

# Éléments finis adaptatifs pour la simulation des phénomènes interfaciaux avec changement de phase

C. Bahbah<sup>1</sup>, Y. Mesri<sup>1</sup>, E. Massoni<sup>1</sup>, R. Valette<sup>1</sup>, E. Hachem<sup>1</sup>

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

**Résumé** — On s'intéresse à la simulation des problèmes physiques rencontrés au niveau de l'interface dans les écoulements multiphasiques. Les interfaces sont suivies à l'aide d'une méthode Level set conservative. Le maillage est adapté à la solution à l'aide d'un estimateur d'erreur à posteriori qui raffine le maillage dans les régions des plus grands gradients, permettant ainsi une meilleure capture des phénomènes physiques. La tension de surface est implémentée de manière implicite permettant ainsi de s'affranchir de la contrainte sur le pas de temps et d'éviter l'apparition d'oscillations parasites de l'interface. Un modèle de changement de phase adapté au formalisme level set est proposé permettant de caractériser de manière précise les échanges de masse et d'énergie entre les différentes phases. Une nouvelle formulation des équations de Navier Stokes est proposée. Pour tester et valider cette approche, plusieurs cas tests seront présentés et analysés.

**Mots clés** — Interface, Level Set, Adaptation de maillage, Tension de surface, Changement de phase

## 1 Introduction

Lors des simulations multiphasiques, les changements physiques importants et donc les modifications topologiques complexes ont lieu au niveau de l'interface. Ainsi, nous nous sommes intéressés dans ce travail aux différents outils permettant de simuler précisément les phénomènes interfaciaux.

Dans la première section, on présente une fonction distance signée Level set. Afin de suivre son évolution dans le temps, nous couplons l'équation de transport de la fonction Level Set avec une réinitialisation directe de cette dernière, afin qu'elle conserve les propriétés d'une fonction distance. Dans la section suivante, on présente une nouvelle formulation des équations de Navier Stokes pour considérer en même temps une phase compressible et une phase incompressible. Ensuite, on utilise l'adaptation de maillage anisotrope pour raffiner le maillage au niveau de l'interface. Dans la section suivante, on propose un modèle de changement de phase permettant de décrire les échanges de matière présents à l'interface lors d'un problème multiphasique. Pour finir, on propose une nouvelle expression de la tension de surface permettant de contourner la contrainte sur le pas de temps. On validera ces approches par quelques exemples de simulation.

## 2 Level set

Dans ce travail, une méthode Level set est utilisée. Cette fonction distance signée notée  $\alpha$  permet de représenter l'interface entre les différents sous-domaines. L'interface est représentée par l'isovaleur zéro de la fonction distance. On définit la fonction Level set sous la forme suivante :

$$\alpha(X) = \begin{cases} -\text{dist}(X, \Gamma) & \text{si } X \in \Omega_1 \\ 0 & \text{if } X \in \Gamma \\ \text{dist}(X, \Gamma) & \text{si } X \in \Omega_2 \end{cases}$$

où  $\Gamma$ ,  $\Omega_1, \Omega_2$  représentent respectivement l'interface ainsi que les sous domaine immergés dans le domaine  $\Omega$  et  $X$  représente un point de ce domaine.

Afin de suivre l'évolution de la fonction distance, on utilise une équation de transport :

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

Lors du transport de la fonction Level set, cette dernière perd sa propriété de fonction distance. Pour cela, on utilise une Level set conservative proposée par [1] en rajoutant deux termes de compression et de diffusion à l'interface. Nous complétons cette approche par une réinitialisation directe modifiant ainsi le terme de transport et le terme source (voir [2] pour plus de détails) :

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

### 3 Formulation compressible-incompressible de Navier Stokes

Après avoir défini les différents sous-domaines immergés grâce à la fonction Level set, elle nous permet de préciser les propriétés des différents composants immergés. Ainsi, on utilise une loi de mélange linéaire afin de déterminer les propriétés physiques d'une maille traversée par des fonctions Level set. On propose dans cette section une nouvelle formulation des équations de Navier Stokes [3], qui permettra de considérer à la fois une phase compressible ainsi qu'une phase incompressible, tout en se basant sur le principe des Levels sets.

Elle se présente sous la forme suivante :

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

où  $v$  est la vitesse,  $p$  la pression,  $T$  le champ de température,  $\rho$  la densité et  $\mu$  la viscosité.

Les coefficients thermodynamiques  $\chi_p$  et  $\chi_T$  sont mélangés dans le solveur de la même manière à l'aide d'une fonction Heaviside  $H$  :

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

Le passage d'une phase à l'autre par le biais de l'interface est réalisé grâce à la loi de mélange ci-dessus.

### 4 Adaptation de maillage

Pour augmenter la précision à l'interface, on propose de combiner cette approche Eulerian et Level set par une adaptation de maillage dynamique, [4]. Cette méthode permet de raffiner le maillage autour de l'interface, ce qui permet ainsi de définir plus précisément l'interface et de suivre son évolution au cours du temps tout en utilisant beaucoup moins d'éléments. Elle est basée sur la variation du gradient de la fonction distance Level Set. La première étape est de définir un estimateur d'erreur qui permettra de minimiser l'erreur sur la fonction distance. Après avoir estimé l'erreur, on définit une métrique qui nous permettra d'imposer la taille du maillage en fonction du gradient de la fonction distance et ainsi raffiner le maillage au niveau des changements de gradient importants. L'étape finale est le remaillage : ici, on minimise l'erreur  $e_{ij}$  dans un élément  $K$  du maillage tout en fixant le nombre d'arêtes par maille. Un maillage est dit optimal lorsque l'erreur est identique sur chaque arête. Ainsi, afin d'obtenir une erreur homogène, certains nœuds doivent être déplacés ou supprimés, mais encore certains doivent être créés.

### 5 Changement de phase

Le taux de transfert de masse à l'interface est défini à l'aide d'une loi de Fourier de la manière suivante :

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

Le modèle présenté ci-dessous repose sur la résolution du problème de Stefan. Le changement de phase ayant lieu à l'interface, il faut donc modifier l'équation de transfert de la fonction Level set :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + u \cdot \nabla \alpha = \frac{\rho}{\rho_2 \rho_1} \dot{m} |\nabla \alpha|$$

La conservation de la masse est exprimée à son tour de la manière suivante :

$$\nabla \cdot u = \left( \frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1} \right) \dot{m} \delta$$

Finalement, l'équation de conservation de l'énergie s'écrit [5] :

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) - \nabla \cdot (k \nabla T) = - (L + (c_p^2 - c_p^1)(T - T_2)) \dot{m} \delta \frac{\rho^2}{\rho_2 \rho_1}$$

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

On propose de tremper une pièce chaude de dimension 10x1.5cm dans de l'eau à 25°C afin d'observer le passage de l'eau de l'état liquide à l'état gazeux. On observe la formation de bulles à la surface, voir la Fig. 1 qui montre le changement de phase et sur la Fig. 2, on représente la carte thermique.

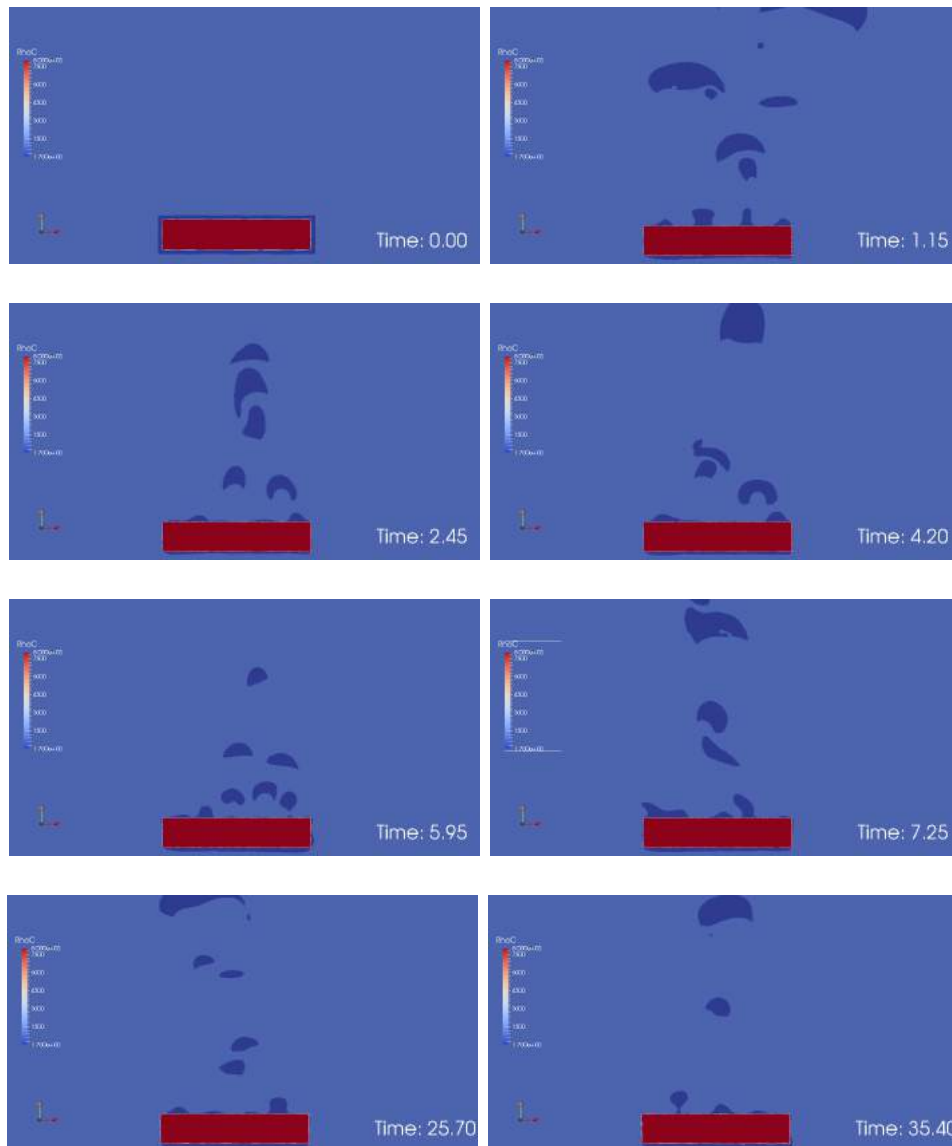


FIGURE 1 – Simulation 2D du procédé de trempé - Changement de phase

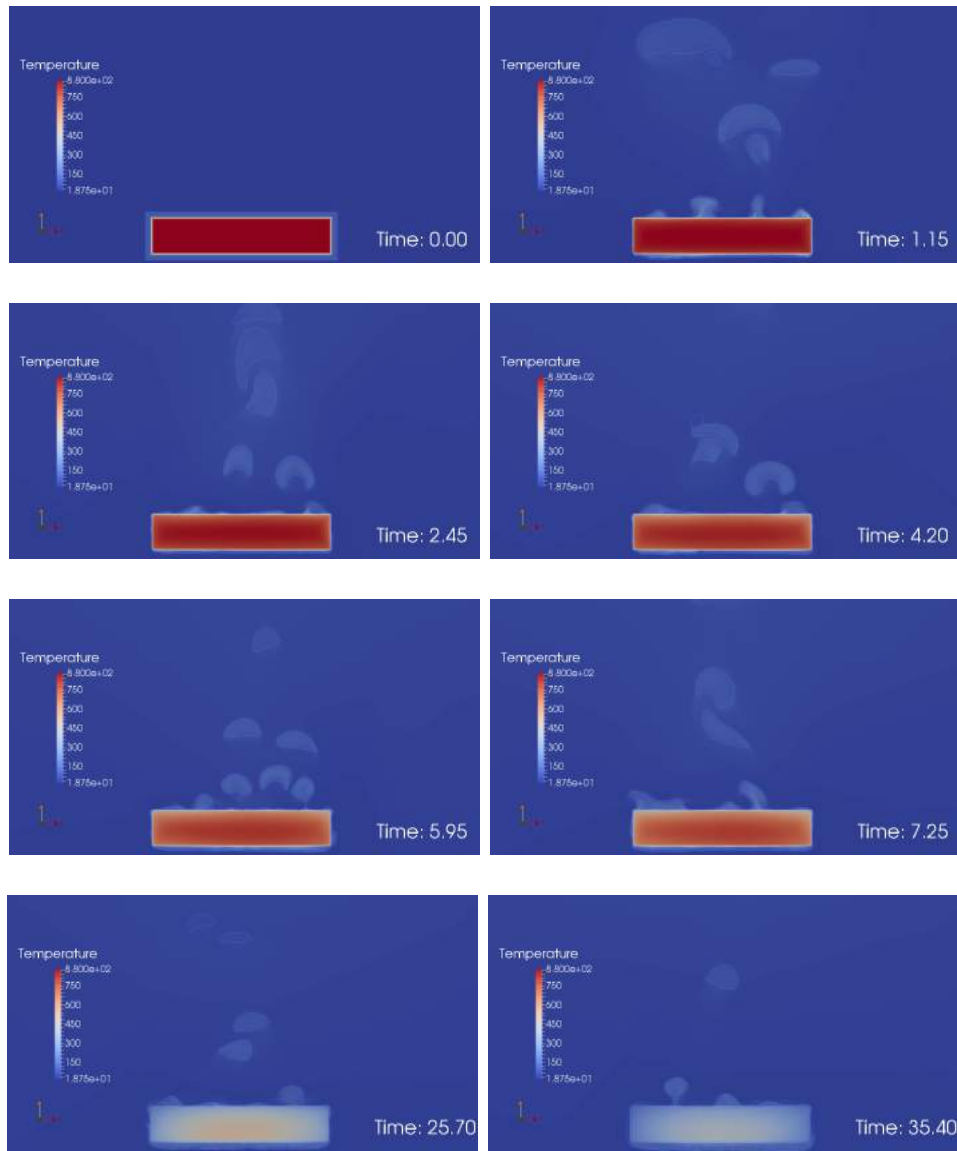


FIGURE 2 – Simulation 2D du procédé de trempe - Carte thermique

## 6 Tension de surface

La tension de surface est la plus part du temps utilisée de manière explicite comme un terme source dans l'équation de conservation de mouvement, ce qui entraîne une restriction temporelle désavantageuse dans le cas des simulations multiphasiques. On propose donc une nouvelle formulation semi-implicite de la tension de surface qui dépendra d'un terme fonction de la vitesse que l'on peut calculer de manière implicite et on complète l'expression initiale de la tension de surface par des termes proportionnels au temps,[2] :

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

où  $\gamma, \kappa, \delta(\Gamma), n$  sont respectivement le coefficient de tension de surface, la courbure moyenne, une fonction Dirac autour de l'interface et la normale à l'interface. Cette nouvelle expression de la tension de surface se rajoute au terme source de l'équation de Navier Stokes.

Afin de valider cette approche, on propose de simuler la croissance d'une bulle dans un liquide de densité et de viscosité plus élevées. On impose une condition de glissement à la vertical et une condition de non glissement au sommet et au bas de la cavité. Le maillage dynamique suit l'interface fluide-gaz. On voit bien sur la Fig. 3 l'effet de la tension de surface sur l'interface qui est très fine. Pour valider

cette approche, on compare ces résultats avec d'autres benchmarks proposés dans la littérature, [6]. On compare l'évolution de la position du centre de la masse et de la vitesse de croissance du centre de la masse pour les différentes méthodes. Les résultats de la Fig. 4 montrent qu'avec très peu d'éléments on arrive à reproduire les résultats de la littérature.

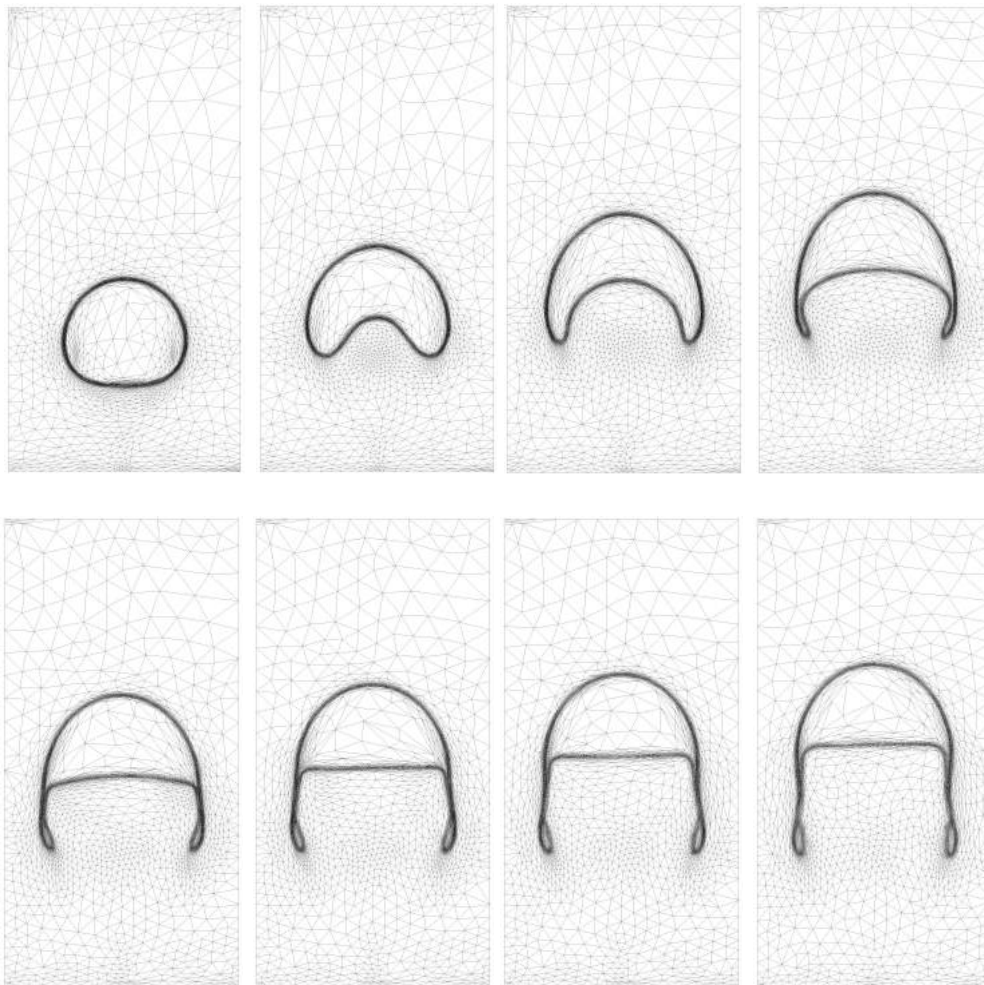


FIGURE 3 – Simulation 2D de la croissance d'une bulle de 0.5m de diamètre - Le liquide a une densité et une viscosité plus élevée

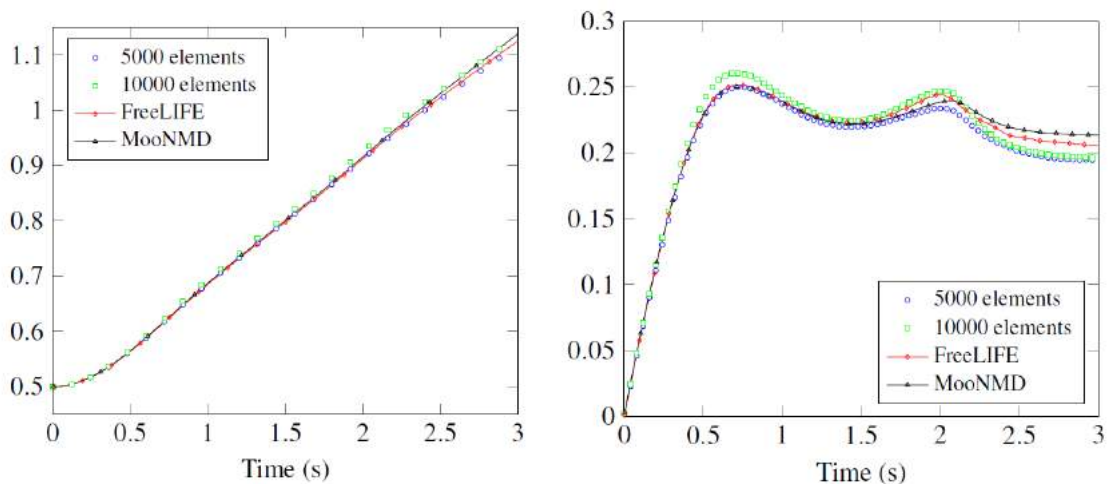


FIGURE 4 – Gauche : Évolution de la position du centre de la masse pour différentes méthodes - Droite : Évolution de la vitesse de croissance du centre de la masse

On réalise une simulation 3D de la croissance d'une bulle. Dans ce cas, la bulle est au repos à l'état initial. On impose une condition de glissement sur toutes les parois du domaine. Cette simulation est réalisée en utilisant une technique d'adaptation de maillage avec 128000 éléments. Le pas de temps est fixé à 0.002s. Le diamètre de la bulle est de 0.01m. On peut voir sur la Fig. 5, que encore une fois l'adaptation de maillage combinée avec la Level Set conservative donne des résultats très précis.

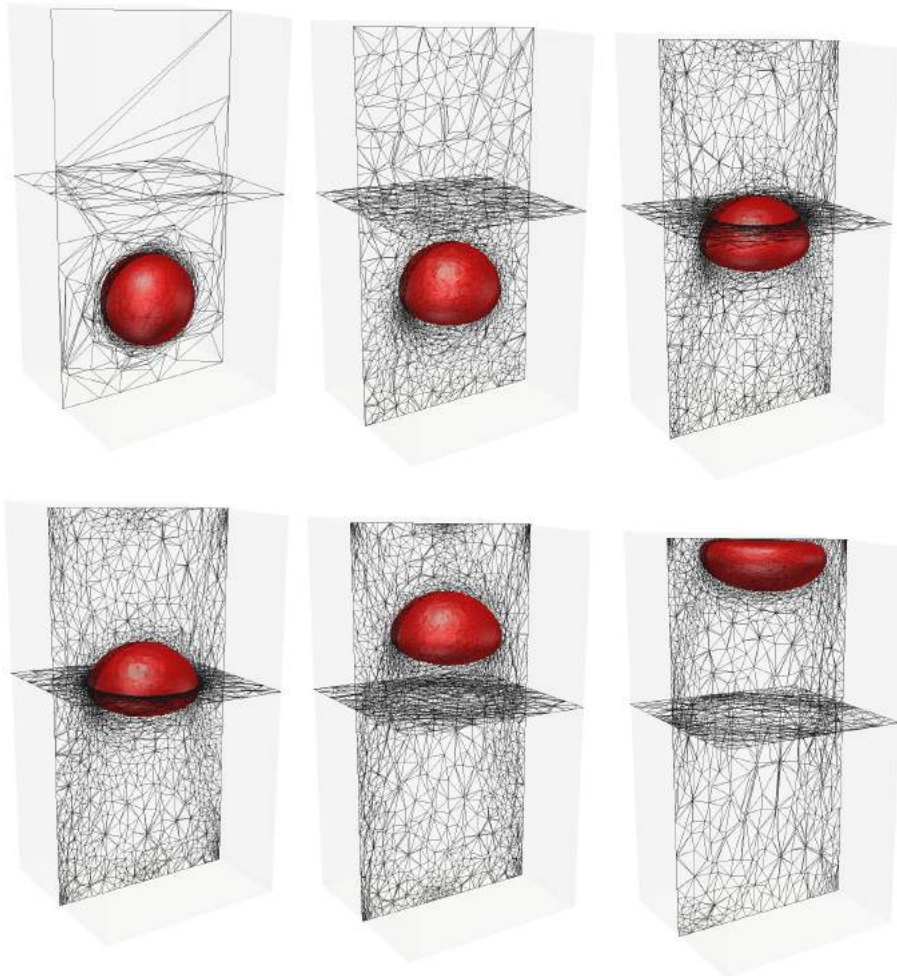


FIGURE 5 – Simulation 3D de la croissance d'une bulle de 0.01m de diamètre - Le liquide a une densité et une viscosité plus élevée

## 7 Conclusion

Dans ce travail, nous avons proposé des méthodes numériques pour la simulation des phénomènes physiques rencontrés à l'interface lors des simulations multiphasiques. La méthode Level set basée sur l'auto réinitialisation qui permet de capturer l'interface. La nouvelle formulation de la loi de mélange pour la résolution des équations de Navier Stokes permet de considérer simultanément une phase compressible et une phase incompressible. L'adaptation de maillage anisotrope nous permet de gagner en précision tout en limitant le nombre de nœuds. Une nouvelle implémentation de la tension de surface permet de réduire les instabilités au niveau de l'interface. On observe le changement de phase à l'interface à l'aide du modèle simplifié grâce aux termes sources ajoutés dans l'équation de Navier Stokes. Nous avons validé ces différentes méthodes grâce à des simulations 2D et 3D.

## Références

- [1] 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
- [2] 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
- [3] 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
- [4] T. Coupez, E. Hachem, *Solution of high-Reynolds incompressible flow with stabilized finite element and adaptive anisotropic meshing*, Comput. Methods Appl. Mech Engrg. 267 (2013) 65-85
- [5] D. Juric, G. Tryggvason, *Computations of boiling flows*, International Journal of Multiphase Flow, Volume 24, Issue 3, 1 April 1998, Pages 387-410
- [6] S. Hysing, S. turek. D. Kuzmin, N. Parolini, E. Burman, S. Ganesan, L. Tobiska, *Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics*, Internat. J. Number. Methods Fluids 60 (11) (2009) 1259-1288.