Simulation numérique directe d'écoulements triphasiques à l'aide de modèles à interfaces diffuses

F. Boyer[1] - C. Lapuerta[2] - S. Minjeaud[2] - B. Piar[2]

[1]Laboratoire d'Analyse, Topologie et Probabilités
Université Paul Cézanne, Aix-Marseille III

[2]Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire,
DPAM / SEMIC / LIMSI.

Séminaire CEA-GAMNI, IHP, 29 Janvier 2008

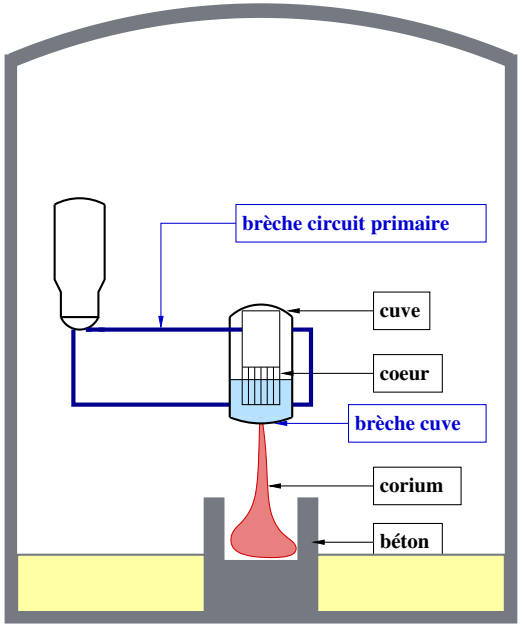
Plan

1. Introduction
2. Modèles triphasiques de type Cahn-Hilliard
3. Schémas numériques
4. Raffinement local adaptatif de maillages
5. Conclusions et perspectives

Plan

1. Introduction
2. Modèles triphasiques de type Cahn-Hilliard
3. Schémas numériques
4. Raffinement local adaptatif de maillages
5. Conclusions et perspectives

Le problème industriel

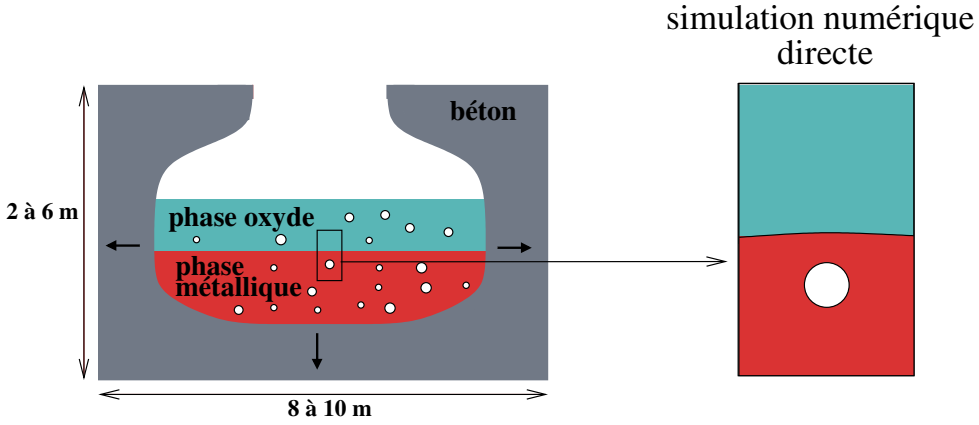


Contexte général :

Accident grave dans un REP dû à une perte de refroidissement, après percement de la cuve.

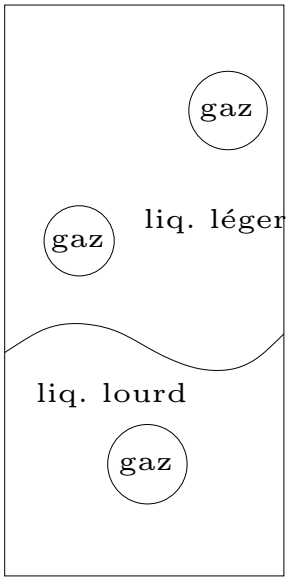
Configuration probable :

- Corium composé de deux phases stratifiées
  - une phase oxyde
  - une phase métallique
- Interaction corium-béton : dégagement d'un flux gazeux



Caractéristiques des écoulements étudiés

- Trois phases non miscibles, sans changement de phase
- Situation 3D
- Rapports de masses volumiques importants
- Tensions de surface différentes pour les différents types d'interface
- Forts changements topologiques des interfaces (ruptures, coalescences)



Modèles diphasiques à interface diffuse

Principe

- Interface = zone de mélange d'épaisseur > 0
- Paramètre d'ordre c = fraction volumique :

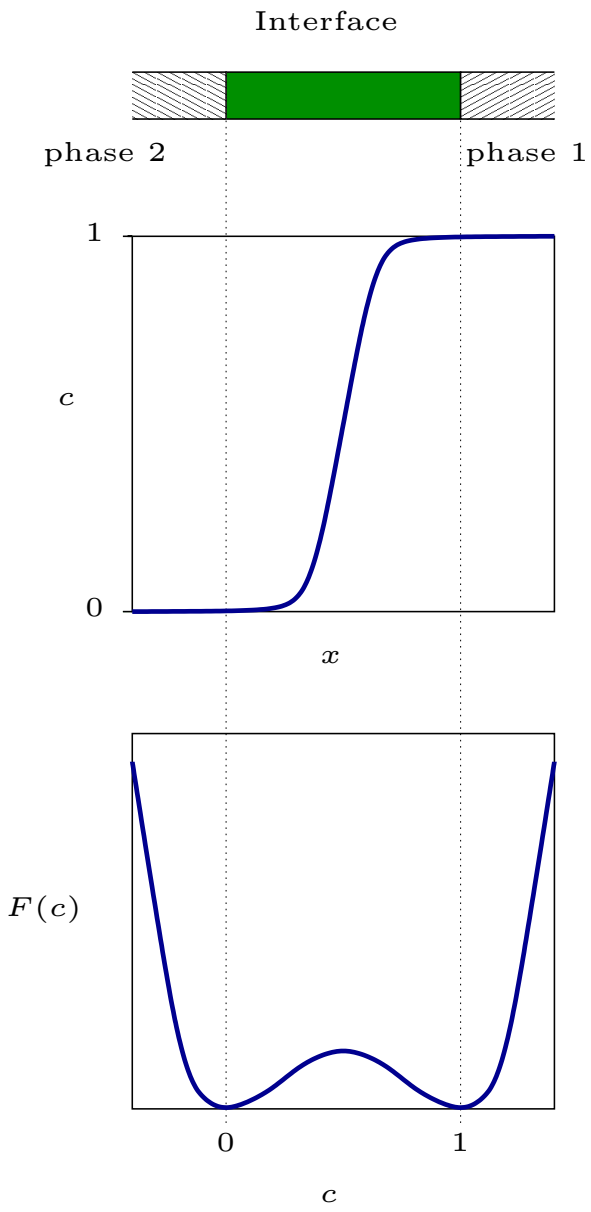
Energie libre du système

$$\mathcal{F}^{\text{diph}}_{\sigma,\varepsilon}(c) = \int_\Omega \left(12\frac{\sigma}{\varepsilon}F(c) + \frac{3}{4}\sigma\varepsilon\,|\nabla c|^2 \right) dx$$

- Terme en $F(c) = c^2(1-c)^2$:
  $\rightsquigarrow$ énergie libre *volumique* du mélange
- Terme en $|\nabla c|^2$:
  $\rightsquigarrow$ terme capillaire

Grandeurs intrinsèques du modèle :

- Tension de surface σ
- Epaisseur d'interface ε



$$\mathcal{F}^{\text{diph}}_{\sigma,\varepsilon}(c) = \int_\Omega \left(12\frac{\sigma}{\varepsilon} c^2(1-c)^2 + \frac{3}{4}\sigma\varepsilon \, |\nabla c|^2 \right) dx$$

Profil attendu de l'interface :
Minimum de $\mathcal{F}^{\text{diph}}_{\sigma,\varepsilon}$ avec $c_0(-\infty) = 0$, $c_0(+\infty) = 1$:

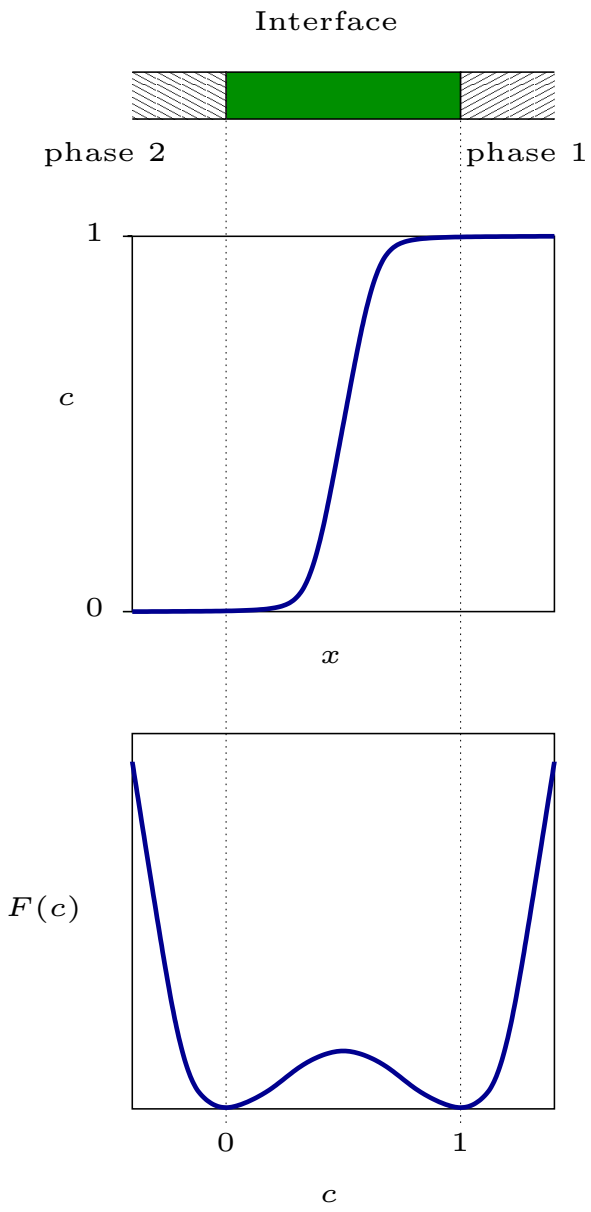
$$-\frac{3}{2}\sigma\varepsilon c_0'' + 24\frac{\sigma}{\varepsilon} c_0(1-c_0)(1-2c_0) = 0.$$

La solution à translation près est donnée par

$$c_0(x) = 0.5\left(1 + \tanh\left(\frac{2x}{\varepsilon}\right)\right),$$

et son énergie est exactement

$$\mathcal{F}^{\text{diph}}_{\sigma,\varepsilon}(c_0) = \sigma.$$



Equation de Cahn-Hilliard :

Evolution en temps = flot de gradient H^{-1} de l'énergie sous la contrainte de conservation de la masse :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (M_0(c)\nabla\mu) = 0, \\ \mu = \dfrac{\delta \mathcal{F}^{\text{diph}}_{\sigma,\varepsilon}}{\delta c} = -\dfrac{3}{2}\sigma\varepsilon\Delta c + \dfrac{12\sigma}{\varepsilon}F'(c), \end{cases}$$

- $M_0 \geq 0$ est la mobilité,
- Conditions aux limites de Neumann pour μ et c.

Bonnes propriétés essentielles :

- Le volume de chaque phase est conservé.
- L'équation vérifiée par $1 - c$ est formellement la même !
- On a l'équation d'évolution de l'énergie :

$$\frac{d}{dt}\mathcal{F}^{\text{diph}}_{\sigma,\varepsilon} + \int_\Omega M_0(c)|\nabla\mu|^2\,dx = 0.$$

Couplage Cahn-Hilliard / Navier-Stokes

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c}{\partial t} + v \cdot \nabla c - \nabla \cdot (M_0(c)\nabla \mu) = 0 \\ \mu = -\dfrac{3}{2}\sigma\varepsilon\Delta c + \dfrac{12\sigma}{\varepsilon}F'(c) \\ \rho(c)\left(\dfrac{\partial v}{\partial t} + (v\cdot\nabla)v\right) - \nabla\cdot(2\mu(c)D(v)) + \nabla p = \mu\nabla c \\ \nabla \cdot v = 0, \end{cases}$$

(Gurtin, Polignone, Viñals, '96), **(Lowengrub, Truskinovsky, '98)**
(Jacqmin, '00)
(B., '99), **(B., '01)**
(Kim, '05), **(Kim, Kang, Lowengrub, '06)**
(Abels, '07)

Plan

1. Introduction
2. Modèles triphasiques de type Cahn-Hilliard
3. Schémas numériques
4. Raffinement local adaptatif de maillages
5. Conclusions et perspectives

Ou est la difficulté ?

Mélange parfait de fluides non miscibles.

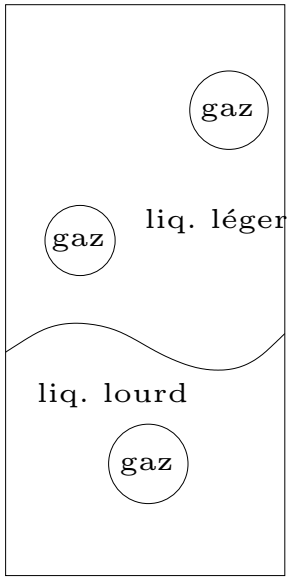
Trois paramètres d'ordre c_1, c_2, c_3 tels que

$c_1 + c_2 + c_3 = 1$, en tout point, à tout instant.

On se donne :

l'épaisseur d'interface $\varepsilon > 0$

les tensions de surfaces $\sigma_{12},\ \sigma_{13},\ \sigma_{23} > 0$.



Cadre général

(B., Lapuerta, M2AN, '06)

Forme générale de l'énergie : avec $\Sigma_i = \sigma_{ij} + \sigma_{ik} - \sigma_{jk}$

$$\mathcal{F}^{\text{triph}}_{\mathbf{\Sigma},\varepsilon}(\mathbf{c}) = \int_\Omega \frac{12}{\varepsilon} F(\mathbf{c}) + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_1|\nabla c_1|^2 + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_2|\nabla c_2|^2 + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_3|\nabla c_3|^2\, dx.$$

Evolution du système = flot de gradient H^{-1} de l'énergie

$$\text{(CH)} \quad \begin{cases} \dfrac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\dfrac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \right), \quad \forall i \in \{1,2,3\} \\ \mu_i = \dfrac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \displaystyle\sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} \left(\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_j F(\mathbf{c}) \right) \right) - \frac{3}{4}\varepsilon\Sigma_i \Delta c_i, \quad \forall i, \end{cases}$$

avec

$$\frac{1}{\Sigma_T} = \frac{1}{3}\left(\frac{1}{\Sigma_1} + \frac{1}{\Sigma_2} + \frac{1}{\Sigma_3} \right).$$

(B., Lapuerta, M2AN, '06)

Forme générale de l'énergie : avec $\Sigma_i = \sigma_{ij} + \sigma_{ik} - \sigma_{jk}$

$$\mathcal{F}^{\text{triph}}_{\mathbf{\Sigma},\varepsilon}(\mathbf{c}) = \int_\Omega \frac{12}{\varepsilon} F(\mathbf{c}) + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_1|\nabla c_1|^2 + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_2|\nabla c_2|^2 + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_3|\nabla c_3|^2\, dx.$$

Evolution du système = flot de gradient H^{-1} de l'énergie

$$\text{(CH)} \quad \begin{cases} \dfrac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\dfrac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \right), \quad \forall i \in \{1,2,3\} \\ \mu_i = \dfrac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \displaystyle\sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} \left(\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_j F(\mathbf{c}) \right) \right) - \frac{3}{4}\varepsilon\Sigma_i \Delta c_i, \quad \forall i, \end{cases}$$

Premières propriétés : (**Rq : on ne suppose pas** $\Sigma_i > 0$)

$$\forall t, \forall x, \ \sum_{i=1}^{3} c_i = 1 \Rightarrow \begin{cases} \text{L'un } \textbf{quelconque} \text{ des } c_i \text{ peut être oublié !} \\ \text{et on a} \quad \displaystyle\sum_{i=1}^{3} \frac{\mu_i}{\Sigma_i} = 0. \end{cases}$$

(B., Lapuerta, M2AN, '06)

Forme générale de l'énergie : avec $\Sigma_i = \sigma_{ij} + \sigma_{ik} - \sigma_{jk}$

$$\mathcal{F}^{\text{triph}}_{\mathbf{\Sigma},\varepsilon}(\mathbf{c}) = \int_\Omega \frac{12}{\varepsilon} F(\mathbf{c}) + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_1|\nabla c_1|^2 + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_2|\nabla c_2|^2 + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_3|\nabla c_3|^2\,dx.$$

Evolution du système = flot de gradient H^{-1} de l'énergie

$$\text{(CH)} \quad \begin{cases} \dfrac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla\cdot\left(\dfrac{M_0}{\Sigma_i}\nabla\mu_i\right), \quad \forall i \in \{1,2,3\} \\ \mu_i = \dfrac{4\Sigma_T}{\varepsilon}\displaystyle\sum_{j\neq i}\left(\frac{1}{\Sigma_j}\left(\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_j F(\mathbf{c})\right)\right) - \frac{3}{4}\varepsilon\Sigma_i\Delta c_i, \quad \forall i, \end{cases}$$

Premières propriétés : (**Rq : on ne suppose pas** $\Sigma_i > 0$)
Formellement, l'évolution de l'énergie est donnée par

$$\frac{d}{dt}\mathcal{F}^{\text{triph}}_{\mathbf{\Sigma},\varepsilon}(\mathbf{c}) + \int_\Omega \sum_{i=1}^{3} \frac{M_0}{\Sigma_i}|\nabla\mu_i|^2\,dx = 0.$$

Existence et unicité

$$\mathcal{F}^{\text{triph}}_{\mathbf{\Sigma},\varepsilon}(\mathbf{c}) = \int_\Omega \frac{12}{\varepsilon} F(\mathbf{c}) + \underbrace{\frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_1|\nabla c_1|^2 + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_2|\nabla c_2|^2 + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_3|\nabla c_3|^2}_{\text{Termes capillaires}} dx.$$

Proposition

La contribution des termes capillaires dans le modèle est positive si et seulement si

$$\Sigma_1\Sigma_2 + \Sigma_1\Sigma_3 + \Sigma_2\Sigma_3 > 0, \tag{1}$$

Théorème

Sous cette hypothèse + conditions **raisonnables** *sur F, le problème est bien posé dans*

$$\mathrm{C}^0_b([0,+\infty[;(\mathrm{H}^1(\Omega))^3) \cap \mathrm{L}^2_{loc}(0,+\infty;(\mathrm{H}^3(\Omega))^3).$$

Consistance

Principe

Pour que le modèle soit pertinent, il faut qu'il soit capable de rendre compte des situations purement diphasiques.

Définition

On dit que le modèle est consistant *avec les modèles diphasiques si*

(P1) *Quand la phase i est* **absente**, *on retrouve l'énergie associée au modèle diphasique.*

$$\mathcal{F}^{triph}_{\mathbf{\Sigma},\varepsilon}(c, 1-c, 0) = \mathcal{F}^{diph}_{\sigma_{12},\varepsilon}(c), \quad \forall c \in \mathrm{H}^1(\Omega),$$
$$\mathcal{F}^{triph}_{\mathbf{\Sigma},\varepsilon}(c, 0, 1-c) = \mathcal{F}^{diph}_{\sigma_{13},\varepsilon}(c), \quad \forall c \in \mathrm{H}^1(\Omega),$$
$$\mathcal{F}^{triph}_{\mathbf{\Sigma},\varepsilon}(0, c, 1-c) = \mathcal{F}^{diph}_{\sigma_{23},\varepsilon}(c), \quad \forall c \in \mathrm{H}^1(\Omega).$$

(P2) *Quand la phase i est* **absente à l'instant initial**, *elle ne doit pas apparaître,* i.e. *toute solution* $\mathbf{c}$ *de* (CH) *doit vérifier*

$$c_i(0) = 0 \Longrightarrow c_i(t) = 0, \ \forall t \geq 0.$$

Modèles algébriquement consistants

Soient σ_{12}, σ_{13}, σ_{23} les trois tensions de surface données et

$$\Sigma_i = \sigma_{ij} + \sigma_{ik} - \sigma_{jk}$$

$$\mathcal{F}^{\text{triph}}_{\mathbf{\Sigma},\varepsilon}(\mathbf{c}) = \int_\Omega \frac{12}{\varepsilon} F(\mathbf{c}) + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_1|\nabla c_1|^2 + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_2|\nabla c_2|^2 + \frac{3}{8}\varepsilon\Sigma_3|\nabla c_3|^2\, dx.$$

Théorème

Le modèle défini par l'énergie $\mathcal{F}^{triph}_{\mathbf{\Sigma},\varepsilon}$ et le système (CH) *est* consistant *avec les systèmes diphasiques si et seulement si F s'écrit :*

$$\begin{aligned} F(\mathbf{c}) &= \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2 \\ &\quad + c_1c_2c_3(\Sigma_1c_1 + \Sigma_2c_2 + \Sigma_3c_3) + c_1^2c_2^2c_3^2\, G(\mathbf{c}), \end{aligned}$$

où G est n'importe quelle fonction régulière.

Exemples et contre-exemples

Notion d'étalement :
Si $\exists i,\ \Sigma_i < 0$ l'étalement est total, sinon il est partiel.

Etalement partiel $\rightsquigarrow$ on peut prendre :

$$F_0(\mathbf{c}) = \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2 + c_1c_2c_3(\Sigma_1c_1 + \Sigma_2c_2 + \Sigma_3c_3)$$

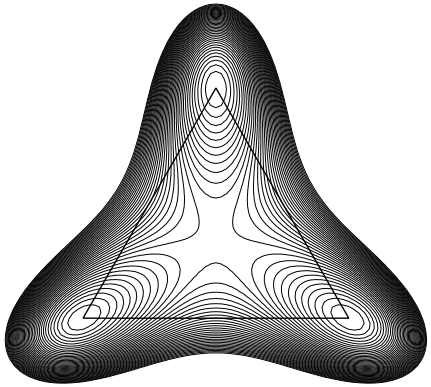
Etalement total $\rightsquigarrow$ il faut prendre :

$$F_\Lambda(\mathbf{c}) = F_0(\mathbf{c}) + \Lambda c_1^2c_2^2c_3^2, \quad \text{avec } \Lambda \text{ assez grand}$$

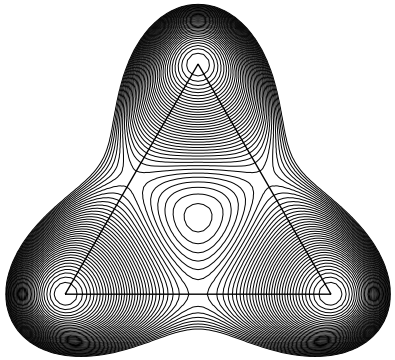
Dans tous les cas :
L'énergie $\widetilde{F}_0$ choisie dans **(Kim, Lowengrub, '05)** ne convient pas

$$\widetilde{F}_0(\mathbf{c}) = \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2.$$

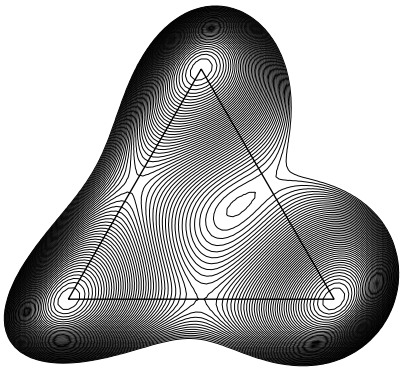
Isovaleurs de F sur le triangle de Gibbs



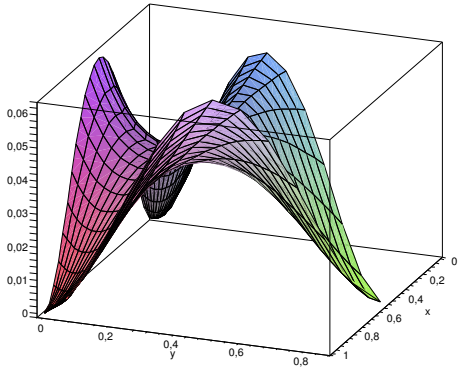
$\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = 4,$
$F = \tilde{F}_0$

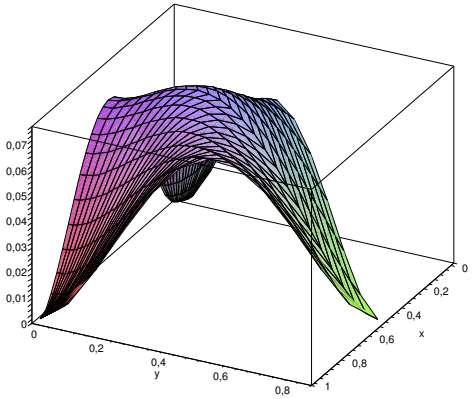


$\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = 4,$
$F = F_0$



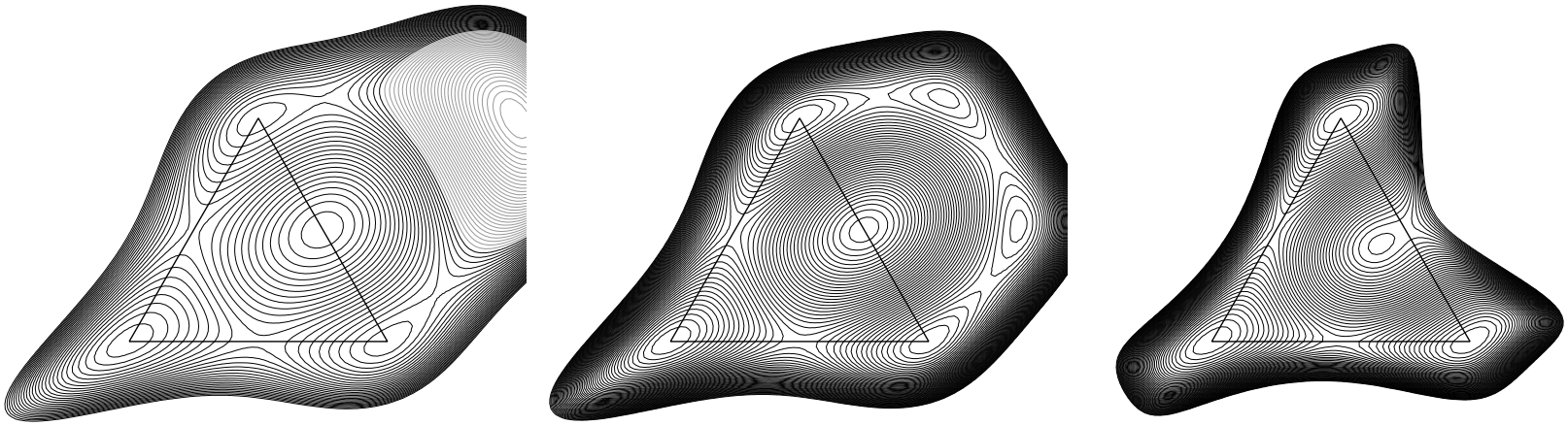
$\Sigma_1 = 6, \Sigma_2 = 8, \Sigma_3 = 4,$
$F = F_0$

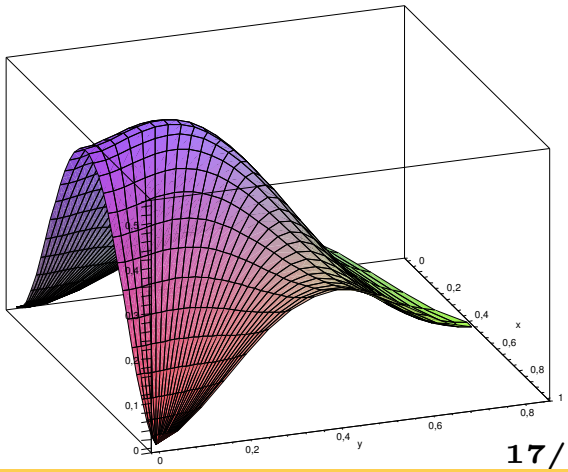




$$\Sigma_1 = \Sigma_2 = 4, \Sigma_3 = -0.8,$$

$\Lambda = 0.4$ $\Lambda = 0.7$ $\Lambda = 10$





Couplage avec Navier-Stokes

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c_i}{\partial t} + (u \cdot \nabla) c_i = \nabla \cdot \left(\dfrac{M_0(\mathbf{c})}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \right), \\ \mu_i = \dfrac{4\Sigma_T}{\varepsilon} \displaystyle\sum_{j \neq i} \left(\dfrac{1}{\Sigma_j} \left(\partial_i F(\mathbf{c}) - \partial_j F(\mathbf{c}) \right) \right) - \dfrac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \Delta c_i \\ \varrho(\mathbf{c}) \left(\dfrac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) - \nabla \cdot (2\mu(\mathbf{c}) D(u)) + \nabla p = \displaystyle\sum_{i=1}^{3} \mu_i \nabla c_i + \varrho(\mathbf{c}) g \\ \nabla \cdot u = 0. \end{cases}$$

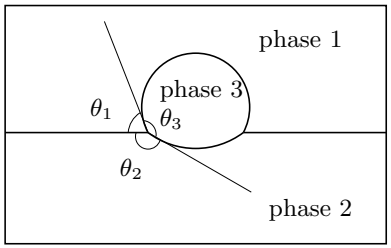
Les termes rouges se compensent au niveau du bilan d'énergie formel.

Expressions équivalentes pour les termes capillaires :

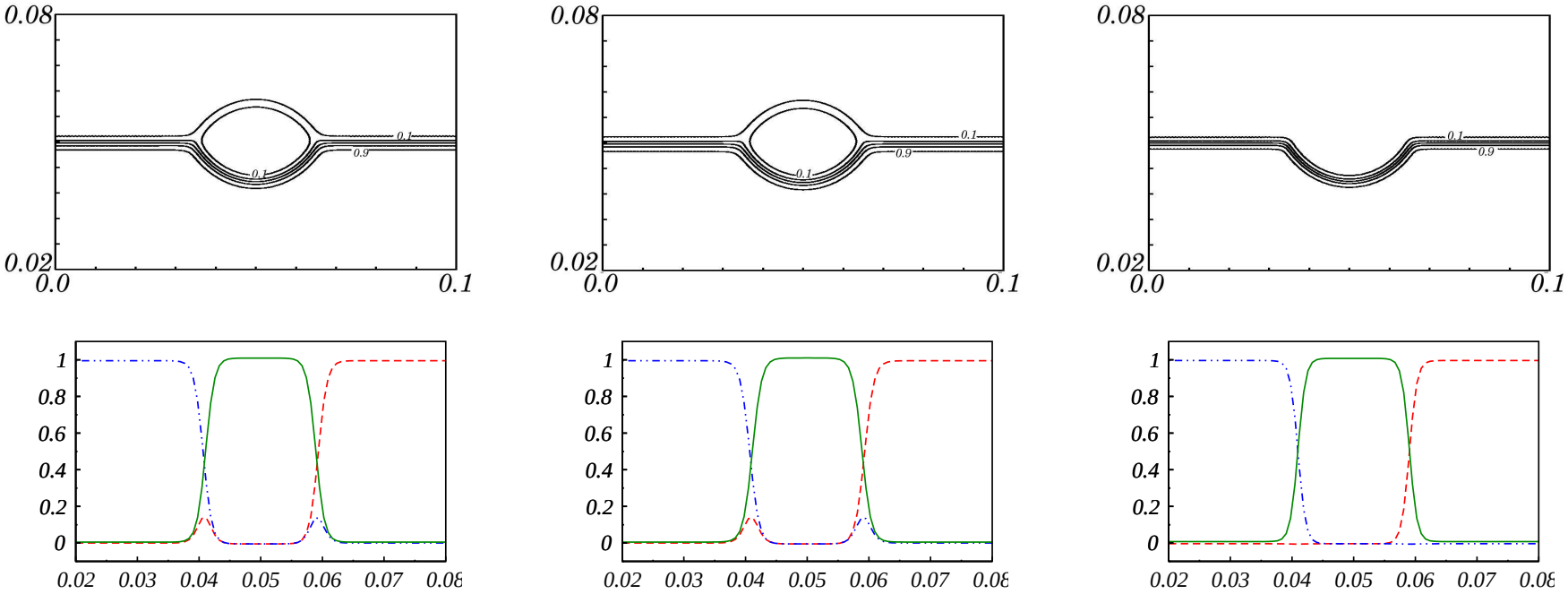
$$\nabla \pi_1 - \sum_i c_i \nabla \mu_i, \text{ ou } \nabla \cdot \left(\alpha \sum_i \nabla c_i \otimes \nabla c_i + \pi_2 \mathrm{Id} \right), \ldots$$

Loi de Young

$$\frac{\sin\theta_1}{\sigma_{23}} = \frac{\sin\theta_2}{\sigma_{13}} = \frac{\sin\theta_3}{\sigma_{12}}$$

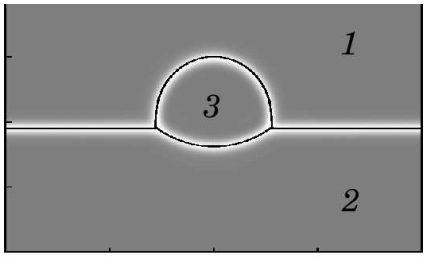


Modèles consistants vs modèles non consistants

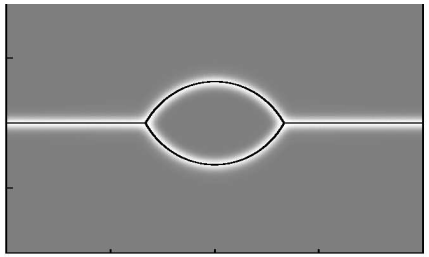


(Kim et al., 2005) $F = \widetilde{F}_0$ $F = F_0$

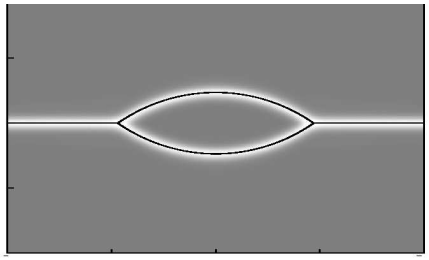
Exemples pour diverses valeurs de $(\sigma_{12}; \sigma_{13}; \sigma_{23})$



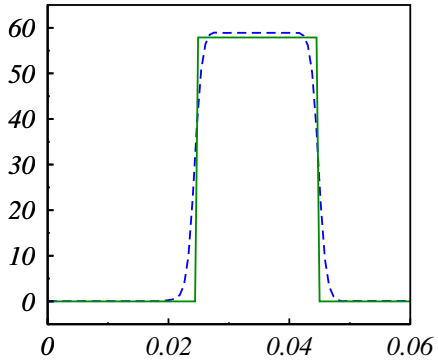
$(1\,;\,0.8\,;\,1.4)$

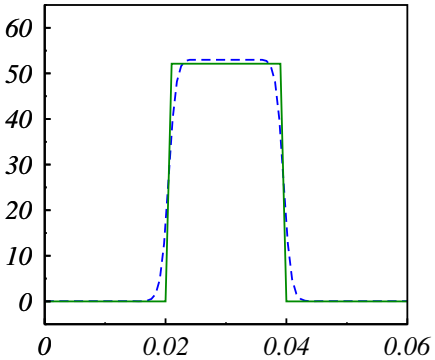


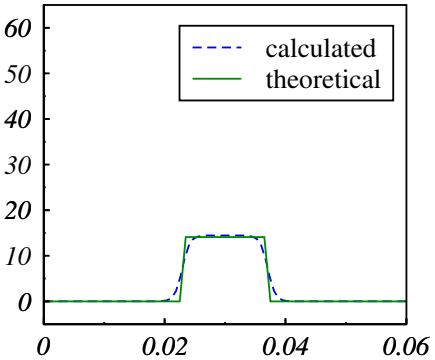
$(1\,;\,1\,;\,1)$



$(1\,;\,0.6\,;\,0.6)$

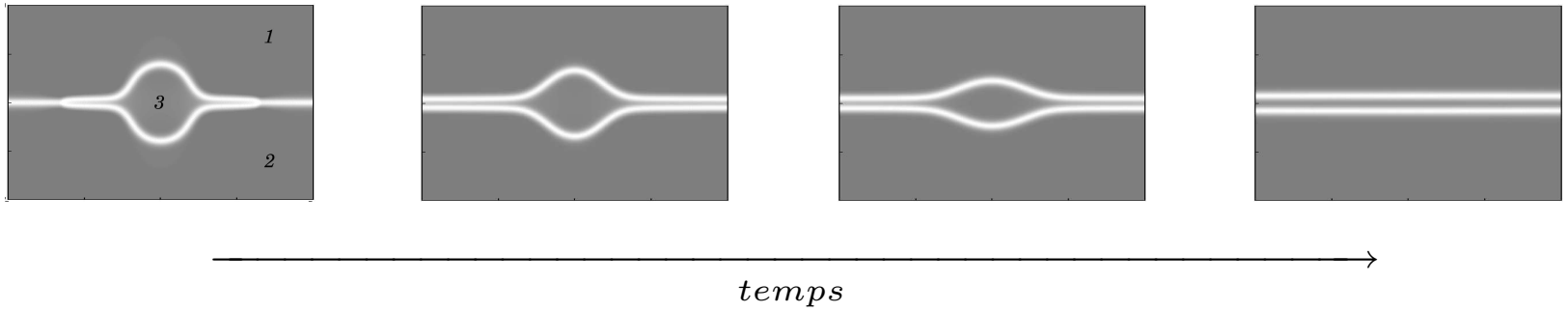




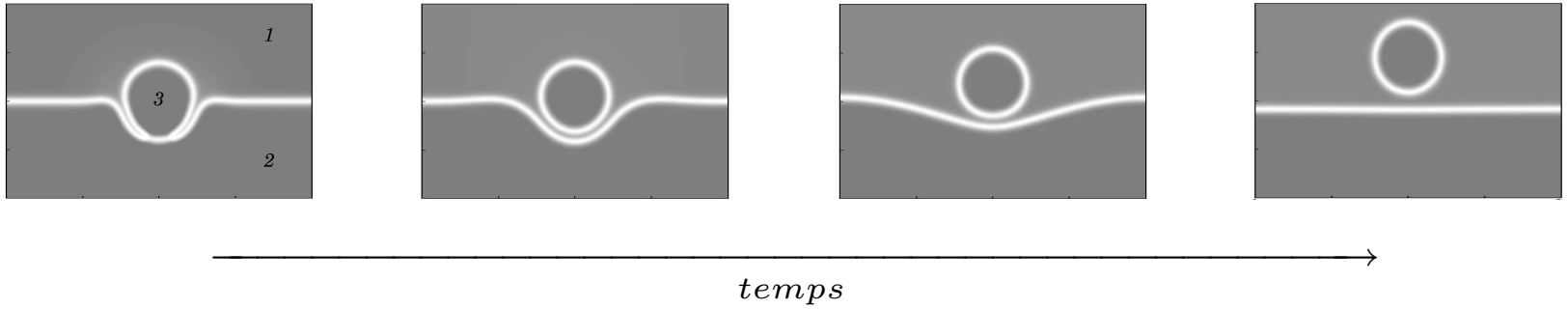


Comme prévu il faut utiliser $F = F_\Lambda$ avec Λ assez grand

Premier cas : $(\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23})=(3\,;\,1\,;\,1)$, $\Sigma_3 < 0$



Deuxième cas : $(\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23})=(1\,;\,1\,;\,3)$, $\Sigma_1 < 0$



Plan

1. Introduction
2. Modèles triphasiques de type Cahn-Hilliard
3. Schémas numériques
4. Raffinement local adaptatif de maillages
5. Conclusions et perspectives

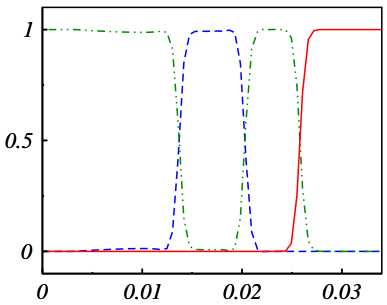
Méthode numérique

Discrétisation en espace par éléments finis :

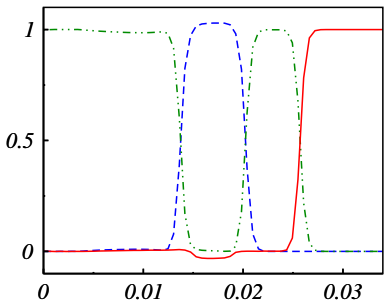
- Plateforme PELICANS de l'IRSN.
- Eléments $\mathbb{P}_1$-bulle / $\mathbb{P}_1$ pour la vitesse et la pression (ou $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$). Eléments $\mathbb{P}_1$ pour $\mathbf{c}$ et $\boldsymbol{\mu}$.
- On élimine un des paramètres d'ordre pour ne résoudre que deux équations de Cahn-Hilliard. Ce choix peut être arbitraire.
- Propriétés de base :
  - Conservation automatique de la contrainte $c_1 + c_2 + c_3 = 1$.
  - Conservation exacte du volume des phases.

Remarque : Difficultés pour monter en ordre sur $\mathbf{c}$ et $\boldsymbol{\mu}$

$\mathbb{P}_1$



$\mathbb{P}_2$



Discrétisation en temps dans CH

Discrétisation implicite des termes NL :

$$\frac{4\Sigma_T}{\varepsilon}\sum_{j\neq i}\left(\frac{1}{\Sigma_j}\left(\partial_i F(\mathbf{c}_h^{n+1})-\partial_j F(\mathbf{c}_h^{n+1})\right)\right)$$

- $\rightsquigarrow$ Pas d'inégalité d'énergie pour tout Δt !
  Mais existence (non unicité) de la solution car le terme non convexe est de bas degré.
- $\rightsquigarrow$ En pratique : dès que $\exists \Sigma_i < 0$, problème de convergence de l'algorithme de Newton lors de l'apparition de points triples.

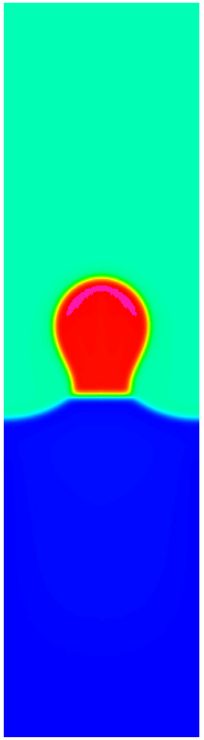
Discrétisation semi-implicite des termes NL : $F = F^+ + F^-$

$$\frac{4\Sigma_T}{\varepsilon}\sum_{j\neq i}\frac{1}{\Sigma_j}\left(\partial_i F^+(\mathbf{c}_h^{n+1})-\partial_j F^+(\mathbf{c}_h^{n+1})\right)$$
$$+\frac{4\Sigma_T}{\varepsilon}\sum_{j\neq i}\frac{1}{\Sigma_j}\left(\left(\partial_i F^-(\mathbf{c}_h^{n})-\partial_j F^-(\mathbf{c}_h^{n})\right)\right)$$

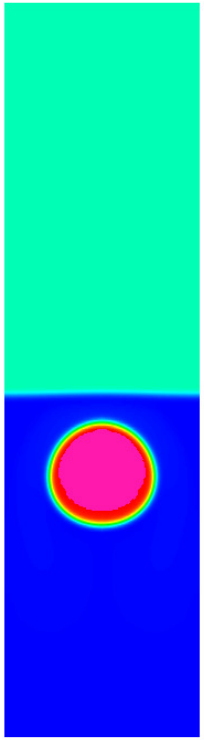
- $\rightsquigarrow$ Inégalité d'énergie $\forall \Delta t \Rightarrow$ existence et unicité.
- $\rightsquigarrow$ Erreur de troncature trop importante en $1/\varepsilon$.

UTILISATION DE $F = F_0$

$\Delta t = 10^{-3}$

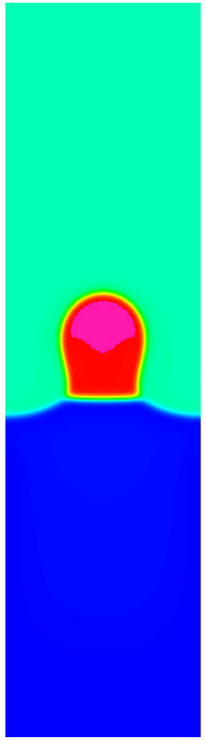


implicite

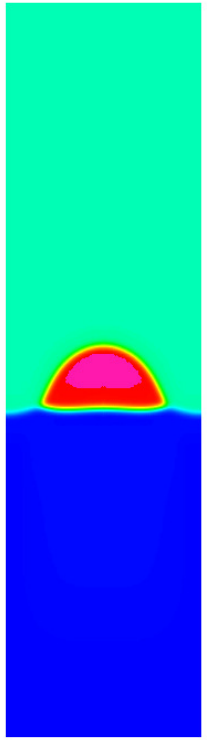


semi-implicite

$\Delta t = 10^{-4}$



implicite



semi-implicite

Que faire du terme d'ordre 6 ?

Rappel : On veut approcher $\frac{\partial P}{\partial c_i} - \frac{\partial P}{\partial c_j}$ avec

$$P(\mathbf{c}) = \Lambda c_1^2 c_2^2 c_3^2.$$

Discrétisation implicite : Echec pour des Δt raisonnables !
Autre idée : On cherche $p_i(\mathbf{c}, \mathbf{d})$ telles que $p_i(\mathbf{c}, \mathbf{c}) = \frac{\partial P}{\partial c_i}$ et

$$P(\mathbf{c}) - P(\mathbf{d}) - \sum_{i=1}^{3} p_i(\mathbf{c}, \mathbf{d}) \underbrace{(c_i - d_i)}_{=\delta_i} \leq 0.$$

Notation : $\mathbf{c} = \mathbf{c}^{n+1}, \quad \mathbf{d} = \mathbf{c}^n$
Après calculs

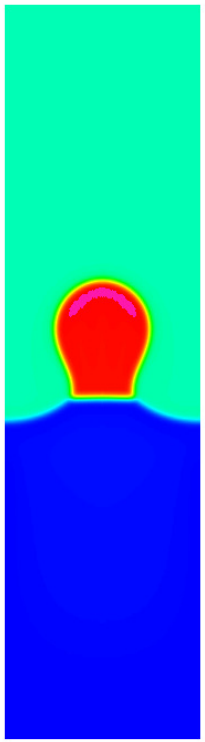
$$\begin{aligned} 3c_1^2c_2^2c_3^2 - 3d_1^2d_2^2d_3^2 \leq & \left(d_2^2d_3^2 + \frac{1}{2}c_2^2d_3^2 + \frac{1}{2}d_2^2c_3^2 + c_2^2c_3^2\right) 2c_1\delta_1 \\ & + \left(d_1^2d_3^2 + \frac{1}{2}c_1^2d_3^2 + \frac{1}{2}d_1^2c_3^2 + c_1^2c_3^2\right) 2c_2\delta_2 \\ & + \left(d_1^2d_2^2 + \frac{1}{2}c_1^2d_2^2 + \frac{1}{2}d_1^2c_2^2 + c_1^2c_2^2\right) 2c_3\delta_3 \end{aligned}$$

UTILISATION DE $F = F_\Lambda = F_0 + P$

$\Delta t = 10^{-3}$

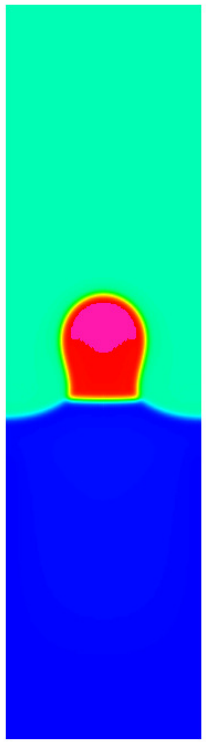
non cvgence de l'algo. de Newton

implicite F_0
implicite P

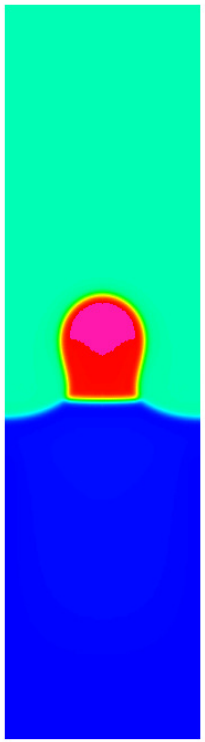


implicite F_0
semi-implicite P

$\Delta t = 10^{-4}$



implicite F_0
implicite P



implicite F_0
semi-implicite P

Solveur de Stokes / Navier-Stokes

$$\text{Soit à résoudre } (S) \begin{cases} M\dfrac{U-U^n}{\Delta t} + A(U^n)U + {}^tBP = G, \\ BU = 0 \end{cases}$$

Méthode de pénalité-projection **(Jobelin et al., JCP 2006)**

- Prédiction de vitesse + pénalisation de la contrainte :

$$M\frac{\tilde{U}-U^n}{\Delta t} + A(U^n)\tilde{U} + {}^tBP^n + r\,{}^tBB\tilde{U} = G,$$

- Correction de pression : $P = P^n + rB\tilde{U} + \Phi$ avec

$$\underbrace{\Delta t B M^{-1}\,{}^tB}_{\equiv C}\Phi = B\tilde{U}$$

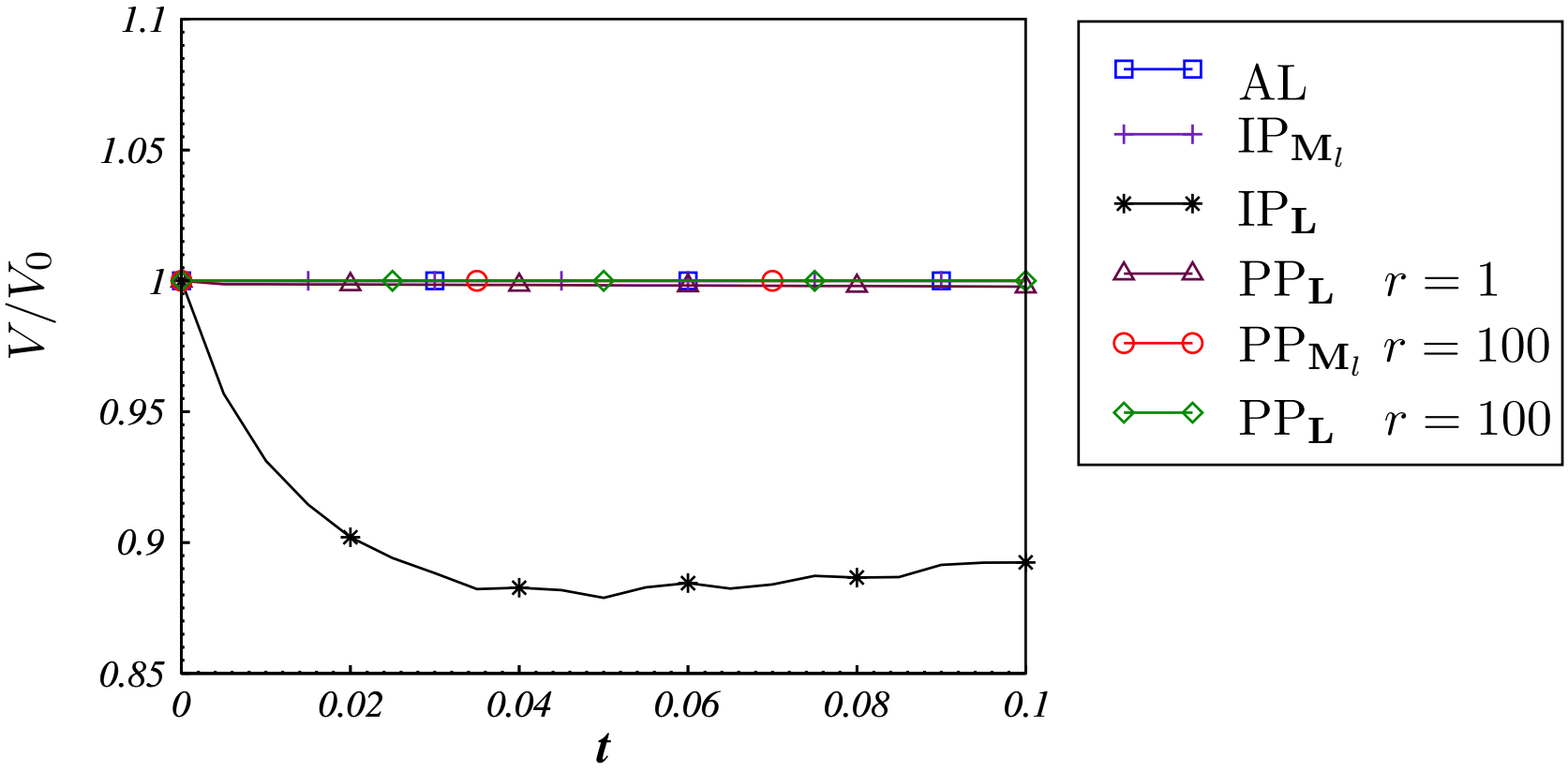
- Correction de vitesse :

$$M\frac{U-\tilde{U}}{\Delta t} + {}^tB\Phi = 0.$$

Avantages : Coût faible. Contrainte $BU = 0$ mieux prise en compte que dans (PI).

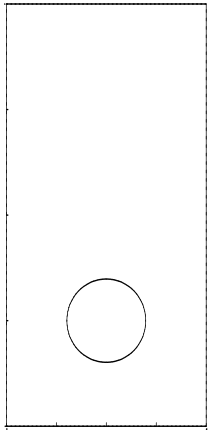
Inconvénients : (S) n'est pas vérifiée + conditions aux limites non-physiques sur la pression.

Evolution du volume de la bulle en fonction du temps



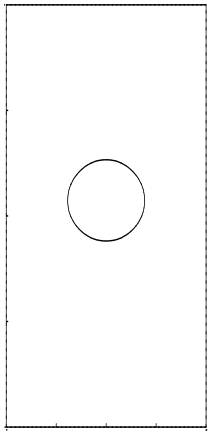
(a)

Donnée initiale

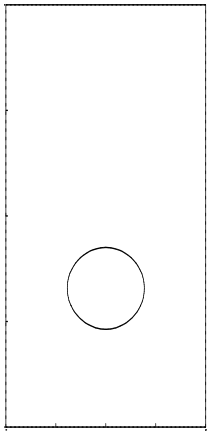


Solution à $t = 0.1$

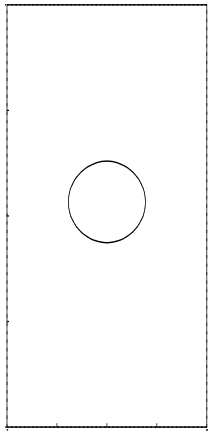
Lagrangien Augmenté



Projection Incrémentale



Pénalité / Projection



Bulles de gaz dans le corium stratifié

	ϱ (kg.m^{-3})	μ (Pa.s)
gaz	0.1	7.3 10^{-5}
métal	7800	0.001
oxyde	4000	0.1

tensions de surface (N.m^{-1})	
gaz/métal σ_{12}	1.3
gaz/oxyde σ_{13}	0.8
oxyde/métal σ_{23}	1

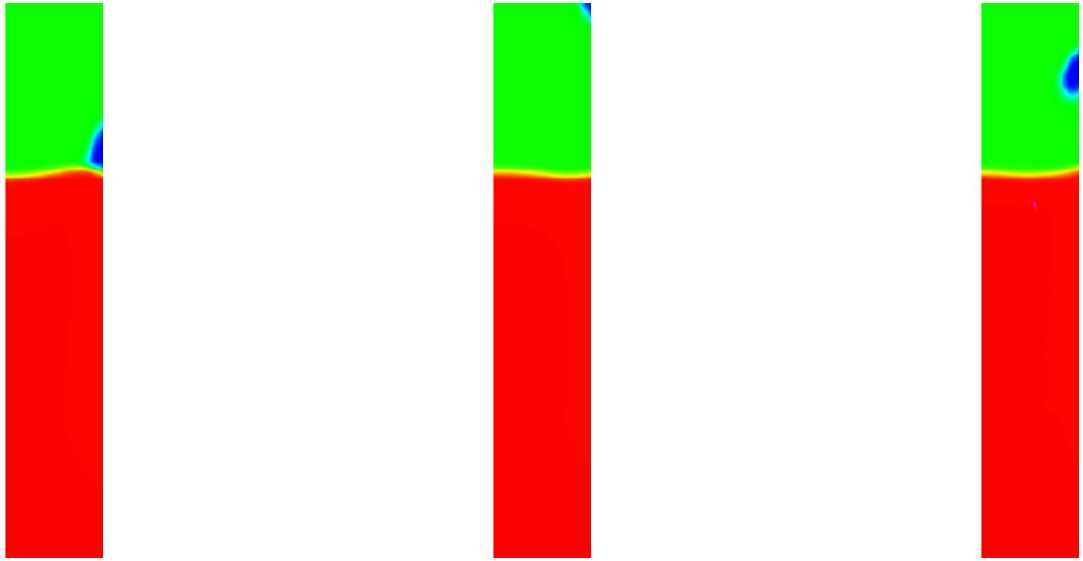
Remarques

- écart de masses volumiques importants
- grandes tensions de surfaces
- faible viscosité dans la phase lourde
- Pas d'étalement total mais il faut quand même utiliser F_Λ avec Λ assez grand, pour assurer la stabilité.
- Calcul en 3D axisymétrique, adimensionné par le rayon de la bulle.

Bulles de gaz dans le corium stratifié

	ϱ (kg.m^{-3})	μ (Pa.s)
gaz	0.1	7.3 10^{-5}
métal	7800	0.001
oxyde	4000	0.1

tensions de surface (N.m^{-1})	
gaz/métal σ_{12}	1.3
gaz/oxyde σ_{13}	0.8
oxyde/métal σ_{23}	1



rayon petit rayon moyen rayon grand

Plan

1. Introduction
2. Modèles triphasiques de type Cahn-Hilliard
3. Schémas numériques
4. Raffinement local adaptatif de maillages
5. Conclusions et perspectives

Sélection d'une méthode de raffinement

Souhaits : "simplicité" de mise en oeuvre

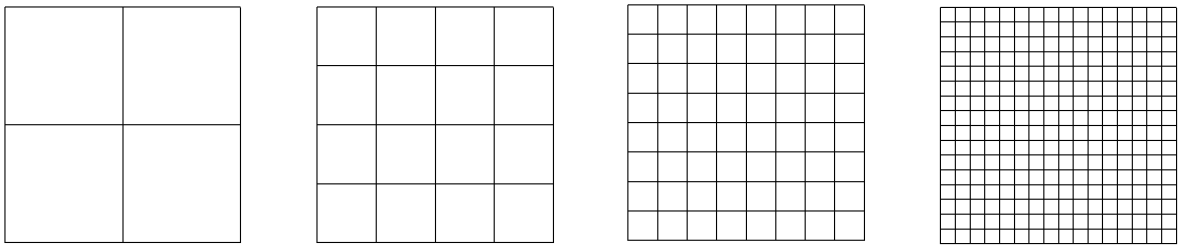
- Pas de modification du schéma numérique à cause de l'adaptation de maillage.
- Utilisation d'un motif de raffinement réitérable.
- Prise en compte implicite de la non-conformité des maillages.
- Pas de traitement particulier selon l'élément fini choisi ($\mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2, \mathbb{Q}_1, \mathbb{Q}_2$, ...)
- Pas de traitement particulier selon la dimension.

$\Rightarrow$ Méthode CHARMS

Conforming, Hierarchical Adaptive Refinement MethodS.

(Krysl, Triverdi, Zhu, 2004), **(Endres, Krysl, 2004)**
(Krysl, Grinspun, Schröder, 2003)

Hiérarchie d'espaces conformes imbriqués



niveau 0 niveau 1 niveau 2 niveau 3

	Triangulation	Espace EF			Base
niveau 0	$\mathcal{T}_0$	X_0	$=$	vect $\mathcal{B}_0$	$\mathcal{B}_0 = \{\varphi_k^{[0]}; k = 1, \ldots, N_{\text{ddl}}^{[0]}\}$
		$\bigcap$			
niveau 1	$\mathcal{T}_1$	X_1	$=$	vect $\mathcal{B}_1$	$\mathcal{B}_1 = \{\varphi_k^{[1]}; k = 1, \ldots, N_{\text{ddl}}^{[1]}\}$
		$\bigcap$			
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	
		$\bigcap$			
niveau J	$\mathcal{T}_J$	X_J	$=$	vect $\mathcal{B}_J$	$\mathcal{B}_J = \{\varphi_k^{[J]}; k = 1, \ldots, N_{\text{ddl}}^{[J]}\}$

Espace EF multi-niveaux

Cadre général

- **Choisir** $\widehat{\mathcal{B}}_j \subset \mathcal{B}_j$ en assurant l'indépendance de $\mathcal{B} = \cup_{j=0}^{J} \widehat{\mathcal{B}}_j$.

  Les fonctions de base de $\mathcal{B}_j$ appartenant à $\widehat{\mathcal{B}}_j$ sont dites : actives.
- $\mathcal{B}$ est la base **multi-niveaux**
- On définit l'espace EF **multi-niveaux** : $\mathcal{V}_h = \operatorname{vect} \mathcal{B} \subset \mathcal{V}$

Ecriture dans l'espace EF multi-niveaux

- Tout $u_h \in \mathcal{V}_h$ s'écrit :

$$u_h(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^{J} \left(\sum_{k \mid \varphi_k^{[j]} \in \widehat{\mathcal{B}}_j} u_k^{[j]} \, \varphi_k^{[j]}(\mathbf{x}) \right)$$

- Attention : $u_k^{[j]} \neq u_h(\mathbf{a}_k^{[j]})$ où $\mathbf{a}_k^{[j]}$ est le noeud (du niveau j) associé à la fonction de base $\varphi_k^{[j]}$

Adaptation

A partir d'une famille libre $\mathcal{B}^\star$ de fonctions de base on construit une nouvelle famille libre $\mathcal{B}$ à l'aide de deux opérations :

Raffinement :	on **enlève** des fonctions grossières on les **remplace** par des fonctions fines
Déraffinement :	on **enlève** des fonctions fines on les **remplace** des fonctions grossières

Activation / Désactivation des fonctions de base

Principes de base de la méthode

- On raffine/déraffine les fonctions de base et non pas les cellules/éléments.
- Il faut s'assurer que $\mathcal{B}$ est encore une famille libre.

Equations de raffinement

$$X_j \subset X_{j+1} \quad \Rightarrow \quad \varphi_k^{[j]}(\mathbf{x}) = \sum_\ell \beta_{k\ell}^{[j+1]} \varphi_\ell^{[j+1]}(\mathbf{x}) \qquad \forall \mathbf{x} \in \Omega$$

Relations Parent/Enfant

Si $\beta_{k\ell}^{[j+1]} \neq 0$: $\varphi_k^{[j]}$ est un parent de $\varphi_\ell^{[j+1]}$
$\varphi_\ell^{[j+1]}$ est un enfant de $\varphi_k^{[j]}$

Règles de raffinement d'un niveau à l'autre

- $\varphi_k^{[j]}$ peut être raffinée si
  - tous ses parents au niveau $[j-1]$ ont été raffinées.
- $\varphi_k^{[j]}$ peut être déraffinée si
  - elle a été précédemment raffinée
  - aucun de ses enfants du niveau $[j+1]$ ont été raffinés

(Dé)-raffinement quasi-hiérarchique

Soit $\mathcal{B}^\star$ une base EF (multi-niveaux).

Raffinement/déraffinement quasi-hiérarchique

- Raffinement de $\varphi_k^{[j]} \in \mathcal{B}^\star$
  - Désactivation de $\varphi_k^{[j]}$
  - Activation de tous les enfants $\varphi_\ell^{[j+1]}$ de $\varphi_k^{[j]}$
- Déraffinement de $\varphi_k^{[j]} \notin \mathcal{B}^\star$
  - Activation de $\varphi_k^{[j]}$
  - Désactivation des enfants de $\varphi_k^{[j]}$ qui n'ont pas d'autre parent actif

$\rightsquigarrow$ **Préférable** au raffinement hiérarchique (où on laisse $\varphi_k^{[j]}$ active) car les matrices obtenues ont une largeur de bande plus petite.

Problème modèle

Connaissant $u_h^\star \in \mathcal{V}_h^\star = \operatorname{vect} \mathcal{B}^\star$ trouver $u_h \in \mathcal{V}_h = \operatorname{vect} \mathcal{B}$ tel que :

$$\forall v \in \mathcal{V}_h \qquad \int_\Omega \frac{u_h - u_h^\star}{\Delta t} \cdot v + \int_\Omega \nabla u_h : \nabla v = \int_\Omega f \cdot v$$

- $\mathcal{B}^\star$ et $\mathcal{B}$ sont des bases EF multi-niveaux ;
- $\mathcal{B}$ obtenue à partir de $\mathcal{B}^\star$ par raffinements/déraffinements.

Observations

1. Approximation variationnelle conforme posée sur $\mathcal{V}_h = \operatorname{vect} \mathcal{B}$
2. Plusieurs champs (inconnus ou donnés) discrétisés sur des espaces différents.

Pas besoin d'opérateur de transfert

- Les cellules actives sont celles qui intersectent le support des fonctions de base de niveau le plus fin qui interviennent dans la formulation

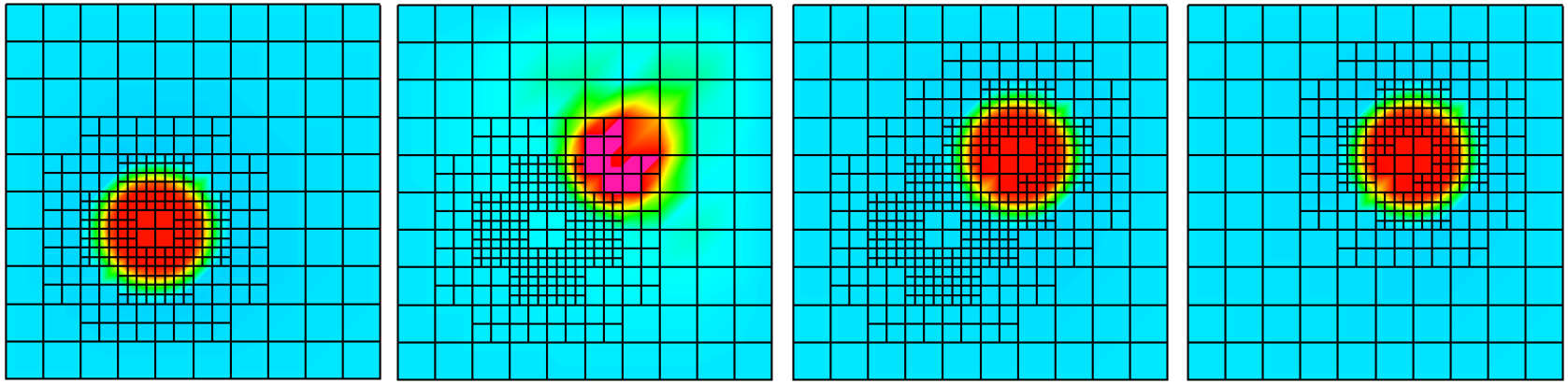
  Cellules actives = domaines d'intégration élémentaires.

- Les intégrales sur les cellules actives K du type

$$\int_K \varphi \cdot \varphi^\star, \quad \int_K \nabla\varphi : \nabla\varphi^\star, \qquad \forall \varphi \in \mathcal{B} \qquad \forall \varphi^\star \in \mathcal{B}^\star$$

  se calculent de façon exacte.

- Exemple



$u_h^\star$ | Calcul de u_h sans adaptation | Calcul de u_h après adaptation | $u_h^\star \leftarrow u_h$

Critère de raffinement/déraffinement
Pour le modèle CH/NS

- On dispose d'un indicateur aisé à calculer

$$\eta_K = \max\Big(\frac{1}{|K|}\int_K c_1^\star \ , \ \frac{1}{|K|}\int_K c_2^\star \ , \ \frac{1}{|K|}\int_K c_3^\star \Big)$$

$\eta_K = 1 \quad \rightarrow \quad K$ est complètement remplie de l'une des phases
$\eta_K < 1 \quad \rightarrow \quad K$ est dans une zone de mélange

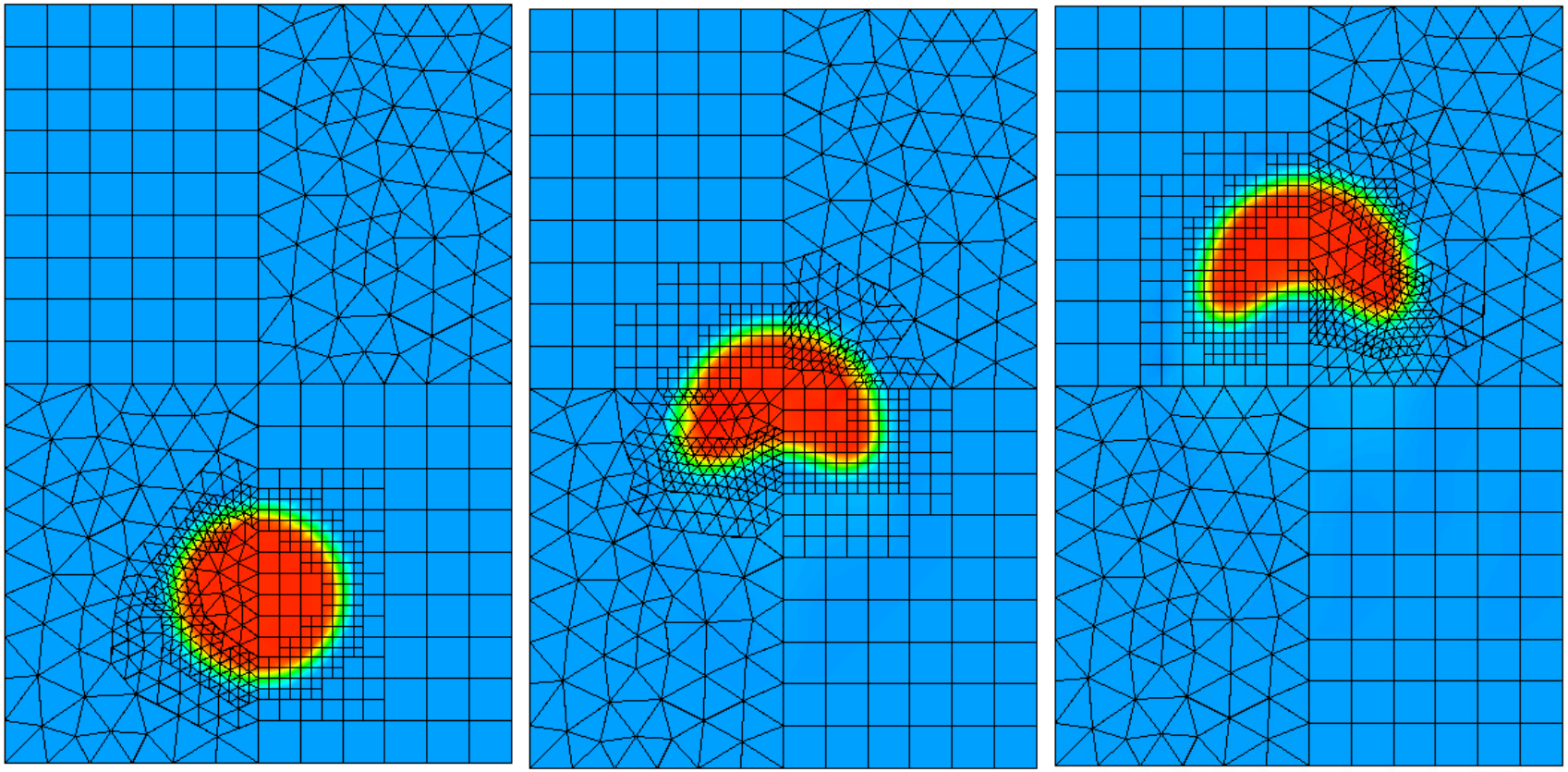
- On construit alors un indicateur pour chaque fonction de base η_φ
- Critère de raffinement :

$$\eta_\varphi < 0.85, \quad \text{et} \quad \text{diam}(K) > h_{interface} \text{ avec } K \subset \text{supp}[\varphi].$$

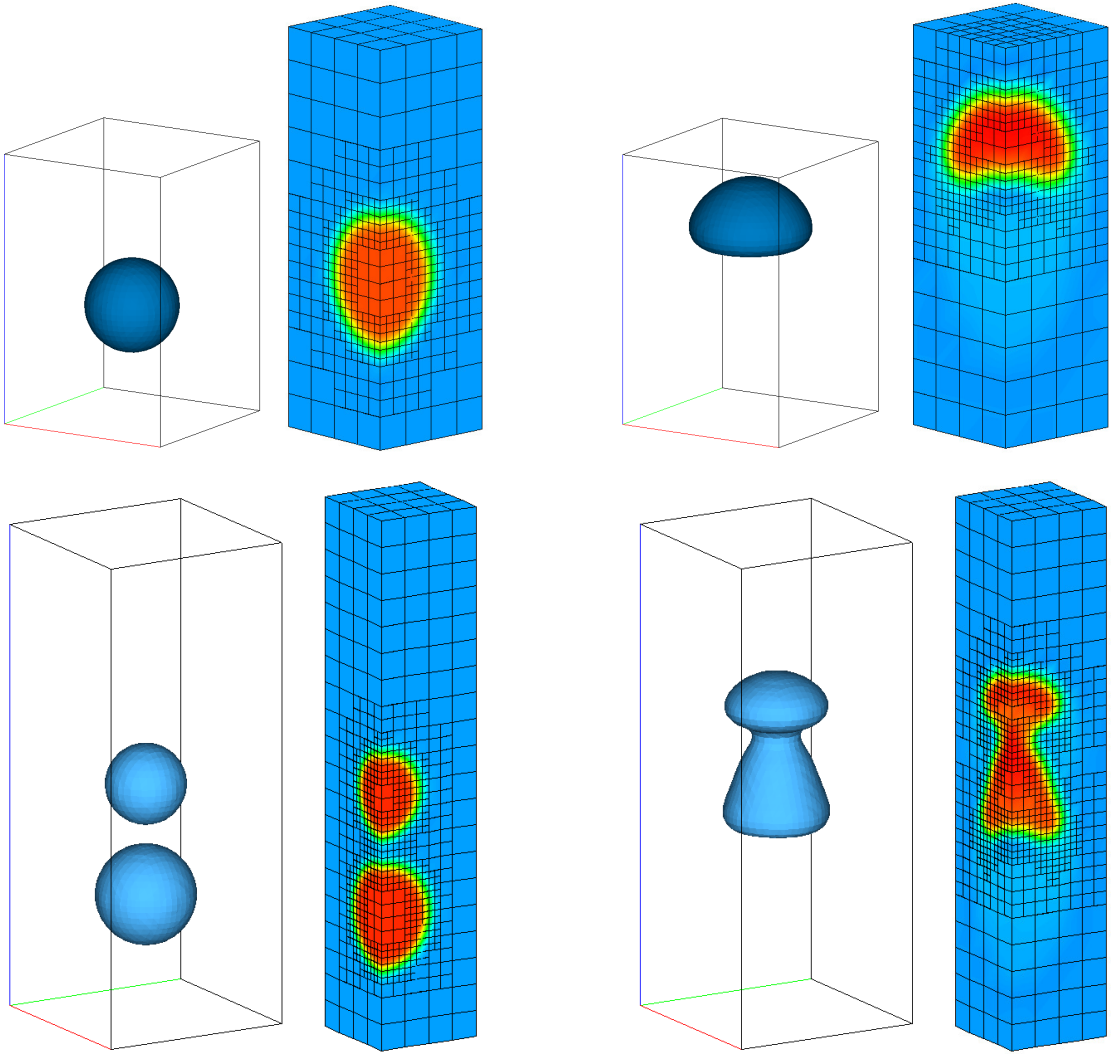
- Critère de déraffinement :

$$\eta_\varphi > 0.95$$

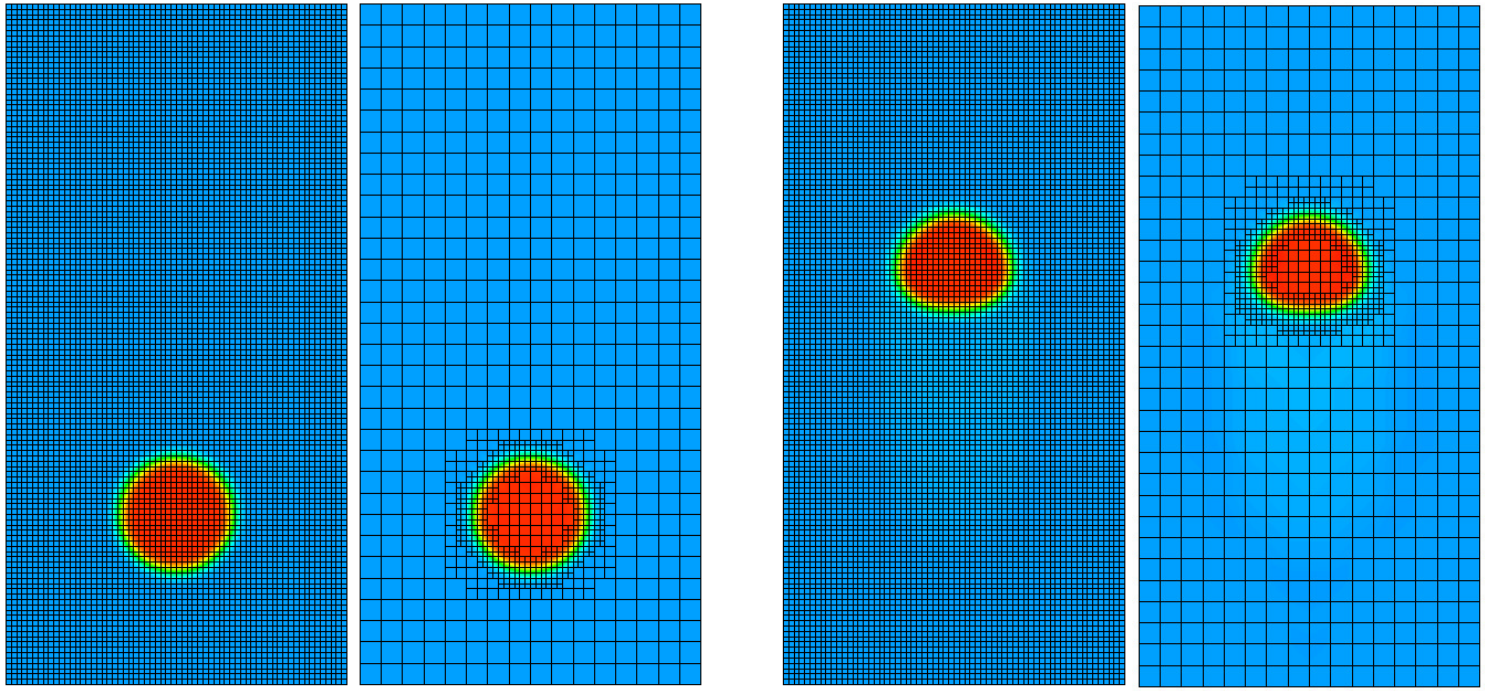
Souplesse de l'approche



Souplesse de l'approche



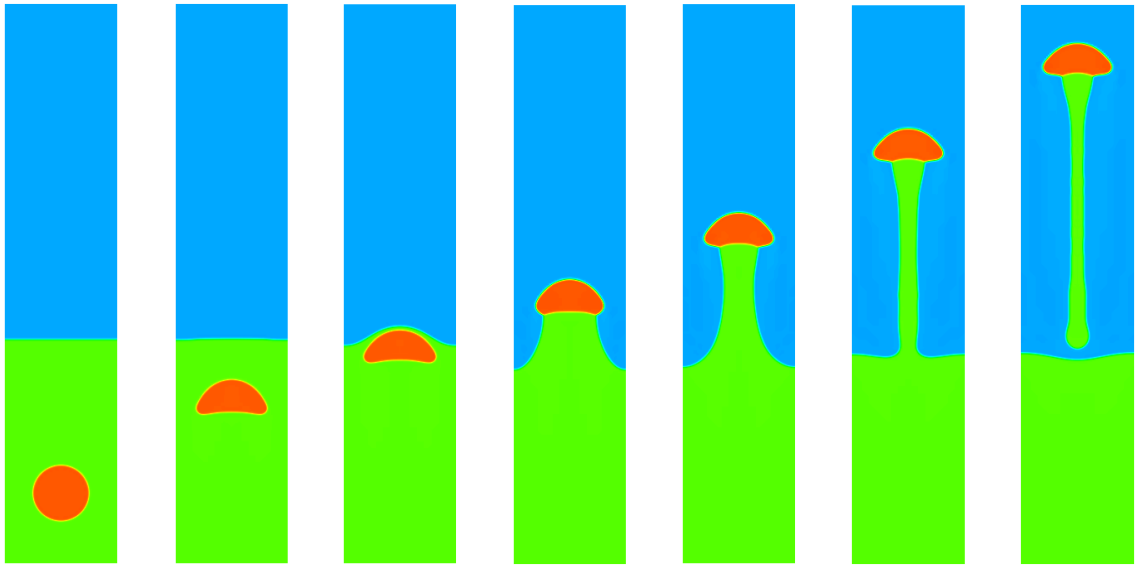
Comparaison : totalement raffiné / localement raffiné



Entrainement du fluide lourd par la bulle

	$\varrho(\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-3})$	$\mu(\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s})$
bulle	1	0.0001
liquide léger	1000	0.1
liquide lourd	1200	0.15

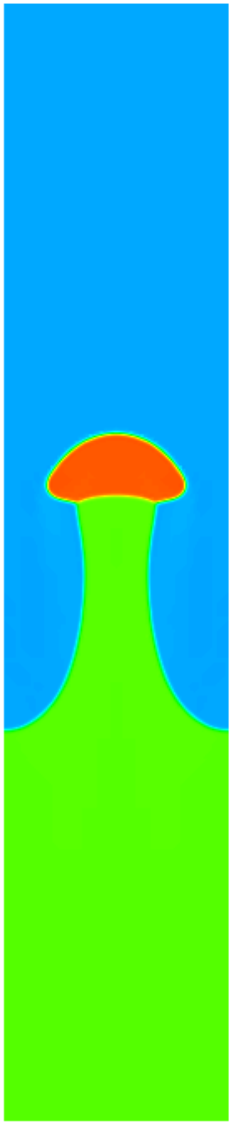
	$\sigma(\mathrm{N}\cdot\mathrm{m}^{-1})$
bulle/liquides	0.07
liquide/liquide	0.05

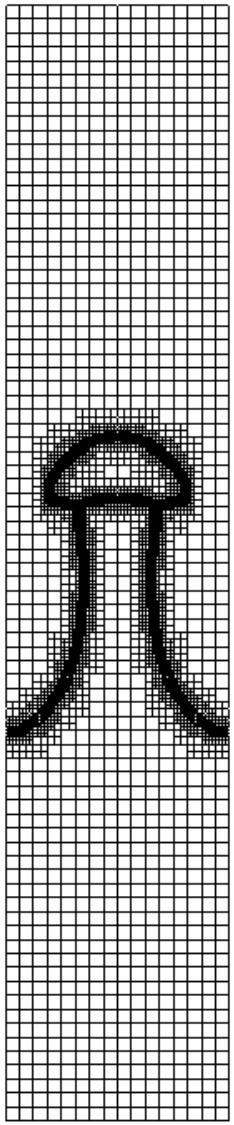


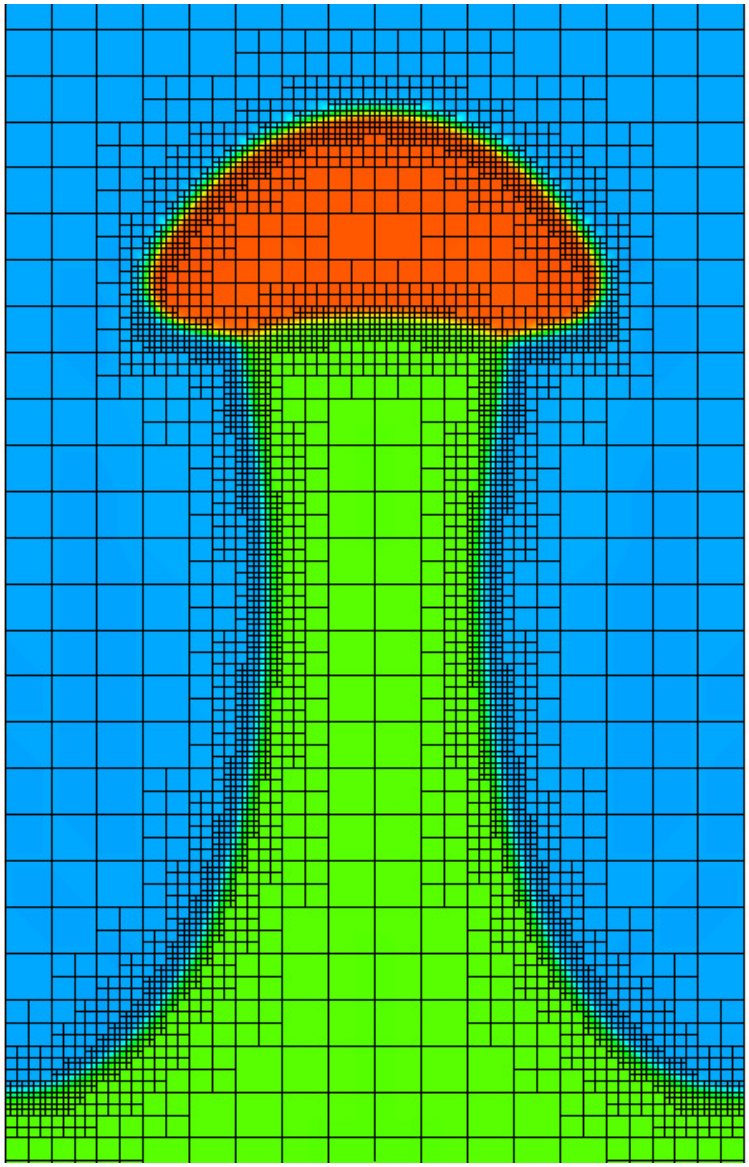
La variation du volume entraîné en fonction des densités et des viscosités coïncide qualitativement avec **(Greene *et al.*, 1988,1991)**

(B., Lapuerta, Piar, *CFM* 2007).

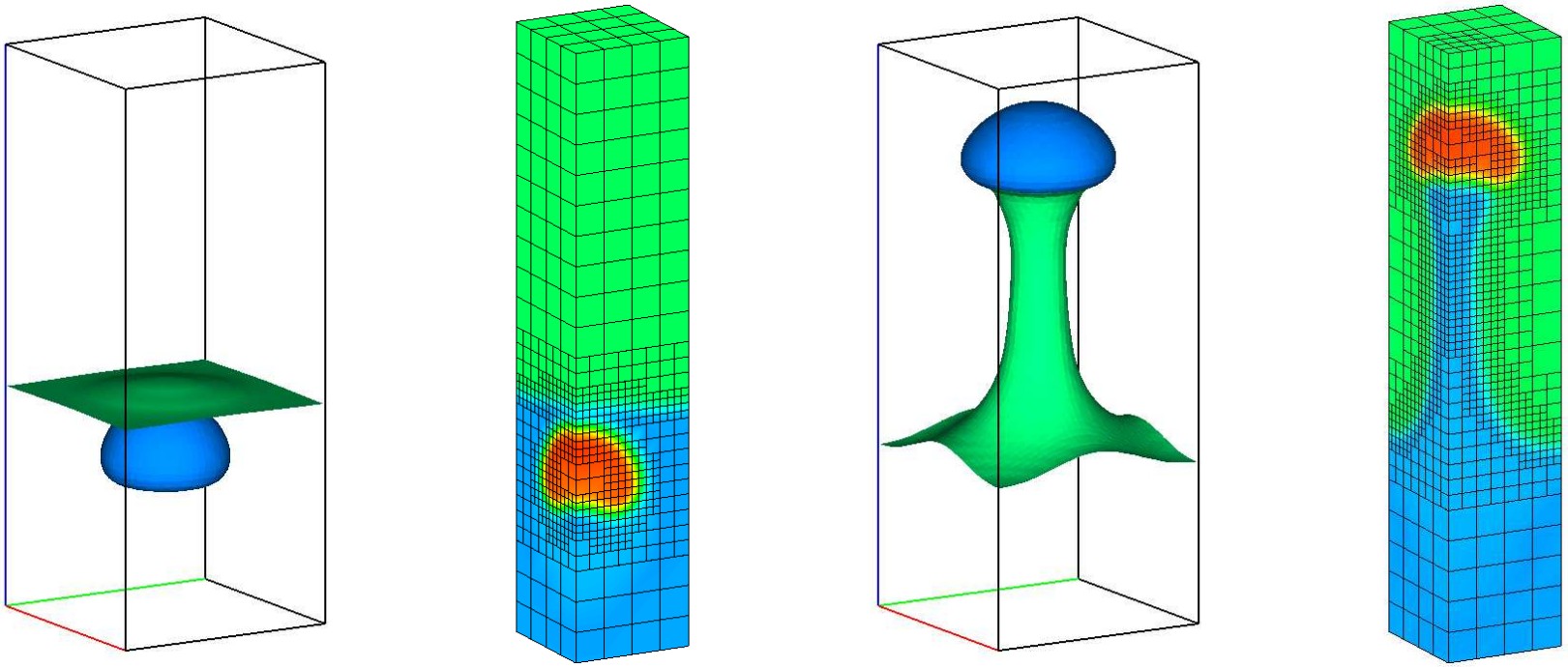
Entrainement du fluide lourd par la bulle







Un calcul en vraie 3D



Plan

1. Introduction
2. Modèles triphasiques de type Cahn-Hilliard
3. Schémas numériques
4. Raffinement local adaptatif de maillages
5. Conclusions et perspectives

Conclusions et perspectives

Conclusions :

- Extension des modèles à interface diffuse au cadre triphasique.
- Les modèles proposés sont bien posés et les résultats numériques sont assez satisfaisants.
- Problèmes numériques :
  - Discrétisation en temps pour CH
  - Solveur de Navier-Stokes
- Utilisation de la méthode de raffinement CHARMS
  - Mise en oeuvre simple et indépendante des schémas, des EF choisis, de la dimension, ...
  - Gain important en temps de calcul (solveur direct)

Perspectives :

- Extension du modèle à plus de 3 phases.
- Mise en oeuvre et étude d'un solveur/préconditionneur linéaire multi-niveaux.
- Utilisation d'un indicateur d'erreur plus précis.

PELICANS : une plateforme numérique

Plate-forme Evolutive de LIbrairies de Composants pour l'Analyse Numérique et Statistique

- **noyau numérique** de plusieurs codes industriels développés à l'IRSN pour des études de sûreté nucléaire
- Une **approche prescriptive**, sans être trop restrictive
- un ensemble de composants en C++ réutilisables pour simplifier le **développement d'applications** en calcul scientifique

Accessibilité

- propriété de l'IRSN
- open-source et entièrement gratuit
- peut être réutilisé dans des logiciels distribués sous licence

licence	CeCILL-C, adaptation française de LGPL
téléchargement	`https://gforge.irsn.fr/gf/project/pelicans`