

Méthode d'éléments finis stabilisés pour la simulation numérique des procédés de trempe industrielle

M. Khalloufi¹, Y. Mesri¹, R. Valette¹, E. Massoni¹, E. Hachem¹

¹ MINES ParisTech, PSL - Research University, CEMEF - Centre for material forming, CNRS UMR 7635, CS 10207 rue Claude Daunesse, 06904 Sophia-Antipolis Cedex, France, {mehdi.khalloufi,youssef.mesri,rudy.valette,elisabeth.massoni,elie.hachem}@mines-paristech.fr

Résumé — On se propose de simuler le procédé de trempe à l'échelle industrielle. Une méthode level set conservative est utilisée pour le suivi des interfaces solide/liquide/gaz. Une nouvelle formulation unifiée éléments finis des équations de Navier-Stokes a été développée, permettant de considérer simultanément un fluide incompressible et un fluide compressible. Ces méthodes sont combinées à un estimateur d'erreur a posteriori qui permet une adaptation de maillage anisotrope. On montre la validité de cette approche en simulant un cas de trempe industrielle à l'aide du calcul haute performance.

Mots clés — Ecoulements multiphasiques compressible-incompressible, Éléments finis stabilisés, Level Set, Tension de surface, Changement de phase

1 Introduction

La trempe est un procédé industriel consistant à refroidir de manière soudaine une pièce chaude dans un fluide pour lui conférer des propriétés mécaniques particulières. Ce fluide, souvent de l'eau, passe de l'état liquide à l'état gazeux et forme un film qui isole thermiquement la pièce et l'empêche de se refroidir efficacement. La simulation numérique de ce procédé reste à ce jour un challenge. Outre la difficulté de prendre en compte des échelles allant du millimètre pour une bulle de vapeur à l'échelle du mètre pour une pièce industrielle, les transferts de chaleur et de masse à travers les interfaces sont délicats à modéliser. La complexité géométrique des pièces métalliques rend également difficile la prédiction des champs de température.

Dans ce travail, un cadre eulérien multiphasique permettant la prise en compte de toutes les échelles et de toute la physique du problème est proposé.

Dans la section 2, une méthode level set utilisée pour le suivi des interfaces solide-liquide-gaz est décrite. Cette méthode est couplée à une méthode de réinitialisation pour empêcher la diffusion de l'interface lors du transport de celle-ci.

Dans la section 3, une nouvelle formulation des équations de Navier-Stokes permettant de considérer une phase compressible et une phase incompressible simultanément est présentée. Cette méthode est implémentée dans le cadre d'une formulation mixte éléments finis, stabilisés avec la méthode variationnelle multi-échelles (VMS - Variational MultiScale) permettant l'accès à la résolution précise d'écoulement turbulent à très haut nombre de Reynolds en implicitant les petites échelles.

Dans la section 4, la tension de surface, qui permet de décrire le détachement du film de vapeur et ainsi le comportement hydrodynamique du système est décrite. L'implémentation de cette force de manière explicite souffre de l'apparition d'oscillations parasites à l'interface si une contrainte sévère sur le pas de temps n'est pas respectée. Cette restriction sur le pas de temps est rédhibitoire pour des calculs à l'échelle industrielle. On propose ici une implémentation semi-implicite, permettant de lever la restriction sur le pas de temps.

Dans la section 5, un modèle simplifié de changement de phase est présenté. Ce modèle, qui se base sur la résolution d'un problème de Stefan, décrit l'évolution de l'interface ainsi que les échanges de matière entre les différentes phases lors de la vaporisation. Les modifications induites par ce modèle dans les équations de Navier-Stokes sont rappelées.

Dans la section 6, l'environnement de calcul haute performance est présenté. Une description des moyens de calculs, des algorithmes de résolution et de la discrétisation est également donnée.

Finalement, dans la section 7, l'ensemble de ces méthodes, couplées à une méthode d'adaptation de maillage anisotrope [3], est mis en œuvre pour la simulation de la trempe à l'eau d'une pièce en acier.

2 Méthode de suivi d'interface

Les méthodes eulériennes de suivi d'interfaces permettent de prendre en compte naturellement les changements topologiques complexes qui peuvent apparaître à l'interface dans les problèmes multiphasiques. Dans ce travail, une méthode level set est utilisée. La fonction level set, dénotée α , est une fonction distance signée dont l'isovaleur zéro correspond à l'interface entre deux domaines. Sa définition est la suivante :

$$\alpha(X) = \begin{cases} -\text{dist}(X, \Gamma) & \text{if } X \in \Omega_l \\ 0 & \text{if } X \in \Gamma \\ \text{dist}(X, \Gamma) & \text{if } X \in \Omega_g \end{cases}$$

où Ω représente le domaine entier, X un point de ce domaine, Ω_l le domaine liquide, Ω_g le domaine gazeux et $\Gamma = \Omega_l \cap \Omega_g$ l'interface entre ces deux domaines.

La méthode level set classique implique de suivre l'isovaleur zéro de la level set. Olsson propose dans [5] de filtrer la fonction level set par une fonction tangente hyperbolique, la remplaçant de fait par une fonction Heaviside lissée :

$$\phi(\alpha) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{\alpha}{2\varepsilon} \right) \right)$$

L'isovaleur à suivre est désormais 0.5. Une équation de transport est ensuite utilisée pour décrire l'évolution de la fonction level set :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \cdot \nabla \phi = 0$$

où u est un champ de vitesse obtenue par la résolution des équations de Navier-Stokes.

Cependant, lors du transport, le profil de tangente hyperbolique n'est pas forcément conservé. Il est nécessaire de réinitialiser la level set en résolvant l'équation suivante :

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \nabla \cdot \left(\phi(1 - \phi)n - \varepsilon((\nabla \phi \cdot n)n) \right) = 0$$

où le flux correspond à une compression du profil à laquelle on oppose une diffusion du profil, dans la direction normale à l'interface.

Le filtrage de la fonction level set et le processus de réinitialisation permettent d'obtenir une meilleure conservation de la masse.

3 Formulation unifiée compressible-incompressible des équations de Navier-Stokes

On propose ici une approche permettant de considérer dans la même formulation une phase compressible et une phase incompressible [2]. Afin de modéliser le comportement de deux fluides dont l'un est compressible et l'autre est incompressible, l'utilisation d'une approche totalement compressible ou incompressible ne permet pas de préserver les spécificités de chacune des phases. En effet, si les deux phases sont considérées incompressibles alors le changement de volume n'est pas permis. Si les deux phases sont considérées compressibles, la conservation de la masse dans la phase incompressible n'est pas contrôlée.

On considère les équations de Navier-Stokes :

$$\frac{d\rho}{dt} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla u - \nabla \cdot (2\mu \varepsilon'(u)) + \nabla p = \rho g \quad (2)$$

où $\varepsilon'(u) = \varepsilon(u) - \frac{1}{3}(\nabla \cdot u)I$ est la partie déviatorique du tenseur des taux de déformations sous l'hypothèse de Stokes.

Un seul set d'équations est résolu sur l'ensemble du domaine : l'équation de conservation de la masse (1) et l'équation de conservation du mouvement (2). Le système est fermé en utilisant une équation d'état reliant la densité, la pression et la température $\rho = \rho(T, p)$.

En faisant l'hypothèse que le fluide est divariant, on peut exprimer la densité en fonction de la pression et de la température :

$$\frac{d\rho}{dt} = \left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_p \frac{dT}{dt} + \left. \frac{\partial \rho}{\partial p} \right|_T \frac{dp}{dt}$$

En conséquent, l'équation de conservation de la masse peut être reformulée comme une équation dont les inconnues sont uniquement la vitesse, la pression et la température :

$$\nabla \cdot u + \chi_p \frac{\partial p}{\partial t} + \chi_p u \cdot \nabla p = \chi_T \frac{dT}{dt}$$

où χ_p et χ_T sont respectivement les coefficients thermodynamiques de compressibilité isotherme et de dilatation thermique.

Le système à résoudre devient ainsi :

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla u - \nabla \cdot (2\mu \varepsilon(u)) + \nabla p &= \rho g \\ \nabla \cdot u + \chi_p \frac{\partial p}{\partial t} + \chi_p u \cdot \nabla p &= \chi_T \frac{dT}{dt} \end{aligned}$$

Les coefficients thermodynamiques sont distribués dans l'espace à l'aide d'une fonction Heaviside H :

$$\chi_p = H \chi_p^g + (1 - H) \chi_p^l$$

Ainsi, lorsque ces coefficients sont nuls, on est en présence d'une phase incompressible et lorsque ceux-ci sont non nuls, on est en présence d'une phase compressible. Le passage à l'interface de l'une à l'autre phase se fait donc naturellement.

4 Implémentation semi-implicite de la tension de surface

On propose dans ce travail une formulation semi-implicite de la tension de surface, publiée dans [1], permettant de lever la restriction induite par la tension de surface sur le pas de temps.

La tension de surface est généralement implémentée de manière explicite, comme un terme source de force volumique dans l'équation de conservation du mouvement :

$$f_{ST} = -\gamma \kappa \delta(\Gamma) n$$

où γ est le coefficient de tension de surface, $\delta(\Gamma)$ est une fonction de Dirac autour de l'interface Γ , κ est la courbure moyenne et n est la normale à l'interface Γ .

Cette implémentation de la tension de surface impose cependant la restriction suivante sur le pas de temps :

$$\Delta t < (\Delta x)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{\bar{\rho}}{2\pi\gamma}}$$

Cette restriction du pas de temps est en général d'un à deux ordres de grandeur plus importantes que la restriction du pas de temps imposée par la condition CFL. Il va sans dire qu'une restriction aussi sévère ne permet pas de traiter des cas industriels à grande échelle.

On propose dans ce travail une formulation de la tension de surface qui fait apparaître un terme dépendant de la vitesse et qui peut donc être implicite :

$$f_{ST} = -\gamma \kappa \delta(\alpha) n - \gamma \delta(\alpha) \Delta t \left(\frac{\partial^2 u}{\partial n^2} + \kappa \frac{\partial u}{\partial n} - \nabla^2 u^{n+1} \right)$$

L'expression usuelle de la tension de surface $-\gamma \kappa \delta(\alpha) n$ est désormais complétée par des termes proportionnels au pas de temps. Ainsi, si le pas de temps tend vers zéro, la formulation usuelle de la tension de surface est retrouvée. Si le pas de temps augmente, les termes additionnels ajoutent de la diffusion, permettant ainsi d'empêcher les oscillations parasites de déstabiliser l'interface.

5 Modèle simplifié de changement de phase

Le modèle présenté ici s'appuie sur la résolution d'un problème de Stefan. Sous l'hypothèse que les flux de chaleur suivent une loi de Fourier, on définit le taux de transfert de masse à l'interface liquide/vapeur lors de la vaporisation par :

$$\dot{m} = \frac{[|k\nabla T|] \cdot n}{L}$$

En considérant la masse échangée entre la phase liquide et la phase vapeur lors de la vaporisation, la conservation de la masse ne s'exprime plus par la relation $\text{div} \cdot u = 0$ mais s'exprime désormais par :

$$\nabla \cdot u = \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) \dot{m} \delta$$

De même, l'évolution de l'interface liquide/vapeur dépend également du changement de phase et induit la modification suivante dans l'équation de transport de la level set :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + u \cdot \nabla \alpha = \frac{\rho}{\rho_v \rho_l} \dot{m} |\nabla \alpha|$$

Finalement, l'équation de conservation de l'énergie s'écrit [4] :

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) - \nabla \cdot (k \nabla T) = - \left(L + (c_p^v - c_p^l)(T - T_{\text{vap}}) \right) \dot{m} \delta \frac{\rho^2}{\rho_v \rho_l}$$

où L est le chaleur latente, T_{vap} est la température de vaporisation, k est la conductivité thermique, c_p est la chaleur spécifique.

6 Environnement de calcul haute performance

Le cluster du CEMEF est composé de 1344 cœurs répartis en 56 nœuds. Chaque nœud dispose de 64 Go de mémoire et de 12 cœurs cadencés à 2.6 GHz. Les calculs s'effectuent en parallèle en utilisant un modèle de parallélisme "Simple Programme Multiples Data (SPMD)". Un algorithme de repartitionnement du maillage permet un équilibrage dynamique de la charge de calcul pour chaque processeur [6].

L'assemblage des matrices locales et du second membre obtenus par la formulation implicite éléments finis est effectué moyennant la structure algébrique de la librairie PETSc. La méthode de pré-conditionnement utilisée est une méthode de factorisation LU incomplète. Un solveur itératif GMRES (Generalized Minimal Residual) est utilisé pour la résolution parallèle du système linéaire[7].

Le maillage est composé d'éléments tétraédriques. Dans ce travail, les éléments finis de Lagrange P1 sont utilisés. Dans le cadre d'une résolution des équations de Navier Stokes incompressible, le speed-up est presque optimal jusqu'à 512 cœurs pour un maillage fixe de 5.3 millions de nœuds et 31 millions d'éléments [8].

7 Simulation numérique de la trempe à l'eau d'une pièce métallique

On se propose de tester la capacité de nos méthodes à simuler des procédés de trempe industrielle en 3D. Dans un domaine d' 1m^3 , rempli à 3/4 d'eau, initialement au repos, on immerge un cylindre en acier de 50 cm de long et 10 cm de diamètre comme représenté dans la figure 1. La température du cylindre est très supérieure à la température de vaporisation. Les paramètres physiques sont donnés dans le tableau 1.

Le cylindre est immergé horizontalement à la hauteur $h=0.5\text{m}$ (figure 2), horizontalement à $h=0.25\text{m}$ (figure 3) et verticalement (figure 4). On observe ainsi la création d'un film de vapeur permanent autour de la pièce. Ce film remonte ensuite à la surface et provoque les remous observés à la surface libre.

TABLE 1 – Paramètres physiques (masse volumique, viscosité, conductivité thermique et chaleur spécifique)

	ρ [kg/m ³]	μ [kg/(m·s)]	k [W/(m·K)]	c_p [J/(kg·K)]
Acier	8000		11.4	435
Eau	960	2.83e-4	0.682	4215
Vapeur	0.6	1.20e-5	0.0248	2027

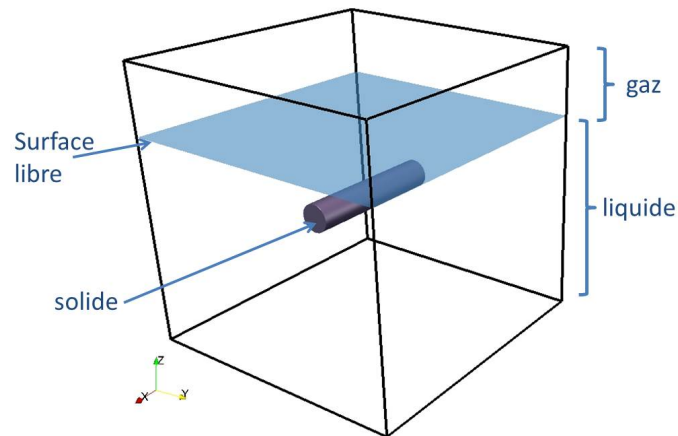


FIGURE 1 – Simulation numérique de la trempe à l'eau d'une pièce métallique - Configuration initiale

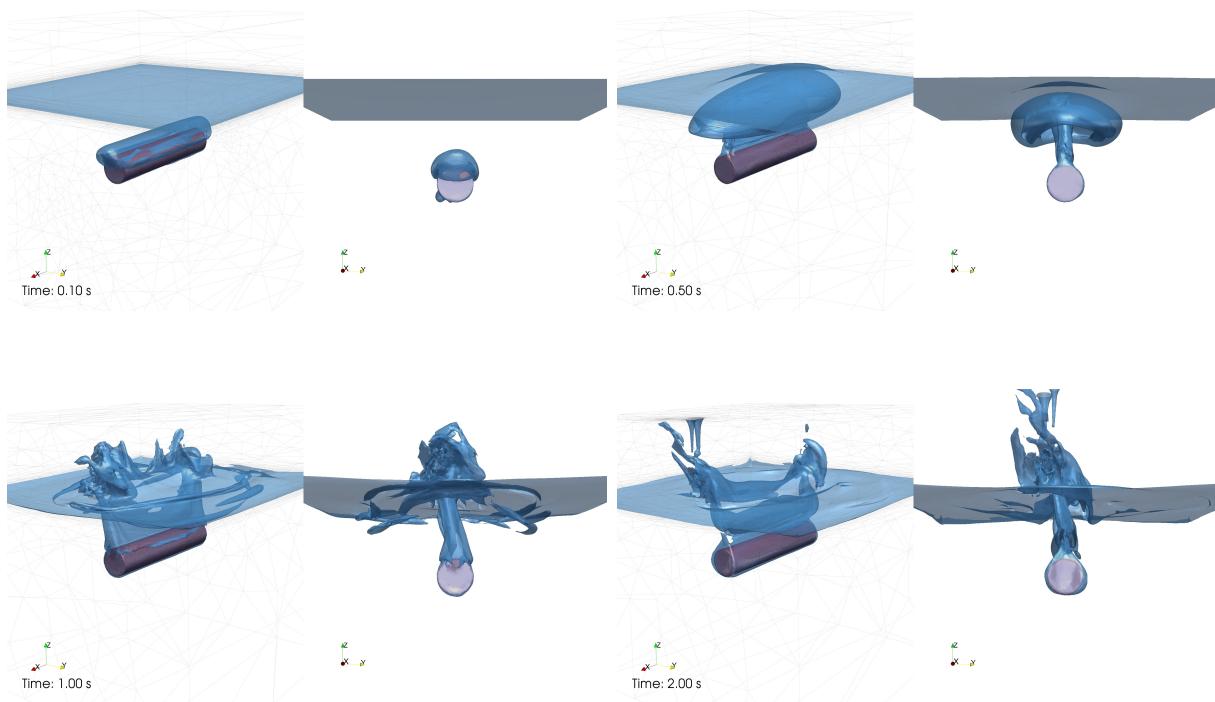


FIGURE 2 – Simulation numérique de la trempe. Cylindre à hauteur $h=0.5$ m. Résultats à $t=0.1, 0.5, 1$ et 2 s. Vue en perspective (gauche), vue de face (droite)

8 Conclusion

Dans ce papier, un cadre eulérien multiphasique adapté à la simulation numérique des procédés de trempe industrielle est proposé. Une nouvelle formulation éléments finis stabilisés des équations de Navier-Stokes permettant de considérer une phase compressible et une phase incompressible est propo-

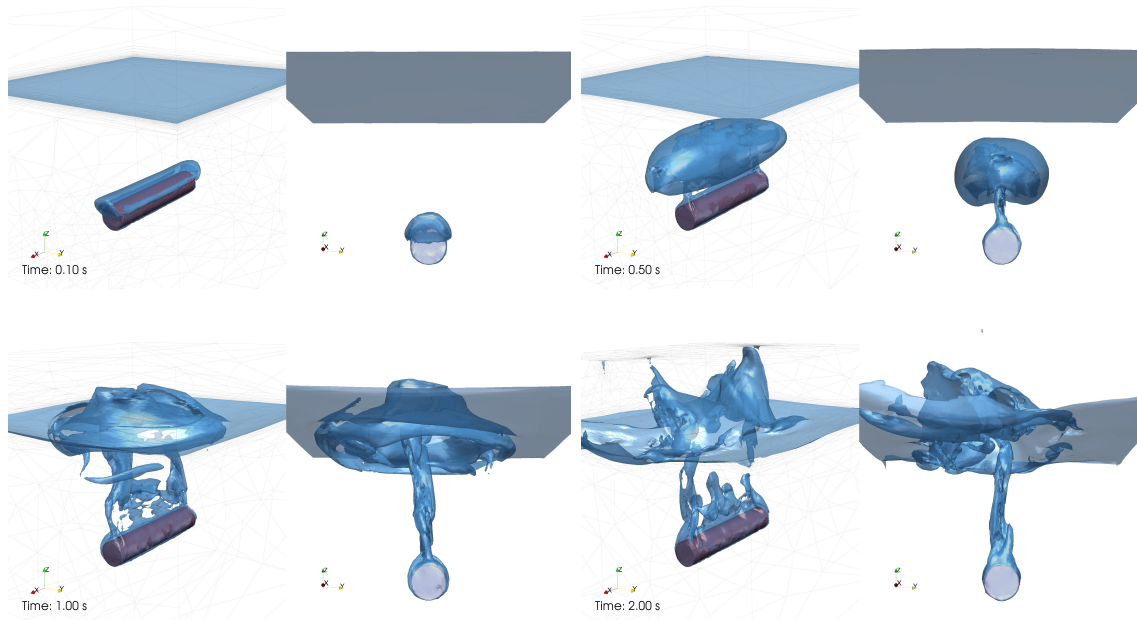


FIGURE 3 – Simulation numérique de la trempe. Cylindre à hauteur $h=0.25\text{m}$. Résultats à $t=0.1, 0.5, 1$ et 2 s. Vue en perspective (gauche), vue de face (droite)

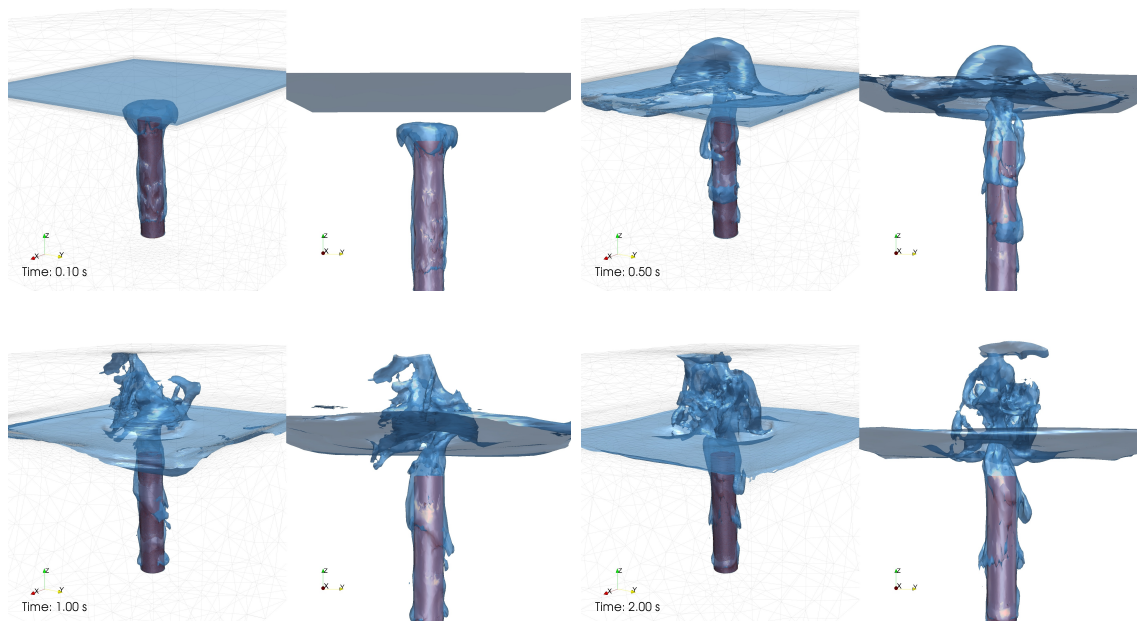


FIGURE 4 – Simulation numérique de la trempe. Cylindre placé verticalement. Résultats à $t=0.1, 0.5, 1$ et 2 s. Vue en perspective (gauche), vue de face (droite)

sée. L'évolution des différentes phases est suivie à l'aide d'une méthode level set conservative qui permet une meilleure conservation de la masse. Un modèle simplifié de changement de phase permet de simuler la vaporisation de l'eau grâce à l'ajout de termes sources dans les équations de Navier-Stokes. La validité des méthodes développées ainsi que leur robustesse sont testées sur des cas en 3D. Pour la première fois, des simulations de trempe industrielle peuvent être effectuées de manière robuste et précise.

Remerciements

Les auteurs remercient les partenaires industriels impliqués dans le consortium THOST pour le financement de ce travail : Science Computer and Consultants (SCC), Areva NP, Aubert & Duval, Faurecia, Industeel CRMC (Arcelor Mittal), Lisi Aerospace and Snecma/Safran.

Références

- [1] M. Khalloufi, Y. Mesri, R. Valette, E. Massoni, E. Hachem, *High fidelity anisotropic adaptive variational multiscale method for multiphase flows with surface tension*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Volume 307, 1 August 2016, Pages 44-67
- [2] E. Hachem, M. Khalloufi, J. Bruchon, R. Valette, Y. Mesri, *Unified adaptive Variational MultiScale method for two phase compressible–incompressible flows*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Volume 308, 15 August 2016, Pages 238-255
- [3] Y. Mesri, M. Khalloufi, E. Hachem, *On optimal simplicial 3D meshes for minimizing the Hessian-based errors*, Applied Numerical Mathematics, Volume 109, November 2016, Pages 235-249
- [4] D. Juric, G. Tryggvason, *Computations of boiling flows*, International Journal of Multiphase Flow, Volume 24, Issue 3, 1 April 1998, Pages 387-410
- [5] E. Olsson, G. Kreiss, *A conservative level set method for two phase flow*, Journal of Computational Physics, Volume 210, Issue 1, 20 November 2005, Pages 225-246
- [6] Y. Mesri, H. Dignonnet, and T. Coupez. *Hierarchical adaptive multi-mesh partitioning algorithm on heterogeneous systems*, Computational science and Engineering. Volume 74, 2011, Pages 299-306
- [7] Y. Mesri, H. Dignonnet, T. Coupez, *Advanced parallel computing in material forming with CIMLib*, European Journal of Computational Mechanics, Volume 18, Issue 7-9, 2009, Pages 669-694
- [8] Y. Mesri, E. Hachem, *Parallel High-Reynolds Incompressible Flow with Adaptive Anisotropic Meshing*, soumis