

# Manuel d'utilisation du modèle à interface diffuse incompressible de Trio\_U

D. Jamet

27 septembre 2004

## 1 Présentation du modèle

Ce modèle présenté est un modèle à interface diffuse (encore appelé modèle “phase-field”) dédié à la **simulation numérique directe d'écoulements diphasiques incompressibles de fluides non miscibles**. Dans les modèles à interface diffuse, les interfaces séparant les phases du système ne sont pas modélisées comme des surfaces de discontinuité mais comme des **zones volumiques de transition** à travers lesquelles toutes les grandeurs physiques varient de manière continue. Ces modèles sont basés sur l'introduction d'un **paramètre d'ordre** caractéristique des phases. Dans le modèle présenté ici, ce paramètre d'ordre est représentatif du **taux de présence volumique** de l'une des phases, que l'on note  $\varphi$ . Afin de prendre en compte les **phénomènes capillaires**, importants en simulation numérique directe, l'énergie du système est supposée dépendre de  $\varphi$  mais également de  $\nabla\varphi$  sous la forme suivante :

$$E = W(\varphi) + \frac{\alpha}{2} (\nabla\varphi)^2$$

où  $\alpha$  est appelée **coefficient de capillarité interne**. La fonction  $W(\varphi)$  est une fonction double-puit dont la forme la plus simple est

$$W(\varphi) = \beta \varphi^2 (1 - \varphi)^2 \quad (1)$$

où  $\beta$  est une constante caractéristique du modèle.

Les coefficients  $\alpha$  et  $\beta$  sont caractéristiques de la tension interfaciale  $\sigma$  et de l'épaisseur  $h$  des interfaces. En effet, on a les relations suivantes :

$$\sigma = \frac{\sqrt{2\alpha\beta}}{6} \quad (2)$$

$$h = 4 \sqrt{\frac{\alpha}{2\beta}} \quad (3)$$

La tension interfaciale  $\sigma$  est une caractéristique des fluides en présence et l'épaisseur  $h$  est en général choisie égale en environ 4 ou 5 fois la taille des mailles.

Par application du second principe de la thermodynamique, on peut montrer que les équations du mouvement sont les suivantes.

$$\frac{d\varphi}{dt} = \nabla \cdot \left[ \kappa(\varphi) \nabla \left( \tilde{\mu} + \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) \right] \quad (4)$$

$$\rho(\varphi) \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla P + \tilde{\mu} \nabla\varphi + \rho(\varphi) \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6)$$

où

$$\tilde{\mu} = \frac{dW}{d\varphi} - \nabla \cdot (\alpha \nabla\varphi) \quad (7)$$

est le **potentiel chimique généralisé** et

$$\rho(\varphi) = \rho_1 + \varphi(\rho_2 - \rho_1) \quad (8)$$

est la masse volumique,  $\rho_1$  et  $\rho_2$  représentant la masse volumique des phases correspondant à  $\varphi = 0$  et  $\varphi = 1$  respectivement.

Dans le système précédent,  $d/dt$  représente la dérivée convective,  $P$  est la pression et  $\tau$  le tenseur des contraintes visqueuses.

L'équation d'évolution de  $\varphi$  (4) est appelée **équation de Cahn-Hilliard**. Le coefficient  $\kappa$  apparaissant dans cette équation est appelé **mobilité** et peut dépendre de  $\varphi$  de manière quadratique :

$$\kappa(\varphi) = a \kappa_0 \varphi (1 - \varphi) \quad (9)$$

où  $a$  et  $\kappa_0$  sont des constantes.

A noter que le terme  $\tilde{\mu} \nabla \varphi$  apparaissant dans l'équation de bilan de quantité de mouvement (5) représente les **forces capillaires**.

## 1.1 Changement de variable

Pour des raisons de simplicité de programmation, l'équation de Cahn-Hilliard est considérée comme une équation de convection-diffusion de concentration. Le second membre de l'équation de Cahn-Hilliard (4) est considéré comme un terme source, de même que le terme en  $\tilde{\mu} \nabla \varphi$  de l'équation de bilan de quantité de mouvement (5).

Pour des raisons de symétrie, la “concentration”, *i.e.* l'inconnue de l'équation de Cahn-Hilliard, est définie par

$$c = \varphi - \frac{1}{2}$$

$c$  varie alors de  $-1/2$  à  $+1/2$  à la traversée d'une interface. Les relations de fermeture  $W(\varphi)$ ,  $\rho(\varphi)$  et  $\kappa(\varphi)$  doivent alors être modifiées en conséquence :

$$W(c) = \beta \left( c - \frac{1}{2} \right)^2 \left( c + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (10)$$

$$\rho(c) = \frac{\rho_1 + \rho_2}{2} + c(\rho_2 - \rho_1) \quad (11)$$

$$\kappa(c) = a \kappa_0 \left( \frac{1}{2} + c \right) \left( \frac{1}{2} - c \right) \quad (12)$$

## 1.2 Approximation de Boussinesq

Le modèle général peut être dégradé en utilisant l'**approximation de Boussinesq** dans laquelle **la masse volumique est supposée constante mis à part dans le terme de gravité où elle est linéarisée**. Cette approximation est classiquement utilisée dans Trio\_U et les variables servant à la résolution numérique du système d'équations ainsi obtenu sont celles classiquement utilisées dans Trio\_U. En particulier, la “pression” utilisée pour la résolution couplée des équations de bilan de quantité de mouvement et de divergence nulle de la vitesse est en fait  $(P/\rho_m - g z)$ , où  $\rho_m = (\rho_1 + \rho_2)/2$  est la masse volumique moyenne et  $z$  la coordonnée verticale (suivant la direction de la gravité). Etant donnée la forme (11) de la fonction  $\rho(c)$ , le terme source lié à la gravité a l'expression suivante :

$$\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_m} c g \quad (13)$$

Cette forme permet de définir la valeur du paramètre **beta\_co** (*i.e.*  $(\rho_2 - \rho_1)/\rho_m$ ).

### 1.3 Formes du bilan de quantité de mouvement

Différentes formes du bilan de quantité de mouvement sont possibles et quatre sont actuellement disponibles. Si ces formes sont équivalentes au niveau continu, elles peuvent potentiellement donner des résultats différents du fait de la discrétisation spatiale et de la résolution numérique. Ces formes modifient la définition de la “pression” utilisée pour la résolution de l’équation de Poisson lors de la résolution du bilan de quantité de mouvement (cf. paragraphe 2.2). Les formes disponibles sont les suivantes :

1. forme 1

$$-\nabla P + \tilde{\mu} \nabla c = -\nabla(P - \tilde{\mu} c) - c \nabla \tilde{\mu} \quad (14)$$

2. forme 2

$$-\nabla P + \tilde{\mu} \nabla c = -\nabla(P + W + c \nabla \cdot (\alpha \nabla c)) + c \nabla [\nabla \cdot (\alpha \nabla c)] \quad (15)$$

3. forme 3

$$-\nabla P + \tilde{\mu} \nabla c = -\nabla \left( P + W - \alpha \frac{(\nabla c)^2}{2} + c \nabla \cdot (\alpha \nabla c) \right) + c \nabla [\nabla \cdot (\alpha \nabla c)] - \nabla \left( \alpha \frac{(\nabla c)^2}{2} \right) \quad (16)$$

4. forme 4

$$-\nabla P + \tilde{\mu} \nabla c = -\nabla(P + W) - \nabla \cdot (\alpha \nabla c) \nabla c \quad (17)$$

La première forme (14) est en général préférée aux autres, plus historiques. Cette forme présente en effet l’avantage numérique d’avoir un terme source nul à l’équilibre, ce dernier étant en particulier caractérisé par la condition  $\tilde{\mu} = cste$ . En revanche, la “pression”  $(P - \tilde{\mu} c)$  est constante à la traversée d’une interface courbe à l’équilibre, ce qui ne correspond pas à la pression habituelle des physiciens ; la pression habituelle du physicien est en fait  $P$ .

## 2 Résolution numérique

Le système d’équations (4)-(9) est résolu numériquement en deux étapes principales :

1. résolution de l’équation de **Cahn-Hilliard** (4), ce qui permet de déterminer  $\varphi^{n+1}$  et  $\tilde{\mu}^{n+1}$  ;
2. résolution de l’équation de bilan de **quantité de mouvement** (5) couplée à la contrainte (6) par une méthode de projection qui permet de déterminer  $\mathbf{u}^{n+1}$  et  $P^{n+1}$ .

La résolution de l’équation de Cahn-Hilliard peut se faire soit de manière explicite, soit de manière implicite. La résolution implicite est effectuée soit par une méthode du point fixe soit par une méthode de Newton-Krylov et permet essentiellement d’augmenter le pas de temps de stabilité (parfois de manière significative).

Les schémas de discrétisation en temps des équations de Cahn-Hilliard et de bilan de quantité de mouvement peuvent être différents.

### 2.1 Equation de Cahn-Hilliard

L’avancée en temps du champ de  $c$  s’effectue en deux grandes sous-étapes :

1. détermination de  $c^{n+1/2}$  en tenant compte uniquement du membre de droite de l’équation de Cahn-Hilliard ; cette étape peut être résolue soit de manière explicite, soit de manière implicite.
2. détermination de  $c^{n+1}$  en prenant en compte le terme de convection ; c’est pour cette seconde étape que l’on peut choisir le schéma en temps (Euler, Runge-Kutta, etc.).

La résolution explicite de la première sous-étape permet de résoudre l’équation suivante :

$$\frac{c^{n+1/2} - c^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \left[ \kappa(c^n) \nabla \left( \tilde{\mu}^n + \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{(\mathbf{u}^n)^2}{2} \right) \right]$$

La résolution implicite mérite plus d'explications car elle est basée sur l'utilisation d'une approximation semi-implicite de  $\tilde{\mu}$ . Pour tout champ  $\phi$ , on note

$$\phi^{n+1/4} = \theta \phi^{n+1/2} + (1 - \theta) \phi^n, \text{ avec } \theta \in [0; 1]$$

Pour des raisons de stabilité et de précision, la valeur de  $\theta$  est imposée à 0.6.

$$\frac{c^{n+1/2} - c^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \left[ \kappa(c^n) \nabla \left( \tilde{\mu}^{n+1/4} + \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{(\mathbf{u}^n)^2}{2} \right) \right] \quad (18)$$

avec

$$\tilde{\mu}^{n+1/4} = W(c^{1/4}) + \nabla \cdot (\alpha \nabla c^{n+1/4}) \quad (19)$$

Le système d'équations (18)-(19) est non linéaire (du fait de la non linéarité de  $W(c)$ ) et est résolu de manière itérative soit par une méthode du point fixe, soit par une méthode de Newton-Krylov (également appelée méthode GMRES non linéaire). A noter que, pour des raisons de simplification du système non linéaire, la mobilité est toujours déterminée au pas de temps  $n$  et non pas au pas de temps  $(n + 1)$ .

## 2.2 Equation de bilan de quantité de mouvement

L'équation de bilan de quantité de mouvement, couplée à la contrainte de divergence nulle de la vitesse, est résolue par une méthode de projection dont on rappelle ici les grandes étapes. Pour simplifier l'exposé, on considère uniquement un schéma d'Euler explicite et l'on met l'équation de bilan de quantité de mouvement sous la forme suivante :

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla P + \mathbf{F}$$

où le vecteur  $\mathbf{F}$  représente toutes les forces autres que celle de pression.

Cette équation est discrétisée de la manière suivante :

$$\rho^n \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\nabla P^{n+1} + \mathbf{F}$$

où le pas de temps auquel est évalué  $\mathbf{F}$  n'est pas précisé car cela peut dépendre des problèmes traités. Cependant, les dépendances en  $\mathbf{u}$  de  $\mathbf{F}$  doivent être explicites.

Après division par  $\rho^n$ , application de l'opérateur de divergence et prise en compte de la condition (6), on obtient l'équation de Poisson sur la pression suivante :

$$\nabla \cdot \left( \frac{1}{\rho^n} \nabla P^{n+1} \right) = \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{F}}{\rho^n} \right)$$

La matrice en pression associée à la discrétisation de cette équation dépend du champ  $\rho^n$  et doit par conséquent être assemblée à chaque pas de temps. C'est la raison pour laquelle les méthodes liées aux assembleurs ont dues être modifiées.

## 3 Mots clés et signification

**Schema\_Phase\_field** définit les caractéristiques du schéma en temps du système. Les champs devant être définis sont les mêmes que ceux du schéma en temps classique de Trio\_U, à l'exception de deux mots-clés supplémentaires définissant les schémas en temps utilisés pour la résolution des équations de Cahn-Hilliard et de quantité de mouvement (cf. paragraphe 2).

**schema\_CH** définit le schéma en temps utilisé pour la résolution de l'équation de Cahn-Hilliard.

**schema\_NS** définit le schéma en temps utilisé pour la résolution de l'équation de bilan de quantité de mouvement.

**Navier\_Stokes\_phase\_field** définit les caractéristiques de l'équation de bilan de quantité de mouvement. Outre les mots-clés définissant les caractéristiques de l'équation de Navier-Stokes incompressible, les mots-clés suivants sont utilisés.

**approximation\_de\_boussinesq oui/non** permet d'utiliser (oui) ou non (non) le modèle avec approximation de Boussinesq (*cf.* paragraphe 1.2).

**viscosite\_dynamique\_constante oui/non** permet de prendre en compte (non) ou non (oui) une viscosité dépendant de  $c$ .

**gravite** définit le nombre de composantes et les composantes du vecteur d'accélération de la gravité. Ce mot-clé est nécessaire lorsque l'approximation de Boussinesq n'est pas utilisée.

**Source\_Qdm\_Phase\_field { forme\_du\_terme\_source 1/2/3/4 }** définit la prise en compte de la force capillaire dans l'équation de bilan de quantité de mouvement avec indication de la forme de cette forme (*cf.* paragraphe 1.3 pour la définition de ces formes).

**Convection\_diffusion\_Phase\_field** définit les caractéristiques de l'équation de bilan de Cahn-Hilliard. Outre les mots-clés d'une équation de convection-diffusion standard, existent les mots-clés particuliers suivants.

**Source\_Con\_Phase\_field** définit le terme source de l'équation de Cahn-Hilliard. Les arguments de ce terme source sont les suivants.

**Temps\_d\_affichage valeur** définit le temps en seconde pendant lequel le récapitulatif des caractéristiques du problème et les valeurs de ses paramètres reste affiché à l'écran avant le démarrage de la résolution du problème.

**alpha valeur** définit la valeur du coefficient de capillarité interne  $\alpha$ .

**beta valeur** définit la valeur du paramètre  $\beta$  (*cf.* équation (1)).

**kappa valeur** définit la valeur du coefficient de capillarité interne  $\kappa_0$  ; c'est la valeur utilisée lorsque la mobilité  $\kappa$  est non variable.

**kappa\_variable oui/non** définit si la mobilité  $\kappa$  dépend ou non de  $c$ .

**multiplicateur\_de\_kappa valeur** définit la valeur du paramètre  $a$  dans l'expression (9) de  $\kappa(c)$ .

**moyenne\_de\_kappa arithmétique/harmonique/géométrique** définit la manière de calculer la valeur de  $\kappa$  aux faces en fonction de ses valeurs aux éléments voisins (le choix de la moyenne harmonique est en général préférable aux autres) :

**arithmétique**  $\kappa_f = (\kappa_1 + \kappa_2)/2$

**harmonique**  $1/\kappa_f = (1/\kappa_1 + 1/\kappa_2)/2$

**géométrique**  $\kappa_f = \sqrt{\kappa_1 \kappa_2}$

**couplage\_NS\_CH mutilde(n+1/2)/mutilde(n)** le pas de temps auquel est pris  $\tilde{\mu}$  pour le calcul du terme source de l'équation de bilan de quantité de mouvement (le choix  $\tilde{\mu}^{n+1/2}$  permet une meilleure conservation de l'énergie du système).

**implication\_CH oui/non** définit si l'équation de Cahn-Hilliard est résolue de manière implicite (oui) ou explicite (non).

**gmres\_non\_lineaire oui/non** définit la méthode de résolution de l'équation de Cahn-Hilliard en implicite : méthode de Newton-Krylov (oui) ou méthode du point fixe (non).

**seuil\_cv\_iterations\_ptfixe valeur** définit le seuil de convergence de la méthode du point fixe, *i.e.*  $|x^{k+1} - x^k|$ , où  $x$  est le vecteur solution du système non linéaire.

**seuil\_residu\_ptfixe valeur** définit le seuil de l'inversion matricielle utilisée par l'algorithme du point fixe.

**seuil\_residu\_gmresnl valeur** définit le seuil de convergence de l'algorithme de Newton-Krylov.

**dimension\_espace\_de\_krylov valeur** définit le nombre de vecteurs de Krylov utilisé dans la méthode de Newton-Krylov.

**nb\_iterations\_gmresnl valeur** définit le nombre d'itérations maximum de la méthode de Newton-Krylov.

**residu\_min\_gmresnl valeur** définit le seuil minimum de convergence de la méthode de Newton-Krylov.

**residu\_max\_gmresnl valeur** définit le seuil maximum de convergence de la méthode de Newton-Krylov.

**mu\_1 valeur** définit la valeur de la viscosité de la phase 1.

**mu\_2 valeur** définit la valeur de la viscosité de la phase 2.

**rho\_1 valeur** définit la valeur de la masse volumique de la phase 1.

**rho\_2 valeur** définit la valeur de la masse volumique de la phase 2.

**potentiel\_chimique\_generalise avec\_energie\_cinétique/sans\_energie\_cinétique** définit si le potentiel chimique généralisé de l'équation de Cahn-Hilliard prend en compte (**avec\_energie\_cinétique**) ou non (**sans\_energie\_cinétique**) le terme en  $(d\rho/dc) \mathbf{u}^2/2$ .

**potentiel\_chimique\_generalise** dans Postraitement permet le post-traitement du champ  $\tilde{\mu}$ .

## 4 Fichiers créées ou modifiées

La liste des fichiers modifiées ou ajoutées pour la résolution de ce modèle ainsi que leur localisation dans l'arborescence Trio\_U sont données dans le tableau ci-dessous.

Répertoire	Fichier
Front_Tracking/VDF	AssembleurP_VDF_FT.cpp
Geometrie	Domaine.cpp Zone.cpp
Math/SolvSys	SolvNPHypre.cpp SolvNPHypre.h
Noyau	Assembleur_base.cpp Assembleur_base.h Eqn_base.cpp Resoudre.cpp Sch_Tps_base.cpp Sch_Tps_base.h
Schemas_Temps	RK3.cpp Schema_Phase_field.cpp Schema_Phase_field.h Schemas_Temps.cpp Sch_Euler_ex.cpp Sch_Euler_ex.h Sch_Euler_Phase_field_ex.cpp Sch_Euler_Phase_field_ex.h
ThHyd	C_D_Concen.cpp C_D_Concen.h C_D_Phase_field.cpp C_D_Phase_field.h DisThyd.cpp DisThyd.h N_S.cpp N_S_phase_field.cpp N_S_phase_field.h Pb_Phase_field.cpp Pb_Phase_field.h SouConPhase_field_base.cpp SouConPhase_field_base.h
VDF/Solveurs	AssembleurPVDF_PF.cpp AssembleurPVDF_PF.h SolveursVDF.cpp
VDF/Sources	BoussiVDFFa.cpp BoussiVDFFa.h SouConPhase_field.cpp SouConPhase_field.h