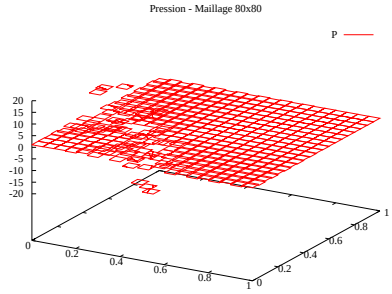


FIG. 3.11: Rendu de la représentation - P

l'interface est un cercle centré sur un carré unité. La finalité de ce calcul est de montrer l'effet du lissage de la tension de surface pour la discrétisation MAC et du calcul sur maillage colocalisé. On observe alors sur les figures Fig: 3.13 et Fig: 3.14 cet effet. Le saut de pression n'est en effet pas lissé.

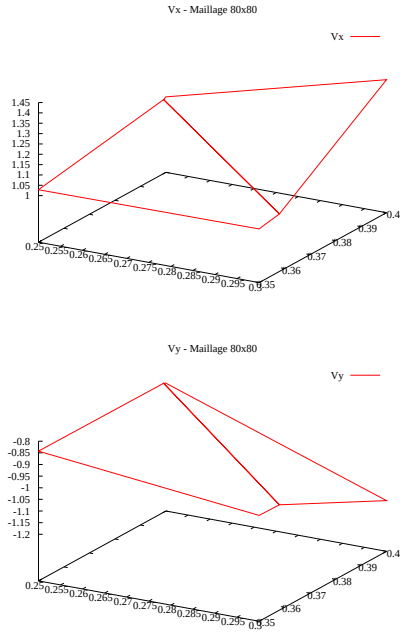


FIG. 3.12: Detail d'une maille duale pour la vitesse

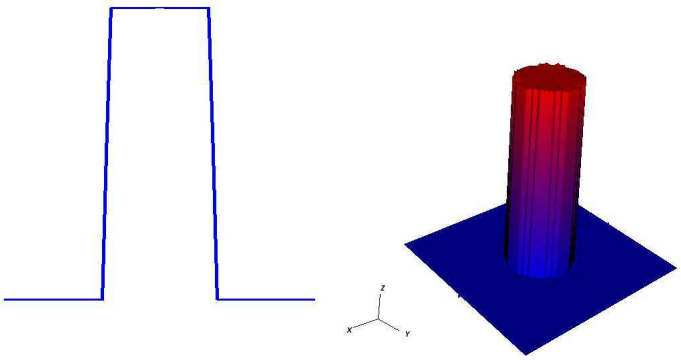


FIG. 3.13: Maillage colocalisé. Nx = Ny = 150, $\gamma = 0.3$. A gauche, coup du champ de pression, à droite, amplitude du champ de pression.

3.2.4 Cas axisymétrique sans interface

Nous définissons le champ de vitesse de la sorte :

$$\vec{V} = \begin{pmatrix} -r^3 \cos^3 \tilde{r} \\ zr^2 \cos^2 \tilde{r}(4 \cos \tilde{r} - 3\tilde{r} \sin \tilde{r}) \end{pmatrix} \tag{3.44}$$

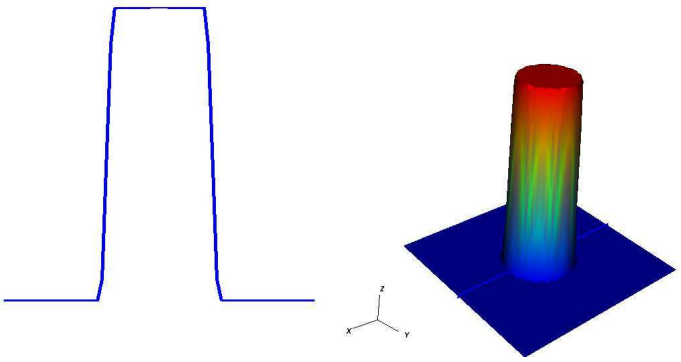


FIG. 3.14: Maillage Mac. Nx = Ny = 150, $\gamma = 0.3$. A gauche, coup du champ de pression, à droite, amplitude du champ de pression.

Nx	$\|U\|_2^2$	$\|V\|_2^2$	$\|\vec{U}\|_2^2$	Order	$\|P\|_2^2$	Order
5	0.312249	0.223137	0.233122		8.96341	
10	0.0834933	0.0767923	0.0774955	1.73442	0.657214	13.6385
20	0.0209375	0.021115	0.0210968	1.91659	0.243339	2.70081
40	0.00527337	0.00532619	0.0053207	1.99124	0.245082	0.99289
80	0.0013632	0.00129648	0.00130365	2.02025	0.245676	0.997582
160	0.000405849	0.000312767	0.000323828	2.00642	0.245836	0.999349

FIG. 3.15: Convergence sans intégration numérique des forces volumiques - cas monofluide axisymétrique sur maillage colocalisé

avec $\tilde{r} = \frac{r\pi}{2}$. Les forces extérieures sont données par :

$$\begin{aligned} f_1(r,z) =& r\cos\tilde{r}(8\cos^2\tilde{r} - 21\tilde{r}\sin\tilde{r}\cos\tilde{r} + 3\tilde{r}^3(3\sin^2\tilde{r} - 1) \\ f_2(r,z) =& z(16\cos^3\tilde{r} - 87\tilde{r}\sin\tilde{r}\cos^2\tilde{r} + 33\tilde{r}^2(3\sin^2\tilde{r} - 1)\cos\tilde{r} \\ &+ 3\tilde{r}^3\sin\tilde{r}(6\cos^2\tilde{r} - 3\sin^2\tilde{r} + 1)) \end{aligned} \tag{3.45}$$

Notons que ce cas test n'a rien de physique mais il a l'avantage d'être explicite et donc de permettre l'évaluation. Le champ de pression à trouver est une constante. La convergence est donnée dans Fig: 3.15, où les forces extérieures sont intégrées d'après la formule des trapèzes et Fig: 3.16 pour une intégration classique.

Nous constatons donc bien un ordre deux de convergence. Nous confrontons maintenant ces résultats avec ceux obtenus sur maillage MAC pour trouver le résultat donné en Fig: 3.17. Nous constatons que bien que légèrement moins précis, le maillage colocalisé se comporte de manière très acceptable, pour un temps de calcul comparable.

Nx	$\|U\|_2^2$	$\|V\|_2^2$	$\|\vec{U}\|_2^2$	Order		Order
5	0.151792	0.0366879	0.0584596		8.97173	
10	0.0379891	0.0092536	0.0149251	1.97911	0.657025	13.6551
20	0.00952249	0.00239614	0.00380931	1.97941	0.254183	2.58485
40	0.00239824	0.00060848	0.000965399	1.98642	0.24505	1.03727
80	0.000607217	0.000153453	0.000244498	1.98708	0.245717	0.997286
160	0.00015788	3.88495e-05	6.30411e-05	1.96936	0.245884	0.999318

FIG. 3.16: Convergence avec intégration numérique des forces volumiques - cas monofluide axisymétrique sur maillage colocalisé

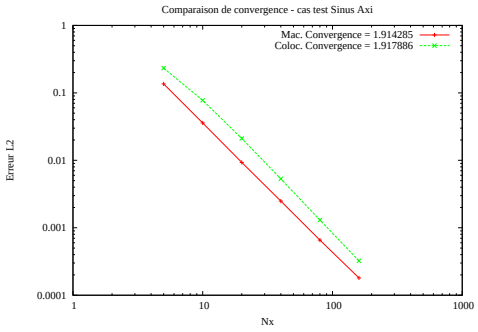


FIG. 3.17: Comparaison de la convergence des deux discrétisations.

3.2.5 Cas axisymétrique avec une interface

Nous présentons le cas test du co-écoulement : la vitesse est définie par :

$$v(r) = \begin{cases} \frac{\Delta P}{4\eta_+ L}\left(r^2 - R^2\right) & \text{si r } \leq r_i \\ \frac{\Delta P}{4L}\left(\frac{1}{\eta_-}\left(r^2 - r_i^2\right) + \frac{1}{\eta_+}\left(r_i^2 - R^2\right)\right) & \text{sinon.} \end{cases} \tag{3.46}$$

où R est le rayon du tube et r_i la distance de l'interface à l'axe de rotation. Cependant, bien que nécessaire, ce cas test n'est pas suffisant pour valider la version

Nx	$\|\vec{U}\|_2^2$	Order
5	0.0235726	
10	0.00935939	1.58
20	0.00269085	1.86
40	0.000662132	2.01
80	0.000158915	2.04

FIG. 3.18: 1 : 20 viscosity ratio - cow flow

cylindrique du solveur Axi, du fait de la géométrie de l'interface.

3.3 Conclusion

Nous avons développé un solveur d'ordre deux pour l'équation de Stokes stationnaire en utilisant une méthode d'éléments/volumes finis mixtes sur grille cartésienne en prenant en compte une singularité dans l'écoulement représenté par une interface pour des fluides Newtoniens. Notre solveur a montré ses capacités à gérer les ratios de viscosités et la tension de surface. Le point faible majeur de la méthode développée est sa forte dépendance à la propriété "fonction distance".

La difficulté principale était de trouver une représentation de la vitesse et de la pression cohérente sur tout le domaine. L'utilisation d'une représentation $bi - Q_1$ nous a permis de nous affranchir de la question de la position de l'interface dans une maille duale. La représentation de la pression est toujours à améliorer, l'étude d'une représentation par maille primale devrait être envisagée.

Les axes d'amélioration doivent maintenant porter sur la continuité de la vitesse entre maille duale en cas de présence d'interface en gardant la possibilité de définir la représentation avec uniquement les mêmes informations qu'aujourd'hui.

Un autre point à prendre en considération : si l'interface passe exactement sur l'arrête d'une maille duale (ce qui est improbable mais possible) alors la continuité de la vitesse sera établie naturellement par la représentation Q_1 mais le saut de σ ne sera pas assuré, tout comme la tension de surface ne sera pas intégrée au second membre.

Tant que nous parvenons à conserver la propriété de fonction distance, le schéma est éligible à la simulation de l'évolution de bulles.

Un autre axe d'amélioration est l'étude de la coalescence présentant une singularité dans l'écoulement, singularité provenant de la continuité du transport.

Chapitre 4

Comparaison des deux méthodes

Sommaire

4.1 Cas 2D 109
4.2 Cas Axi monofluide 110
4.3 Discussion 112

Nous présentons dans ce chapitre les résultats de convergence des deux solveurs, en 2D et en axi afin de comparer leurs efficacités relatives, en mono et bifluide.

4.1 Cas 2D

La courbe présentée en Fig: 4.1 présente la convergence des deux méthodes sur un cas polynomial. On observe que les deux méthodes ont le même comportement et présentent sensiblement les mêmes résultats, soit de l'ordre 2 en norme L^2. Le cas test est le suivant :

$$\begin{aligned} u\,(x,y) &= -y(y-1)(2y-1)x^2(x-1)^2, \\ v\,(x,y) &= x(x-1)(2x-1)y^2(y-1)^2, \\ f1\,(x,y) &= 2(2y-1)(6y^2x^2-6y^2x+y^2-6yx^2+6yx-y+3x^4-6x^3+3x^2), \\ f2\,(x,y) &= -2(2x-1)(6x^2y^2-6x^2y+x^2-6xy^2+6xy-x+3y^4-6y^3+3y^2). \end{aligned} \tag{4.1}$$

Nous présentons maintenant les convergences pour le cas test des anneaux décrit au chapitre précédent car nous disposons d'une solution analytique 2D pour du bifluide. Les quatre premières courbes Fig: 4.2,4.3,4.4,4.5 présentent la convergence pour différents ratios de viscosité.

Si à viscosité constante, la convergence des deux méthodes est comparable, soit

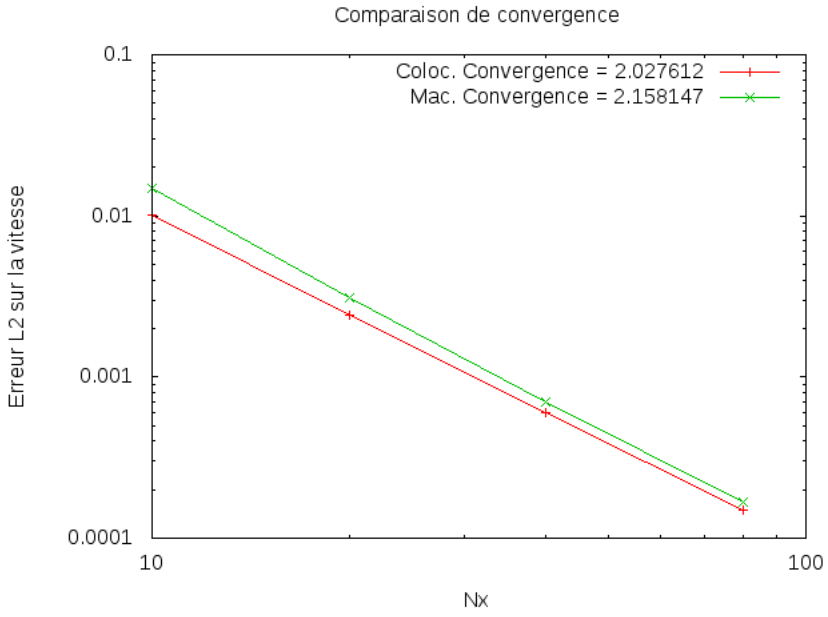


FIG. 4.1: Comparaison sur un cas polynomial 2D monofluide

d'ordre 2 en norme L^2, bien que l'erreur soit légèrement plus petite sur maillage MAC, nous observons lorsque les viscosités varient que la discrétisation sur maillage colocalisé fournit de bien meilleur résultat, en terme d'ordre et d'erreur.

Les courbes qui sont exposées sur les images Fig: 4.6,4.7,4.8 et 4.9 présentent le même cas, mais en présence de tension de surface. Nous observons le même comportement qualitatif des deux méthodes, soit de l'ordre 1 pour le maillage MAC, un ordre supérieur pour le maillage colocalisé et une erreur bien plus faible sur maillage colocalisé.

4.2 Cas Axi monofluide

Nous présentons maintenant pour une géométrie axisymétrique.g des convergences en monofluide. Les convergences données en Fig: 4.10 et Fig: 4.11 ont toujours les mêmes comportements, soit de l'ordre 2 pour chaque type de discrétisation, et une erreur plus faible pour le maillage MAC.

4.3 Discussion

On observe que - en monofluide - sur maillage MAC, l'erreur est systématiquement plus petite. Ceci peut provenir de la discrétisation elle même, mais nous

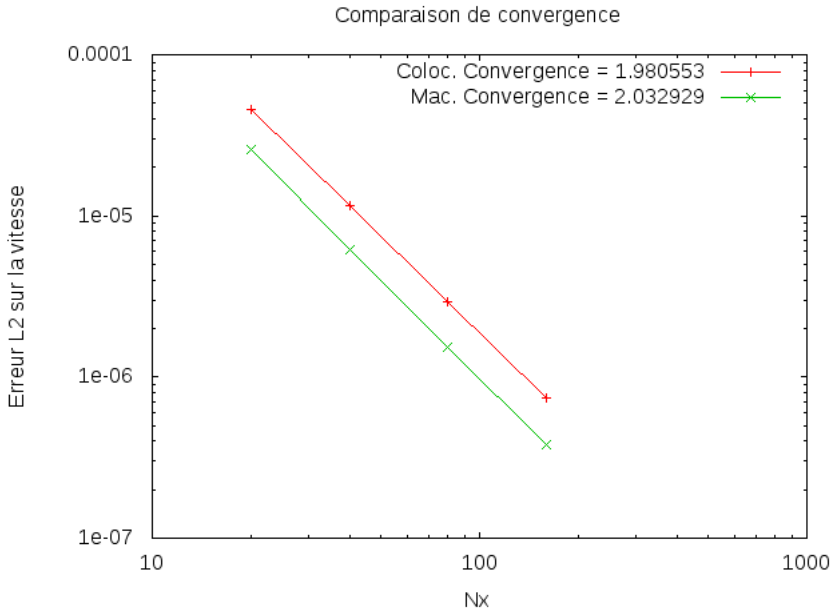


FIG. 4.2: Les anneaux- $\eta^- = 1, \eta^+ = 1, \gamma = 0$. Les deux méthodes sont d'ordre 2 en norme L^2.

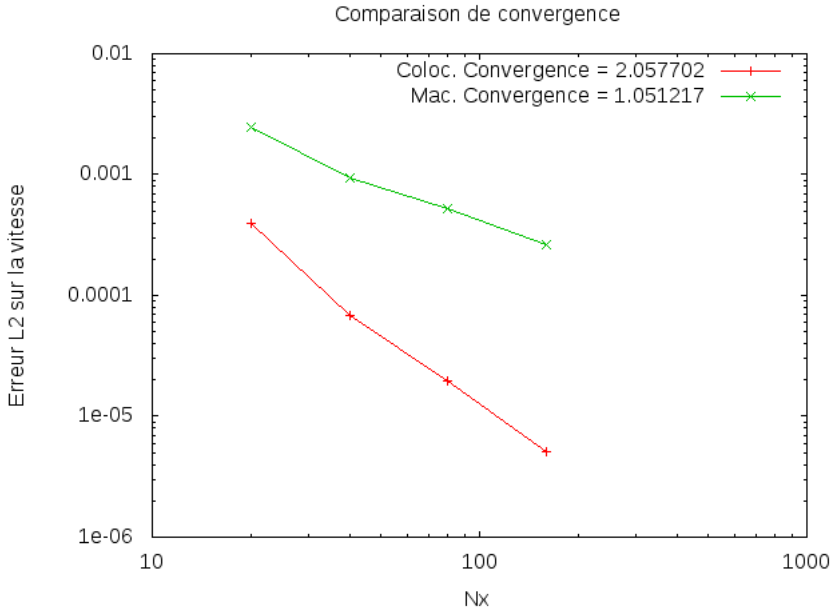


FIG. 4.3: Les anneaux- $\eta^- = 1, \eta^+ = 10, \gamma = 0$. Seule la méthode colocalisée est d'ordre 2 en norme L^2.

suspectons l'usage de conditions limites par extrapolation quadrique de nous aider

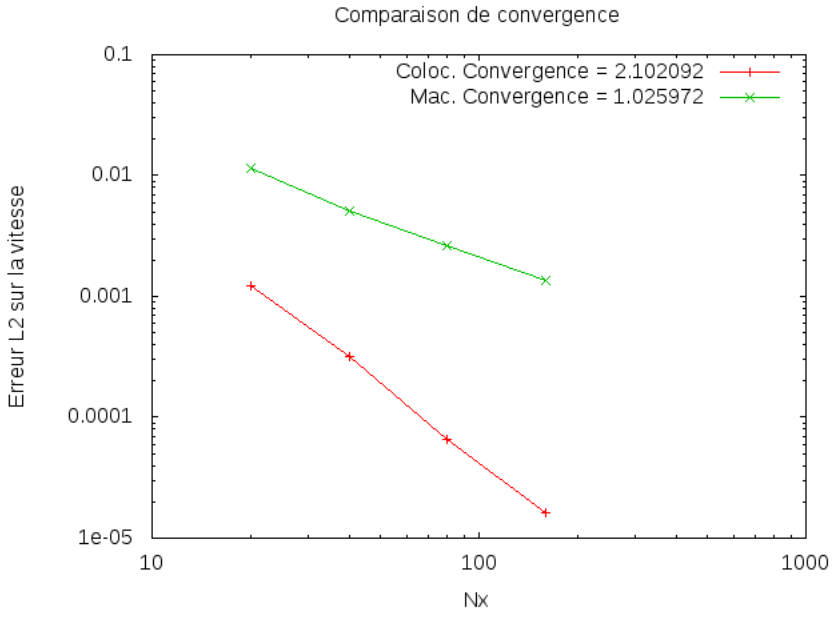


FIG. 4.4: Les anneaux- $\eta^- = 1, \eta^+ = 50, \gamma = 0$. Seule la méthode colocalisée est d'ordre 2 en norme L^2.

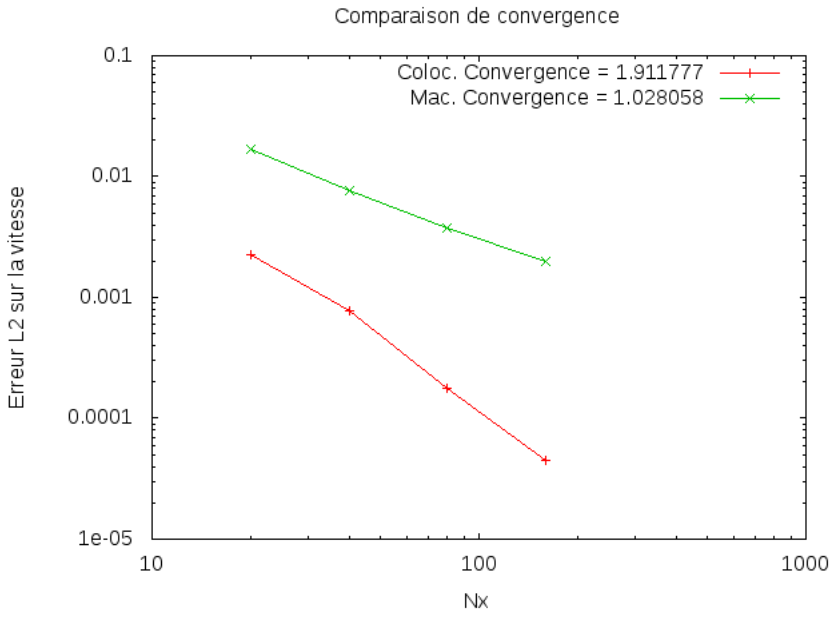


FIG. 4.5: Les anneaux- $\eta^- = 1, \eta^+ = 100, \gamma = 0$. La méthode colocalisée résiste bien mieux mais perd légèrement en ordre.

à mieux gérer nos conditions limites. En effet, cet usage nous permet de rajouter

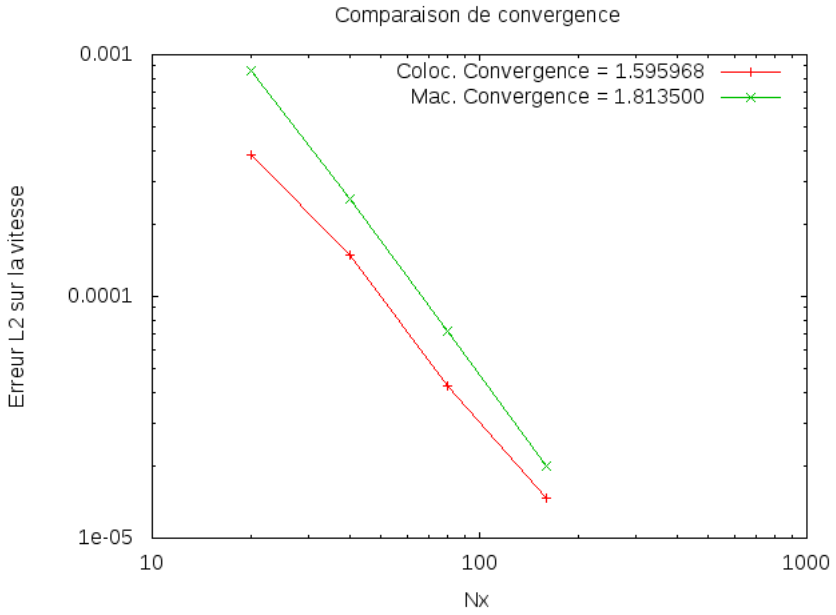


FIG. 4.6: Les anneaux- $\eta^- = 1, \eta^+ = 1, \gamma = 1$. La convergence n'est pas constante, mais l'erreur relative est plus faible pour le maillage colocalisé.

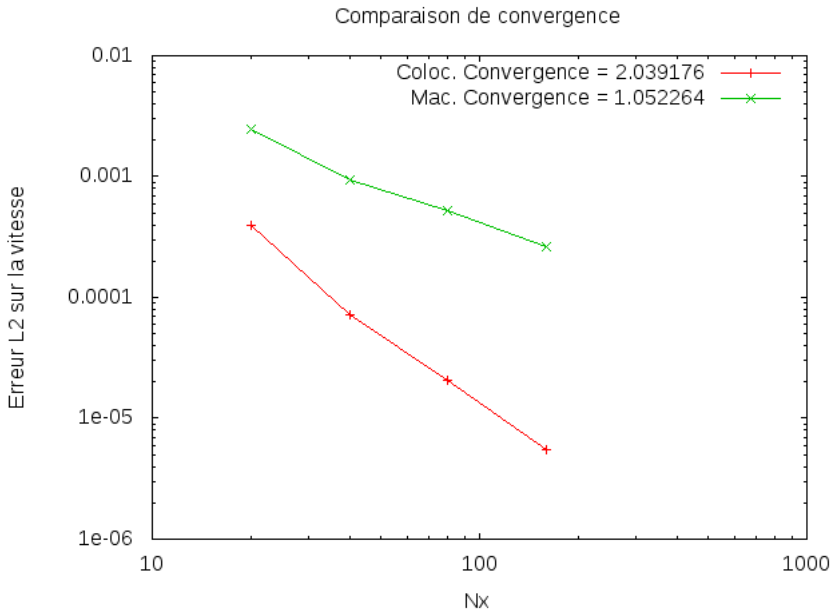


FIG. 4.7: Les anneaux- $\eta^- = 1, \eta^+ = 10, \gamma = 1$. La convergence n'est pas constante, mais l'erreur est plus faible sur maillage colocalisé.

des points de discrétisation sur notre domaine, et doit donc naturellement réduire

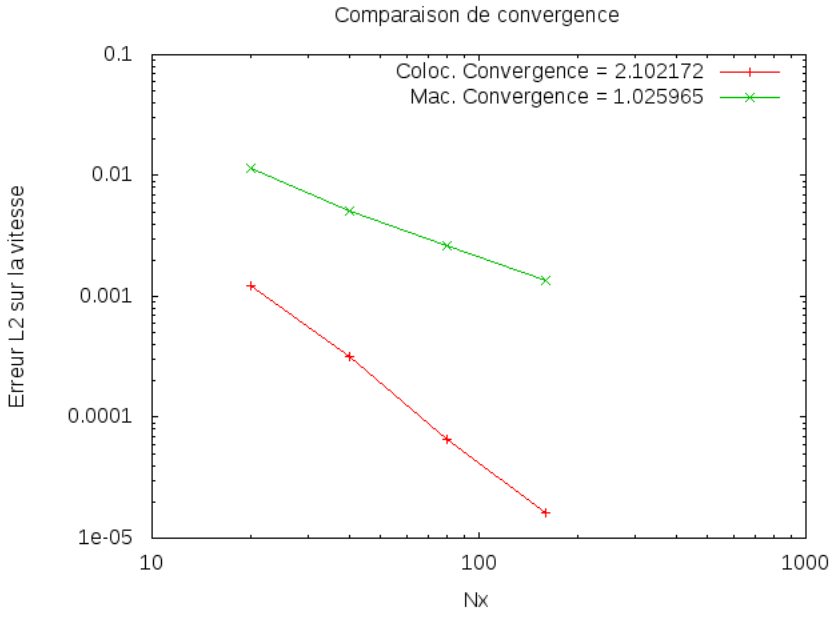


FIG. 4.8: Les anneaux- $\eta^- = 1, \eta^+ = 50, \gamma = 1$. Seule la discrétisation sur maillage colocalisé conserve l'ordre 2 en norme L^2.

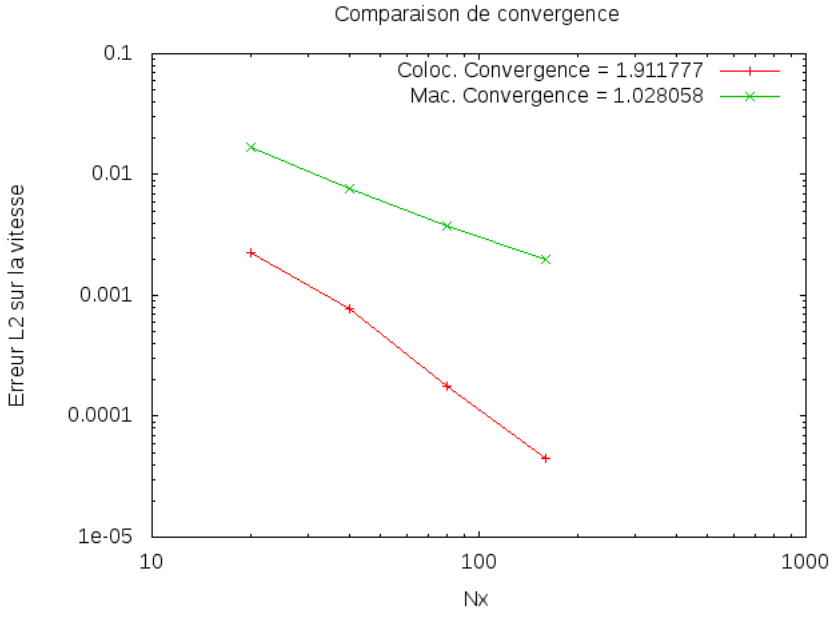


FIG. 4.9: Les anneaux- $\eta^- = 1, \eta^+ = 100, \gamma = 1$

l'erreur. D'autre part, nous observons pour les simulations axisymétriques sur le maillage colocalisé une concentration de l'erreur sur l'axe de symétrie, nous ne dis-

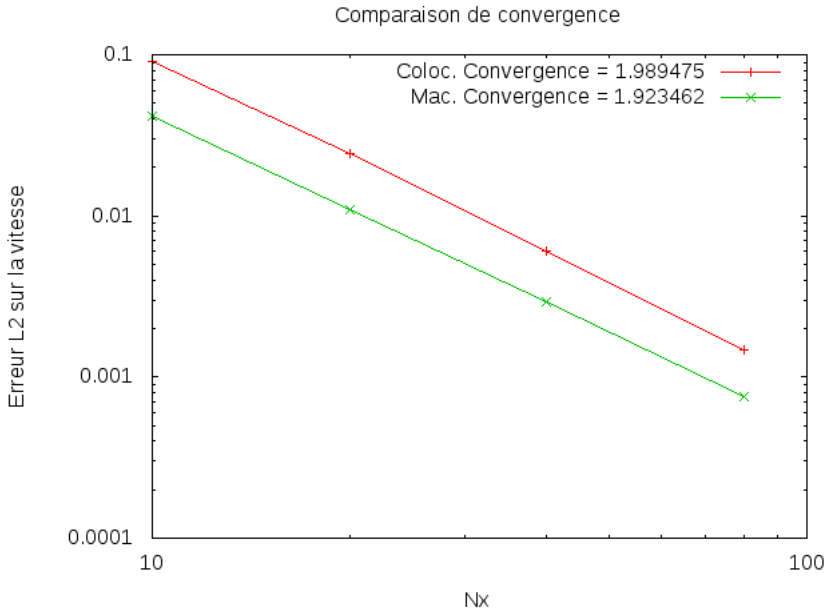


FIG. 4.10: Comparaison sur le cas sinusoïdale axisymétrique.g sans vitesse radiale.

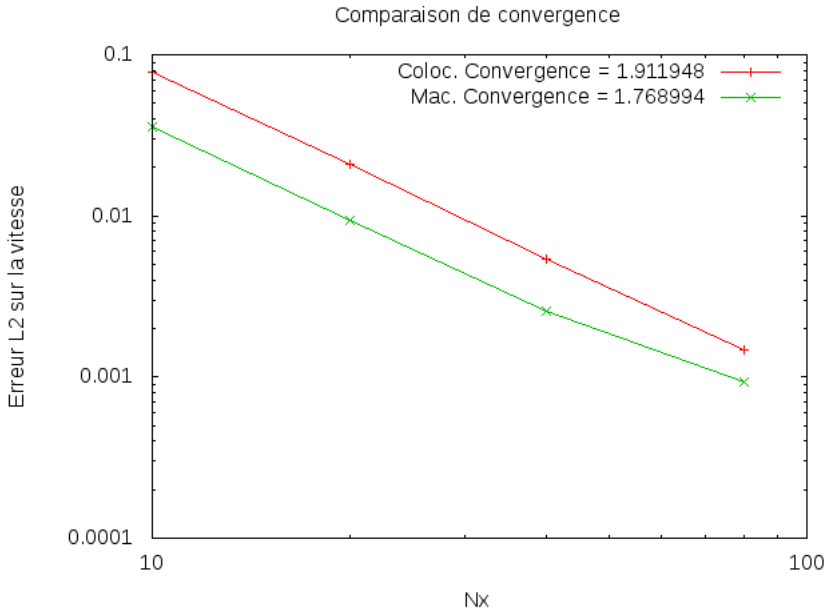


FIG. 4.11: Comparaison sur un cas sinusoïdale axisymétrique.g avec vitesse radiale monofluide.

posons effectivement pas d'extrapolation permettant d'assurer l'ordre 2 sur l'axe de symétrie comme pour le maillage MAC.

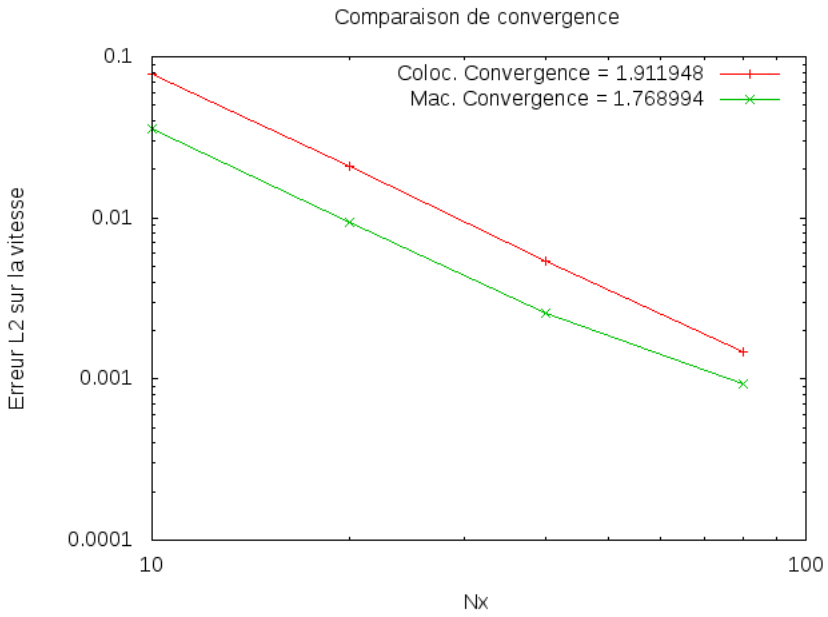


FIG. 4.12: Comparaison sur un cas polynomial axisymétrique.g monofluide.

Chapitre 5

Simulations d'évolution de gouttes

Sommaire

5.1 Évolution 2D bifluide 117

5.2 Évolution 3D-axisymétrique bifluide 119

Jusqu'à présent, nous nous sommes intéressés au calcul des champs de vitesse et de pression pour un état stationnaire. Nous proposons dans ce chapitre d'étudier l'évolution d'une interface - une goutte - dans un écoulement réaliste avec une géométrie complexe.

Ainsi, nous allons étudier le comportement du modèle suivant :

$$\begin{aligned} -\alpha\Delta V + \nabla P + \frac{\mathbb{1}_{\Omega_p}}{\epsilon} V &= \gamma c \delta_{\phi=0} \vec{n}, \\ \nabla \cdot V &= 0, \\ \partial_t \phi + (V \cdot \nabla)\, \phi &= 0, \\ \phi\,(0) &= \phi_{\text{init}}, \end{aligned} \tag{5.1}$$

où α décrit la viscosité, soit une constante par phase.

Toutes les simulations proposées par la suite sont effectuées sur maillage colocalisé. On pourra trouver d'autres méthodes pour étudier ce problème en [30, 31].

5.1 Évolution 2D bifluide

Nous couplons maintenant le solveur de Stokes 2D avec le transport de la fonction level set afin de simuler l'évolution d'une bulle dans un canal.

Dans ces simulations, nous avons choisi de ne pas pénaliser l'espace.

Le cas qui suit a été étudié par [56] et repris par [9, 8]. Nous présentons qua-

litativement les mêmes résultats en présence de tension de surface en Fig: 5.1. On observe que d'une géométrie initiale, la forme de la goutte tend à se stabiliser et ne plus subir qu'une translation. L'intérêt pour une telle simulation est d'observer le champ de vitesse sur le contour de la goutte, lieu des réactions chimiques.

On présente aussi en Fig: 5.3 le cas de la déformation d'un carré pour acquérir la forme d'une sphère grâce à la tension de surface. Le carré initial est présenté de biais afin d'éviter d'avoir une interface confondue avec le maillage. Les calculs présentés sont effectués sur un carré unité, avec une viscosité de 1 dans chaque phase et une tension de surface de 1 également. L'écriture adimensionné ne change rien à la valeur de la viscosité. Une viscosité de l'ordre de 1 pourrait correspondre à du miel liquide, pour l'exemple. Quand à la tension de surface, sa valeur n'est fonction - physiquement - que de la concentration des tensio-actifs sur l'interface. On la trouve en général plus faible dans la nature, sa valeur pour l'interface créée par de l'eau et du surfactant pulmonaire est de $2510^{-3} N.m^{-1}$.

De manière non surprenante, on observe qu'au début de la simulation, le champ de vitesse est particulièrement important là où sont les angles (le maximum de l'amplitude est de 0.21) et des recirculations apparaissent de manière symétrique. En fonction du temps, l'interface se déforme, tendant vers la forme d'un cercle. La vitesse est élevée là où la courbure est forte, mais l'amplitude du champ de vitesse atteint 0.04. In fine, l'interface atteint la forme d'un cercle et l'amplitude du champ de vitesse devient très faible (0.0016, à comparer avec le 0.21 à l'état initial). Sans surprise, le champ de vitesse induit encore un tourbillon. Ceci n'est pas surprenant à cause d'un effet d'inertie numérique : nous utilisons comme état initial pour le Lagrangien Augmenté l'état calculé précédemment. Ainsi, le champ de vitesse nous amenant d'un carré à un cercle présente des effets tourbillonnaires et reste en mémoire. Cependant, on s'aperçoit à l'amplitude de ce champ qu'il est négligeable.

Á l'état final, on observe que la pression tend comme on pouvait s'y attendre à vérifier la loi de Laplace.

Cette simulation a été conduite en une vingtaine de minutes sur un ordinateur de bureau.

5.2 Évolution 3D-axisymétrique bifluide

Nous nous plaçons dans le cas d'une contraction 2 : 1, où une goutte initiale - avec une géométrie non physique : un ovale - est présente. Cette géométrie n'est pas physique au vu de l'expérience : soit la bulle acquiert la forme "ovale applatie"

sous l'effet de la tension de surface et du champ de vitesse, soit elle acquiert la forme d'une sphère comme pour le cas de l'équation de Laplace. Notre simulation est conduite sur un domaine adimensionné dont le rapport longueur/rayon est de 8. Nous posons que la viscosité interne à la goutte est de 5 tandis que celle hors de la goutte est de 1. La tension de surface est posée à 10.

Nous présentons quatre simulations différentes. Les deux premières concernent l'évolution d'une petite goutte sur deux maillages différents : 50×400 et 100×800, les deux suivantes d'une grosse, sur les mêmes maillages que précédemment. Pour les simulations sur maillage grossier, les temps de calculs sont de l'ordre d'une cinquantaine d'heures sur un ordinateur de bureau et d'une vingtaine de jours pour le maillage le plus fin. Les calculs peuvent être accélérés en optimisant la constante de la condition (1.5) et en répartissant mieux la charge de la machine utilisée pour le calcul (notre machine était utilisée pour plusieurs applications simultanément).

Cette simulation fait apparaître l'évolution d'une bulle relativement petite d'un réservoir dans un canal, puis sa sortie hors du canal. On présente les lignes de courant du champ de vitesse, la forme de l'interface et le champ de pression.

Numériquement, on observe une très forte variation du volume pour chaque goutte. La petite Fig: 5.8 subit une perte de 10% du volume avant l'entrée dans le canal correspondant au temps d'accès à la contraction, gain de 10% en entrant dans le canal puis à nouveau perte à la sortie. La grosse Fig: 5.9 ne subit pas de perte avant l'entrée dans le canal car elle ne dispose pas de suffisamment de temps pour subir une perte. On observe alors un très gros gain de volume, nous touchons là aux difficultés de la couche limite, puis en sortie du canal, la goutte très rapide arrivant dans un milieu très lent présente une perte de masse importante.

Cet effet de variation du volume est du à la tolérance du solveur de Stokes que nous avons imposé, à savoir une divergence en norme L^2 normalisée de $1e^{-4}$. Ce choix de paramètre est un compromis entre le temps de calcul et le respect de l'incompressibilité. Cependant, il convient de préciser que dans le canal, la condition d'incompressibilité semble mieux acquise puisque le volume varie peu.

Cette simulation nous donne accès à l'effet général sur le champ de vitesse, à savoir l'état des vortex amont et aval lors du passage d'une goutte : on voit très clairement à l'entrée le vortex croître puis reprendre sa configuration initiale une fois la goutte passée.

Conclusion

Ainsi, notre schéma mixte est capable de simulations en géométrie complexe. Les effets de tension de surface sont bien capturés comme le présente le cas du carré se déformant en bulle ou encore la bulle atteignant un état stationnaire.

En 3D-axisymétrique, nous avons présenté le cas d'évolution de deux gouttes de tailles différentes et avons observé alors la limite de notre implémentation : la couche limite. Les effets de couche limite n'étant pas inclus dans notre modélisation, notre schéma est incapable de les prendre en compte et butte donc sur la condition d'incompressibilité. On s'aperçoit que le raffinement du maillage n'apporte pas plus ou moins de variation du volume des gouttes : c'est bien dans le modèle que la faiblesse réside. Cependant, qualitativement, nous pouvons observer l'effet de la présence d'une goutte dans un tel écoulement.

Ainsi, la question de l'utilisation de notre schéma est posée et il revient à l'utilisateur d'utiliser ce schéma à bon escient.

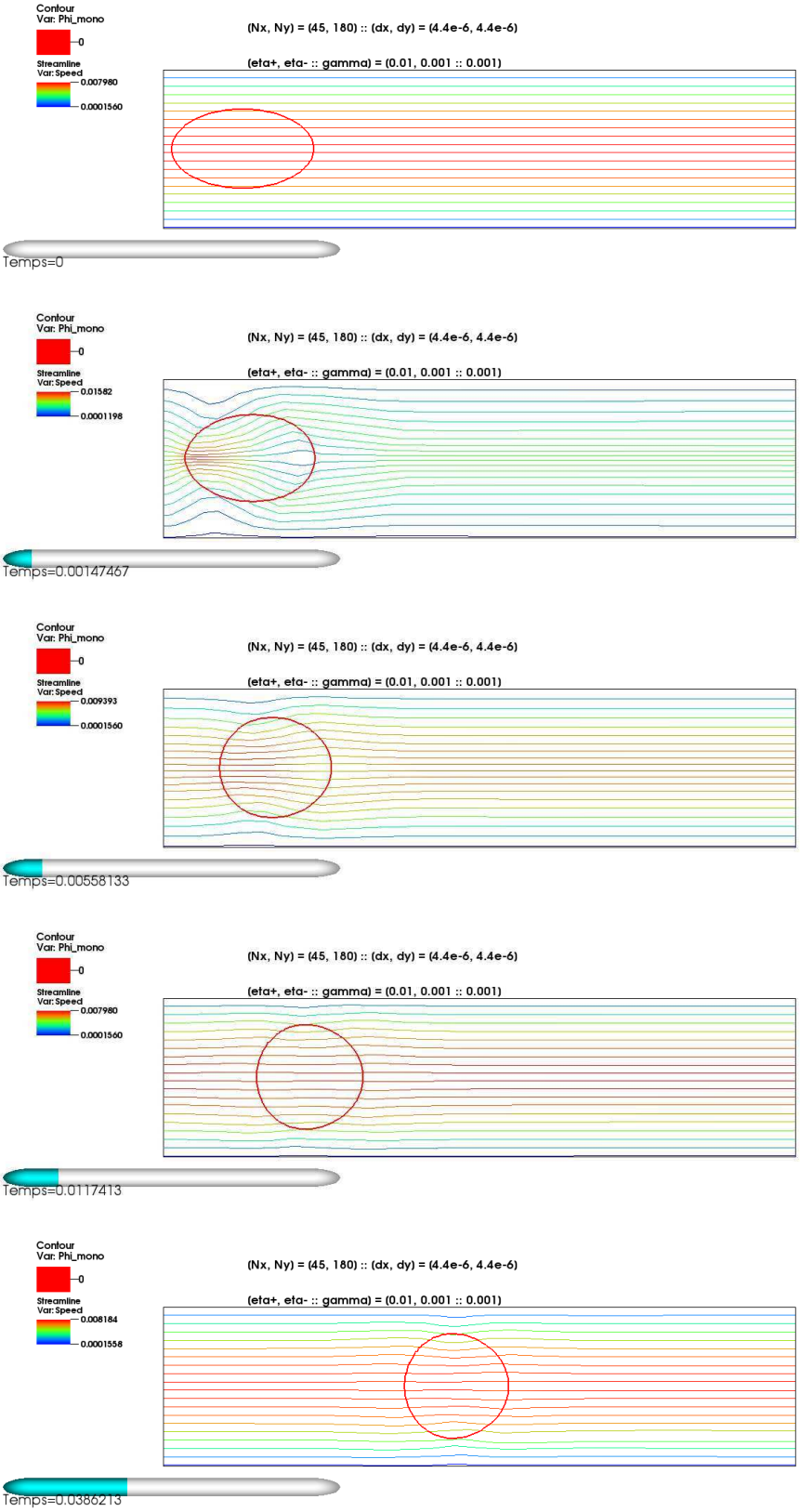


FIG. 5.1: Évolution d'une goutte dans un micro canal avec de la tension de surface. Viscosité dans la bulle : $1e^{-3}$. Viscosité du fluide porteur : $1e^{-2}$. Tension de surface : $1e^{-3}$

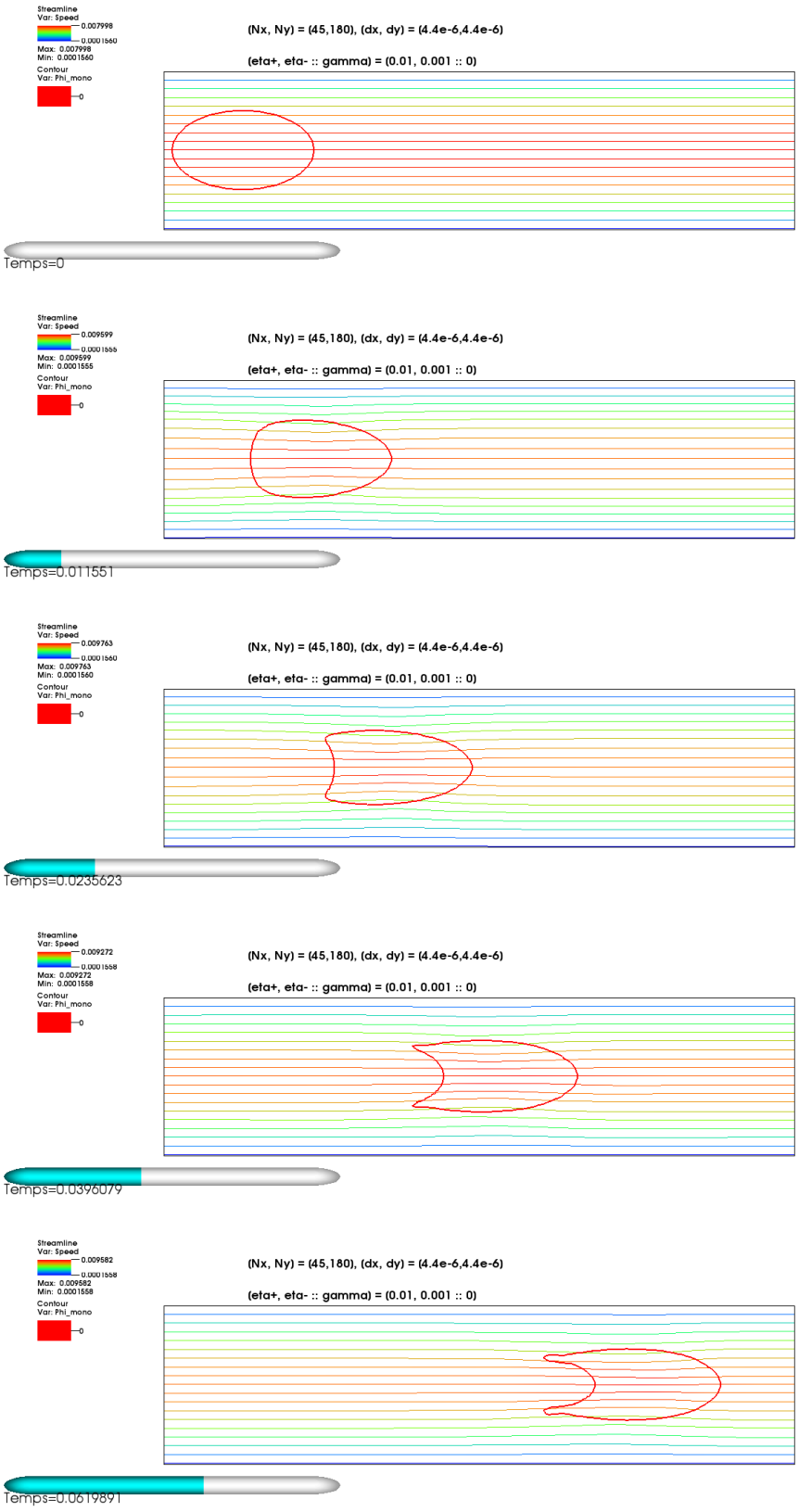


FIG. 5.2: Évolution d'une goutte dans un micro canal sans tension de surface. Viscosité dans la bulle : $1e^{-3}$. Viscosité du fluide porteur : $1e^{-2}$. On observe que la goutte se déforme et perd son aspect convexe.

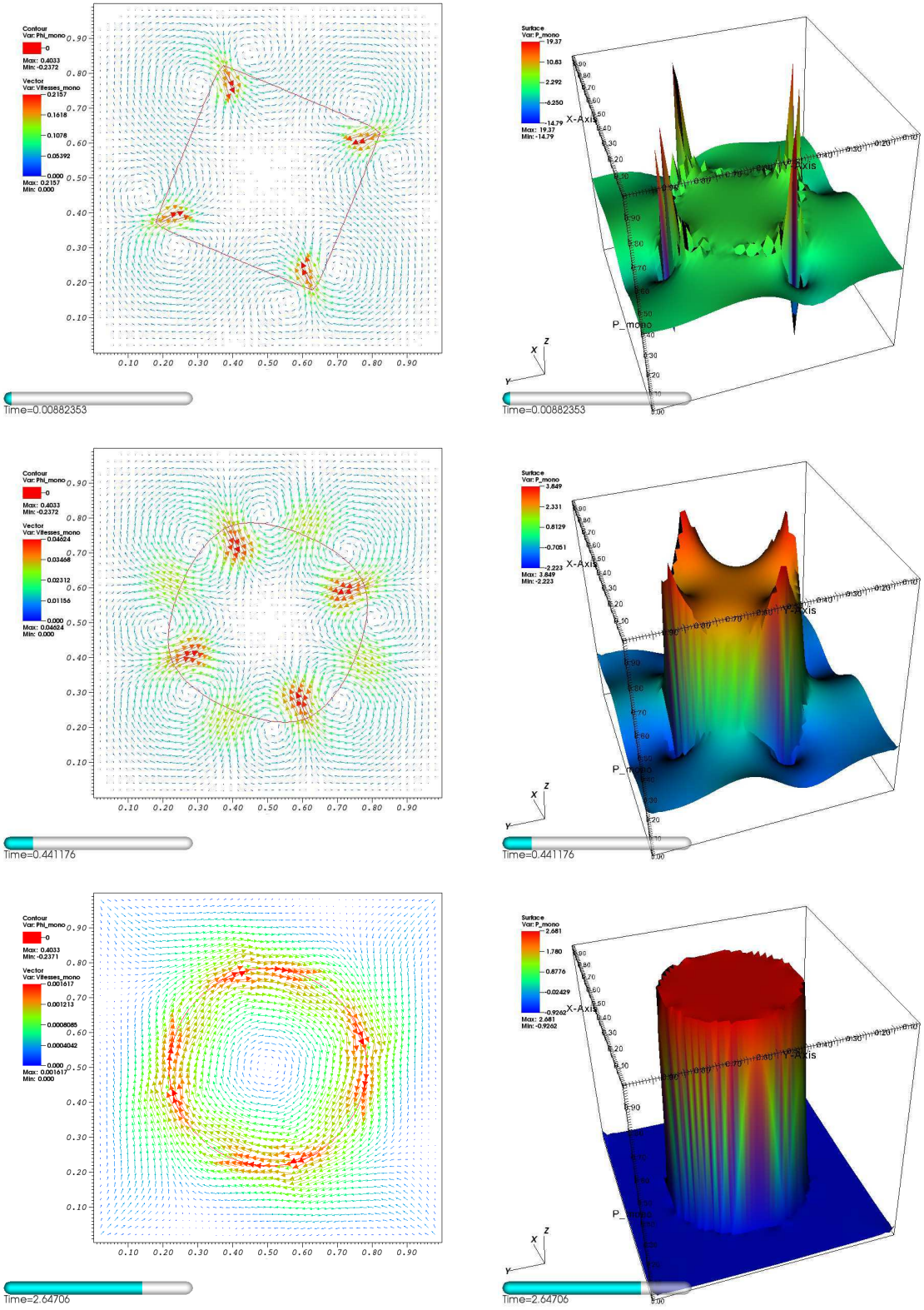


FIG. 5.3: Évolution d'une interface sous l'effet de la tension de surface. A droite, le champ de vitesse et l'interface, à gauche, le champ de pression. $\eta^+ = 1, \eta^- = 1, \gamma = 1$. Perte de masse : 0.08%

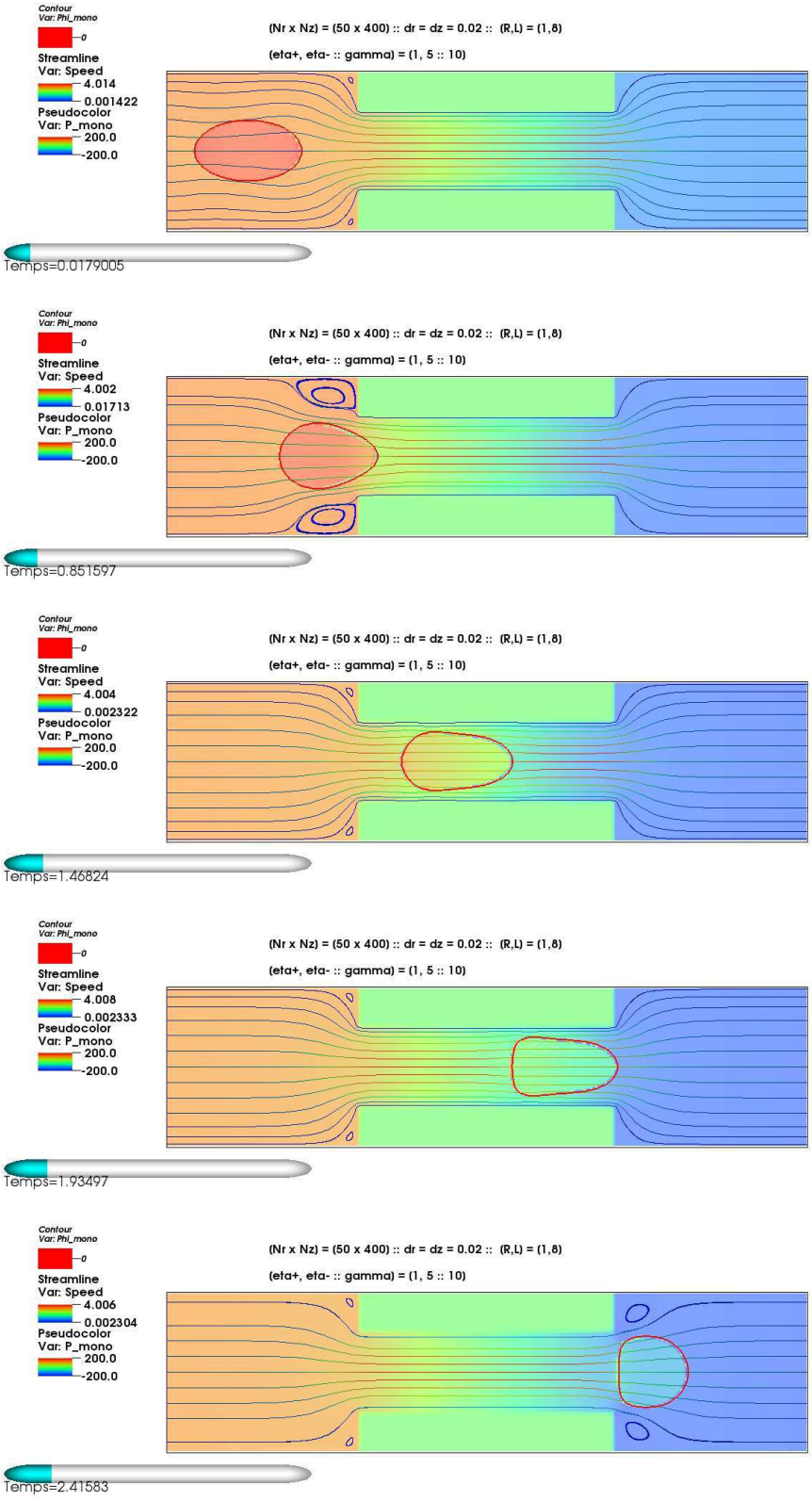


FIG. 5.4: Évolution d'une goutte dans une contraction. Maillage 50×400, $\eta^+ = 1, \eta^- = 5, \gamma = 10$.

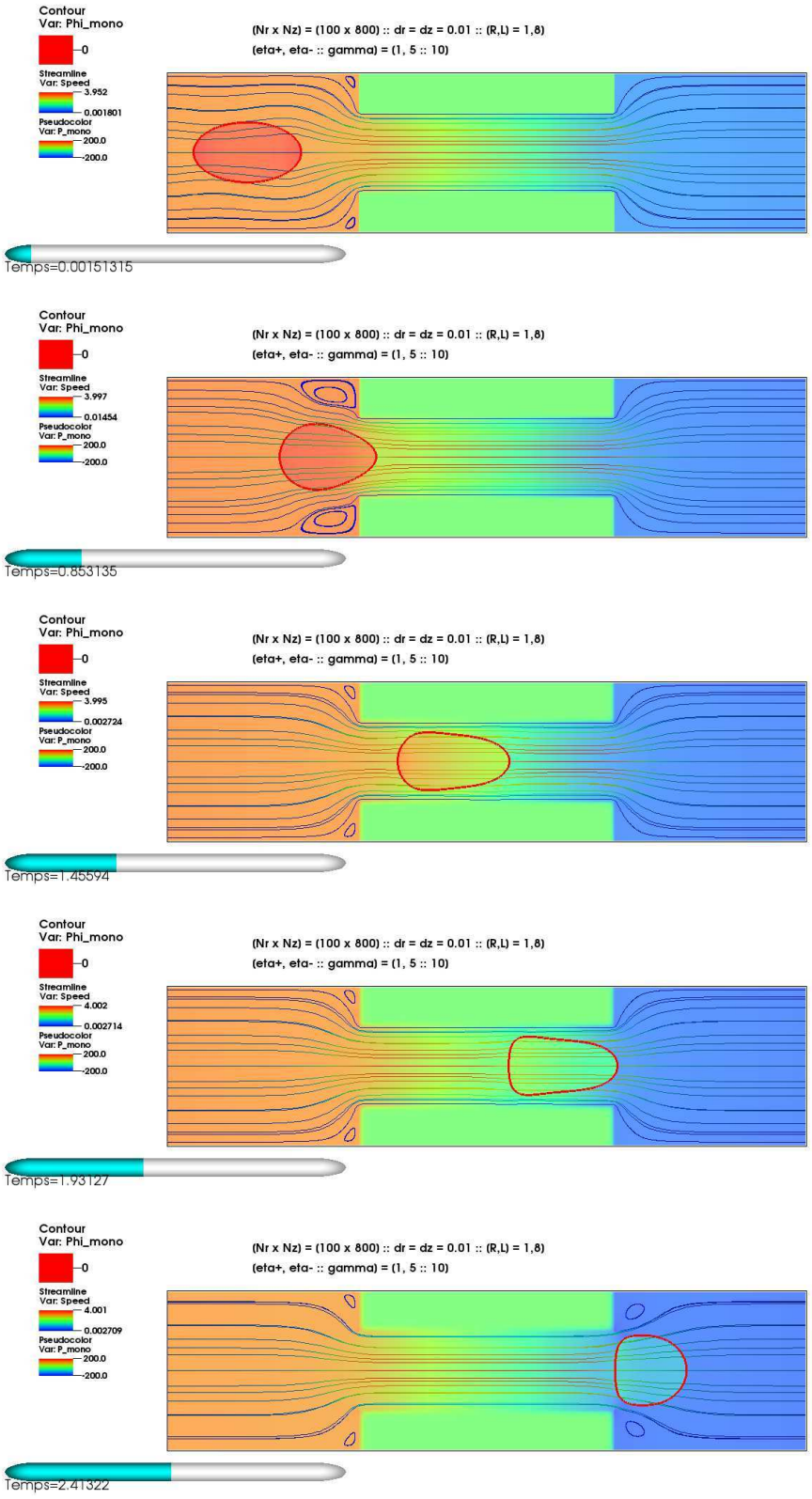


FIG. 5.5: Évolution d'une goutte dans une contraction. Maillage 100×800, $\eta^+ = 1, \eta^- = 5, \gamma = 10$.

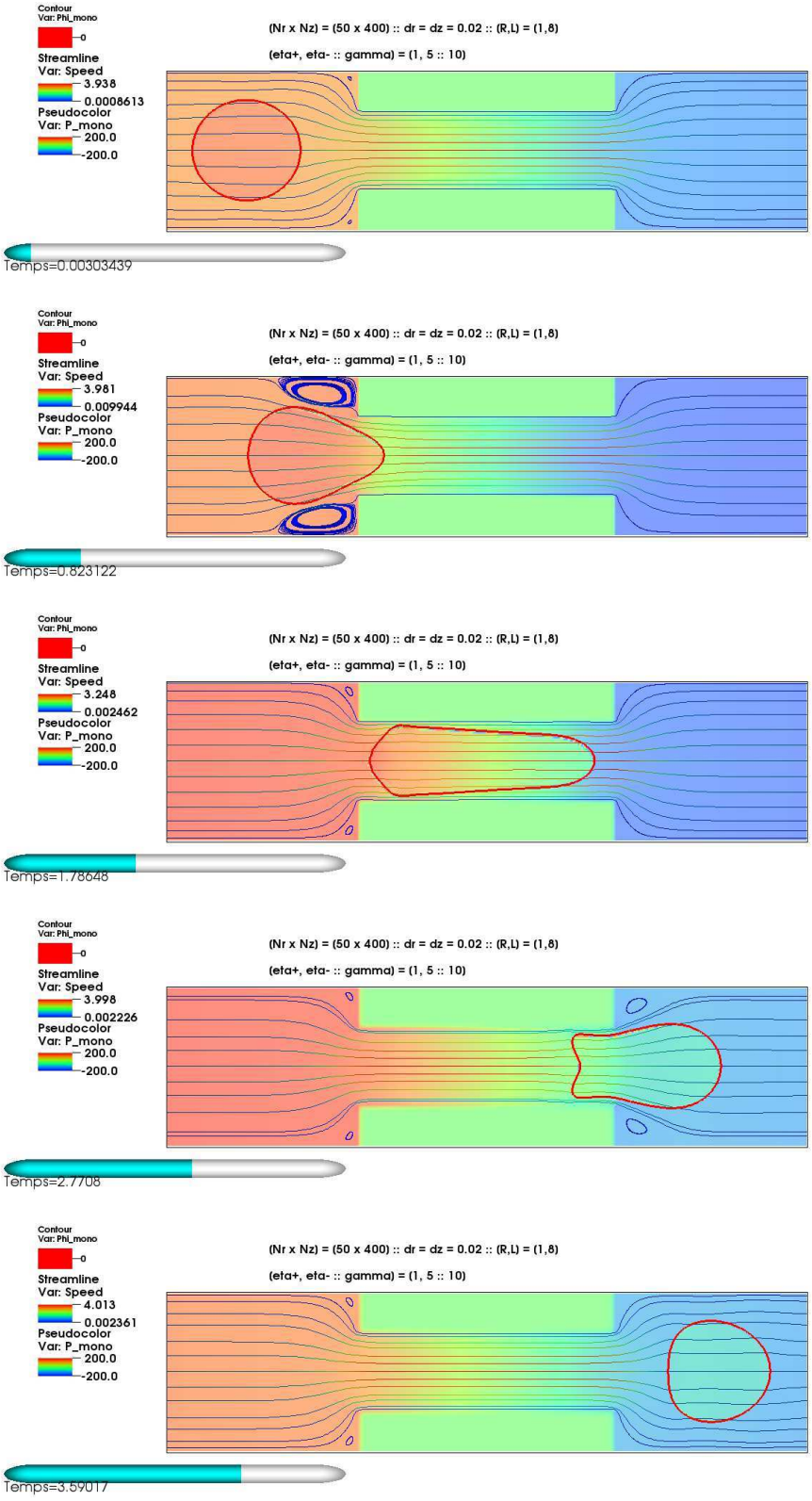


FIG. 5.6: Evolution d'une goutte dans une contraction. Maillage 50×400, $\eta^+ = 1, \eta^- = 5, \gamma = 10$.

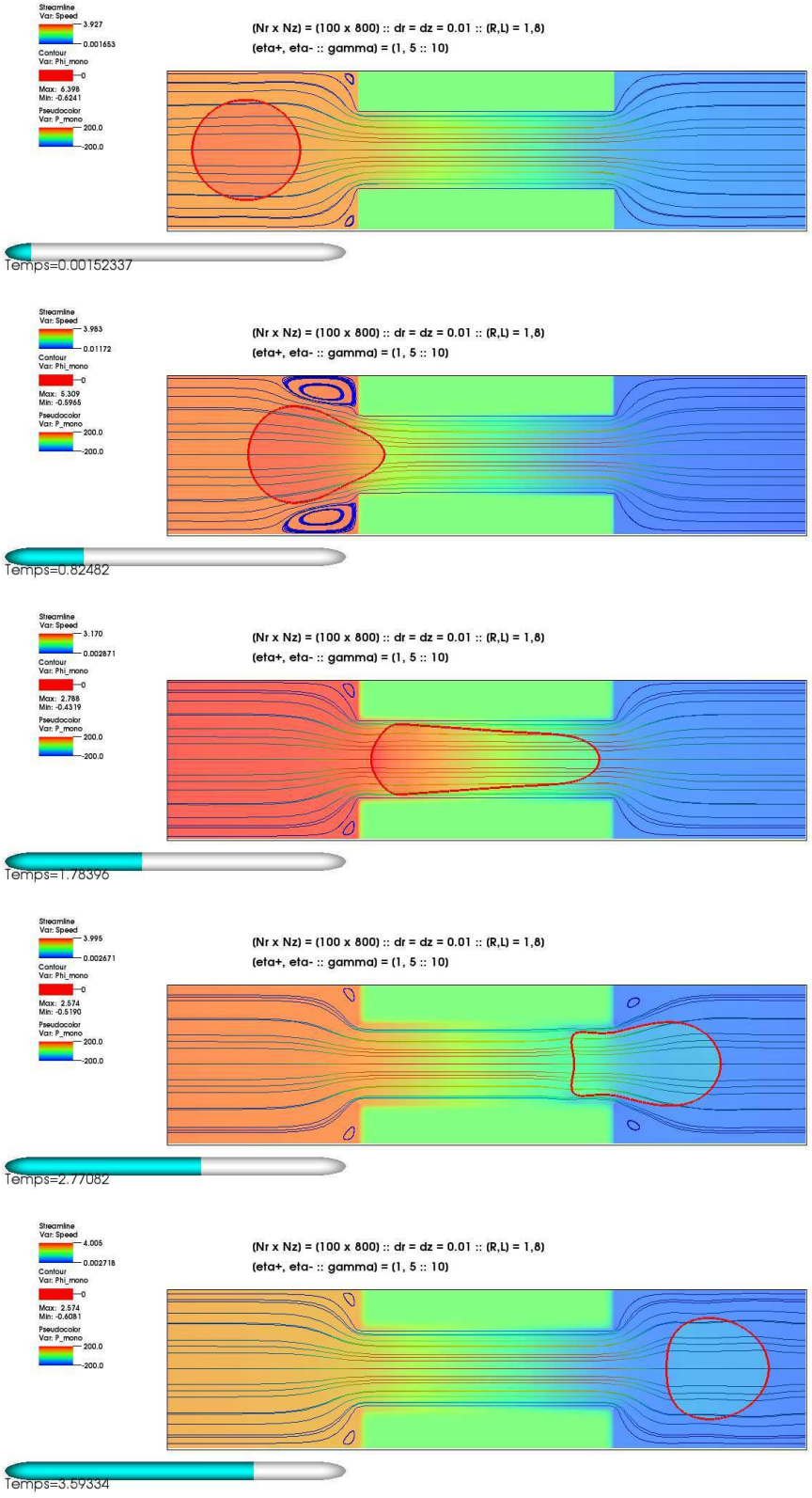


FIG. 5.7: Evolution d'une goutte dans une contraction. Maillage 100×800, $\eta^+ = 1, \eta^- = 5, \gamma = 10$.

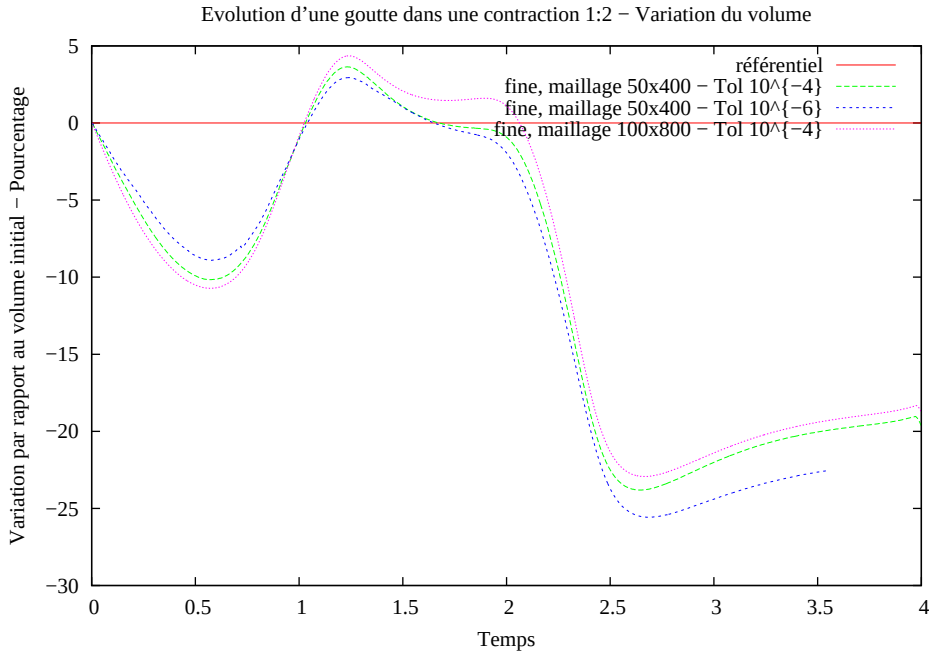


FIG. 5.8: Variation du volume pour la petite goutte Fig: 5.4 et Fig: 5.5 en fonction du maillage et de la tolérance du Lagrangien Augmenté.

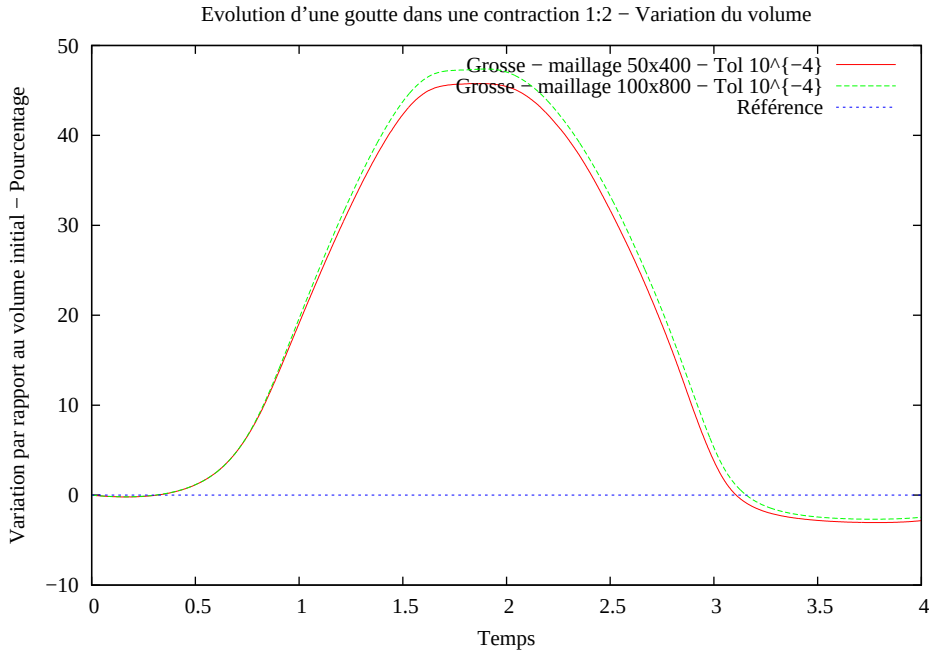


FIG. 5.9: Variation du volume pour la grosse goutte Fig: 5.6 et Fig: 5.7 en fonction du maillage et de la tolérance du Lagrangien Augmenté.

Conclusion

État des lieux Nous avons présenté dans cette partie différents aspects numériques pour les écoulements bifluides Newtoniens. Nous avons en premier lieu rappelé que notre modélisation ne permet pas la coalescence ou la rupture de jet, puis mis en avant certaines conditions de stabilité provenant du traitement explicite de la tension de surface.

Le second chapitre a été utilisé pour rappeler la formulation sur maillage MAC d'un écoulement 3D-axisymétrique. Nous avons montré comment éviter la singularité au centre du cylindre et présenté des résultats validant la convergence à l'ordre deux de la discrétisation sur maillage MAC. Nous avons aussi montré les faiblesses d'une telle discrétisation, soit pour la viscosité, soit pour la tension de surface, laquelle doit être lissée.

Le troisième chapitre a été l'occasion de présenter une nouvelle méthode numérique, soit une méthode mixte volumes finis/éléments finis. L'idée principal de la formulation est de donner une représentation de la vitesse par maille duale, permettant alors d'exprimer les conditions d'interface de manière très précise et surtout d'offrir la possibilité de ne pas lisser la tension de surface. Nous avons montré que ce schéma nous donne pour un écoulement monophasique des résultats comparables à la discrétisation sur maillage MAC, et permet de simuler des écoulements diphasiques à l'ordre deux.

Perspectives L'usage d'une représentation nous permet d'imaginer plusieurs axes d'études dans la continuité de ce doctorat.

Le premier axe est la recherche d'une représentation de l'interface continue d'une maille duale à l'autre. En effet, rien ne permet d'assurer la continuité de la vitesse d'une maille duale à l'autre lorsqu'elle partage une arrête traversée par l'interface.

Le deuxième axe d'évolution est la recherche d'un plus fort ratio de viscosité. En effet, l'utilisation d'une très forte viscosité permet numériquement de faire de la pénalisation d'ordre deux.

Un autre axe d'étude à considérer est l'utilisation de la représentation afin de

calculer un champ de vitesse étendu, permettant alors dans les problèmes d'évolution d'interface de transporter la fonction distance sans perdre son attribut "fonction-distance". En effet, tout comme pour le fast-marching, la difficulté majeure est l'initialisation de l'algorithme. Cette initialisation serait grandement facilitée par la possibilité de connaître la vitesse non pas à proximité mais sur l'interface.

Enfin, on remarque que pour des écoulements de fluides non Newtoniens, seule l'équation (et ce qu'elle implique) (3.10) et le second membre sont impactés. Ainsi, en cherchant à donner de la même manière une représentation à une partie élastique du tenseur des contraintes, un tel calcul serait envisageable.

Troisième partie

Discrétisation en temps inconditionnellement stable pour les fluides visco-élastiques

Le but de cette partie est la simulation 3D-axi de fluides visco-élastiques. On teste notre étude sur une contraction 4 : 1. Nous présenterons dans un premier chapitre la construction de notre schéma puis dans un second chapitre une étude stabilité.

Introduction

L'objet de cette partie est l'étude de la stabilité numérique de la résolution du problème d'Oldroyd-B lorsque le ratio de viscosité, noté α, tend vers zéro. Rappelons le problème obtenu dans la partie 1, en (1.77).

$$\begin{aligned} -\alpha\Delta V + \nabla P &= \nabla \cdot \sigma_p \\ \nabla \cdot V &= 0 \\ \mathrm{We}\overset{\triangledown}{\sigma_p} + \sigma &= 2\ D\left[V\right] \end{aligned} \tag{2}$$

problème auquel il convient d'adjoindre des conditions limites (pour V et σ_p) et initiales (pour σ_p).

L'étude de stabilité que nous allons présenter est effectuée sur un modèle simplifié, afin d'éviter les effets non linéaires. Ainsi, le système considéré est le suivant :

$$\begin{aligned} -\alpha\Delta V + \nabla P &= \nabla \cdot \sigma_p \\ \nabla \cdot V &= 0 \\ \mathrm{We}\partial_t\sigma_p + \sigma_p &= 2D\left[V\right] \end{aligned} \tag{3}$$

Nous allons étudier deux discrétisations en temps de (3). Pour l'une, V est discrétisé de manière explicite et pour l'autre de manière implicite. Nous proposons les semi-discrétisations en temps suivantes :

$$\begin{aligned} \sigma_p^{n+1} &= \left(1 - f\left(\delta t\right)\right)\sigma_p^n + 2f\left(\delta t\right) D\left[V^k\right], \\ -\alpha\Delta V^{n+1} + \nabla P^{n+1} &= \nabla \cdot \sigma_p^{n+1}, \\ \nabla \cdot V^{n+1} &= 0, \end{aligned} \tag{4}$$

où la fonction f définit le type de discrétisation choisie pour le terme $\mathrm{We}\partial_t\sigma_p + \sigma_p$: explicite, implicite ou exponentielle pour σ_p, et k est l'indice du temps choisi pour l'évaluation de la vitesse, n ou $n+1$. On nomme nos discrétisations ainsi : si $k = n$, alors on parlera du schéma $V-$explicite, sinon, on parlera du schéma $V-$implicite. De la même manière, on parlera des schémas $\sigma-$exponentiel, $\sigma-$implicite et $\sigma-$explicite.

Suivant le schéma choisi pour σ_p, la fonction f s'écrit ainsi :

$$f(\delta t) = \begin{cases} \frac{\delta t}{\mathrm{We}} & \text{pour le schéma } \sigma - \text{explicite}, \\ \frac{\delta t}{\mathrm{We}+\delta t} & \text{pour le schéma } \sigma - \text{implicite}, \\ 1 - e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}} & \text{pour le schéma } \sigma - \text{exponentiel}. \end{cases} \tag{5}$$

Nous présentons en Algo: 2 l'algorithme $V-$explicite et en Algo: 3 sa version $V-$implicite. Ce sont sur ces deux schémas que vont porter les études de stabilité.

L'analyse de stabilité pour le schéma $V-$explicite / σ-explicite a été effectuée par J. Dambrine [13] et il a été déterminé que $\delta t \leq \min\left(\frac{\alpha^2}{2}, \frac{1}{2}\right)$ est une condition nécessaire de stabilité. Bien entendu, à ce résultat doit être ajouté la condition de stabilité relative au transport pour le modèle complet (2).

Algorithme 2 Discrétisation $V-$explicite en temps de (3)

Entrées: $\alpha, T, \sigma_p^n, V^n$

1: $t = 0$
2: **tant que** $t < T$ **faire**
3: Résoudre :

$$\sigma_p^{n+1} = (1 - f(\delta t))\,\sigma_p^n + 2f(\delta t)\,D[V^n]$$

4: Résoudre le système linéaire :

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \left(2\alpha D\left(V^{n+1}\right)\right) + \nabla P^{n+1} &= \nabla \cdot \sigma_p^{n+1} \\ \nabla \cdot V^n &= 0 \end{aligned}$$

5: $t \leftarrow t + \delta t$
6: $n \leftarrow n + 1$
7: **fin tant que**

Si nous choisissons de poser $k = n + 1$, la divergence du tenseur des taux de déformations relative au polymère s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \sigma_p^{n+1} &= \nabla \cdot \left((1 - f(\delta t))\,\sigma_p^n + 2f(\delta t)\,D\left[V^{n+1}\right]\right), \\ &= (1 - f(\delta t))\,\nabla \cdot \sigma_p^n + \nabla \cdot \left(2f(\delta t)\,D\left[V^{n+1}\right]\right), \end{aligned} \tag{6}$$

Résoudre l'équation (6) n'est évidemment pas possible car V^{n+1} est inconnue. Mais

Algorithme 3 Discrétisation $V-$implicite en temps de (3)

Entrées: α, T, σ_p^n

1: $t = 0$
2: **tant que** $t < T$ **faire**
3: Résoudre le système linéaire :

$$-\nabla \cdot \left(2\left(\alpha + f\left(\delta t\right)\right) D\left(V^{n+1}\right)\right) + \nabla P^{n+1} = \left(1 - f\left(\delta t\right)\right) \nabla \cdot \sigma_p^n$$
$$\nabla \cdot V^{n+1} = 0$$

4: Résoudre :

$$\sigma_p^{n+1} = \left(1 - f\left(\delta t\right)\right) \sigma_p^n + 2f\left(\delta t\right) D\left[V^{n+1}\right]$$

5: $t \leftarrow t + \delta t$
6: $n \leftarrow n + 1$
7: **fin tant que**

si on reporte l'équation (6) dans l'équation de Stokes on trouve :

$$\begin{aligned} -\left(\alpha + f\left(\delta t\right)\right) \Delta V^{n+1} + \nabla P^{n+1} &= \left(1 - f\left(\delta t\right)\right) \nabla \cdot \sigma_p^n, \\ \nabla \cdot V^{n+1} &= 0. \end{aligned} \tag{7}$$

Ce système est particulièrement intéressant dans la mesure où il suffit de modifier la valeur de viscosité par rapport à celle du problème de Stokes pour l'implémenter. On observe d'autre part que le terme portant sur le Laplacien n'est plus α seul mais une quantité dépendante du temps qui ne tend pas vers zéro avec α. Bien évidemment, cette quantité dépend de δt. On est donc en droit d'espérer un comportement bien plus stable avec ce schéma lorsque α devient petit.

Le premier chapitre de cette partie sera dédié à une étude de stabilité L^2 permettant de prendre en compte des conditions limites de type Dirichlet non homogène. Le second chapitre présentera une analyse de Fourrier pour une version discrète en espace et en temps, lequel requiert des conditions limites périodiques mais qui peut prendre en compte la discrétisation spatiale utilisée. Enfin, une série de résultats sera présentée dans le troisième chapitre.

Chapitre 1

Étude de stabilité dans le cas de conditions aux limites de types Dirichlet non homogènes

Le but de cette étude est de montrer un résultat de stabilité pour le schéma $V-$implicite de (3) présenté dans l'introduction de cette partie dans sa forme semi-discrète, laquelle est rappelée ci-dessous :

$$\begin{aligned} \sigma_p^{n+1} &= \left(1 - f\left(\delta t\right)\right)\sigma_p^n + 2f\left(\delta t\right) D\left[V^{n+1}\right], \\ &= \sigma_p^n - f\left(\delta t\right)\left(\sigma_p^n - 2D\left[V^{n+1}\right]\right), \\ \frac{1}{1-f\left(\delta t\right)}\nabla P^{n+1} &= \frac{\alpha + f\left(\delta t\right)}{1-f\left(\delta t\right)}\Delta V^{n+1} + \nabla\cdot\sigma_p^n, \\ \nabla\cdot V^{n+1} &= 0. \end{aligned} \tag{1.1}$$

A ce système, pour ne pas avoir de solutions triviales $V = 0$, $P = 0$ et $\sigma_p = 0$, nous devons soit imposer des conditions limites sur la vitesse de type dirichlet non homogène, soit imposer un état initial sur σ_p non nul. Pour la démonstration, nous imposons des conditions limites sur la vitesse de type Dirichlet non homogène constante en temps soit $V^n = \tilde{V}$, fonction continue sur $\partial\Omega$, pour tout n.

Toute la démonstration qui suit est très similaire aux travaux de J. Dambrine, et fait preuve donc du même niveau de complexité. Elle diffère principalement par l'usage de la vitesse au temps $n+1$ dans l'équation d'évolution en temps.

Pour la suite du chapitre, $\|\cdot\|_2$ représente la norme $L^2\left(\Omega\right)$ et $\langle\cdot,\cdot\rangle$ le produit scalaire dans L^2. On a donc :

Proposition 2 *Soit σ_p^{n+1}, V^{n+1}, P^{n+1} la solution de* (1.1).

Posons

$$\begin{aligned} X^n &= \sigma_p^n - 2D\left[V^{n+1}\right] \\ &= \frac{\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n}{-f\left(\Delta t\right)} \end{aligned} \tag{1.2}$$

Si

$$0 < f\left(\delta t\right) < 1,$$

alors on a :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \left\|\sigma_p^{n+2} - \sigma_p^{n+1}\right\|_2^2 \leq \left\|\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n\right\|_2^2$$

ce qui implique que le schéma est stable.

Preuve Évaluons la différence entre les temps $n+2$ et $n+1$ de l'équation de Stokes :

$$\begin{aligned} \frac{1}{1-f\left(\delta t\right)}\left(\nabla P^{n+2} - \nabla P^{n+1}\right) =& \frac{\alpha + f\left(\delta t\right)}{1-f\left(\delta t\right)}\left(\Delta V^{n+2} - \Delta V^{n+1}\right) \\ &+ \left(\nabla \cdot \sigma_p^{n+1} - \nabla \cdot \sigma_p^n\right). \end{aligned} \tag{1.3}$$

Appliquons maintenant le produit scalaire de (1.3) avec $V^{n+2} - V^{n+1}$:

$$\begin{aligned} &\frac{\alpha + f\left(\delta t\right)}{1-f\left(\delta t\right)}\langle \Delta V^{n+2} - \Delta V^{n+1}, V^{n+2} - V^{n+1}\rangle \\ &\qquad + \langle \nabla \cdot \sigma_p^{n+1} - \nabla \cdot \sigma_p^n, V^{n+2} - V^{n+1}\rangle \\ &= \frac{1}{1-f\left(\delta t\right)}\langle \nabla P^{n+2} - \nabla P^{n+1}, V^{n+2} - V^{n+1}\rangle. \end{aligned}$$

Notons que $V^{n+2} - V^{n+1}$ vérifie une condition de Dirichlet constante au bord.

La condition d'incompressibilité et les conditions limites nous donnent :

$$-\frac{\alpha + f\left(\delta t\right)}{1-f\left(\delta t\right)}\left\|\nabla V^{n+2} - \nabla V^{n+1}\right\|_2^2 - \langle \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n, \nabla V^{n+2} - \nabla V^{n+1}\rangle = 0. \tag{1.4}$$

Comme on a :

$$\left\|D\left[V\right]\right\|_2^2 = \left\|\frac{\nabla V + \nabla V^t}{2}\right\|_2^2 = \left\|\nabla V\right\|_2^2,$$

on peut écrire, en imposant $0 < f\left(\delta t\right) < 1$ et en utilisant (1.2) :

$$\frac{\alpha + f\left(\delta t\right)}{f\left(\delta t\right)\left(1-f\left(\delta t\right)\right)}\left\|D\left[V^{n+2}\right] - D\left[V^{n+1}\right]\right\|_2^2 = \langle X^n, \nabla V^{n+2} - \nabla V^{n+1}\rangle. \tag{1.5}$$

En rappelant que $X^n = \sigma_p^n - 2D\left[V^{n+1}\right]$, et en utilisant (1.2) nous trouvons

$$X^{n+1} = \left(1 - f\left(\delta t\right)\right) X^n - 2\left(D\left[V^{n+2}\right] - D\left[V^{n+1}\right]\right).$$

Appliquons à nouveau le produit scalaire avec X^{n+1} pour obtenir :

$$\begin{aligned}\left\|X^{n+1}\right\|_2^2 = &\left(1 - f\left(\delta t\right)\right)\left\langle X^n, X^{n+1}\right\rangle \\ &- 2\langle D\left[V^{n+2}\right] - D\left[V^{n+1}\right], X^{n+1} - X^n\rangle \\ &- 2\langle D\left[V^{n+2}\right] - D\left[V^{n+1}\right], X^n\rangle.\end{aligned} \tag{1.6}$$

L'inégalité de Young, avec $\epsilon > 0$ nous donne :

$$\begin{aligned}-2\langle D\left[V^{n+2}\right] - D\left[V^{n+1}\right], X^{n+1} - X^n\rangle \leq &\left|2\langle D\left[V^{n+2}\right] - D\left[V^{n+1}\right], X^{n+1} - X^n\rangle\right|, \\ \leq &\frac{1}{\epsilon}\left\|D\left[V^{n+2}\right] - D\left[V^{n+1}\right]\right\|_2^2 \\ &+ \epsilon\left\|X^{n+1} - X^n\right\|_2^2,\end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned}\left\|X^{n+1}\right\|_2^2 \leq &\left(1 - f\left(\delta t\right)\right)\left\langle X^n, X^{n+1}\right\rangle \\ &+ \frac{1}{\epsilon}\left\|D\left[V^{n+2}\right] - D\left[V^{n+1}\right]\right\|_2^2 \\ &+ \epsilon\left\|X^{n+1} - X^n\right\|_2^2 \\ &- 2\langle D\left[V^{n+2}\right] - D\left[V^{n+1}\right], X^n\rangle.\end{aligned} \tag{1.7}$$

Ainsi, en développant $\epsilon||X^{n+1} - X^n||_2^2$ et en utilisant (1.5) nous trouvons :

$$\begin{aligned}\left(1 - \epsilon\right)\left\|X^{n+1}\right\|_2^2 \leq &\left(1 - f\left(\delta t\right) - 2\epsilon\right)\left\langle X^n, X^{n+1}\right\rangle \\ &+ \left(\frac{1}{\epsilon} - 2\frac{\alpha + f\left(\delta t\right)}{f\left(\delta t\right)\left(1 - f\left(\delta t\right)\right)}\right)\left\|D\left[V^{n+2}\right] - D\left[V^{n+1}\right]\right\|_2^2 + \epsilon\left\|X^n\right\|_2^2.\end{aligned} \tag{1.8}$$

Ainsi, en posant $\epsilon = \frac{1-f(\delta t)}{2}$ - qui est strictement positive tant que $0 < f\left(\delta t\right) < 1$ - on obtient :

$$\begin{aligned}\frac{1 + f\left(\delta t\right)}{2}\left\|X^{n+1}\right\|_2^2 \leq &\left(\frac{2}{1 - f\left(\delta t\right)} - 2\frac{\alpha + f\left(\delta t\right)}{f\left(\delta t\right)\left(1 - f\left(\delta t\right)\right)}\right)\left\|D\left[V^{n+2}\right] - D\left[V^{n+1}\right]\right\|_2^2 \\ &+ \frac{1 - f\left(\delta t\right)}{2}\left\|X^n\right\|_2^2,\end{aligned}$$

soit :

$$\left\|X^{n+1}\right\|_2^2 \leq \frac{-4\alpha}{f\left(\delta t\right)\left(1+f\left(\delta t\right)\right)\left(1-f\left(\delta t\right)\right)} \left\|D\left[V^{n+2}\right]-D\left[V^{n+1}\right]\right\|_2^2 + \frac{1-f\left(\delta t\right)}{1+f\left(\delta\right)} \left\|X^n\right\|_2^2 .$$

Tant que la condition $0 < f\left(\delta t\right) < 1$ est vérifiée, alors $\frac{-4\alpha}{f(\delta t)(1+f(\delta t))(1-f(\delta t))}$ est négatif, tandis que $\frac{1-f(\delta t)}{1+f(\delta)}$ est positif, mais plus petit que 1.
On peut ré-écrire ce résultat sous la forme :

$$\left\|\sigma_p^{n+2}-\sigma_p^{n+1}\right\|_2^2 \leq \left\|\sigma_p^{n+1}-\sigma_p^{n}\right\|_2^2 . \tag{1.9}$$

Ceci clos donc la démonstration de la proposition 2.

Ainsi, la condition de stabilité pour la semi-discrétisation en temps est :

$$0 < f\left(\delta t\right) < 1, \tag{1.10}$$

ce qui est validé pour le schéma $\sigma-$explicite si $0 < \delta t < We$ et ce qui l'est toujours sinon.

Chapitre 2

Stabilité du schéma

Sommaire

2.1 Cas continu 142

2.2 Cas totalement discret 150

2.3 Conclusion partielle 154

Le but de ce chapitre est de présenter une preuve alternative du résultat de stabilité du chapitre précédent, reposant sur la transformée de Fourier en espace. L'avantage est que la méthode s'étend au cas complètement discret en utilisant la transformée de Fourier. L'inconvénient est que l'on est obligé de se restreindre au cas périodique. La discrétisation totale sera effectuée sur maillage MAC.

L'idée principale de cette étude est la suivante : Si on note $\widehat{\sigma_p^n}$ la transformée de Fourier en notation de Voigt [1] en espace au temps de n de la variable σ_p, on cherche à écrire :

$$\begin{aligned} \widehat{\sigma_p^{n+1}} &= A\widehat{\sigma_p^n} \\ &= A^{n+1}\widehat{\sigma_p^0}, \end{aligned} \tag{2.1}$$

où A est appelée la matrice d'amplification. On trouve donc ceci :

$$\begin{aligned} \|\widehat{\sigma_p^{n+1}}\|_2 &= \|A\widehat{\sigma_p^n}\|_2, \\ &\leq \|A\|_2\|\widehat{\sigma_p^n}\|_2, \\ &\leq \|A^{n+1}\|_2\|\widehat{\sigma_p^0}\|_2. \end{aligned} \tag{2.2}$$

[1] Les matrices symétriques sont écrites sous forme de vecteur.

Or, il se trouve que, pour toute matrice B :

$$\begin{aligned} \|B\|_2 &\geq \rho(B), \\ \|B^n\|_2 &\geq (\rho(B))^n, \end{aligned} \tag{2.3}$$

où ρ définit ici le rayon spectrale de la matrice B.

Il se trouve que la matrice A est normale car antisymétrique, ce qui implique alors :

$$\begin{aligned} \|A\|_2 &= \rho(A), \\ \|A^n\|_2 &= (\rho(A))^n, \end{aligned} \tag{2.4}$$

Si on montre qu'en valeur absolue, le rayon spectrale de A est plus petit que un, ce qui revient à dire que les valeurs propres de A sont en valeur absolue inférieures à un, ou que l'on trouve une condition pour satisfaire cette relation, alors on montre qu'en norme L^2, les coefficients de Fourier sont bornés, et qu'ainsi, le schéma est stable. Comme la matrice A est normale, c'est une condition nécessaire et suffisante [4].

Pour des raisons de simplicité, nous présenterons une preuve en deux dimensions, bien que la méthode soit analogue en 3D et 3D axisymétrique. La méthode utilisée est décrite dans [52].

2.1 Cas continu

Nous considérons simultanément les versions V-explicite (2.5) et V-implicite (2.6) posées sur tout l'espace $\mathbb{R}^2$, ou bien sur le tore Π^2, avec $0 < f(\delta t) < 1$:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \sigma_p^n &= -\alpha \Delta V^n + \nabla P^n, \\ \nabla \cdot V^n &= 0, \\ \sigma_p^{n+1} &= (1 - f(\delta t))\, \sigma_p^n + 2 f(\delta t)\, D[V^n], \\ \sigma_p^0 &= 0, \end{cases} \tag{2.5}$$

et

$$\begin{cases} \nabla \cdot \sigma_p^n &= -\frac{\alpha + f(\delta t)}{1 - f(\delta t)} \Delta V^{n+1} + \frac{1}{1 - f(\delta t)} \nabla P^{n+1}, \\ \nabla \cdot V^{n+1} &= 0, \\ \sigma_p^{n+1} &= (1 - f(\delta t))\, \sigma_p^n + 2 f(\delta t)\, D[V^{n+1}], \\ \sigma_p^0 &= 0. \end{cases} \tag{2.6}$$

En notant $\widehat{f(x,y)}$ la transformée de Fourier d'une fonction f et en appliquant la transformée de Fourier à (2.6) et à (2.5) on trouve les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \widehat{\sigma_p^{n+1}} &= \left[(1 - f(\delta t)) I + 2\frac{f(\delta t)}{\nu(\delta t)} F \right] \widehat{\sigma_p^n}, \\ \widehat{\sigma_p^0} &= 0. \end{aligned} \tag{2.7}$$

avec F l'opérateur correspondant au système de Stokes et où :

$$\nu(\delta t) = \begin{cases} \alpha & \text{pour (2.5)}, \\ (\alpha + f(\delta t))(1 - f(\delta t))^{-1} & \text{pour (2.6)}. \end{cases} \tag{2.8}$$

L'inverse de l'opérateur de Stokes dans l'espace de Fourier, c'est-à-dire

$$w = F^{-1}(F\widehat{\sigma_p})$$

est solution de :

$$\begin{aligned} -\alpha \Delta w + \nabla P &= \nabla \cdot \sigma_p, \\ \nabla \cdot w &= 0. \end{aligned} \tag{2.9}$$

Afin d'homogénéiser les notations, nous introduisons la fonction

$$p \left| \begin{array}{rcl} : \mathbb{R}^+ & \to & \mathbb{R} \\ \delta t & \mapsto & \begin{cases} 1, & \text{pour (2.5)}, \\ \frac{1}{1-f(\delta t)}, & \text{pour (2.6)}, \end{cases} \end{array} \right. \tag{2.10}$$

ce qui nous permet d'écrire un schéma générique, où $k = n$ ou $k = n + 1$ selon le schéma choisi :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \sigma_p^n &= -\nu(\delta t) \Delta V^k + p(\delta t) \nabla P^k, \\ \nabla \cdot V^n &= 0, \\ \sigma_p^{n+1} &= (1 - f(\delta t)) \sigma_p^n + 2 f(\delta t) D\left[V^k\right], \\ \sigma_p^0 &= 0, \end{cases} \tag{2.11}$$

Nous nous concentrons ainsi sur six schémas différents : explicite, exponentiel ou implicite au regard de σ_p, et implicite ou explicite au regard la vitesse. Nous précisons les résultats pour le schéma $\sigma-$explicite dans la mesure ou la preuve de stabilité faite dans [13] a été conduite sur ce schéma.

La proposition 3 résume les résultats que nous allons démontrer.

Proposition 3 *La condition de stabilité s'écrit :*

σ \ V	*Explicite*	*Implicite*
Explicite	$\delta t < 2\,We\frac{\alpha}{\alpha+1}$	$\delta t < 2\,We$
Implicite	$\begin{cases} \alpha < 1 & \rightarrow \delta t \leq \frac{2\alpha\,We}{1-\alpha} \\ \alpha \geq 1 & \rightarrow \textit{inconditionnellement stable} \end{cases}$	*Inconditionnellement stable*
Exponentiel	$\begin{cases} \alpha < 1 & \rightarrow \delta t \leq -We\ln\frac{1-\alpha}{1+\alpha} \\ \alpha \geq 1 & \rightarrow \textit{inconditionellement stable} \end{cases}$	*Inconditionnellement stable*

Afin de démontrer cette proposition, nous allons montrer que les valeurs propres de $(1-f(\delta t))\,I + 2\frac{f(\delta t)}{\nu(\delta t)}F$ sont, en valeurs absolues, plus petites que un, sous certaines conditions sur le pas de temps.

Posons $V = \binom{u}{v}$ et $\sigma_p = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \end{pmatrix}$.

La première étape est d'obtenir la matrice F. La transformée de Fourrier de l'équation de Stokes nous donne :

$$\begin{cases} \nu(\delta t)\left(\xi_1^2+\xi_2^2\right)\hat{u} + i\xi_1 p(\delta t)\,\hat{P} = i\left(\xi_1\widehat{\sigma_{xx}} + \xi_2\widehat{\sigma_{xy}}\right), \\ \nu(\delta t)\left(\xi_1^2+\xi_2^2\right)\hat{v} + i\xi_2 p(\delta t)\,\hat{P} = i\left(\xi_1\widehat{\sigma_{xy}} + \xi_2\widehat{\sigma_{yy}}\right), \\ \hat{u} + \dfrac{\xi_2}{\xi_1}\hat{v} = 0. \end{cases}$$

Qui implique alors :

$$\begin{pmatrix} \xi_2\nu(\delta t)\left(\xi_1^2+\xi_2^2\right) & -\xi_1\nu(\delta t)\left(\xi_1^2+\xi_2^2\right) \\ \xi_1 & \xi_2 \end{pmatrix}\widehat{V} = \begin{pmatrix} i\xi_1\xi_2 & i\left(\xi_2^2-\xi_1^2\right) & -i\xi_1\xi_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \widehat{\sigma_{xx}} \\ \widehat{\sigma_{xy}} \\ \widehat{\sigma_{yy}} \end{pmatrix}. \tag{2.12}$$

En utilisant la notation de Voigt qui permet d'écrire des matrices symétriques sous

forme de vecteurs, nous trouvons :

$$\begin{aligned}\widehat{D[V]} &= i\begin{pmatrix}\xi_1 & 0\\ \frac{\xi_2}{2} & \frac{\xi_1}{2}\\ 0 & \xi_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{u}\\ \hat{v}\end{pmatrix},\\ &= \frac{1}{\nu(\delta t)\left(\xi_1^2+\xi_2^2\right)^2}\begin{pmatrix}-\xi_1^2\xi_2^2 & \xi_1\xi_2(\xi_1^2-\xi_2^2) & \xi_1^2\xi_2^2\\ \frac{\xi_1\xi_2(\xi_1^2-\xi_2^2)}{2} & \frac{-\left(\xi_1^2-\xi_2^2\right)^2}{2} & \frac{-\xi_1\xi_2(\xi_1^2-\xi_2^2)}{2}\\ \xi_1^2\xi_2^2 & -\xi_1\xi_2(\xi_1^2-\xi_2^2) & -\xi_1^2\xi_2^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\widehat{\sigma_{xx}}\\ \widehat{\sigma_{xy}}\\ \widehat{\sigma_{yy}}\end{pmatrix},\\ &= \frac{1}{\nu(\delta t)}F\widehat{\sigma_p}.\end{aligned} \tag{2.13}$$

On peut maintenant calculer les valeurs propres de :

$$(1-f(\delta t))\,I + 2\frac{f(\delta t)}{\nu(\delta t)}F.$$

Il est clair que $\det(F)=0$ (la première ligne est l'opposée de la troisième), ainsi, la première valeur propre β_1 est donnée par :

$$\beta_1 = 1-f(\delta t).$$

La seconde, de multiplicité deux, est :

$$\beta_2 = 1-f(\delta t)-\frac{f(\delta t)}{\nu(\delta t)},$$

La fin de la démonstration se réduit à des estimations sur ces valeurs propres.

Remarque 2 *Cette analyse n'est valable que sur le modèle simplifié. En effet, nous ne pouvons pas conduire une analyse de Fourier sur un problème non linéaire. D'autre part, si nous ajoutons les termes non linéaires dans l'équation d'évolution de σ_p, alors il faudra prendre en compte la CFL induite par le terme de transport $(V\cdot\nabla)\sigma_p$, mais aussi des conditions de stabilité induites par le nombre de Weissenberg ou la présence de tension de surface dans la formulation du problème de Stokes.*

Remarque 3 *Pour s'affranchir de la condition de stabilité générée par la petitesse d'α, il est évident qu'on doit choisir la version implicite en vitesse. Ceci sera confirmé par la suite pour des simulations numériques ainsi que sur le problème complet pour lequel il n'est pas possible de faire une analyse de stabilité.*

Nous présentons ci-dessous les valeurs propres pour les différents schémas proposés.

σ-explicite, V-explicite

Les valeurs propres sont :

$$\begin{aligned} f(\delta t) &= \frac{\delta t}{We}, \\ \nu(\delta t) &= \alpha. \end{aligned} \qquad \beta = \begin{cases} 1 - \frac{\delta t}{We}, \\ 1 - \frac{\delta t}{We} - \frac{\delta t}{\alpha We}. \end{cases}$$

On veut vérifier :

$$\begin{aligned} \left|1 - \frac{\delta t}{We}\right| < 1, \\ 0 < \delta t < 2We. \end{aligned} \qquad \begin{aligned} \left|1 - \frac{\delta t}{We} - \frac{\delta t}{\alpha We}\right| < 1, \\ 0 < \delta t \left(\frac{1}{We} + \frac{1}{\alpha We}\right) < 2, \\ 2\frac{\alpha We}{\alpha + 1} > \delta t > 0. \end{aligned}$$

La condition de stabilité est alors :

$$\boxed{0 < \delta t < 2We, \frac{\alpha}{\alpha + 1}}$$

Ce résultat n'est pas vraiment surprenant : nous sommes contraints par α. Mais dans la forme adimensionnée du problème, nous apprenons que nous ne devons pas choisir des pas des temps plus grands que le temps de relaxation ou que le ratio des temps de relaxation et de retard.

σ-explicite, V-implicite

Les valeurs propres sont :

$$\begin{aligned} f(\delta t) &= \frac{\delta t}{\mathrm{We}}, \\ \nu(\delta t) &= \frac{\alpha + \frac{\delta t}{\mathrm{We}}}{1 - \frac{\delta t}{\mathrm{We}}}. \end{aligned} \qquad \beta = \begin{cases} 1 - \frac{\delta t}{\mathrm{We}}, \\ 1 - \frac{\delta t}{\mathrm{We}} - \frac{\delta t(\mathrm{We} - \delta t)}{\mathrm{We}(\alpha \mathrm{We} + \delta t)}. \end{cases}$$

On veut vérifier :

$$\left|1-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}\right|<1, \quad 0<\delta t<2\mathrm{We}. \qquad \Bigg\| \qquad \begin{aligned} \left|1-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}-\frac{\delta t\,(\mathrm{We}-\delta t)}{\mathrm{We}\,(\alpha\mathrm{We}+\delta t)}\right|&<1,\\ \left|\frac{\mathrm{We}-\delta t}{\mathrm{We}}\left(1-\frac{\delta t}{\alpha\mathrm{We}+\delta t}\right)\right|&<1,\\ \left|\frac{\alpha\,(\mathrm{We}-\delta t)}{\alpha\mathrm{We}+\delta t}\right|&<1,\\ |g\,(\delta t)|&<1. \end{aligned}$$

Une rapide analyse de la fonction g :

$$g\left|\begin{array}{rccc} : & \mathbb{R}^+ & \to & \mathbb{R} \\ & \delta t & \mapsto & \frac{\alpha(\mathrm{We}-\delta t)}{\alpha\mathrm{We}+\delta t} \end{array}\right. \tag{2.14}$$

nous apprend que $g\,(0)=1$ et que $g'\,(\delta t)=-\frac{\alpha(\alpha+1)\mathrm{We}}{(\delta t+\alpha\mathrm{We})^2}<0$ et aussi que $g\,(\delta t)=-1 \Leftrightarrow \delta t=\frac{2\mathrm{We}\alpha}{\alpha-1}$, ce qui est négatif pour $\alpha\in[0,1]$ et plus grand que 2We pour $\alpha>1$. Ainsi, la fonction vaut 1 en 0, est strictement décroissante, et n'est inférieure à -1 que lorsque que $\delta t\geq\frac{2\mathrm{We}\alpha}{\alpha-1}$. Cette valeur n'est jamais atteinte si $\alpha<1$. Si α est plus grand que 1, alors on observe que $\delta t<\min\left(2\mathrm{We},\frac{2\mathrm{We}\alpha}{\alpha-1}\right)=2\mathrm{We}$. La condition de stabilité est donc :

$$\boxed{\delta t<2\mathrm{We}.}$$

σ-implicite, V-explicite

Les valeurs propres sont :

$$\begin{aligned} f\,(\delta t)&=\frac{\delta t}{\mathrm{We}+\delta t},\\ \nu\,(\delta t)&=\alpha. \end{aligned} \qquad \Bigg\| \qquad \beta=\begin{cases} \frac{\mathrm{We}}{\mathrm{We}+\delta t}, \\ \frac{\mathrm{We}}{\mathrm{We}+\delta t}-\frac{\delta t}{\alpha(\mathrm{We}+\delta t)}. \end{cases}$$

On veut vérifier :

$$\left|\frac{\mathrm{We}}{\mathrm{We}+\delta t}\right| < 1, \qquad 0 < \delta t.$$

$$\left|\frac{\mathrm{We}}{\mathrm{We}+\delta t} - \frac{\delta t}{\alpha\left(\mathrm{We}+\delta t\right)}\right| < 1,$$
$$\left|\frac{\alpha\mathrm{We}-\delta t}{\alpha\left(\mathrm{We}+\delta t\right)}\right| < 1,$$
$$\left|g\left(\delta t\right)\right| < 1.$$

En analysant la fonction g, définie par :

$$g\left|\begin{array}{rcl} : \mathbb{R}^+ & \rightarrow & \mathbb{R} \\ \delta t & \mapsto & \frac{\alpha\mathrm{We}-\delta t}{\alpha(\mathrm{We}+\delta t)} \end{array}\right. \tag{2.15}$$

on trouve que $g\left(0\right)=1$, et que $g'\left(\delta t\right) = -\mathrm{We}\frac{\alpha+1}{\alpha(\delta t+\mathrm{We})^2}$ est négatif, et que la limite en $+\infty$ est égale à $\frac{-1}{\alpha}$. Tant que α est plus grand que 1, le schéma est stable, sinon, nous devons imposer $\delta t < \frac{2\alpha\mathrm{We}}{1-\alpha}$. La condition de stabilité s'écrit donc dans ce cas :

$$\left\{\begin{array}{l} \alpha < 1 \rightarrow \delta t < \frac{2\alpha\mathrm{We}}{1-\alpha}, \\ \alpha \geq 1 \rightarrow \text{inconditionnellement stable.} \end{array}\right.$$

σ-implicite, V-implicite

Les valeurs propres sont :

$$f\left(\delta t\right) = \frac{\delta t}{\mathrm{We}+\delta t},$$
$$\nu\left(\delta t\right) = \frac{\alpha + \frac{\delta t}{\mathrm{We}+\delta t}}{1 - \frac{\delta t}{\mathrm{We}+\delta t}}.$$

$$\beta = \left\{\begin{array}{l} \frac{\mathrm{We}}{\mathrm{We}+\delta t}, \\ \frac{\mathrm{We}}{\mathrm{We}+\delta t} - \frac{\delta t}{\mathrm{We}+\delta t}\frac{\mathrm{We}}{\alpha(\mathrm{We}+\delta t)+\delta t}. \end{array}\right.$$

On veut vérifier :

$$\left|\frac{\mathrm{We}}{\mathrm{We}+\delta t}\right| < 1, \qquad 0 < \delta t.$$

$$\left|\frac{\mathrm{We}}{\mathrm{We}+\delta t} - \frac{\delta t}{\mathrm{We}+\delta t}\frac{\mathrm{We}}{\alpha\left(\mathrm{We}+\delta t\right)+\delta t}\right| < 1,$$
$$\left|\frac{\mathrm{We}}{\mathrm{We}+\delta t}\left(1 - \frac{\delta t}{\alpha\left(\mathrm{We}+\delta t\right)+\delta t}\right)\right| < 1,$$
$$\left|\frac{\mathrm{We}}{\mathrm{We}+\delta t}\frac{\alpha\left(\mathrm{We}+\delta t\right)}{\alpha\left(\mathrm{We}+\delta t\right)+\delta t}\right| < 1.$$

On pose :

$$g \left| \begin{array}{rcl} : \mathbb{R}^+ & \rightarrow & \mathbb{R} \\ \delta t & \mapsto & \frac{\mathrm{We}}{\mathrm{We}+\delta t} \frac{\alpha(\mathrm{We}+\delta t)}{\alpha(\mathrm{We}+\delta t)+\delta t} \end{array} \right. \tag{2.16}$$

$g(0) = 1$ et g est le produit de deux fonctions positives plus petites que un : ce schéma est inconditionnellement stable.

σ-exponentiel, V-explicite

Les valeurs propres sont :

$$\begin{array}{l} f(\delta t) = 1 - e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}, \\ \nu(\delta t) = \alpha. \end{array} \quad \Bigg\| \quad \beta = \begin{cases} e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}, \\ e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}} - \frac{1-e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}}{\alpha}. \end{cases}$$

On veut vérifier :

$$\begin{array}{l} \left| e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}} \right| < 1, \\ 0 < \delta t. \end{array} \quad \Bigg\| \quad \begin{array}{l} \left| e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}} - \dfrac{1 - e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}}{\alpha} \right| < 1, \\ \left| \dfrac{\alpha e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}} - 1 + e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}}{\alpha} \right| < 1, \\ \left| \dfrac{(\alpha+1)\, e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}} - 1}{\alpha} \right| < 1. \end{array}$$

On pose :

$$g \left| \begin{array}{rcl} : \mathbb{R}^+ & \rightarrow & \mathbb{R} \\ \delta t & \mapsto & \frac{(\alpha+1)e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}} - 1}{\alpha} \end{array} \right. \tag{2.17}$$

On observe que $g(0) = 1$ et que $g'(\delta t) < 0$. Ainsi, g est strictement décroissante. On peut vérifier que $g(\delta t) = -1 \Rightarrow \delta t = -\mathrm{We} \ln\left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right)$, ce qui implique donc que :

$$\boxed{\begin{cases} \alpha < 1 \Rightarrow \delta t < -\mathrm{We} \ln\left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right), \\ \alpha \geq 1 \Rightarrow \text{inconditionnellement stable.} \end{cases}}$$

σ-exponentiel, V-implicite

Les valeurs propres sont :

$$f(\delta t) = 1 - e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}},$$
$$\nu(\delta t) = \frac{\alpha + e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}}{1 - e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}}.$$

$$\beta = \begin{cases} e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}, \\ e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}} - \frac{\left(1-e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}\right)e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}}{\alpha \mathrm{We}+1-e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}}. \end{cases}$$

On veut vérifier :

$$\left|e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}\right| < 1,$$
$$0 < \delta t.$$

$$\left|e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}} - \frac{\left(1 - e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}\right) e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}}{\alpha \mathrm{We} + 1 - e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}}\right| < 1,$$
$$\left|\frac{\alpha \mathrm{We} e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}}{\alpha \mathrm{We} + 1 - e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}}\right| < 1,$$

On pose :

$$g \left| \begin{array}{rcl} : \mathbb{R}^+ & \to & \mathbb{R} \\ \delta t & \mapsto & \frac{\alpha \mathrm{We} e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}}{\alpha \mathrm{We}+1-e^{-\frac{\delta t}{\mathrm{We}}}} \end{array} \right. \tag{2.18}$$

On observe que $g(\delta t) = 1$ et que $g'(\delta t) \leq 0$, ainsi $g(\delta t)$ est strictement décroissante $\lim_{\delta t \to \infty} g(\delta t) = 0$. Ainsi, ce schéma est inconditionnellement stable.

2.2 Cas totalement discret

Nous appliquons maintenant une analyse de Fourier complètement discrète afin d'analyser le comportement de la discrétisation espace-temps. Le point à prendre en compte ici est que la discrétisation spatiale est de type MAC - comme nous l'avons présenté pour la discrétisation du problème de Stokes au chapitre deux de la deuxième partie. Pour des raisons de simplicité, nous posons que le pas d'espace est le même dans chaque direction : $h = \Delta x = \Delta y$.

Comme usuellement sur le maillage MAC, nous calculons la divergence discrète de cette manière :

$$\nabla \cdot V \approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h} + \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{h},$$

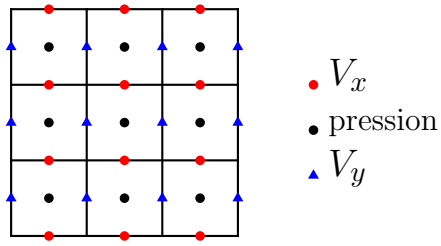


FIG. 2.1: Maillage MAC

ce qui nous fournit la divergence aux nœuds pression. Nous discrétisons σ_p aux nœuds pression, et ainsi $\nabla \cdot \sigma_p$ s'écrit :

$$\nabla \cdot \sigma_p \approx \frac{1}{h} \begin{pmatrix} \left(\sigma^{xx}_{i,j} - \sigma^{xx}_{i-1,j}\right) + \frac{1}{4}\left(\sigma^{xy}_{i,j+1} + \sigma^{xy}_{i-1,j+1} - \sigma^{xy}_{i,j-1} - \sigma^{xy}_{i-1,j-1}\right) \\ \frac{1}{4}\left(\sigma^{xy}_{i+1,j} + \sigma^{xy}_{i+1,j-1} - \sigma^{xy}_{i-1,j} - \sigma^{xy}_{i-1,j-1}\right) + \left(\sigma^{yy}_{i,j} - \sigma^{yy}_{i,j-1}\right) \end{pmatrix}$$

L'évaluation du gradient de pression ∇P est donnée par :

$$\nabla P \approx \frac{1}{h} \begin{pmatrix} P_{i,j} - P_{i-1,j} \\ P_{i,j} - P_{i,j-1} \end{pmatrix}$$

ce qui nous fournit le gradient de pression aux nœuds vitesse. Pour le Laplacien, la discrétisation s'écrit :

$$\Delta V \approx \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} u_{i+1,j} + u_{i,j+1} + u_{i-1,j} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j} \\ v_{i+1,j} + v_{i,j+1} + v_{i-1,j} + v_{i,j-1} - 4v_{i,j} \end{pmatrix}$$

Les différentes dérivées du champ de vitesse s'écrivent :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h} \\ \frac{\partial u}{\partial y} &\approx \frac{u_{i+1,j+1} + u_{i,j+1} - u_{i+1,j-1} - u_{i,j-1}}{4h} \\ \frac{\partial v}{\partial x} &\approx \frac{v_{i+1,j+1} + v_{i+1,j} - v_{i+1,j-1} - v_{i,j-1}}{4h} \\ \frac{\partial v}{\partial y} &\approx \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{h} \end{aligned}$$

Afin de simplifier notre étude, définissons quatre opérateurs de translation : $S_+^x, S_+^y, S_-^x, S_-^y$

$$\begin{array}{l|l} S_+^x \to \left(S_+^x u\right)_{i,j} = u_{i+1,j} & S_-^x \to \left(S_-^x u\right)_{i,j} = u_{i-1,j} \\ S_+^y \to \left(S_+^y u\right)_{i,j} = u_{i,j+1} & S_-^y \to \left(S_-^y u\right)_{i,j} = u_{i,j-1} \end{array} \tag{2.19}$$

On définit la transformée de Fourier discrète comme :

$$\hat{u}\left(\xi\right) = \Sigma_j u_j e^{ij\xi}, 0 < \xi < 2\pi, \tag{2.20}$$

avec $\hat{u}$ la fonction dont les coefficients de Fourier sont les points de discrétisations. Et ainsi :

$$\begin{aligned} \widehat{\left(S_+^x u\right)}_{i,j} &= \Sigma_j u_{j+1} e^{ij\xi} \\ &= \Sigma_j u_j e^{i(j-1)\xi} \\ &= \Sigma_j u_j e^{ij\xi} e^{-i\xi} \\ &= e^{-i\xi} \Sigma_j u_j e^{ij\xi} \\ &= e^{-i\xi} \hat{u}\left(\xi\right) \end{aligned} \tag{2.21}$$

La preuve qui suit est très semblable au cas semi-discret, l'analyse de stabilité se résume à des estimations de valeurs propres.

Preuve En appliquant la transformée de Fourrier discrète, on obtient pour la condition d'incompressibilité :

$$\left(S_+^x - 1\right) u_{i,j} + \left(S_+^y - 1\right) v_{i,j} = 0$$

∇P est donnée par

$$\frac{1}{h} \begin{pmatrix} 1 - S_-^x \\ 1 - S_-^y \end{pmatrix}, P$$

$\nabla \cdot \sigma_p$ devient

$$\frac{1}{h} \begin{pmatrix} \left(1 - S_-^x\right) & \frac{1}{4}\left(1 + S_-^x\right)\left(S_+^y - S_-^y\right) & 0 \\ 0 & \frac{1}{4}\left(1 + S_-^y\right)\left(S_+^x - S_-^x\right) & \left(1 - S_-^y\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{i,j}^{xx} \\ \sigma_{i,j}^{x,y} \\ \sigma_{i,j}^{yy} \end{pmatrix},$$

et ΔV is

$$\frac{1}{h^2}\left(S_+^x + S_+^y - 4Id + S_-^x + S_-^y\right) I_{2\times 2} \begin{pmatrix} u_{i,j} \\ v_{i,j} \end{pmatrix}$$

Grâce à la condition d'incompressibilité, nous pouvons écrire :

$$\nu(\delta t) M_1 \begin{pmatrix} \widehat{u_{i,j}} \\ \widehat{v_{i,j}} \end{pmatrix} = h M_2 \widehat{\sigma_{i,j}}$$
$$\begin{pmatrix} \widehat{u_{i,j}} \\ \widehat{v_{i,j}} \end{pmatrix} = \frac{h}{\nu(\delta t)} M_1^{-1} M_2 \widehat{\sigma_{i,j}}$$

Ce qui nous permet d'obtenir :

$$\begin{aligned} D\left[\widehat{V_{i,j}}\right] &= \frac{1}{h} \begin{pmatrix} e^{-i\xi_1} - 1 & 0 \\ \frac{1}{4}\left(e^{-i\xi_1} - 1\right)\left(e^{-i\xi_2} + e^{i\xi_2}\right) & \frac{1}{4}\left(e^{-i\xi_2} - 1\right)\left(e^{-i\xi_1} + e^{i\xi_1}\right) \\ 0 & \left(e^{-i\xi_2} - 1\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{u_{i,j}} \\ \widehat{v_{i,j}} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\nu(\delta t)} \begin{pmatrix} e^{-i\xi_1} - 1 & 0 \\ \frac{1}{2}\left(e^{-i\xi_1} - 1\right)\left(e^{-i\xi_2} + e^{i\xi_2}\right) & \frac{1}{2}\left(e^{-i\xi_2} - 1\right)\left(e^{-i\xi_1} + e^{i\xi_1}\right) \\ 0 & \left(e^{-i\xi_2} - 1\right) \end{pmatrix} M_1^{-1} M_2 \widehat{\sigma_{i,j}} \\ &= \frac{1}{\nu(\delta t)} \begin{pmatrix} a & b & -a \\ b & c & -b \\ -a & -b & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\sigma_{i,j}^{xx}} \\ \widehat{\sigma_{i,j}^{xy}} \\ \widehat{\sigma_{i,j}^{yy}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} a &= -\frac{(\cos\xi_1 - 1)(\cos\xi_2 - 1)}{(\cos\xi_1 - 2 + \cos\xi_2)^2} \\ b &= -\frac{\sin\xi_1 \sin\xi_2 (\cos\xi_1 - \cos\xi_2)}{2(\cos\xi_1 - 2 + \cos\xi_2)^2} \\ c &= -\frac{(\cos\xi_2 + 1)(\cos\xi_1 + 1)(\cos\xi_1 - \cos\xi_2)^2}{4(\cos\xi_1 - 2 + \cos\xi_2)^2} \end{aligned} \tag{2.22}$$

Ainsi, nous pouvons écrire $\widehat{\sigma_p^{n+1}} = A\widehat{\sigma_p^n}$, avec :

$$A = (1 - f(\delta t)) I_{3\times 3} + 2\frac{f(\delta t)}{\nu(\delta t)} \begin{pmatrix} a & b & -a \\ b & c & -b \\ -a & -b & a \end{pmatrix} \tag{2.23}$$

où A est indépendante du pas d'espace et toujours antisymétrique. On vérifie aisément que $ac = b^2$.

Le schéma est stable si les valeurs propres de A - nommées β - sont < 1, en

valeurs absolues. Ainsi, nous devons calculer :

$$\begin{aligned}\det\left[A-\beta I_{3\times 3}\right] &= \det\left(\left[1-f\left(\delta t\right)-\beta\right]I_{3\times 3}+2\frac{f\left(\delta t\right)}{\nu\left(\delta t\right)}\begin{pmatrix} a & b & -a\\ b & c & -b\\ -a & -b & a\end{pmatrix}\right)\\ &= 0\end{aligned} \tag{2.24}$$

ce qui nous donne, considérant que $2a+c<0$:

$$\beta=\begin{cases} 1-f\left(\delta t\right)\\ 1-f\left(\delta t\right)+\frac{f(\delta t)}{2\nu(\delta t)}\left(2a+c-\sqrt{\left(2a-c\right)^2+\left(8b\right)^2}\right)=1-f\left(\delta t\right)\\ 1-f\left(\delta t\right)+\frac{f(\delta t)}{2\nu(\delta t)}\left(2a+c+\sqrt{\left(2a-c\right)^2+\left(8b\right)^2}\right)=1+f\left(\delta t\right)\left(\frac{2a+c}{\nu(\delta t)}-1\right)\end{cases} \tag{2.25}$$

On trouve que le minimum de $2a+c$ est -1, ce qui signie que la plus grande valeur propre est $1-f\left(\delta t\right)-\frac{f(\delta t)}{\nu(\delta t)}$ ce qui nous fournit exactement la même expression que pour le cas semi discret.

Proposition 4 *La condition de stabilité pour le schéma entièrement discrétisé sur maillage mac est donc la même que celle donnée en 3.*

2.3 Conclusion partielle

Dans ce chapitre, nous avons abordé la question de la stabilité du modèle jouet pour six schémas de discrétisations temporelles, en version semi-discrétisée et complètement discrète.

L'étude a été effectuée pour des conditions limites périodiques. Nous avons démontré que le discriminant pour le pas de temps pour les versions $V-$explicites est le rapport des viscosités tandis que pour les versions $V-$implicite, le schéma peut être inconditionnellement stable. Sans surprise, aucune limitation venant du nombre de Weissenberg n'a été observée, tout ayant été fait pour l'éviter par l'éviction dans l'analyse de stabilité des termes non linéaires.

L'étude complètement discrète a révélé que la discrétisation sur maillage MAC n'induisait pas de stabilité relative au pas d'espace.

Nous proposons donc, au vu des résultats, de privilégier systématiquement la version $V-$implicite, $\sigma-$exponentiel, inconditionnellement stable pour tout rapport de viscosité et ayant le même degré de complexité numérique (même nombre d'opérations) que les cinq autres discrétisations.

Chapitre 3

Résultats numériques

Sommaire

3.1 Validation : un écoulement de Poiseuille 156

3.2 Cas test de la contraction 4 :1 157

3.2.1 Influence du Weissenberg 157

3.2.2 Influence du ratio de viscosité dans la contraction 4 : 1 . . 159

3.3 Conclusion 160

Nous rappelons le système complet à résoudre :

$$\begin{aligned} -\alpha\Delta V + \nabla P &= \nabla \cdot \sigma_p, \\ \nabla \cdot V &= 0, \\ \mathrm{We}\overset{\triangledown}{\sigma_p} + \sigma_p &= 2D\left[V\right], \end{aligned} \tag{3.1}$$

système auquel nous rajoutons les conditions limites et initiales nécessaires.

Comme précisé au chapitre précédent, la discrétisation est faite sur maillage MAC, mais la simulation sera faite dans une configuration axisymétrique. Cette configuration a été présentée à la deuxième partie du manuscrit.

Le calcul de $\nabla \cdot \sigma_p$, ainsi que la méthode de résolution de l'équation d'évolution pour σ_p, ont été présentés dans le deuxième chapitre de la première partie. Ainsi, nous disposons de tous les outils nécessaires à l'étude de notre système.

Nous présentons dans la suite les résultats numériques dans une configuration 3D-axi, avec une condition initiale nulle pour σ_p. Le système est donc mis en mouvement par les conditions aux limites.

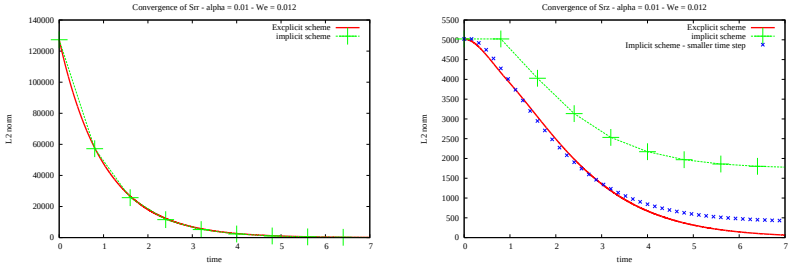
3.1 Validation : un écoulement de Poiseuille



La figure ci-dessus représente la configuration dans laquelle notre calcul est mené : il s'agit d'une coupe dans un domaine cylindrique. Les conditions limites sont imposées grâce aux hypothèses de symétries propres à la configuration axi-symétrique. Pour un écoulement de type Poiseuille, la vitesse est donnée par $V = \left(0{,}0{,}V_0\left(1-\frac{r^2}{R^2}\right)\right)^t$ où V_0 est la vitesse caractéristique du fluide. Nous définissons $\dot{\gamma} = \frac{\partial V_z}{\partial r} = -2V_0R^2$. L'état d'équilibre est donné par :

$$\lim_{t\to\infty} \sigma_p = \left(0, \dot{\gamma}, 2\dot{\gamma}^2, 0\right)^t. \tag{3.2}$$

On peut maintenant vérifier, comme indiqué à la figure Fig: 3.1 que les deux schémas, $V-$explicite et $V-$implicite convergent vers la même solution. Nous présentons sur



(a) Convergence de σ_{rz} (b) Convergence de σ_{zz}

FIG. 3.1: Norme L^2 de la différence entre les valeurs exactes et numériques, $\alpha = 1e^{-2}$, We $= 1.2e^{-2}$, le temps est normalisé par rapport au temps de relaxation.

les figures Fig: 3.1 et Fig: 3.1 la convergence des deux parties non nulles du tenseur σ_p en fonction du schéma et du pas de temps choisi. Nous observons le comportement attendu, à savoir une convergence exponentielle vers la solution d'équilibre. Ce cas test nous a permis de tester la stabilité dans la plus simple configuration. Dans la suite, nous allons nous intéresser à des simulations plus réalistes, et surtout plus discriminantes, numériquement parlant.

3.2 Cas test de la contraction 4 :1

Nous nous intéressons maintenant au cas test de la contraction 4 :1 dans une configuration 3D-axi.

Dans la littérature, nous trouvons des études [40] de l'effet du ratio de contraction sur l'écoulement, mais le cas test 4 :1 est un standard, comme on peut le voir dans [11, 38, 46, 1]

Nous allons utiliser la même configuration que [43], soit :

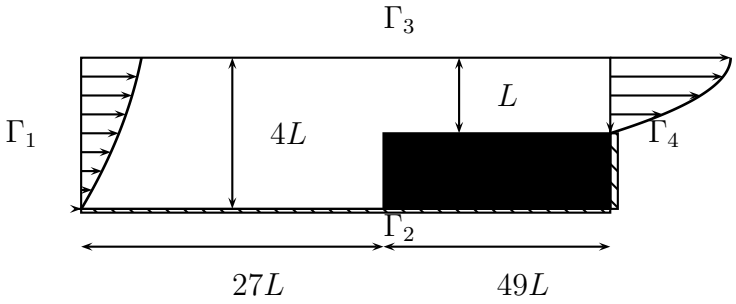


FIG. 3.2: Domaine d'étude pour la contraction 4 :1. L'échelle n'est pas respectée pour simplifier la lecture.

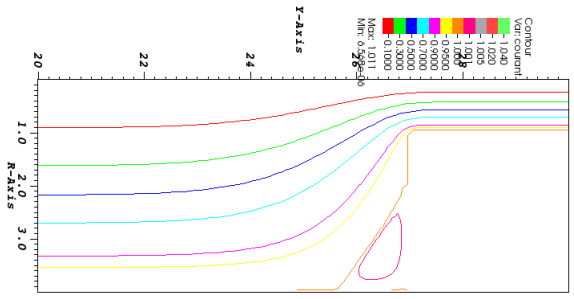
Sur Γ_2, nous imposons des conditions limites de type Dirichlet homogènes, et à l'entrée du réservoir ainsi qu'à la sortie, nous imposons un écoulement de type Poiseuille, en supposant que le tenseur σ_p est revenu au repos depuis la contraction. Nous simulerons la présence de l'obstacle en utilisant une des deux techniques de pénalisation présentée en première partie du manuscrit, à savoir celle utilisant l'ajout d'un terme de la forme $1/\epsilon$ dans la matrice.

3.2.1 Influence du Weissenberg

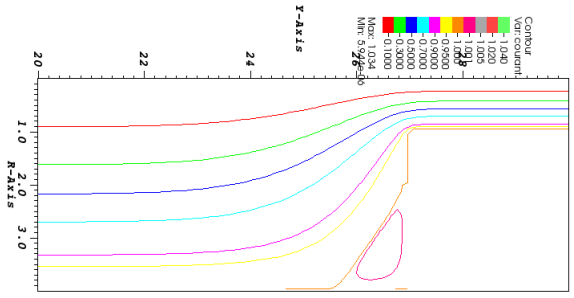
Nous présentons cette partie pour vérifier l'accord de nos résultats à petit Weissenberg, avec des ratios de viscosité égale à ce qui a été utilisé dans la littérature.

Nous présentons les lignes de niveau de la fonction courant pour différents nombres de Weissenberg. Nous constatons l'effet désiré : plus le nombre de Weissenberg croît, plus le vortex grossit ce qui est un comportement typique des liquides non Newtoniens que l'on retrouve dans la littérature [43, 45]. Un point important à souligner dans cette configuration : le discriminant pour le choix du pas de temps n'est pas le ratio de viscosité mais la condition CFL venant du transport. Les résultats sont présentés aux figures Fig: 3.3,Fig: 3.4,Fig: 3.5,Fig: 3.6, pages 154,155,156 et 157.

Pour ces simulations, nous avons utilisé une version σ-exponentielle, sur un maillage 40×760 avec comme condition d'arrêt soit la convergence sur X, c'est-à-dire $\left\| \frac{X^n - X^{n-1}}{X^n} \right\| \leq 1e{-}7$, soit que le temps de la simulation soit égale à 200 fois le temps de relaxation. Les simulations s'arrêtent dès que l'un des deux critères est satisfait. On voit apparaître des gains d'un ordre de grandeur sur le pas de temps, soit d'autant en nombre d'itérations.



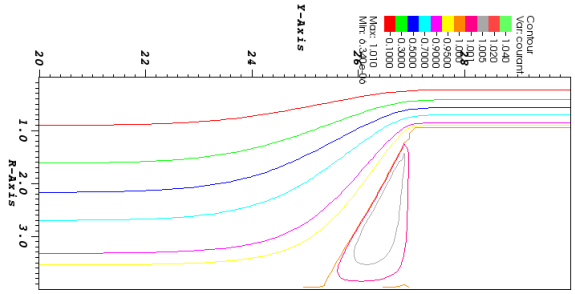
(a) $V-$Implicite, $\delta t = 7.7e^{-5}$



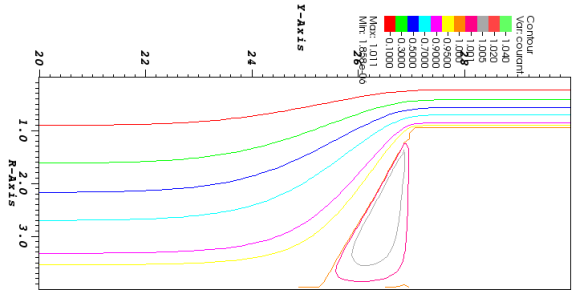
(b) $V-$Explicite, $\delta t = 8.7e^{-3}$

FIG. 3.3: Lignes de niveau de la fonction courant We $= 0.1$ - $\alpha = \frac{1}{8}$ $[Nr, Nz] = [40, 760]$ - Schéma σ-exponentiel.

Nous obtenons les mêmes résultats, quelque soit le schéma choisi pour la discrétisation de la vitesse.



(a) $V-$Implicite, $\delta t = 3.9e^{-4}$



(b) $V-$Explicite, $\delta t = 8.8e^{-3}$

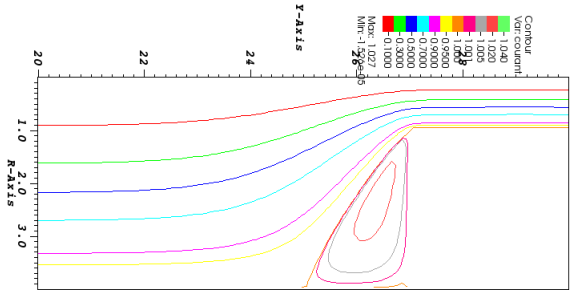
FIG. 3.4: Lignes de niveau de la fonction courant We $= 0.5$ - $\alpha = \frac{1}{8}$ $[Nr, Nz] = [40, 760]$ - Schéma σ-exponentiel.

3.2.2 Influence du ratio de viscosité dans la contraction $4:1$

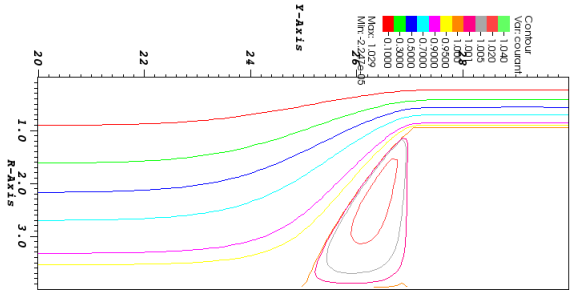
Pour la même configuration géométrique, nous avons conduit la simulation précédente en faisant varier le ratio de viscosité, afin de vérifier nos résultats, toujours en utilisant le schéma $V-$implicite, sans quoi nos simulations n'auraient pas pu être envisagées. On pouvait pressentir que le champ de vitesse ne serait pas modifié par un faible rapport de viscosité au regard d'un écoulement de type Poiseuille offrant le même profil vitesse, quelque soit la viscosité (le modèle d'Oldroyd-B n'est pas rhéofluidifiant ou rhéoépaississant). De la même manière, le profil vitesse sera le même ici pour toute viscosité, le gradient de la vitesse ne sera donc pas impacté.

De la même manière que précédemment, toutes ces simulations sont effectuées sur un maillage 40×760 avec le schéma σ-exponentiel. La tolérance du Lagrangien Augmenté est mise à $1e{-}7$ et nous présentons les résultats une fois que le temps physique a atteint 200 fois le temps de relaxation.

Nous avons passé avec succès le cas $\alpha = 0$ avec We $= 0.1$, mais dès We $= 0.5$,



(a) $V-$Implicite, $\delta t = 7.7e^{-4}$



(b) $V-$Explicite, $\delta t = 8.9e^{-3}$

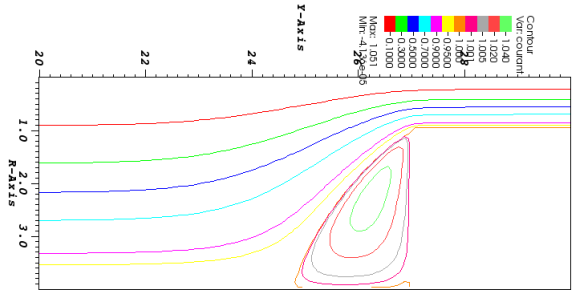
FIG. 3.5: Lignes de niveau de la fonction courant We = 1 - $\alpha = \frac{1}{8}$ $[Nr, Nz] = [40, 760]$ - Schéma σ-exponentiel.

avec $\alpha = 0$, la simulation diverge, ou dit autrement. Cependant, avec un très petit ratio, $\alpha = 1.e-2$, nous avons passé le cas We $= 0.5$.

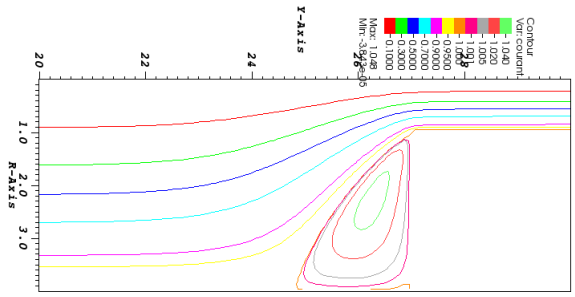
3.3 Conclusion

Nous tirons de ces résultats numériques plusieurs enseignements.

- Le schéma V-implicite permet de faire des calculs pour des petites valeurs de α, y compris $\alpha = 0$ pour des petits nombres de Weissenberg.
- Si le nombre de Weissenberg augmente, alors cela handicape le calcul. Ce comportement n'a rien de surprenant, notre étude ne porte pas sur les problèmes du haut Weissenberg.



(a) $V-$Explicite, $\delta t = 1.1e{-}3$



(b) $V-$Implicite, $\delta t = 8.8e^{-3}$

FIG. 3.6: Lignes de niveau de la fonction courant We $= 1.5$ - $\alpha = \frac{1}{8}$ $[Nr, Nz] = [40, 760]$ - Schéma σ-exponentiel.

– Le schéma V-implicite permet d'augmenter la rapidité des calculs, d'un rapport dépendant du ratio des viscosités : plus le rapport est faible, plus l'accélération est importante.

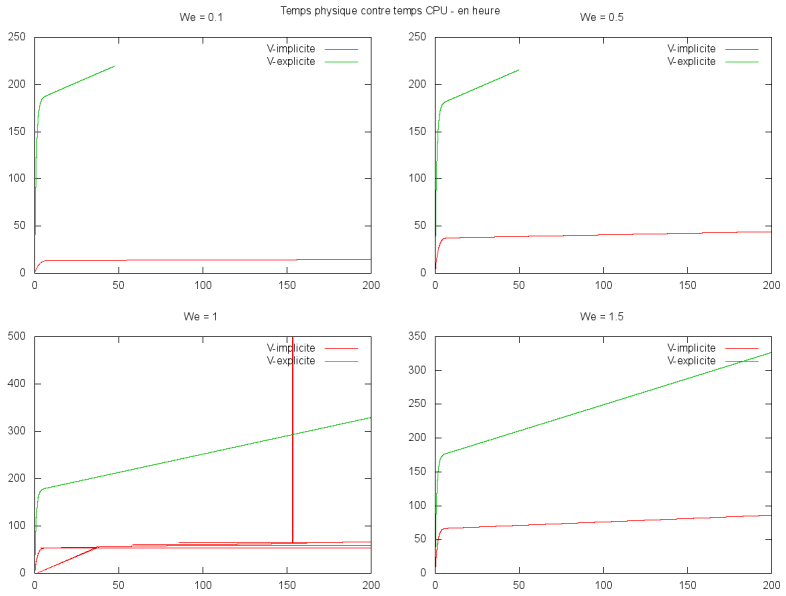
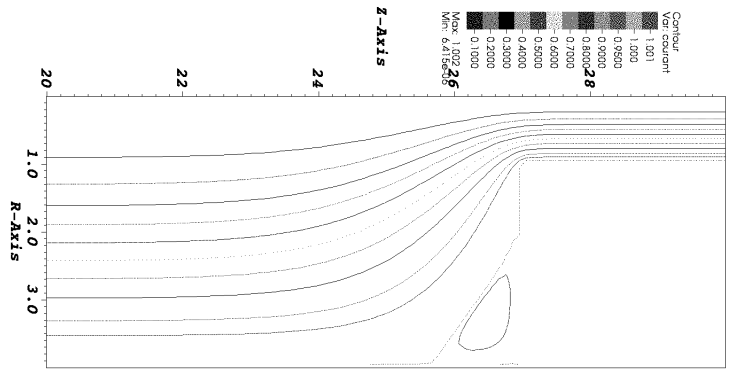
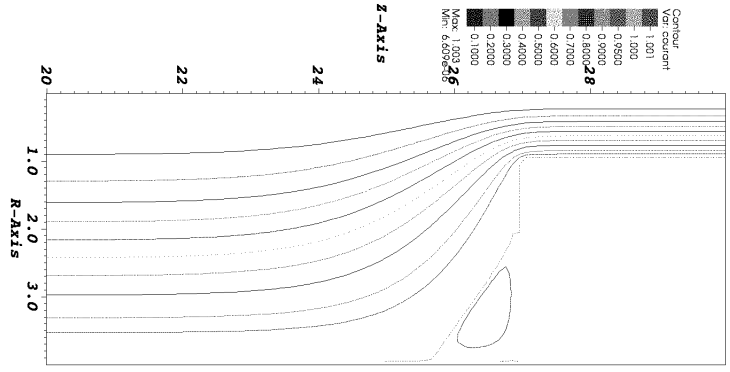


FIG. 3.7: Temps de calcul contre temps CPU pour différents Weissenberg. $\alpha = 1/8$. On observe un fort gain en temps de calcul. La convergence suit un schéma exponentiel, ainsi, une fois passé six fois le temps de relaxation, l'état stationnaire est presque atteint et les calculs sont bien plus rapides. A petit We, les schémas explicites ont atteint le critère de convergence sur X et donc, la simulation cesse. Pour We $= 1$, le bruit est du à un fichier de résultats corrompus.

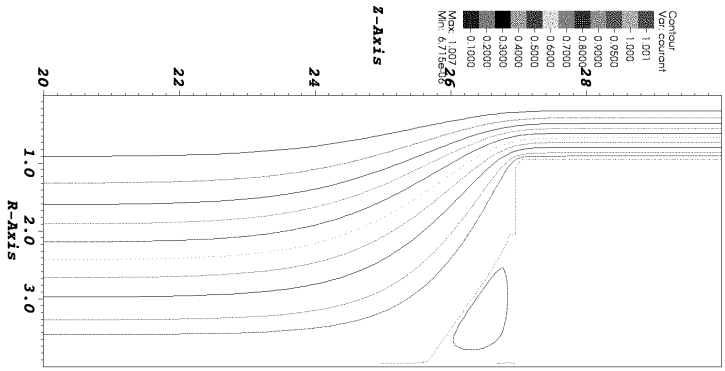


(a) $\alpha = 0.5$

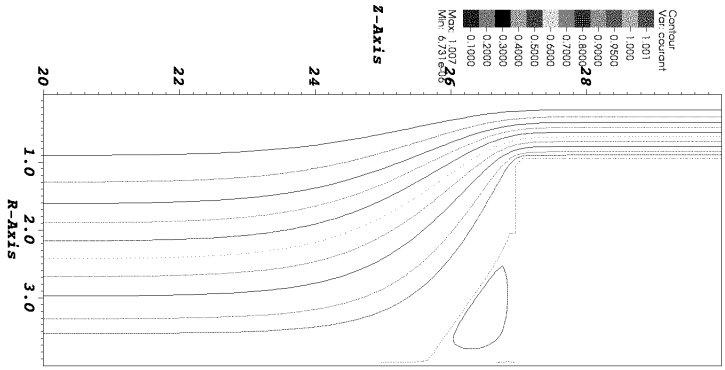


(b) $\alpha = 0.1$

FIG. 3.8: Lignes de niveau de la fonction courant We $= 0.1$ - Simulation $V-$implicite. Le vortex est petit et ne dépend pas du ratio des viscosités.

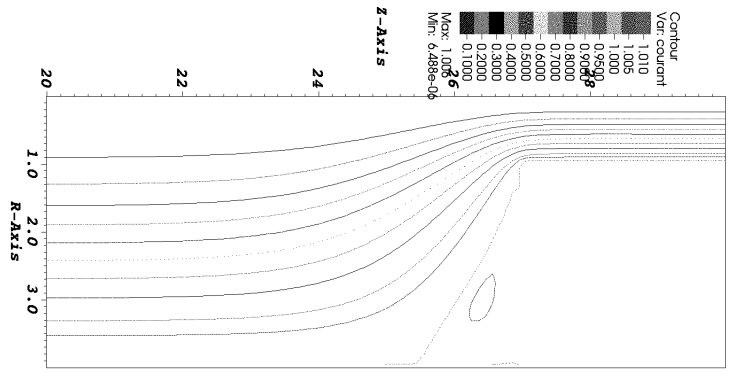


(a) $\alpha = 1.e^{-2}$

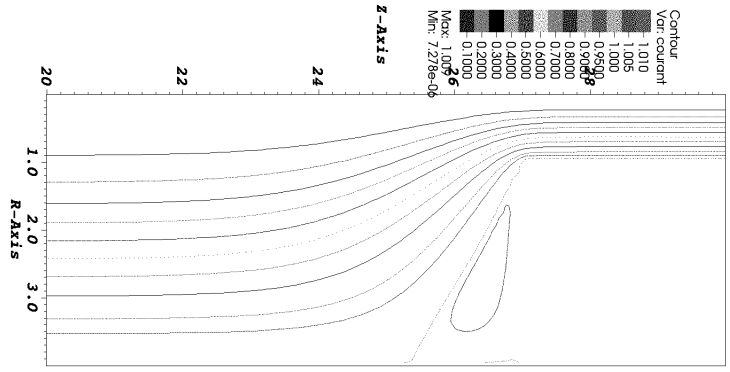


(b) $\alpha = 0$

FIG. 3.9: Lignes de niveau de la fonction courant We $= 0.1$ - Simulation $V-$implicite. Le vortex est petit et ne dépend pas du ratio des viscosités.

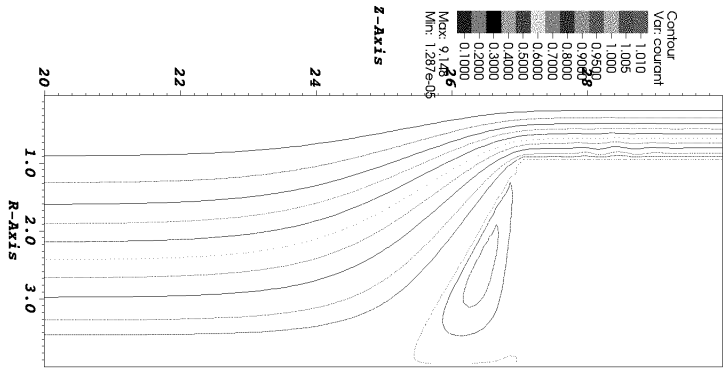


(a) $\alpha = 0.5$

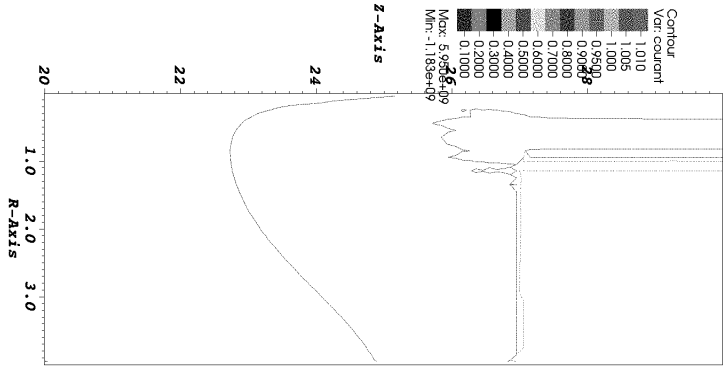


(b) $\alpha = 0.1$

FIG. 3.10: Lignes de niveau de la fonction courant We $= 0.5$ - Simulation $V-$implicite. La différence observée est due au post traitement, les deux vortex ont globalement la même intensité.



(a) $\alpha = 1.e^{-2}$



(b) $\alpha = 0$

FIG. 3.11: Lignes de niveau de la fonction courant We = 0.5 - Simulation $V-$implicite. A ce nombre de Weissenberg, le solveur de Stokes diverge pour un ratio nul et pour un ratio de $1e^{-2}$ la convergence est très lente.

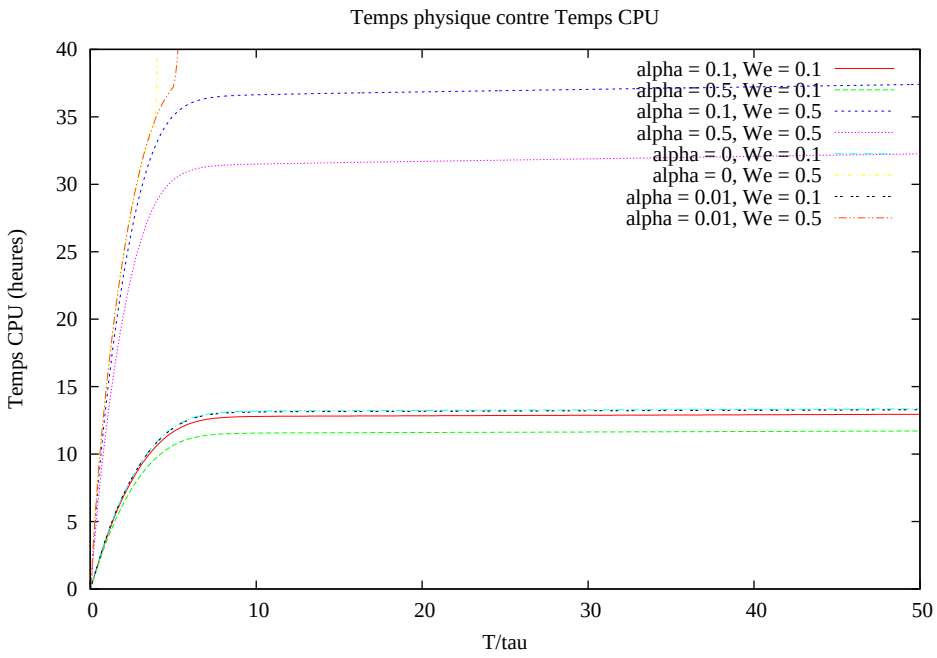


FIG. 3.12: Temps de calcul contre temps physique : on observe que le discriminant est le nombre de Weissenberg et que pour un petit rapport de viscosité associé à un nombre de Weissenberg de 0.5, le temps de calcul devient très grand. Pour $\alpha = 1e^{-2}$ la simulation ne diverge pas, mais le temps de calcul croît considérablement ; pour $\alpha = 0$ la convergence n'est plus assurée.

Conclusion

Nous avons présenté dans cette partie plusieurs types de discrétisations en temps pour les fluides viscoélastiques. La difficulté à laquelle nous faisions face était l'influence du rapport des viscosités. En effet, le critère de stabilité numérique sur le pas de temps dans la situation où ce rapport devient petit devant 1 était présenté comme très contraignant. Cette situation - petitesse du rapport - est la situation souhaitée lors de l'utilisation du modèle de Johnson-Segalman pour les micelles géantes.

Deux grandes classes de discrétisations en temps ont été présentées : une classe où la vitesse est implicite, l'autre où elle est explicite. Grâce à l'utilisation d'un terme générique pour préciser la discrétisation en temps du tenseur des taux de déformations, les analyses ont pu être faites sur six schémas numériques différents. Nous avons démontré que l'usage de la version $V-$implicite permettait de s'affranchir de toute condition de stabilité relative au rapport des viscosités (sauf pour le schéma $\sigma-$explicite, bien que le rapport des viscosités soit sans conséquences). Ce résultat avait été pressenti par l'écriture de la méthode, à savoir l'augmentation artificielle du terme de viscosité dans l'équation de Stokes, rendant sans effet la petitesse des rapports de viscosité.

L'utilisation d'un modèle réduit pour conduire les études de stabilité, modèle revenant à celui de Maxwell à un temps de relaxation, nous permet d'affirmer que notre étude est valable pour tout modèle basé sur ce dernier. En terme de perspectives relatives à cette méthodes, il convient donc de vérifier la pertinence de nos résultats pour les modèles de Johnson-Segalman, de Giesekus, de Pan-Tenn-Tanner et de sa version exponentielle...

Quatrième partie

Architecture logicielle

Introduction

Toutes les simulations présentées dans cette thèse sont issues d'implémentations en 2D ou 3D-axisymétrique effectuée sur la librairie *eLYSe* .

Dans un premier temps, nous décrirons la librairie *eLYSe* qui a reçu nos développements, puis nous allons étudier les différents aspects du travail fourni.

Chapitre 1

eLYSe

Sommaire

1.1 Présentation générale 175

1.2 Exemple de programme 177

1.3 Investissement pour *eLYSe* 179

1.3.1 Correction 179

1.3.2 Ajout 179

1.1 Présentation générale

La plateforme de calcul *eLYSe* [47] est un projet débuté en 2006 par O. Saut, initialement dédiée à la simulation de croissance tumorale [29], puis par extension à la simulation de fluides complexes ou encore d'écoulement en microfluidique, ces différentes disciplines butant sur les mêmes difficultés numériques. La librairie est écrite en C++, est multi-plateforme (Unix, Linux, Mac...) et fait intervenir - à ce jour - onze collaborateurs. Elle est utilisée principalement à Bordeaux, mais aussi à Amiens, Lyon ou encore Houston. Longtemps mutualisé [1] grâce à SVN, la mutualisation a récemment changé au profit de GIT, proposant plus de fonctionnalités et permettant un développement collaboratif plus aisé au regard des besoins exprimés par les intervenants.

La prétention de cette bibliothèque est de fournir un ensemble de solveurs robustes et fiables permettant au modélisateur de tester efficacement différents modèles rapidement. Sont ainsi développés différents solveurs pour les problèmes de la mécanique des milieux continus comme les équations de Navier-Stokes, Stokes, Poisson,

[1] La mutualisation est la mise en partage du code, permettant à plusieurs développeurs de travailler sur le même logiciel.

Chaleur, transport...

La spécificité de cette librairie est de traiter uniquement les maillages cartésiens réguliers, soit tout en volumes finis. Ce choix une fois posé - pour des raisons de simplicité d'écriture, de légèreté des structures et de la possibilité - grâce aux méthodes Level-Set - de décrire des interfaces, il a fallu faire évoluer cette librairie afin de la rendre efficace en fonction des applications ciblées.

D'autre part, le choix du C++, supportant donc naturellement le langage C permet d'utiliser facilement des librairies externes. Ainsi, l'inversion de systèmes linéaires par exemple n'a pas à être reprogrammée. En effet, des librairies comme PETSC mettent à disposition des solveurs précis, robustes et fiables, lesquels sont optimisés et écrits directement pour le calcul massivement parallèle, au besoin. Ceci permet donc de s'affranchir de la ré-écriture de méthode numériques en profitant de l'expérience et de l'optimisation déjà effectuée pour Petsc. Il y a cependant un revers à la médaille : par l'utilisation de librairies, nous ne contrôlons plus tout le cycle de développement. Il arrive ainsi qu'une mise à jour de Petsc nous impose la ré-écriture de toute une partie du code déjà implémenté. En Fig: 1.1, nous présentons la structure de la plateforme *eLYSe* ainsi que ses dépendances.

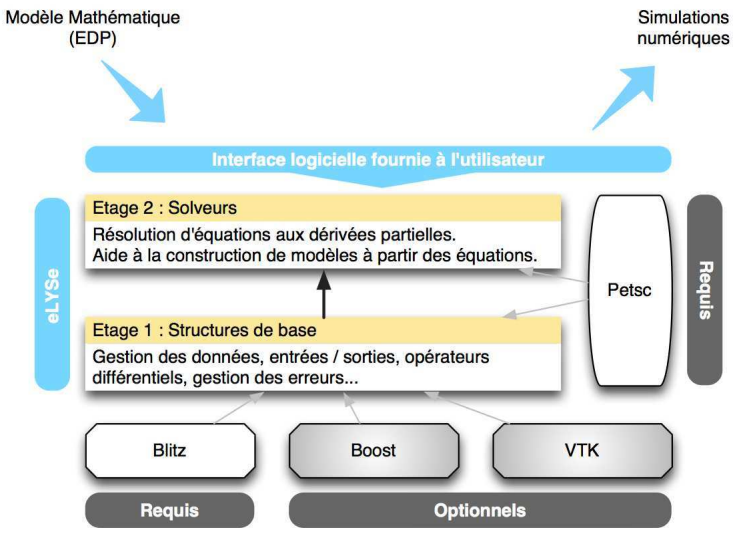


FIG. 1.1: Structure de la plateforme *eLYSe* et les diverses dépendances.

Ainsi, on trouvera dans le développement d'*eLYSe* deux axes majeurs, parfois en concurrence :

- la recherche de la facilité de modélisation,
- la recherche d'efficacité et de précisions dans les solveurs.

C'est ainsi qu'on trouvera au sein d'*eLYSe* une multitude de solveurs pour le transport (upwind, weno3, weno5...) ou pour l'équation de Stokes stationnaire (2D, axi, sur maillage mac ou colocalisé...)

Enfin, *eLYSe* est pourvu de tout un jeu de méthodes connexes, allant de la gestion simple de Level Set jusqu'au jeu d'écritures en vue du post-traitement en VTK.

1.2 Exemple de programme

Nous présentons ici un exemple de programme simulant l'évolution d'une interface décrite par la ligne de niveau zéro de la fonction ϕ avec une tension de surface γ. La fonction *initialise* n'est pas précisée ici car elle n'interfère en rien dans la compréhension de l'utilisation d'*eLYSe* .

```
#include <eLYSe.h>

int main(int argc, char **argv){

  // Initialisation de la librairie
  eLYSeWarmUp(argc,argv);

  // Description du maillage
  const int Nx = 90, Ny = 90;
  const double dx = 1.e-2, dy = 1.e-2;
  MeshDesc grille(Nx,Ny,dx,dy);

  // Declaration et initialisation des variables
  field u,v,p,eta,phi,cl_u, cl_v;
  double gamma = 1.;

  // donne une taille aux champs ainsi qu'un etat initial a phi
  // et des conditions limites a cl_u et cl_v
  initialise(grille,u,v,p,eta,phi);

  // Solveur de Stokes
  SolvStokes stokes(grille);
  // Solveur de transport
  SolvTransp transp(grille);
```

```
  // Routines de sauvegarde
  Writer ww(grille, './resultats');

  /*
   * Boucle principale
   */
  int t = 0, T_MAX = 10;
  double dt = 0.;
  while(t < T_MAX){
    // Calcul du champ de vitesse
    stokes(u,v,p,eta,phi,cl_u,cl_v,gamma);

    //calcul du pas de temps -> CFL
    dt = 0.9 / ( dx/max(fabs(u)) + dy/max(fabs(v)));

    // Transport de phi a la vitesse (u,v)^t pour un pas de temps dt
    // avec une extension lineaire pour les bords
    transp(phi,u,v,dt,extlin);

    // Sauvegarde des resulats
    ww.writeFieldVTK(u,"u");
    ww.writeFieldVTK(v,"v");
    ww.writeFieldVTK(phi,"phi");

    // Actualisation de la viscosite
    eta = where(phi > 0 , max(eta) , min(eta) );

    t += dt;
  }

  // Nettoyage
  eLYSeCoolDown();

  return 0;
}
```

1.3 Investissement pour *eLYSe*

Nous présentons maintenant la liste des interventions effectuées au sein d'*eLYSe* durant ce doctorat. Nos investissements se sont situés dans la couche logicielle *eLYSe* , et non dans son utilisation. Ainsi, il a fallu prendre garde à faire en sorte que nos développements soient transparents pour les utilisateurs.

1.3.1 Correction

Lors de la résolution du Lagrangien Augmenté, un système linéaire est inversé un nombre de fois considérable jusqu'à atteindre un critère de convergence. Dans cette résolution, la matrice est une constante, son inverse l'est donc aussi. Ainsi, il n'est pas nécessaire de calculer et d'inverser cette matrice à chaque itération du Lagrangien Augmenté. Cette remarque nous pousse donc à préférer un solveur direct à un solveur itératif, lequel nous forcerait à inverser notre système autant de fois que le Lagrangien Augmenté demanderait d'itérations.

D'autre part, une sorte de bug ou d'incompréhension réside dans la librairie Petsc : si on utilise un solveur direct et que la matrice est modifiée après que le préconditionneur (qui contient en fait le solveur direct) ait été "accroché" à la matrice, alors c'est l'état de la matrice avant modification qui restera en mémoire du solveur, rendant tout le calcul de la matrice inopérant.

D'autre part, la matrice était calculée et assemblée (au sens de Petsc) plusieurs fois - à chaque itération du Lagrangien Augmenté de fait - ce qui rendait le processus très long, finalement pour aucune raison.

Ainsi, la correction apportée a été de corriger l'erreur d'utilisation de Petsc et de ne calculer qu'une fois pour toute notre matrice en proposant par défaut l'utilisation d'un solveur direct, permettant un gain de temps considérable.

1.3.2 Ajout

Pénalisation Une étude intéressante a été menée numériquement durant les derniers mois du doctorat : pour simuler numériquement la présence ou non d'un obstacle solide, ou simplement chercher à imposer un champ de vitesse à divergence nulle dans une partie du domaine, deux options s'offrent à nous :

- soit on rajoute à notre équation d'état un terme $\mathbb{1}_{\Omega_p}\frac{V-\bar{V}}{\epsilon}$, où ϵ est un terme très petit, et $\mathbb{1}_{\Omega_p}$ l'indicatrice du domaine où nous voulons imposer une vitesse,
- soit on impose directement dans notre système linéaire la valeur désirée.

Nous nous sommes posé la question de l'efficacité comparée de ces deux méthodes ainsi que des résultats en fonction de la discrétisation spatiale.

Nous présentons ici - sur un maillage relativement grossier - le conditionnement et le rayon spectrale de la matrice du Lagrangien Augmenté en fonction du type de pénalisation, ainsi que le nombre d'itérations nécessaires pour résoudre (à la première itération du Lagrangien Augmenté) notre système, avec et sans préconditionneur. Nous nommons la méthode utilisant l'ajout d'un terme dans l'équation de Stokes $1/\epsilon$, celle posant directement l'équation sur la valeur de la vitesse "méthode direct".

	MAC	COLOC
1/eps	$1.6e^9$	$8.6e^9$
direct	270.2	110.5

TAB. 1.1: Conditionnement de la matrice du Lagrangien Augmenté en fonction de la pénalisation - Nx = Ny = 25

Nous avons aussi regardé les temps de calcul de Petcs pour ces différentes discrétisations. Nous avons utilisé le solveur GMRES implémenté dans Petsc, avec et sans préconditionneur (LU partiel par défaut) :

	MAC	MAC + PRECond	COLOC	COLOC + PRECond
1/eps	848	57	402	27
direct	283	53	147	27

TAB. 1.2: Nombre d'itérations sur solveur GMRes - avec et sans préconditionnement, sur maillage colocalisé et MAC

	LU	GMRES	GMRES + précond
1/eps	120 000	220 000	30 000
direct	40 000	80 000	20 000

TAB. 1.3: Nombre de battements du processeur pour inverser la matrice - Maillage colocalisé

La conclusion de cette étude est la suivante : les deux méthodes - donnant les mêmes résultats - ne se comportent pas de même pour la résolution numérique. La pénalisation avec $1/\epsilon$, plus élégante, détruit le conditionnement de la matrice, gênant ainsi l'utilisation d'un solveur itératif pour inverser notre système, si ce dernier n'utilise pas de préconditionneur. L'utilisation d'un préconditionneur rend les calculs envisageables, cette technique étant par défaut dans Petsc, les deux méthodes sont donc - pour l'utilisateur - équivalentes. L'utilisation d'un solveur direct est plus

lourde que celle d'un solveur itératif. C'est cependant le choix posé car la matrice du Lagrangien Augmenté étant constante, son inversion n'est effectuée qu'à la première itération, ce qui induit un gain de temps important.

La fin de la discussion porte sur l'élégance des méthodes et surtout de l'implémentation. Le seul argument que nous voyons actuellement en faveur de la pénalisation avec $1/\epsilon$ est que l'implémentation ne demande pas de rajouter des tests pour la prendre en compte, contrairement au cas direct.

Ces considérations posées, on notera que si dans un domaine - Ω_1 pour l'exemple - nous pénalisons un point tel que sa vitesse soit nulle et que nous posons une très grande viscosité devant celle d'Ω_2, alors, dotée d'un solveur bifluide très robuste, la pénalisation serait acquise à l'ordre 2.

Stokes Stationnaire La partie CFD de ce doctorat a été focalisée sur l'équation de Stokes stationnaire. Ainsi, le premier ajout apporté à *eLYSe* a été le solveur de Stokes stationnaire en 2D sur maillage MAC avec condition limite de type Dirichlet, tout en proposant l'utilisation de solveurs itératifs ou directs pour la résolution des systèmes linéaires. Une fois ce solveur développé, il a été transformé afin de résoudre la même équation - toujours du maillage MAC - dans le cas axicylindrique tel que décrit dans la deuxième partie de ce manuscrit. Afin de prendre en compte le plus fidèlement possible les conditions aux limites, des ajouts ont été effectués, ce qui revient à munir notre maillage de nœuds supplémentaires.

Les techniques de lissage de la tension de surface ou du choc des discontinuités ne permettant plus de simuler à l'ordre deux des phénomènes diphasiques, nous avons du aller de l'avant.

La deuxième partie du doctorat nous a contraint à abandonner les maillages MAC et donc à ré-écrire nos solveurs pour Stokes, que ce soit en 2D ou en Axi. Ainsi, une autre classe (au sens C++ du terme) a été développée afin de traiter notre problème bi-fluide. Cette classe permet donc de traiter notre problème :

- en 2D,
- en Axicylindrique,
- avec un ratio de viscosité,
- avec une tension de surface, sans lissage,

toujours à l'ordre deux.

Tous ces solveurs disposent - afin de permettre à l'utilisateur une plus grande liberté de développement - plusieurs options, comme par exemple la tolérance du Lagrangien Augmenté, le type de solveur de linéaire (LU ou BICG), le nombre maximum d'itérations, mais encore pour les maillages MAC les valeurs limites en des points inexistants sur le maillage, l'affichage de la matrice pour la correction du code,

la disponibilité d'un mode verbeux, pour le code 2D - si nécessaire - la possibilité de définir un axe de symétrie, la modification des paramètres du Lagrangien Augmenté, la gestion des obstacles, l'affichage du nom de chaque fonction appelée, l'accès aux normales et courbures et bien d'autres encore. Lors du développement du solveur sur maillage colocalisé, nous avons remarqué que la force extérieure pouvait être une fonction parfaitement connue, comme par exemple la gravité. Ainsi, une intégration par la méthode des rectangles - très facile à mettre en place - permet tout en gardant l'ordre de convergence de réduire encore l'erreur numérique. Ainsi, l'utilisateur a la possibilité du choix d'intégration du second membre, ce qui peut se révéler utile.

Autres interventions D'autres parties ont été implémentées, comme le calcul du déterminant d'une matrice, l'inversion explicite d'une petite matrice et d'autres outils d'analyse numérique.

La partie Level Set a été aussi explorée. En effet, l'initialisation de la narrow band dans l'algorithme du fast marching est assez problématique car cette initialisation peut déplacer l'interface.

Une autre partie invisible à l'utilisateur a été explorée, il s'agit de la documentation automatique du code grâce à Doxygen. Il est maintenant possible d'écrire directement en LaTeXdans le code source afin de générer une documentation plus accessible aux scientifiques.

Une intervention a été menée dans les solveurs de transport. En effet, si le champ de vitesse est à divergence nulle, il y a équivalence entre

$$\partial_t \phi + (V \cdot \nabla)\, \phi = 0 \tag{1.1}$$

et

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (V\phi) = 0 \tag{1.2}$$

Par contre, les méthodes numériques peuvent diverger. Toujours dans le souci d'offrir à l'utilisateur le plus de liberté possible, les deux versions ont donc été implémentées pour le cas du Weno5.

Des parties de test afin de s'assurer de la non régression du code ont été implémentées, que ce soit pour les problèmes de Stokes ou du transport.

Enfin, une partie très utile et pourtant presque invisible a été apportée à *eLYSe* : la sauvegarde des résultats, sur maillage MAC ou colocalisé, avec la possibilité ou non de supprimer certains résultats. En effet, certains logiciels de post-traitement comme Visit ou Paraview ne gèrent pas efficacement les valeurs trop petites dans certains calculs (notamment les lignes de courant) et donc, la présence de très petits

termes (plus de dix fois inférieurs à l'ordre globale) introduisent des erreurs dans le post traitement (invalidant par exemple la présentation des lignes de courant d'un champ de vitesse). Ces considérations ont donné lieu à de grandes discussions sur la conservation ou non des valeurs extrêmes, et finalement, il a été convenu que par défaut, *eLYSe* écrirait toutes les données et que l'utilisateur pouvait interdire l'écriture des valeurs inférieures à un seuil définit par lui.

Hors de la librairie, pour nos propres nécessités, des méthodes de calculs d'opérateurs différentiels ou de contraintes pour les écoulements de fluides non Newtonien ont été implémentées, ainsi qu'un code utilisateur générique permettant tous types de simulations : 2D/axi, Mac/colocalisé, monofluide/bifluide...

Conclusion

Les buts fixés durant ce doctorat, soit l'analyse de stabilité du modèle d'Oldroyd-B ainsi que la recherche d'un schéma numérique permettant de résoudre à l'ordre deux l'équation de Stokes stationnaire bifluide, en 2D et en 3D-Axi pour des fluides Newtoniens ont été atteint.

L'analyse de stabilité L'analyse de stabilité a été motivée par la volonté de simuler des écoulements de micelles géantes diluées en un temps de calcul raisonnable. En effet, il a été démontré [13] qu'une condition nécessaire de stabilité de l'ordre de α^2 existait. Les écoulements de micelles géantes présentent la particularité d'être étudiée avec un ratio de viscosité très faible, bien en dessous de la limite communément admise d'1/8 induite par le comportement non monotone de la contrainte au regard du cisaillement pour le modèle de Johnson Segalman. Ainsi, le pas de temps induit interdit les simulations dans des temps physiques réalistes.

Nous avons en premier lieu analysé la stabilité du schéma $V-$implicite et montré qu'aucune condition de stabilité en fonction du paramètre α n'intervenait alors, contrairement à la version $V-$explicite. Cette analyse de stabilité utilisant les normes a été menée afin de démontrer le résultat en prenant en compte des conditions limites de type Dirichlet non-homogènes, mais constantes en temps physique.

Cependant, cette analyse ne permettant pas de prendre en compte la discrétisation spatiale, nous avons été amenés à utiliser une analyse de Fourier, bien que cette dernière impose des conditions limites périodiques. L'écriture sous forme générique de la semi-discrétisation en temps de l'équation différentielle ordinaire du modèle simplifié nous a permis de mettre en œuvre une étude systématique pour différentes discrétisations en temps. Cette analyse a permis de montrer que la condition pour la semi-discrétisation $V-$explicite pouvait être bien moins restrictive que celle utilisée jusqu'à présent. D'autre part, nous avons démontré que le schéma $V-$implicite permettait l'utilisation du modèle d'Oldroyd-B sans faire intervenir de solvant.

Nous avons alors confronté nos résultats avec ceux fournis par la littérature sur

la contraction 4 :1 pour le modèle complet. Ces résultats ont été testés pour une famille de discrétisation, soit avec le schéma $\sigma-$exponentiel, pour $V-$explicite et $V-$implicite.

Enfin, des simulations à petit Weissenberg et très petit ratio de viscosité ont été conduite, montrant un comportement satisfaisant de notre schéma.

Le schéma d'ordre deux pour Stokes bifluide Les simulations où l'hypothèse du Reynolds nulle est envisageable ont été notre point de départ. Physiquement, nous retrouvons cette situation en microfluidique, domaine étudié au sein de l'équipe MC2.

La motivation était la faiblesse des schémas à notre disposition ou leur trop grande complexité numérique. Nous avons dans un premier temps présenté un solveur sur maillage MAC dans les cas 2D et 3D-axi et puis l'avons validé en monofluide. L'utilisation de moyenne harmonique pour la discrétisation de la viscosité ou encore d'une fonction Heaviside lissée pour la tension de surface permet dans ces cas là de mener à bien les calculs, mais à l'ordre un, et une capacité à gérer les questions d'interface uniquement de manière diffuse.

Nous avons alors présenté un schéma numérique prometteur inspiré des travaux de [39] qui, en thermique, présente un comportement exceptionnel. Les avantages annoncés par notre étude étaient la possibilité d'utiliser un maillage cartésien colocalisé avec un schéma volumes finis, à l'ordre deux, avec tension de surface et ratio de viscosité. Ainsi, nous espérions présenter un solveur pour lequel il n'était pas nécessaire de raffiner localement le maillage, tout en conservant une certaine robustesse.

L'utilisation du formalisme offert par le Lagrangien Augmenté nous a permis de définir une représentation de la vitesse sur tout le domaine, lequel, grâce à l'utilisation de fonction indicatrice, nous a permis de ne pas nous soucier de la forme de l'interface dans les mailles duales concernées. Bien que le champ de vitesse puisse ne pas être partout continu (lorsque deux mailles duales coupées par l'interface se côtoient), la représentation a permis de construire un stencil générique à 18 points qui, en monofluide nous a donné immédiatement l'ordre deux, en 2D et en axisymétrique.

Nous avons de plus construit un cas test permettant de valider en 2D notre discrétisation avec un ratio de viscosité de 1 : 20 et une tension de surface égale à 1.

Nous avons conduit une étude comparative du comportement de la discrétisation sur maillage MAC et colocalisé, quelle étude a montré la plus grande robustesse de la méthode volumes finis/éléments finis mixte.

Enfin, des simulations d'évolution en géométries simples et complexes ont été

conduites. Ces simulations ont montré les atouts et faiblesses soit du modèle pour les problèmes de couche limite dans le cas des contractions, soit des schémas numériques. En effet, des variations importantes de masse ont été observées dans le cas des contractions. Comme notre modèle ne fait pas intervenir les difficultés liées à la présence d'une couche limite dans l'écoulement, nous pouvons suspecter cette lacune d'être à l'origine des diffcultés rencontrées, bien que la précision (la tolérance) dans le Lagrangien Augmenté permette d'obtenir une meilleure conservation de la masse. On fait remarquer que la condition d'arrêt sur la divergence de la vitesse est menée en norme L^2, ce qui permet l'existence de valeurs éloignées de la précision désirée. Une condition en norme infinie pourrait être alors souhaitable, afin de contrôler la divergence à chaque point de discrétisation.

Perspectives Les études menées durant ce doctorat peuvent être à la base de multiples axes d'études.

Méthode mixte Le schéma volumes finis/éléments finis mixte que nous avons présenté peut générer le calcul de deux champs de pression disjoints. Il convient alors de se pencher sur cette difficulté en cherchant soit à adapter la méthode numérique sur maillage MAC, soit en imaginant d'autres axes d'étude.

Extension de vitesse Nous avons discuté des méthodes de redistanciation de la fonction ϕ dans le manuscrit. De la même manière, nous avons présenté d'autres classes de méthodes pour conserver la propriété fonction distance au cours du temps, à savoir les méthodes dites d'extension de vitesse. Ces deux familles disposent de la même faiblesse : l'initialisation de l'algorithme. Pour le cas du Fast Marching, on redistancie la fonction à partir d'une ligne de niveau zéro qui peut être mal évaluée, provoquant ainsi une perte de masse. Pour le cas de l'extension de vitesse, on dispose d'une fonction distance bien initialisée, mais la valeur de la vitesse à l'interface peut être mal évaluée. Par le jeu des représentations, nous avons accès à la vitesse à l'interface, et donc, il devient envisageable de disposer d'une initialisation de l'algorithme plus efficace. Ce schéma, en offrant grâce aux représentations la valeur de la vitesse sur l'interface devrait permettre de réaliser une procédure d'extension de vitesse dont la phase d'initialisation serait grandement améliorée.

Effets de surface La présence d'une singularité dans l'écoulement, lors de la recherche de la coalescence ou de la rupture de jet présente une difficulté majeure. Numériquement, il est possible d'éviter cette singularité en forçant la coalescence ou la rupture, mais la simulation n'est à ce moment plus physique. On peut cependant

parfois observer que le phénomène est correctement simulé, mais ceci reste un artifice numérique. Un travail de modélisation devient alors nécessaire pour permettre une simulation réaliste, mais nous devons faire alors face à des modélisations multi-échelles.

Écoulements bifluides avec différentes lois constitutives Nous avons étudié les écoulements monofluides pour des fluides non Newtoniens ainsi que les écoulements bifluides Newtoniens. Un axe d'évolution naturel est donc la simulation d'écoulements bifluides, avec une partie Newtonienne et l'autre non, ou encore avec deux parties non Newtoniennes.

Écoulements non Newtonien Nous avons présenté une étude de stabilité sur un modèle réduit. On retrouve ce modèle réduit dans un grand nombre de modèle rhéologique pour les fluides non Newtoniens. Ainsi, chercher l'effet du schéma $V-$implicite sur plusieurs modèles rhéologiques est un axe d'étude à prendre en compte.

Bibliographie

[1] M. Aboubacar, H. Matallah, H. R. Tamaddon-Jahromi, and M. F. Webster. Numerical prediction of extensional flows in contraction geometries : hybrid finite volume/element method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 104(2-3) :125 – 164, 2002.

[2] D. Adalsteinsson and J. Sethian. The fast construction of extension velocities in level set methods. *Journal of Computational Physics*, 148(1) :2 – 22, 1999.

[3] A. Afonso, P. Oliveira, F. Pinho, and M. Alves. The log-conformation tensor approach in the finite-volume method framework. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 157(1–2) :55 – 65, 2009.

[4] G. Allaire. *Analyse numérique et Optimisation*. Les éditions de l'école Polytechnique, 2007.

[5] C. Baroud, N., M. Robert De Saint Vincent, and J.-P. Delville. An optical toolbox for total control of droplet microfluidics. *Lab on a Chip*, 7(8) :1029–1033, 2007.

[6] S. Bénito, F. Molino, C.-H. Bruneau, T. Colin, and C. Gay. Non-linear oscillatory rheological properties of a generic continuum foam model : comparison with experiments and shear-banding predictions. *European Physical Journal E*, 35 :51, 2012.

[7] J. Brackbill, D. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2) :335 – 354, 1992.

[8] T. T. C. Bui. *Simulation des écoulements bifluides, une stratégie de couplage basée sur l'adaptation de maillage anisotrope*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2009.

[9] T. T. C. Bui, P. Frey, and B. Maury. Méthode du second membre modifié pour la gestion de rapports de viscosité importants dans le problème de stokes bifluide. *Comptes Rendus Mécanique*, 336(6) :524 – 529, 2008.

[10] Y. Chang, T. Hou, B. Merriman, and S. Osher. A level set formulation of eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 124(2) :449 – 464, 1996.

[11] H. C. Choi, J. H. Song, and J. Y. Yoo. Numerical simulation of the planar contraction flow of a giesekus fluid. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 29 :347 – 379, 1988.

[12] D. L. Chopp. Another look at velocity extensions in the level set method. *SIAM J. Sci. Comput.*, 31(5) :3255–3273, Aug. 2009.

[13] J. Dambrine. *Modélisation et étude numérique de quelques écoulements de fluides complexes en micro-fluidique*. PhD thesis, Bordeaux 1, 2009.

[14] Y. Deubelbeiss and B. Kaus. Comparison of eulerian and lagrangian numerical techniques for the stokes equations in the presence of strongly varying viscosity. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 171(1–4) :92 – 111, 2008.

[15] C. Dobrzynski and P. J. Frey. Anisotropic Delaunay mesh adaptation for unsteady simulations. In *Proceedings of the 17th international Meshing Roundtable*, pages 177–194, États-Unis, 2008.

[16] J.-G. Dostor. Aire d'un quadrilatère quelconque. *Nouvelles annales de mathématiques*, 1(7) :69,74, 1848.

[17] C. Elmore and M. Heald. *Psysics of Waves*. MC-Graw-Hill, 1969.

[18] R. Fattal and R. Kupferman. Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high weissenberg number using the log-conformation representation. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 126(1) :23 – 37, 2005.

[19] M. Fortin, R. Glowinski, and T. inter-scientia (Firm). *Augmented Lagrangian methods : Applications to the numerical solution of boundary-value problems*. Studies in mathematics and its applications. North-Holland Pub. Co., 1983.

[20] C. Galusinski and P. Vigneaux. On stability condition for bifluid flows with surface tension : Application to microfluidics. *Journal of Computational Physics*, 227(12) :6140 – 6164, 2008.

[21] S. Gottlieb and W. Chi-Shu. Total variation diminishing runge-kutta schemes. Technical report, 1996.

[22] F. Habla, H. Marschall, O. Hinrichsen, L. Dietsche, H. Jasak, and J. L. Favero. Numerical simulation of viscoelastic two-phase flows using openfoam®. *Chemical Engineering Science*, 66(22) :5487 – 5496, 2011.

[23] A. Harten and S. Osher. Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes. i. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 24(2) :pp. 279–309, 1987.

[24] B. Helenbrook, L. Martinelli, and C. Law. A numerical method for solving incompressible flow problems with a surface of discontinuity. *Journal of Computational Physics*, 148(2) :366 – 396, 1999.

[25] K. Ito and Z. Li. Interface conditions for stokes equations with a discontinuous viscosity and surface sources. *Applied Mathematics Letters*, 19(3) :229 – 234, 2006.

[26] J. Joie. *Simulation numérique des écoulements de fluides polymères.* PhD thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour, 2011.

[27] M. J. Jr. and D. Segalman. A model for viscoelastic fluid behavior which allows non-affine deformation. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2(3) :255 – 270, 1977.

[28] A. S. Kane. *Simulation des écoulements de fluides viscoélastiques par une formulation logarithmique du tenseur de conformation.* PhD thesis, 2009.

[29] J.-B. Lagaert. *Modélisation de la croissance tumorale : estimation de paramètres d'un modèle de croissance et introduction d'un modèle spécifique aux gliomes de tout grade.* PhD thesis, Bordeaux 1, 2011.

[30] A. T. Layton. An efficient numerical method for the two-fluid stokes equations with a moving immersed boundary. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(25–28) :2147 – 2155, 2008. ¡ce :title¿Immersed Boundary Method and Its Extensions¡/ce :title¿.

[31] Z. Li, K. Ito, and M.-C. Lai. An augmented approach for stokes equations with a discontinuous viscosity and singular forces. *Computers & Fluids*, 36(3) :622 – 635, 2007.

[32] X.-D. Liu, S. Osher, and T. Chan. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *Journal of Computational Physics*, 115(1) :200 – 212, 1994.

[33] P. S. M. Sussman and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114(1) :146 – 159, 1994.

[34] J. Magnaudet. Méthodes numériques pour les problèmes d'interfaces, 1997. Cours de l'école de printemps de mécanique des fluides numériques.

[35] E. Marchandise. *Simulation of three-dimensional two-phase flows : coupling of a stabilized finite element method with a discontinuous level set approach/.* PhD thesis, 2006.

[36] S. McKee, M. Tomé, V. Ferreira, J. Cuminato, A. Castelo, F. Sousa, and N. Mangiavacchi. The mac method. *Computers & Fluids*, 37(8) :907 – 930, 2008.

[37] B. Nichols, C. Hirt, and R. Hotchkiss. A fractional volume of fluid method for free boundary dynamics. In W. Reynolds and R. MacCormack, editors, *Seventh International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, volume 141 of *Lecture Notes in Physics*, pages 304–309. Springer Berlin / Heidelberg, 1981.

[38] S. Nigen and K. Walters. Viscoelastic contraction flows : comparison of axisymmetric and planar configurations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 102(2) :343 – 359, 2002.

[39] M. Oevermann and R. Klein. A cartesian grid finite volume method for elliptic equations with variable coefficients and embedded interfaces. *Journal of Computational Physics*, 219(2) :749 – 769, 2006.

[40] M. S. Oliveira, P. J. Oliveira, F. T. Pinho, and M. A. Alves. Effect of contraction ratio upon viscoelastic flow in contractions : The axisymmetric case. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 147(1-2) :92 – 108, 2007.

[41] S. Osher and J. A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1) :12 – 49, 1988.

[42] P. Oswald. *Rhéophysique Ou comment coule la matière*. Belin, 2005.

[43] T. N. Phillips and A. J. Williams. Comparison of creeping and inertial flow of an oldroyd b fluid through planar and axisymmetric contractions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 108(1-3) :25 – 47, 2002.

[44] M. Renardy. On the high weissenberg number limit of the upper convected maxwell fluid. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 165(1-2) :70 – 74, 2010.

[45] T. N. P. Robert G. Owens. *Computational Rheology*. Imperial College Press, 2002.

[46] G. P. Sasmal. A finite volume approach for calculation of viscoelastic flow through an abrupt axisymmetric contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 56(1) :15 – 47, 1995.

[47] O. Saut. "page personnel". http ://www.math.u-bordeaux1.fr/∼osaut/wp/, 2006.

[48] Z. S. Scardovelli, R. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31 :567–603, 1999.

[49] J. A. Sethian. A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 93(4) :1591–1595, Feb. 1996.

[50] J. A. Sethian. *Level Set Methods and Fast Marching Methods : Evolving Interfaces in Computational Geometry*. Cambridge University Press, 1999.

[51] P. Smereka. Level set methods for two-fluid flows.

[52] G. A. Sod. *Numerical Methods in Fluid Dynamics*. Press Syndicate of the University of Cambridge, 1985.

[53] S.Osher and R. Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer, 2003.

[54] S. Tancogne. *Calcul numérique et stabilité d'écoulements diphasiques tridimensionnels en microfluidique*. PhD thesis, Bordeaux 1, 2007.

[55] M. Tomé, A. Castelo, A. Afonso, M. Alves, and F. Pinho. Application of the log-conformation tensor to three-dimensional time-dependent free surface flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 175–176(0) :44 – 54, 2012.

[56] P. Vigneaux. *Méthodes Level Set pour des problèmes d'interface en microfluidique*. PhD thesis, Bordeaux 1, 2007.

[57] S. Vincent. *Modélisation d'écoulements incompressibles de fluides non-miscibles*. PhD thesis, Bordeaux 1, 1999.

[58] J. Zhao, Y. Hou, and Y. Li. Immersed interface method for elliptic equations based on a piecewise second order polynomial. *Computers & Mathematics with Applications*, 63(5) :957 – 965, 2012.

Contribution au calcul d'écoulements de fluides complexes.

La première contribution de cette thèse est l'étude de la modélisation ainsi que de la discrétisation des écoulements multiphasiques en géométrie microfluidique. Nous proposons un nouveau schéma d'ordre deux de discrétisation basé sur les méthodes mixtes volumes finis/éléments finis pour le système de Stokes bi-fluides avec tension de surface. Nous présentons alors des comparaison de la précision de ce nouveau schéma avec la discrétisation MAC, en 2D et en 3D-axi.
La seconde contribution est relative à l'étude de schémas numériques en temps pour les fluides viscoélastiques. Nous présentons les limites actuelles des modélisations dans ce domaine en étudiant le cas des écoulements de micelles géantes, polymères ayant la capacité de se réorganiser spatialement en fonction du taux de cisaillement. Nous montrons qu'une condition de stabilité liée au ratio de viscosité du polymère et du solvant en temps - très restrictive - existe. Un nouveau schéma est alors proposé pour contourner cette limitation et des études stabilité sont menés pour démontrer nos résultats.

Mots clés : Calcul scientifique, Fluide complexe, Mathématiques appliquées, Stabilité, Ordre 2, Oldroyd-B, Volumes finis/éléments finis mixte

Contribution to complex fluids flow simulation.

The first contribution of this thesis is the analysis and discretization of multiphase flow in a microfluidic framework. We propose a new scheme wich is second order accurate, based on mixed finite volume / finite element method for the two phases Stokes system with surface tension. We then present the comparison of the accuracy of this new scheme with the MAC discretization in 2D and 3D axi.
The second contribution is related to the study of numerical schemes in time for viscoelastic fluids.We present the current limitations in this area by studying the case of flows of wormlike micelles, polymers having the ability to reorganize themselves according to the shear rate. We show that a condition of stability related to the ratio of viscosity of the polymer and solvent in time - very restrictive - exists. A new scheme is then proposed to overcome this limitation and stability studies are conducted to demonstrate our results.

Keywords : Scientific calculus, Complex flow, Applied mathematics, Stability, Second order, Oldroyd-B, Mixed finite volume/finite element