

Simulation numérique d'écoulement de fluides à seuil avec la méthode X-Mesh

V. Degrooff¹, J.F. Remacle¹, N. Moës²

¹ IMMC, UCLouvain, {vincent.degrooff,jean-francois.remacle}@uclouvain.be

² GeM, Ecole Centrale Nantes, nicolas.moes@ec-nantes.fr

Résumé — Ce travail porte sur la simulation numérique d'écoulements de fluides à seuil décrits par le modèle de Bingham. L'interface solide-liquide qui apparaît dans de tels écoulements est capturée en utilisant l'idée X-Mesh qui permet des déformations extrêmes du maillage afin d'améliorer la qualité des simulations à faible coût. Les équations de conservation sont résolues via une fonctionnelle discrétisée par éléments finis et minimisée par une méthode de point intérieur.

Mots clés — Fluides de Bingham, X-Mesh, Éléments Finis, Optimisation Conique.

1 Introduction

1.1 Lois de conservation

Soit un domaine $\Omega \in \mathbb{R}^2$ muni d'une frontière $\Gamma = \partial\Omega$. Le fluide présent dans Ω est caractérisé par un champ de vitesse \mathbf{u} et est soumis à un champ de contraintes $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}$, composé d'un terme de pression isostatique $-p\mathbf{I}$ et d'un terme visqueux $\boldsymbol{\tau}$ aussi appelé déviateur.

Dans cette étude, nous nous concentrons sur des écoulements incompressibles et dominés par les effets visqueux. Nous négligeons donc les termes d'inertie dans les équations de conservation de la quantité de mouvement. Nous obtenons alors les équations de Stokes (1) :

$$\begin{aligned} 0 &= -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}(\mathbf{u}) + \mathbf{f} && \text{in } \Omega \\ 0 &= \nabla \cdot \mathbf{u} && \text{in } \Omega \\ \mathbf{u} &= \mathbf{U} && \text{on } \Gamma_D \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} &= \mathbf{g} && \text{on } \Gamma_N \end{aligned} \tag{1}$$

La frontière $\partial\Omega$ est partitionnée en Γ_D et Γ_N où sont respectivement appliquées des conditions de Dirichlet et de Neumann. $\hat{\mathbf{n}}$ est le vecteur unitaire normal à la frontière $\partial\Omega$, \mathbf{f} et \mathbf{g} sont des champs de forces volumiques et surfaciques connus et \mathbf{U} est une vitesse imposée.

1.2 Loi de comportement

Pour fermer le système d'équation (1), il nous faut une loi de comportement reliant le déviateur des contraintes $\boldsymbol{\tau}$ au champ de vitesse \mathbf{u} .

Le modèle le plus simple est celui du fluide newtonien puisqu'il suppose que le cisaillement $\boldsymbol{\tau}$ qu'un fluide subit est proportionnel au taux de déformation $\dot{\boldsymbol{\gamma}} = \nabla\mathbf{u} + \nabla^\top\mathbf{u}$ de son écoulement. Cette relation linéaire décrit très précisément le comportement de nombreux liquides et gaz, tels que l'air, l'eau, l'essence ou l'alcool, dans des conditions normales [5]. Cependant, il ne caractérise pas correctement les fluides à seuil par exemple, tels que le sang, le dentifrice ou le ketchup, pour n'en citer que quelques-uns [1, 4].

Ces fluides non-Newtoniens sont beaucoup mieux décrits comme *Newtoniens généralisés* [1]. Ce modèle-ci étend le modèle du fluide Newtonien avec une loi de comportement spécifique entre le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\tau}$ et le taux de déformation $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu(\dot{\boldsymbol{\gamma}}, T, \phi) \dot{\boldsymbol{\gamma}}$$

où μ , T et ϕ font respectivement référence à la viscosité du fluide, sa température et sa concentration en particules (par exemple des chaînes de polymères en solution diluée). Puisque la viscosité qui est un scalaire dépend du tenseur $\dot{\gamma}$, elle doit uniquement dépendre des combinaisons $\dot{\gamma}_{ij}$ qui ne dépendent pas du système de coordonnées [2], c.-a.-d. des invariants de $\dot{\gamma}$. En pratique, seul le second invariant est utilisé [2] :

$$I_2(\dot{\gamma}) := \frac{1}{2} \left[(\text{Tr}(\dot{\gamma}))^2 - \text{Tr}(\dot{\gamma} \cdot \dot{\gamma}) \right] = -\frac{1}{2} \text{Tr}(\dot{\gamma} \cdot \dot{\gamma}) \quad \dot{\gamma} := \sqrt{|I_2(\dot{\gamma})|}$$

Les fluides Newtoniens généralisés les plus simples suivent la loi d'Ostwald-de Waele [2, 1], ou loi en puissance, qui suppose $\mu(\dot{\gamma}) = K\dot{\gamma}^{n-1}$, où K est l'indice de consistance et n l'indice d'écoulement. En fonction de l'indice n , ce modèle peut déjà décrire des fluides rhéofluidifiants $n < 1$, rhéoépaississants $n > 1$ et Newtoniens $n = 1$.

Cependant, ce modèle n'est pas suffisant pour décrire certains fluides soumis à de faibles contraintes. Par exemple, le dentifrice a été conçu pour s'écouler tel un liquide à la sortie du tube, mais pour rester figé tel un solide dès qu'il est posé sur la brosse à dent, afin qu'on en laisse pas tomber sur au sol avant de le porter à la bouche.

Le modèle de Herschel-Bulkley [2, 1, 4] étend la loi d'Ostwald-de Waele avec un seuil τ_0 qui nous permet de simuler des écoulements de fluides à seuil comme le dentifrice. Quand la norme du tenseur de cisaillement $\tau := \sqrt{|I_2(\boldsymbol{\tau})|} < \tau_0$, le fluide se comporte comme un solide non déformable ($\dot{\gamma} = \mathbf{0}$). Dans ces régions-là, le fluide n'est soumis qu'à des mouvements de corps solide : il est au repos, en translation ou bien en rotation uniforme. Au-delà de ce seuil, le fluide se déforme en suivant la loi d'Ostwald-de Waele. La loi de comportement de Herschel-Bulkley est représentée graphiquement à la figure 1, et est décrite par la relation (2) :

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_{ij} &= 0 & \text{si } \tau < \tau_0 \\ \tau_{ij} &= \left(K\dot{\gamma}^{n-1} + \frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} \right) \dot{\gamma}_{ij} & \text{si } \tau \geq \tau_0 \end{aligned} \quad (2)$$

Seul les fluides de Bingham seront considérés dans la suite de ce travail. Les équations de ce modèle sont en effet plus simple à résoudre que celles de Herschel-Bulkley en général, mais fournissent tout de même des solutions avec des interfaces qui les rendent intéressantes à analyser avec la méthode X-Mesh où l'on capture l'interface en déplaçant les nœuds, sans modifier la topologie du maillage [6]. Reformulons alors le modèle (2) pour $n = 1$:

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\tau}\| < \tau_0 & \quad \text{si } \dot{\gamma} = \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\tau} &= \left(K + \frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} \right) \dot{\gamma} \quad \text{si } \dot{\gamma} \neq \mathbf{0} \end{aligned} \quad (3)$$

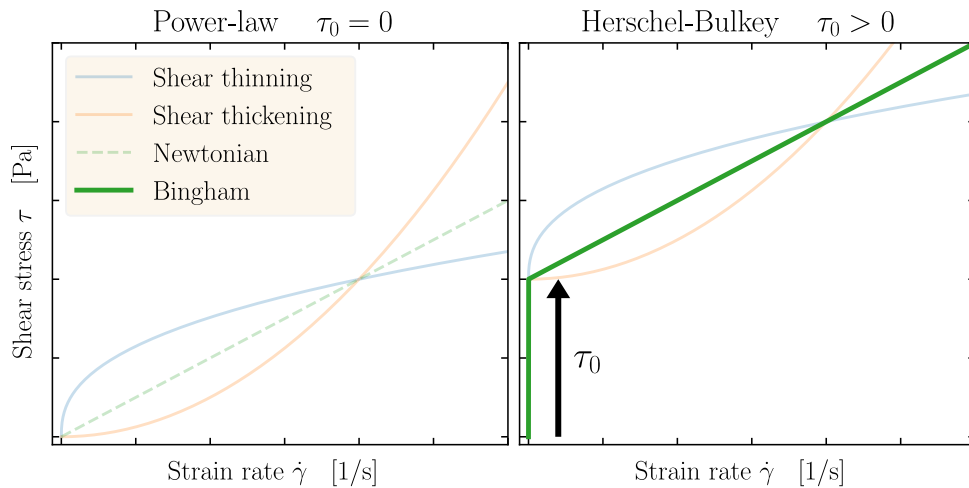


FIGURE 1. Modèles de fluides non-Newtoniens.

2 Trouver l'écoulement solution

2.1 Minimisation d'une énergie

Les équations de conservation (1), complétés de l'équation constitutive (3), sont généralement réécrites sous leur formulation faible avant de chercher une solution approchée par la méthode des éléments finis. Cependant, le champs de vitesse \mathbf{u} solution de cette formulation faible peut également être obtenu via la minimisation d'une fonctionnelle d'énergie $\mathcal{J}(\mathbf{v})$ [3, 7]. Si l'on adimensionnalise adéquatement les différentes grandeurs physiques en jeu, on obtient le problème (4), avec le nombre de Bingham, $Bn = \frac{\tau_0 L}{KU_\infty}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \arg \min_{\mathbf{v} \in \mathcal{V}} \mathcal{J}(\mathbf{v}) \\ \mathcal{J}(\mathbf{v}) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \|\dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{v})\|^2 dx + Bn \int_{\Omega} \|\dot{\boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{v})\| dx - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} dx - \int_{\Gamma_N} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} ds \quad (4) \\ \mathcal{V} &= \{\mathbf{v} \in (H^1(\Omega))^2 \mid \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \text{ in } \Omega, \mathbf{v} = \mathbf{u}_D \text{ on } \Gamma_D\} \end{aligned}$$

La contrainte d'incompressibilité peut se réécrire sous une formulation faible, avec une fonction test de pression ψ :

$$0 = \int_{\Omega} \psi \nabla \cdot \mathbf{v}^h \quad \forall \psi \in L^2(\Omega)$$

En coordonnées cartésiennes où $\mathbf{v} = (u, v)$, la norme du tenseur des taux de déformation, présente dans la fonctionnelle (4), s'écrit :

$$\implies \|\dot{\boldsymbol{\gamma}}(u, v)\|_{\text{Cart}}^2 = 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2$$

2.2 Formulation par éléments finis

Comme le veut la méthode des éléments finis, nous approximons classiquement le champ de vitesse par une somme pondérée de fonctions de forme ϕ associées à chaque nœud du maillage. Ce dernier est ici une triangulation \mathcal{T} constitué d'éléments K .

$$\mathbf{v}(x, y) \approx \mathbf{v}^h(x, y) = \sum_j \mathbf{V}_j \phi_j(x, y) \quad \mathbf{V}_j \in \mathbb{R}^2 \quad \forall j$$

Il est bien connu que les champs de vitesse-pressure des équations de Stokes, ou des équations équivalentes d'élasticité linéaire, ne peuvent pas être discrétisés avec des éléments $\mathcal{P}_1-\mathcal{P}_0^d$ ou $\mathcal{P}_1-\mathcal{P}_1$. Ce problème est généralement résolu de deux manières. La première est d'utiliser des éléments $\mathcal{P}_1-\mathcal{P}_1$ instables avec une stabilisation. La seconde est d'utiliser une paire d'élément stable, comme l'élément de Taylor-Hood $\mathcal{P}_k-\mathcal{P}_{k-1}$ par exemple. Dans ce travail, nous avons implémenté la seconde option avec $k = 2$, comme présenté à la figure 2.

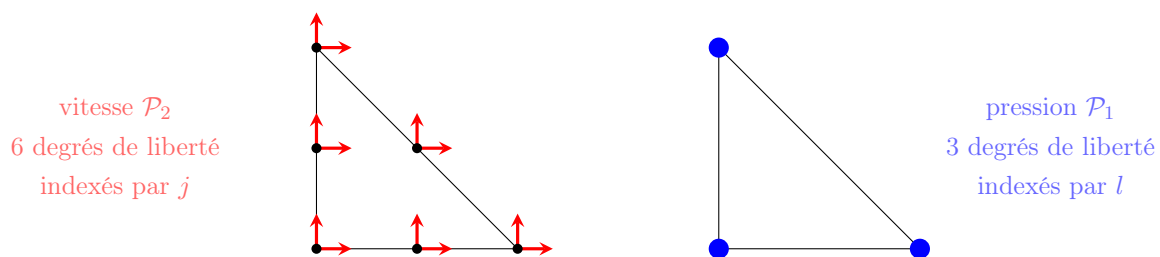


FIGURE 2. Élément de Taylor-Hood d'ordre 2.

2.3 Optimisation conique

Si l'on écrit la fonctionnelle \mathcal{J} du champ \mathbf{u}^h sous forme discrète avec une quadrature, on obtient des termes $\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|^2$ et $\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|$. Les premiers ne sont que des fonction quadratiques de u et v et ne posent aucun problème pour la minimisation. Les seconds sont la racine carrée des premiers et ne sont donc pas toujours différentiables, rendant plus compliqué le problème d'optimisation. Une des solution est de recourir à l'optimisation conique [3] qui étend la programmation linéaire à des fonctions non-linéaires convexes.

En pratique, cela implique d'insérer des variables supplémentaires $S_{i,g}$ et $T_{i,g}$ dans la fonctionnelle discrète pour chaque point de quadrature g de chaque élément i , qui bornent respectivement les termes $\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|_{i,g}^2$ et $\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|_{i,g}$. Les inconnues u , v , S et T deviennent alors liées par des contraintes *coniques*, avec les cônes de Lorentz $L^{n+1} := \{(t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \mid \|x\|_2 \leq t\}$, et sa version pivotée $L_R^{n+2} = \{(s, t, x) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^n \mid \|x\|_2^2 \leq 2st\}$. On obtient alors le problème d'optimisation conique (5), avec des poids de quadrature w sur les faces d'aire \mathcal{A} et \tilde{w} sur les arêtes de longueur ℓ :

$$\begin{aligned}
 & \underset{\mathbf{V}_j, S_{i,g}, T_{i,g}}{\text{minimize}} && \sum_i \sum_g w_g \left[\frac{1}{2} S_{i,g} + Bn T_{i,g} - \mathbf{f} \cdot \mathbf{v}^h|_{\mathbf{x}_g} \right] \mathcal{A}_i - \sum_e \sum_g \tilde{w}_g \mathbf{g} \cdot \mathbf{v}^h|_{\tilde{\mathbf{x}}_g} \ell_e \\
 & \text{s.t.} && \left(S_{i,g}, \frac{1}{2}, \sqrt{2} \frac{\partial u^h}{\partial x}, \sqrt{2} \frac{\partial v^h}{\partial y}, \frac{\partial u^h}{\partial y} + \frac{\partial v^h}{\partial x} \right) \in L_R^5 && \forall i, g \\
 & && \left(T_{i,g}, \sqrt{2} \frac{\partial u^h}{\partial x}, \sqrt{2} \frac{\partial v^h}{\partial y}, \frac{\partial u^h}{\partial y} + \frac{\partial v^h}{\partial x} \right) \in L^4 && \forall i, g \\
 & && 0 = \sum_i \sum_g w_g \psi_l|_{\mathbf{x}_g} \left(\frac{\partial u^h}{\partial x} + \frac{\partial v^h}{\partial y} \right) \mathcal{A}_i && \forall l \\
 & && \mathbf{V}_j = \mathbf{U} && \forall j \in \Gamma_D
 \end{aligned} \tag{5}$$

Dans ce travail, le problème d'optimisation conique (5) est résolu par une méthode de point intérieur avec le solveur commercial MOSEK.

3 Capture de l'interface

Entre les régions déformées ($\tau > \tau_0$) et non déformées ($\tau < \tau_0$), le champ de déformation $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$ est continu, mais sa variation est discontinue. En d'autres termes, le champ de déformation $\dot{\boldsymbol{\gamma}} \in \mathcal{C}^0$, $\notin \mathcal{C}^1$ et le champ de vitesse $\mathbf{u} \in \mathcal{C}^1$, $\notin \mathcal{C}^2$. Cette discontinuité caractérise une interface qui sépare les deux régions. Un schéma de cette interface est présenté à la figure 3.

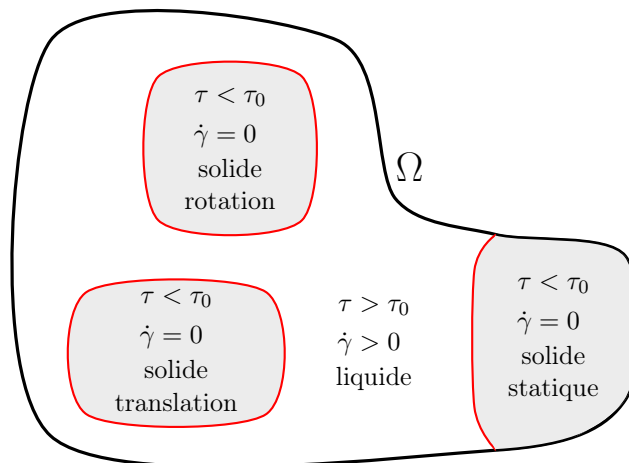


FIGURE 3. Vue schématique d'un écoulement de fluide à seuil avec plusieurs zone rigides.

L'idée de la méthode X-Mesh est de suivre l'interface entre les régions déformables et non-déformables en déplaçant les nœuds du maillage vers cette interface. Pour ce faire, nous utilisons une méthode de prédiction-corrrection en trois étapes, illustrée à la figure 4, et répétée tant que la capture de l'interface n'est pas suffisante :

1. Résolution du problème par éléments finis en minimisant la fonctionnelle \mathcal{J} .
2. Estimation de la position de l'interface en fonction du champ $\hat{\gamma}(\mathbf{v}^h)$.
3. Déplacement des nœuds du maillage vers l'interface estimée.

Dans notre cas, l'interface est la frontière $\partial\mathcal{S}$ du sous-domaine non-déformé $\mathcal{S} = \{\mathbf{x} \in \Omega \mid \|\hat{\gamma}(\mathbf{v}^h(\mathbf{x}))\| = 0\}$. Il est toutefois plus simple de travailler avec une interface définie par le changement de signe d'un champ scalaire. C'est pourquoi nous proposons de générer un champ virtuel continu φ sur base de $\hat{\gamma}$, qui change de signe à l'interface.

$$\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \quad \text{tel que} \quad \varphi(\mathcal{S}) \leq 0 \leq \varphi(\Omega \setminus \mathcal{S})$$

En pratique, le champ φ ne doit pas être calculé sur Ω , mais uniquement sur un sous-ensemble proche de l'interface. La position de l'interface, elle, est calculée avec une méthode prédicteur-correcteur :

- 2a. Prédiction de l'interface comme la frontière d'un ensemble d'éléments du maillage présentant une déformation nulle en chaque point de quadrature : $\{i \mid T_{i,g} = 0 \ \forall g\}$.
- 2b. Construction du champ φ sur base des valeurs positives de $\|\hat{\gamma}(\mathbf{v}^h)\|$ proches de l'interface prédite. Ce champ virtuel est construit avec des approximations linéaires locales de $\|\hat{\gamma}(\mathbf{v}^h)\|$.
- 2c. Le correcteur est le lieu des racines de $\varphi : \{\mathbf{x} \mid \varphi(\mathbf{x}) = 0\}$.

Numériquement, les valeurs $T_{i,g}$ correspondant à la norme de la déformation ne sont jamais nulle, mais légèrement positives. C'est pourquoi les régions sont prédites solides lorsqu'elles dépassent un paramètre ϵ , fixé à 10^{-4} .

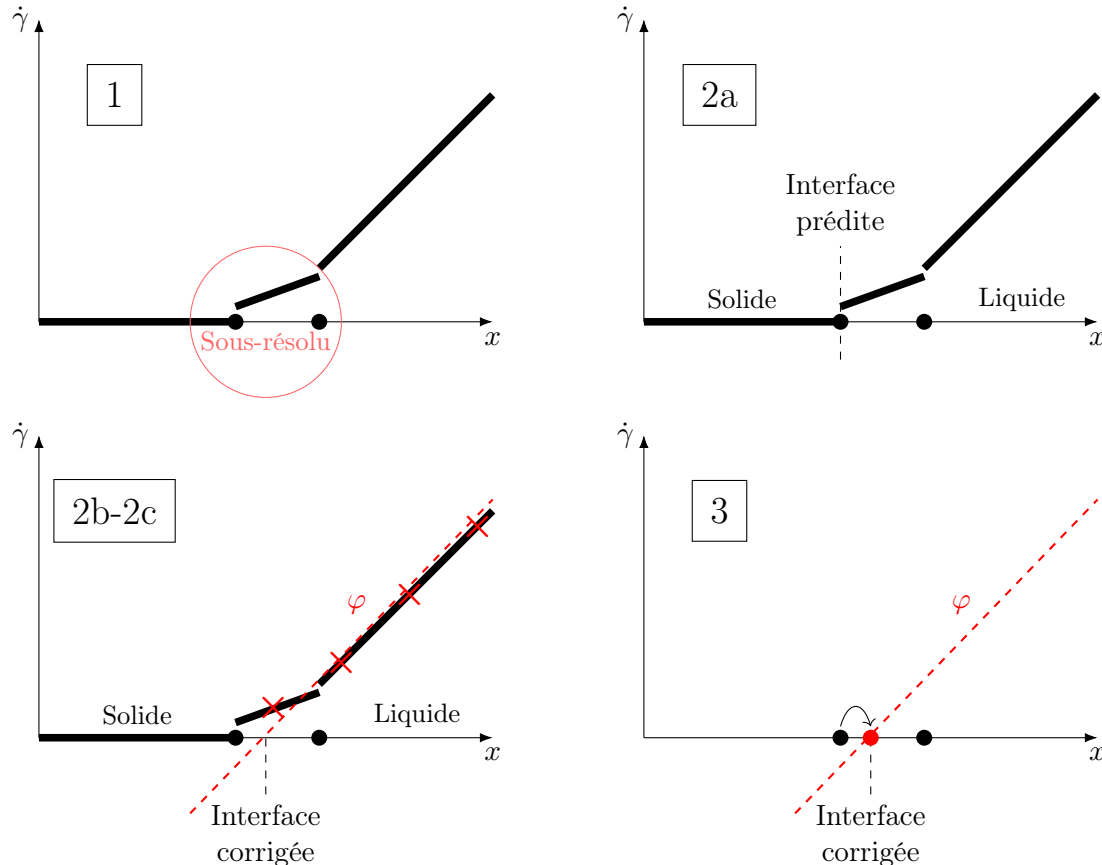


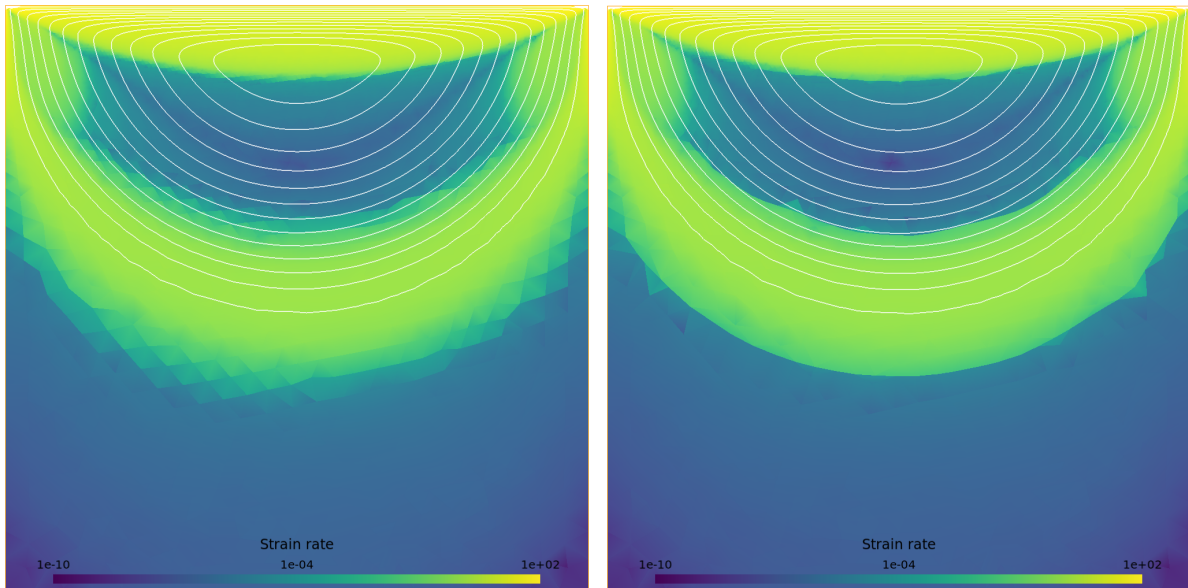
FIGURE 4. Esquisse de l'algorithme de capture de l'interface.

4 Résultats numériques

Nous nous intéressons ici à un écoulement de fluide à seuil dans une cavité entraînée, régulièrement utilisé comme cas d'étude [3, 8]. La vitesse est imposée à $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ sur toutes les paroi de la cavité carrée, sauf sur le côté supérieur, où la vitesse horizontale est non-nulle pour générer l'entraînement avec $u = 1$ et $v = 0$.

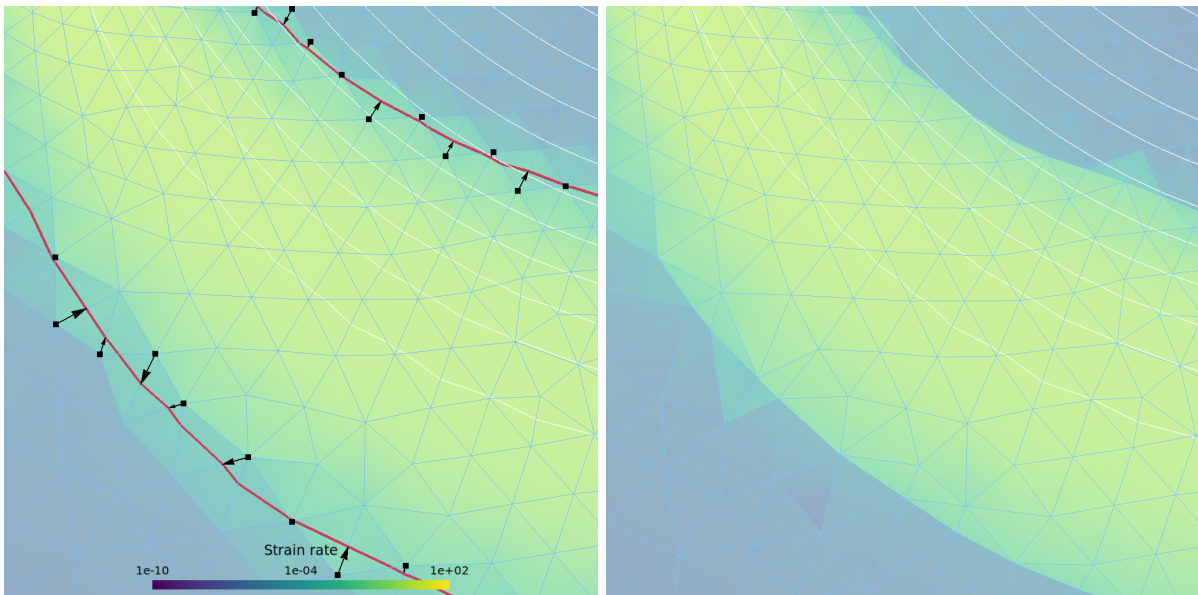
Dans cette géométrie, l'introduction du seuil τ_0 crée deux régions rigides : une dans le fond en contact avec la paroi où le fluide est statique et une seconde en haut de la cavité où le fluide suit un mouvement de rotation uniforme. L'augmentation du seuil τ_0 génère de plus grandes zones rigides.

À la figure 5, on peut observer l'impact de la capture de l'interface au niveau du maillage après seulement deux itérations de l'algorithme présenté ci-dessus. Le changement d'échelle de déformation entre régions liquides et solides est résolu de manière plus nette.



(a) Maillage initial.

(b) Maillage après deux itérations.



(c) Zoom sur le maillage initial. L'iso-0 de φ est tracé en rouge. Le déplacement des nœuds est affiché avec les flèches noires.

(d) Zoom sur le maillage après deux itérations.

FIGURE 5. Intensité du taux de déformation $\dot{\gamma}$ en échelle logarithmique, avant et après la capture d'interface. Les lignes de courant sont également affichées en blanc. $Bn = 20$.

Les résultats obtenus par la méthode présentée ici, par Bleyer et al. [3] et par Syrakos et al. [8] sont comparés à la figure 6, et concordent assez bien. On y représente la vitesse horizontale u le long d'une coupe verticale au milieu du domaine, pour différents paramètres Bn .

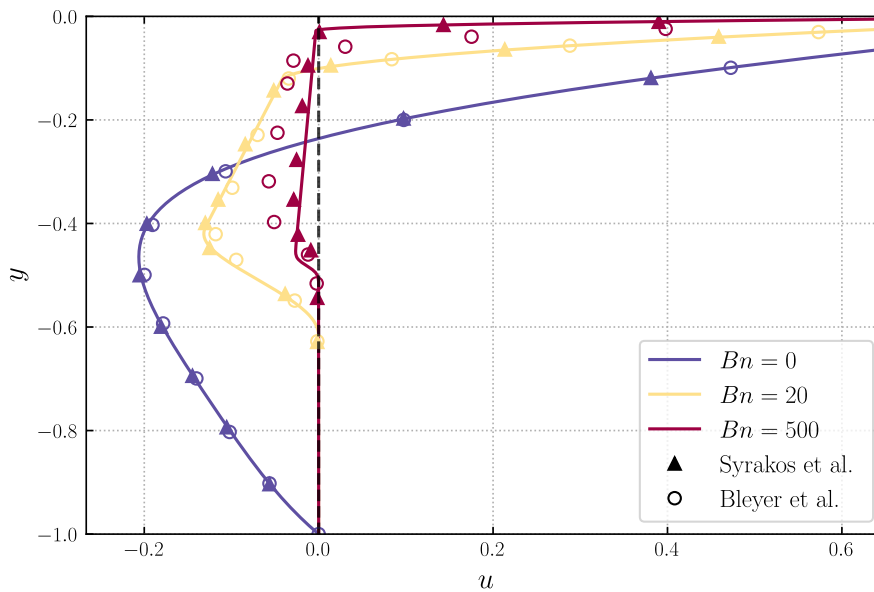


FIGURE 6. Profils de vitesse horizontale.

L'algorithme présenté dans ce travail fournit des résultats probants en accord avec la littérature pour des écoulements variés comme la cavité entraînée détaillée ici, mais également des écoulements autour d'obstacles ou bien des écoulements en canal. Cependant, la méthode n'est pas encore suffisamment robuste et deux points méritent d'être améliorés :

1. La capture de l'interface est sensible à la valeur du paramètre ϵ qui détermine la valeur seuil de $T_{i,g}$ pour prédire une région solide. Il pourrait être plus judicieux d'utiliser une tolérance relative en plus de cette tolérance absolue ϵ .
2. Les régions solides peuvent présenter des points anguleux où leur frontière n'est pas lisse. Dans ce cas là, l'implémentation actuelle de la méthode a tendance à arrondir l'interface au niveau de ces points anguleux.

Références

- [1] N. Balmforth, R. Craster, *Geophysical Aspects of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Springer, 34-51, 2008.
- [2] R. Bird et al., *Dynamics of polymeric liquids, volume 1 : Fluid mechanics*, John Wiley & Sons, 1987.
- [3] J. Bleyer et al., *Efficient numerical computations of yield stress fluid flows using second-order cone programming*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Elsevier Science, 599-614, 2015.
- [4] P. Coussot, *Yield stress fluid flows : A review of experimental data*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, Elsevier Science, 31-49, 2014.
- [5] R. Fox et al. *Fox and McDonald's introduction to fluid mechanics*, John Wiley & Sons, 2020.
- [6] N. Moës et al., *The eXtreme Mesh deformation approach (X-MESH) for the Stefan phase change model*, Journal of Computational Physics, Elsevier Science, 111878, 2023.
- [7] P. Saramito, *Complex fluids : Modeling and Algorithms*, Springer, 2016.
- [8] A. Syrakos et al., *Solution of the square lid-driven cavity flow of a Bingham plastic using the finite volume method*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, Elsevier Science, 19-31, 2013.