Simulation numérique d'écoulements visco-élastiques avec inclusions rigides

Sébastien Martin

Université Paris Descartes / MAP5 CNRS-UMR 8145

École d'été "Écoulements gravitaires et risques naturels"
Piriac-sur-mer, 1-4 juin 2015.

Plan de l'exposé

Écoulement régi par le système

$$\mathrm{Re}\frac{\mathsf{d}\mathbf{u}}{\mathsf{d}t} = \mathbf{f} + \mathrm{div}(-p\,\mathrm{Id} + \Sigma), \qquad \mathrm{div}(\mathbf{u}) = 0.$$

- Fluides newtoniens :

$$\Sigma = 2\,\mathbb{D}(\mathbf{u})$$

- Fluides quasi-newtoniens :

$$\Sigma = 2\ f(\|\mathbb{D}(\mathbf{u})\|)\ \mathbb{D}(\mathbf{u}), \qquad f(\|\mathbb{D}(\mathbf{u})\|) = m\|\mathbb{D}(\mathbf{u})\|^n$$

- Fluides visco-élastiques :

$$\Sigma = 2\,(1-r)\,\mathbb{D}(\mathbf{u}) + \sigma_{\mathrm{el.}}$$

$$\mathrm{We}\left(\frac{\mathsf{d}\sigma_{\mathrm{el.}}}{\mathsf{d}t} + g_a(\nabla\mathbf{u}, \sigma_{\mathrm{el.}})\right) + \sigma_{\mathrm{el.}} = 2r\,\mathbb{D}(\mathbf{u})$$

Terminologie : Jeffreys $r < 1$, Maxwell $r = 1$, sous-convecté $a = -1$, corotationnel $a = 0$, sur-convecté $a = +1$...

Modèle d'Oldroyd avec contrainte diffusive :

$$\left\{\begin{array}{rcll} \mathrm{Re}\,(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}) - (1-r)\Delta\mathbf{u} + \nabla p & = & \mathrm{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{f}, & \text{dans } \Omega, \\ \mathrm{div}(\mathbf{u}) & = & 0, & \text{dans } \Omega, \\ \mathrm{We}\,(\partial_t\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{u}\cdot\nabla\boldsymbol{\sigma} + g_a(\nabla\mathbf{u},\boldsymbol{\sigma})) + \boldsymbol{\sigma} - \mathrm{D}\,\Delta\boldsymbol{\sigma} & = & 2r\mathbb{D}(\mathbf{u}), & \text{dans } \Omega, \\ \mathbf{u} & = & \mathbf{0}, & \text{sur } \partial\Omega, \\ \mathrm{D}\,\partial_n\boldsymbol{\sigma} & = & \mathbf{0}, & \text{sur } \partial\Omega, \end{array}\right.$$

Réf. : Guillopé & Saut '90, Lions & Masmoudi '00, Molinet & Talhouk '04

Schéma numérique

$$\begin{array}{rcl} \mathrm{Re}\dfrac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n\circ\kappa^n}{\Delta t} - (1-r)\Delta\mathbf{u}^{n+1} + \nabla p^{n+1} & = & \mathrm{div}(\boldsymbol{\sigma}^{n+1}) + \mathbf{f}^{n+1}, \\ \mathrm{div}(\mathbf{u}^{n+1}) & = & 0, \end{array}$$

$$\mathrm{We}\left(\frac{\boldsymbol{\sigma}^{n+1} - \boldsymbol{\sigma}^n\circ\kappa^n}{\Delta t} + g_a(\nabla\mathbf{u}^{n+1},\boldsymbol{\sigma}^{n+1})\right) + \boldsymbol{\sigma}^{n+1} - \mathrm{D}\Delta\boldsymbol{\sigma}^{n+1} = 2r\mathbb{D}(\mathbf{u}^{n+1}).$$

Modèle d'Oldroyd avec contrainte diffusive :

$$\left\{\begin{array}{rcll}
\mathrm{Re}\,(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}) - (1-r)\Delta\mathbf{u} + \nabla p & = & \mathrm{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{f}, & \text{dans } \Omega,\\
\mathrm{div}(\mathbf{u}) & = & 0, & \text{dans } \Omega,\\
\mathrm{We}\,(\partial_t\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{u}\cdot\nabla\boldsymbol{\sigma} + g_a(\nabla\mathbf{u},\boldsymbol{\sigma})) + \boldsymbol{\sigma} - \mathrm{D}\,\Delta\boldsymbol{\sigma} & = & 2r\mathbb{D}(\mathbf{u}), & \text{dans } \Omega,\\
\mathbf{u} & = & \mathbf{0}, & \text{sur } \partial\Omega,\\
\mathrm{D}\,\partial_n\boldsymbol{\sigma} & = & \mathbf{0}, & \text{sur } \partial\Omega,
\end{array}\right.$$

Réf. : Guillopé & Saut '90, Lions & Masmoudi '00, Molinet & Talhouk '04

Schéma numérique

$$\begin{array}{rcl}
\mathrm{Re}\dfrac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n \circ \kappa^n}{\Delta t} - (1-r)\Delta\mathbf{u}^{n+1} + \nabla p^{n+1} & = & \mathrm{div}(\boldsymbol{\sigma}^n \quad) + \mathbf{f}^{n+1},\\
\mathrm{div}(\mathbf{u}^{n+1}) & = & 0,
\end{array}$$

$$\mathrm{We}\left(\frac{\boldsymbol{\sigma}^{n+1} - \boldsymbol{\sigma}^n \circ \kappa^n}{\Delta t} + g_a(\nabla\mathbf{u}^{n+1}, \boldsymbol{\sigma}^{n+1})\right) + \boldsymbol{\sigma}^{n+1} - \mathrm{D}\Delta\boldsymbol{\sigma}^{n+1} = 2r\mathbb{D}(\mathbf{u}^{n+1}).$$

Interaction fluide-structure :

- validation de modèles macroscopiques (description fine des interactions par paire, étude de la sédimentation,...) ;
- étude de la rhéologie de fluides complexes (suspensions denses, contact, forces de lubrification...)

Références (fluides newtoniens) :

- **Domaines mobiles** : Hu, Joseph & Crochet '92, Johnson & Tezduyar '96, Maury '99, Villone *et al.* '10, Choi, Hulsen & Meijer '10
- **Domaines fictifs** (1) : Glowinski, Pan, Hesla & Joseph '99, Patankar, Singh, Joseph, Glowinski & Pan '00
- **Domaines fictifs** (2) : Angot, Bruneau & Fabrie '99, Randrianarivelo, Pianet, Vincent & Caltagirone '05, Lefebvre '07

Simulation d'écoulements *visco-élastiques* : Feng, Joseph, Glowinski & Pan '95, Huang, Feng, Hu & Joseph '97

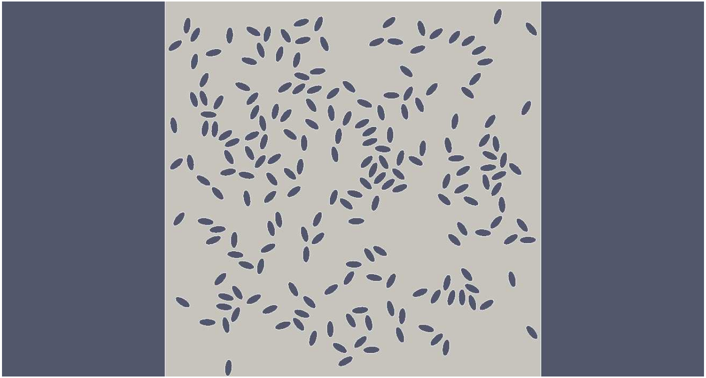
Plan de l'exposé

- collection de corps rigides :

$$B(t) = \bigcup_{i=1}^{N} B_i(t)$$

- domaine fluide :

$$\Omega \setminus \overline{B}(t)$$



- Tenseur de contraintes :

$$\Sigma := 2\mu(1-r)\mathbb{D}(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\sigma}$$

- Équations d'Oldroyd dans le domaine fluide :

$$\begin{aligned}
\rho_{\mathrm{f}}\left(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}\right) - \operatorname{div}(\Sigma) + \nabla p &= \mathbf{f}_{\mathrm{f}}, && \text{dans} \bigcup_{t\in(0,T)} \{t\}\times(\Omega\setminus\overline{B(t)}),\\
\operatorname{div}(\mathbf{u}) &= 0, && \text{dans} \bigcup_{t\in(0,T)} \{t\}\times(\Omega\setminus\overline{B(t)}),\\
\lambda\left(\partial_t\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{u}\cdot\nabla\boldsymbol{\sigma} + g_a(\nabla\mathbf{u},\boldsymbol{\sigma})\right) + \boldsymbol{\sigma} &= 2r\mu\mathbb{D}(\mathbf{u}), && \text{dans} \bigcup_{t\in(0,T)} \{t\}\times(\Omega\setminus\overline{B(t)}).
\end{aligned}$$

- Conditions aux limites (et rigidité des objets) :

$$\mathbf{u}(t,\mathbf{x}) = \mathbf{v}_i(t) + \omega_i(t)(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)^{\perp}, \qquad \mathbf{x}\in\partial B_i(t),$$

- Pour chaque particule i, on désigne par
  - $(\mathbf{x}_i, \theta_i)$ ses coordonnées ;
  - $(\mathbf{v}_i, \omega_i)$ ses vitesses (translation / rotation) :

$$\mathbf{v}_i = \dot{\mathbf{x}}_i, \qquad \omega_i = \dot{\theta}_i$$

- Couplage fluide-structure :

$$\begin{aligned}
m_i \dot{\mathbf{v}}_i(t) &= \int_{B_i(t)} \mathbf{f}_i(t,\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} - \int_{\partial B_i(t)} \Sigma(t,\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(t,\mathbf{x})\,\mathrm{d}\gamma(\mathbf{x}), \\
J_i \dot{\omega}_i(t) &= \int_{B_i(t)} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(t))^{\perp} \cdot \mathbf{f}_i(t,\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} \\
&\quad - \int_{\partial B_i(t)} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(t))^{\perp} \cdot (\Sigma(t,\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(t,\mathbf{x}))\,\mathrm{d}\gamma(\mathbf{x}),
\end{aligned}$$

où $\mathbf{f}_i$ désigne les forces (non-hydrodynamiques) appliquées à la particule, m_i est sa masse et J_i son moment d'inertie.

Plan de l'exposé

Approche de type domaine fictif : le champ de vitesse, initialement défini sur le domaine $\Omega \setminus B$, est étendu sur Ω :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{V}_i + \omega_i \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^{\perp}, \quad \mathbf{x} \in B_i, \quad \forall i.$$

Les champs de pression et contraintes sont prolongés par 0.

Nécessairement, $\mathbf{V}_i$ et ω_i sont de la forme

$$\mathbf{V}_i[\mathbf{u}] := \frac{1}{\mathrm{mes}(B_i)} \int_{B_i} \mathbf{u}(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}, \qquad \omega_i[\mathbf{u}] := \frac{\displaystyle\int_{B_i} \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^{\perp}\,\mathrm{d}\mathbf{x}}{\displaystyle\int_{B_i} |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|^2\,\mathrm{d}\mathbf{x}}$$

Mouvement rigide dans B :

$$\begin{aligned} V_B &:= \left\{\mathbf{u} \in H^1_0(\Omega),\ \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{V}_i[\mathbf{u}] + \omega_i[\mathbf{u}] \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^{\perp} \text{ p.p. dans } B_i, \forall i\right\} \\ &= \left\{\mathbf{u} \in H^1_0(\Omega),\ \mathbb{D}(\mathbf{u}) = 0 \text{ p.p. dans } B\right\}, \\ Z_B &:= \{p \in L^2_0(\Omega),\ p = 0 \text{ p.p. dans } B\}, \\ W_B &:= \{\boldsymbol{\sigma} \in H^1_{\mathrm{sym.}}(\Omega),\ \boldsymbol{\sigma} = 0 \text{ p.p. dans } B\} \end{aligned}$$

Dans le cas newtonien non-inertiel :

$$\left\{\begin{array}{l}\text{Trouver } (\mathbf{u}, p) \in V_B \times Z_B \text{ tel que} \\ \bullet \qquad 2\mu \int_\Omega \mathbb{D}(\mathbf{u}) \cdot \mathbb{D}(\mathbf{w}) - \int_\Omega p \,\mathrm{div}(\mathbf{w}) = \int_\Omega \mathbf{f} \cdot \mathbf{w}, \\ \bullet \qquad \int_\Omega q \,\mathrm{div}(\mathbf{u}) = 0, \\ \text{pour tout } (\mathbf{w}, q) \in V_B \times Z_B. \end{array}\right.$$

Terme source :

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_\mathrm{f}\, \mathbf{1}_{\Omega \setminus \overline{B}} + \sum_{i=1}^{N} \mathbf{f}_i \mathbf{1}_{B_i}.$$

Espace fonctionnel contraint : $V_B = \left\{\mathbf{u} \in H_0^1(\Omega),\ \mathbb{D}(\mathbf{u}) = 0 \text{ p.p. dans } B\right\}$

Dans le cas newtonien non-inertiel :

$$\left\{\begin{array}{l} \text{Trouver } (\mathbf{u}, p) \in H^1_0(\Omega) \times L^2_0(\Omega) \text{ tel que} \\ \bullet \quad 2\mu \displaystyle\int_\Omega \mathbb{D}(\mathbf{u}) \cdot \mathbb{D}(\mathbf{w}) + \frac{2}{\varepsilon} \int_B \mathbb{D}(\mathbf{u}) \cdot \mathbb{D}(\mathbf{w}) - \int_\Omega p \operatorname{div}(\mathbf{w}) = \int_\Omega \mathbf{f} \cdot \mathbf{w}, \\ \bullet \quad \displaystyle\int_\Omega q \operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0, \\ \text{pour tout } (\mathbf{w}, q) \in H^1_0(\Omega) \times L^2_0(\Omega). \end{array}\right.$$

Terme source :

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_{\mathrm{f}}\, \mathbf{1}_{\Omega \setminus \overline{B}} + \sum_{i=1}^{N} \mathbf{f}_i \mathbf{1}_{B_i}.$$

Espace fonctionnel non contraint : $H^1_0(\Omega)$

Algorithme : mise en œuvre pratique

i. Détermination du champ de vitesse instantané $\mathbf{u}^n$: résolution du problème mixte pénalisé associé à la position des particules

$$B := B^{n} = \bigcup_{i=1}^{N} B_i^{n}$$

et construction du terme source $\mathbf{f} := \mathbf{f}^{n}$.

ii. Calcul de la vitesse des particules :

$$\boldsymbol{V}_i^n = \frac{1}{\mathrm{mes}(B_i^n)} \int_{B_i^n} \mathbf{u}^n(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}, \qquad \omega_i^n = \frac{\displaystyle\int_{B_i^n} \mathbf{u}^n(\mathbf{x}) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i^n)^{\perp}\,\mathrm{d}\mathbf{x}}{\displaystyle\int_{B_i^n} |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i^n|^2\,\mathrm{d}\mathbf{x}}$$

iii. Mise à jour des positions des particules (détermination de B^{n+1}) :

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^{n} + h\,\boldsymbol{V}_i^{n}, \qquad \theta_i^{n+1} = \theta_i^{n} + h\,\omega_i^{n}.$$

Dans le cas visco-élastique inertiel, le problème variationel est le suivant :

$$\left\{\begin{array}{l} \text{Trouver } (\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}) \in V_{B^{n+1}} \times Z_{B^{n+1}} \text{ t. q., pour tout } (\mathbf{w}, q) \in V_{B^{n+1}} \times Z_{B^{n+1}}, \\ \bullet \quad \dfrac{1}{\Delta t} \displaystyle\int_\Omega \rho^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{w} + 2\mu \int_\Omega \mathbb{D}(\mathbf{u}^{n+1}) \cdot \mathbb{D}(\mathbf{w}) - \int_\Omega p^{n+1} \operatorname{div}(\mathbf{w}) \\ \qquad = \dfrac{1}{\Delta t} \displaystyle\int_\Omega ((\rho^n \mathbf{u}^n) \circ \kappa^n) \cdot \mathbf{w} - \int_\Omega \boldsymbol{\sigma}^n : \mathbb{D}(\mathbf{w}) + \int_\Omega \mathbf{f}^{n+1} \cdot \mathbf{w}, \\ \bullet \quad \displaystyle\int_\Omega q \operatorname{div}(\mathbf{u}^{n+1}) = 0, \end{array}\right.$$

où le terme source $\mathbf{f}^{n+1}$ et la densité ρ^{n+1} sont définies par

$$\mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{f}_{\mathrm{f}}\, \mathbf{1}_{\Omega \setminus \overline{B^{n+1}}} + \sum_{i=1}^{N} \mathbf{f}_i \mathbf{1}_{B_i^{n+1}}, \qquad \rho^{n+1} = \rho_{\mathrm{f}}\, \mathbf{1}_{\Omega \setminus \overline{B^{n+1}}} + \sum_{i=1}^{N} \rho_i \mathbf{1}_{B_i^{n+1}}.$$

$$\left\{\begin{array}{l} \text{Trouver } \boldsymbol{\sigma}^{n+1} \in W_{B^{n+1}} \text{ t. q., pour tout } \boldsymbol{\tau} \in W_{B^{n+1}}, \\ \dfrac{\lambda}{\Delta t} \displaystyle\int_\Omega \boldsymbol{\sigma}^{n+1} : \boldsymbol{\tau} + \lambda \int_\Omega g_a(\nabla \mathbf{u}^{n+1}, \boldsymbol{\sigma}^{n+1}) : \boldsymbol{\tau} + \int_\Omega \boldsymbol{\sigma}^{n+1} : \boldsymbol{\tau} + \mathrm{d} \int_\Omega \nabla \boldsymbol{\sigma}^{n+1} : \nabla \boldsymbol{\tau} \\ \qquad = \dfrac{\lambda}{\Delta t} \displaystyle\int_\Omega (\boldsymbol{\sigma}^n \circ \kappa^n) : \boldsymbol{\tau} + \int_\Omega 2r\mu \mathbb{D}(\mathbf{u}^{n+1}) : \boldsymbol{\tau}. \end{array}\right.$$

Relaxation des contraintes sur les espaces fonctionnels par **pénalisation** :

- pénalisation du champ de vitesse :

$$\frac{2}{\varepsilon}\int_B \mathbb{D}(\mathbf{u})\cdot\mathbb{D}(\mathbf{w})$$

- pénalisation de la contrainte élastique :

$$\frac{1}{\varepsilon}\left(\int_B \boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{\tau}+\int_B \nabla\boldsymbol{\sigma}:\nabla\boldsymbol{\tau}\right).$$

Relaxation des contraintes sur les espaces fonctionnels par **pénalisation** :

- pénalisation du champ de vitesse :

$$\frac{2}{\varepsilon} \int_B \mathbb{D}(\mathbf{u}) \cdot \mathbb{D}(\mathbf{w})$$

- pénalisation de la contrainte élastique :

$$\frac{1}{\varepsilon} \left(\int_B \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\tau} + \int_B \nabla \boldsymbol{\sigma} : \nabla \boldsymbol{\tau} \right).$$

Intérêt de la combinaison *splitting* / pénalisation :

- solveur de type Stokes ou Navier-Stokes
- solveur de type système de transport linéaire
- éléments finis usuels
- maillages fixes, structurés ou non structurés
- schéma implicite par point-fixe

Plan de l'exposé

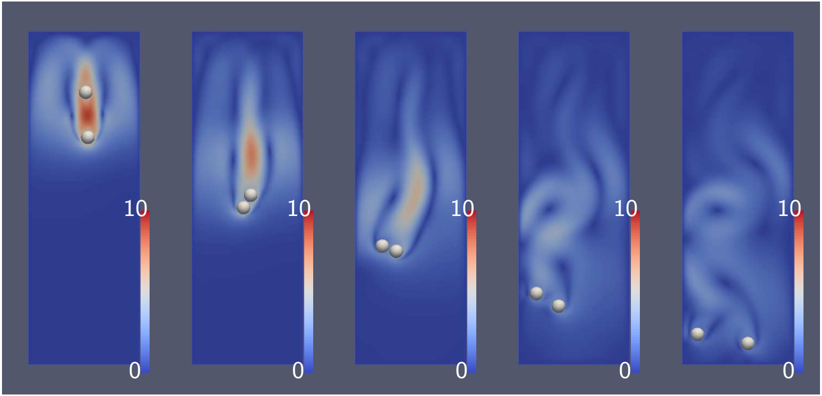
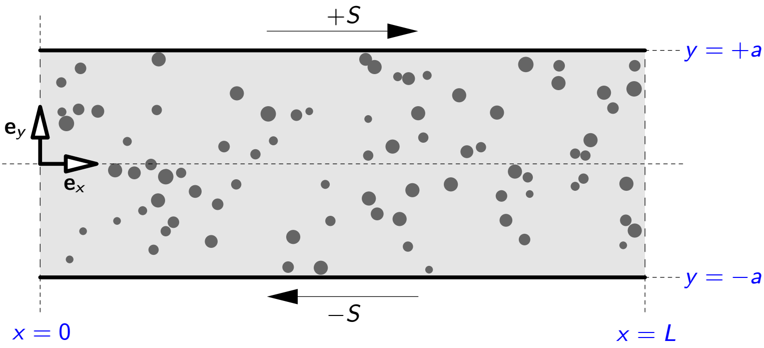


Figure: Drafting, kissing, tumbling

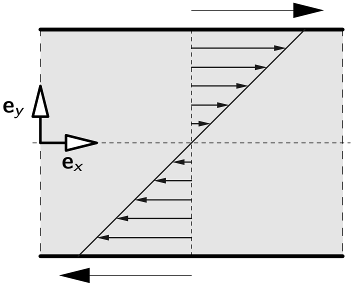
Definition 1

La *viscosité effective* d'un fluide est une observable macroscopique qui caractérise la résistance du fluide déformé par une contrainte de cisaillement.



- Tenseur de contraintes de Cauchy pour un fluide newtonien :

$$\Sigma_{\text{tot.}} = p\,\mathrm{I} - 2\mu\mathbb{D}(\mathbf{u})$$



- Écoulement de Couette :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(x,y) &= S\frac{y}{a}\mathbf{e}_x, \\ p(x,y) &= 0. \end{aligned}$$

- Forces tangentielles (de cisaillement) exercées par les parois sur le fluide :

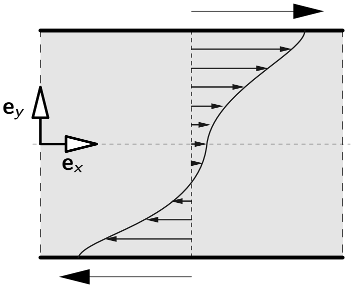
$$\mathcal{F}_{|y=\pm a} = \int_0^L (\pm\mathbf{e}_x)\cdot(-\Sigma_{\text{tot.}})_{|y=\pm a}\cdot(\pm\mathbf{e}_y)\,\mathrm{d}x$$

  - Pour un fluide newtonien,

$$\mu = \frac{a}{2LS}(\mathcal{F}_{|y=+a} + \mathcal{F}_{|y=-a}).$$

- Tenseur de contraintes de Cauchy pour un fluide complexe :

$$\Sigma_{\mathrm{tot.}} = p\,\mathrm{I} - \Sigma$$



- Forces tangentielles (de cisaillement) exercées par les parois sur le fluide :

$$\mathcal{F}_{|y=\pm a} = \int_0^L (\pm\mathbf{e}_x) \cdot (-\Sigma_{\mathrm{tot.}})_{|y=\pm a} \cdot (\pm\mathbf{e}_y)\,\mathrm{d}x$$

  - Pour un fluide complexe,

$$\mu_{\mathrm{eff}} = \frac{a}{2LS}(\mathcal{F}_{|y=+a} + \mathcal{F}_{|y=-a}).$$

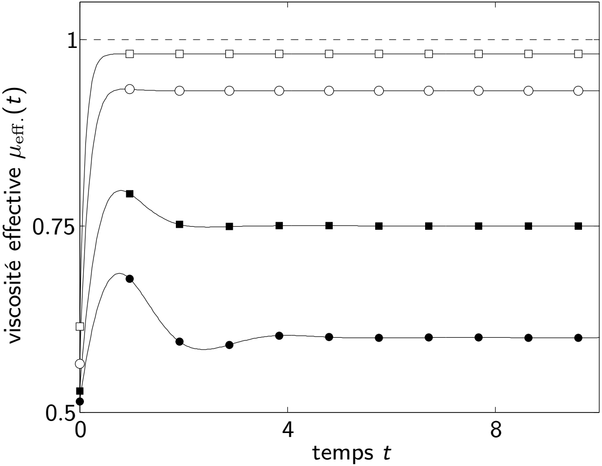


Figure: Viscosité effective pour le modèle d'Oldroyd, sans inclusion de particules rigides, avec $r = 0.5$ et différentes valeurs de λ : $\lambda = 0.0$ (--), $\lambda = 0.1$ ($\square$), $\lambda = 0.2$ ($\circ$), $\lambda = 0.5$ ($\blacksquare$), $\lambda = 1.0$ ($\bullet$).

Résultats numériques | Cisaillement d'une suspension dense

fluide newtonien	fluide visco-élastique

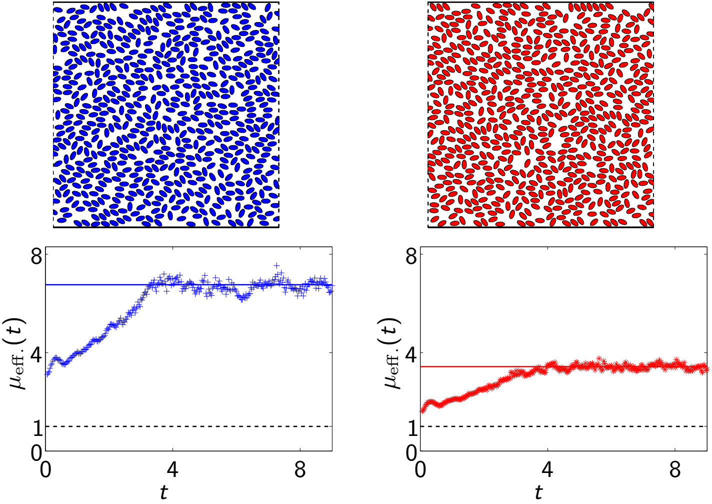


Figure: Viscosité effective d'une suspension de 625 particules (fraction solide : 40%).

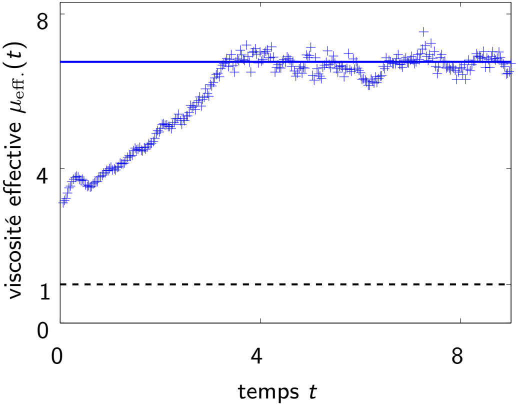


Figure: Viscosité effective d'une suspension de 625 particules rigides dans un fluide visco-élastique. Paramètres : $r = 0.0$ et $\lambda = 0.000$.

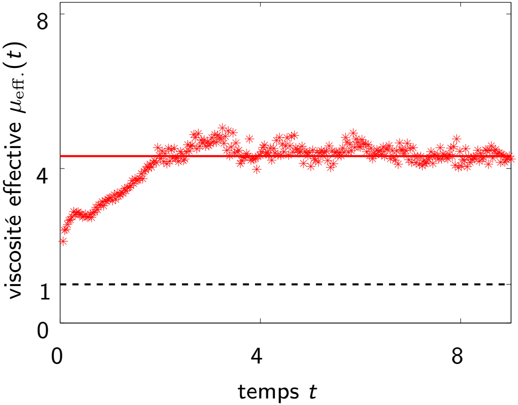


Figure: Viscosité effective d'une suspension de 625 particules rigides dans un fluide visco-élastique. Paramètres : $r = 0.5$ et $\lambda = 0.010$.

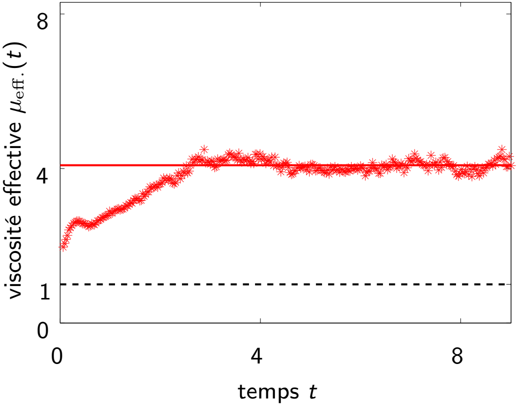


Figure: Viscosité effective d'une suspension de 625 particules rigides dans un fluide visco-élastique. Paramètres : $r = 0.5$ et $\lambda = 0.100$.

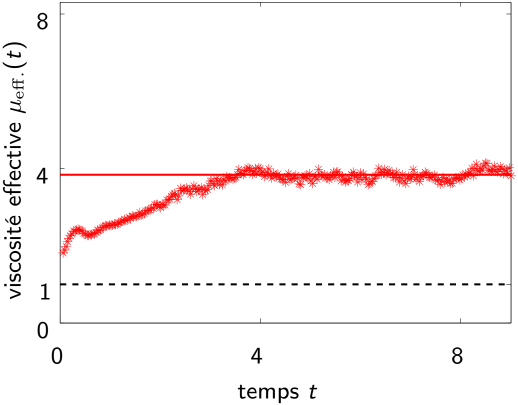


Figure: Viscosité effective d'une suspension de 625 particules rigides dans un fluide visco-élastique. Paramètres : $r = 0.5$ et $\lambda = 0.200$.

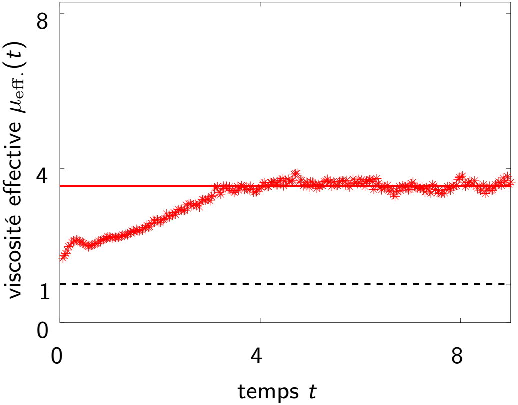


Figure: Viscosité effective d'une suspension de 625 particules rigides dans un fluide visco-élastique. Paramètres : $r = 0.5$ et $\lambda = 0.500$.

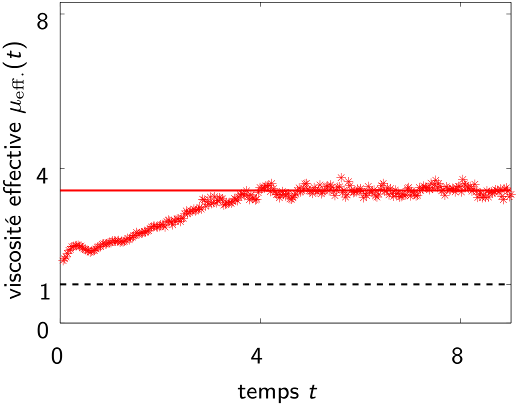


Figure: Viscosité effective d'une suspension de 625 particules rigides dans un fluide visco-élastique. Paramètres : $r = 0.5$ et $\lambda = 1.000$.

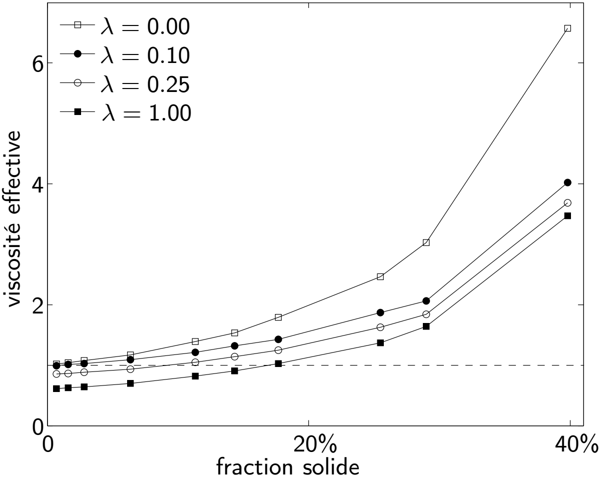


Figure: Influence de la fraction solide sur la viscosité effective d'une suspension de particules rigides dans un fluide visco-élastique.

Conclusions

- Avantages et inconvénients de la pénalisation
- Simulations 3D
- Régimes $\mathrm{We} \gg 1$, $\mathrm{Re} \gg 1$
- *Shear-bending* dans le régime de Johnson-Segalman ($a \neq 0$)
- Applications : transport mucociliaire etc.