

CANUM 29 Mai - 2 Juin 2006

Modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes pour la simulation d'écoulements composés de trois phases

Franck Boyer¹, Céline Lapuerta², Bruno Piar²

IRSN

¹ Laboratoire d'Analyse, Topologie et Probabilités
CNRS/LATP, AIX-MARSEILLE I

² Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire
DPAM/SEMIC/LMPC, Cadarache



1. Introduction

2. Modèle de Cahn-Hilliard triphasique
3. Couplage hydrodynamique et applications numériques
4. Conclusion

Contexte et objectif

Contexte études de sûreté nucléaire

Caractéristiques des écoulements étudiés

- 3 phases non miscibles
(ex. 2 phases liquides stratifiées traversées par un train de bulles)
- sans changement de phase
- propriétés physiques différentes entre les phases
(ex. tensions de surface $\sigma_{12} \neq \sigma_{13} \neq \sigma_{23}$)
- écoulements incompressibles
- forts changements topologiques des interfaces

Objectif calcul du flux thermique à l'interface de deux phases stratifiées dans un écoulement à bulles

⇒ **généralisation d'une méthode à interface diffuse diphasique pour des écoulements de trois phases**

1. Introduction
2. Modèle de Cahn-Hilliard triphasique
3. Couplage hydrodynamique et applications numériques
4. Conclusion

Le cas diphasique

Principe

- interface d'épaisseur non nulle ε
- définition d'un indicateur de phase c (paramètre d'ordre) :

$$\begin{cases} c(x) = 1 & \text{si } x \in \text{à la phase 1} \\ 0 < c(x) < 1 & \text{si } x \in \text{à l'interface} \\ c(x) = 0 & \text{si } x \in \text{à la phase 2} \end{cases}$$

- évolution de $c \rightsquigarrow$ principe de minimum d'une énergie libre

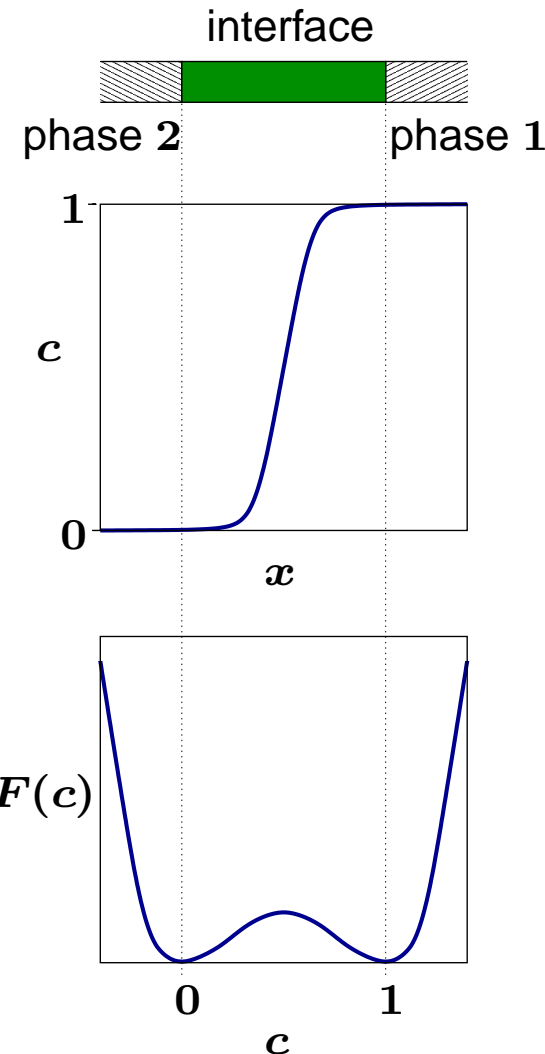
Energie libre

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

- terme non-convexe : $\frac{12}{\varepsilon} F(c) = \frac{12\sigma}{\varepsilon} c^2(1-c)^2$ ($\rightsquigarrow \varepsilon \downarrow$)
- terme capillaire : $\frac{3}{2} \sigma \varepsilon |\nabla c|^2$ ($\rightsquigarrow \varepsilon \uparrow$)

Grandeurs intrinsèques du modèle

σ : tension de surface, ε : épaisseur d'interface



Etablissement du modèle triphasique

Mélange parfait de 3 fluides non miscibles \rightsquigarrow 3 paramètres d'ordre (c_1, c_2, c_3)

Objectifs physiques

- à chaque instant $c_1 + c_2 + c_3 = 1$
- les équations d'évolution de c_1 , c_2 et c_3 doivent être formellement identiques
- si une des phases est absente, nous devons retrouver le modèle diphasique

Forme générale de l'énergie libre $\mathcal{F}_{\Sigma, \epsilon}^{\text{triph}}$

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

- terme non-convexe : $F(c_1, c_2, c_3)$
- trois termes capillaires : $\frac{3}{8} \epsilon \Sigma_i |\nabla c_i|^2$

$\hookrightarrow \Sigma = (\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3)$ et F à déterminer de manière à vérifier la troisième contrainte

Etablissement des équations d'évolution

Principe de minimisation de $\mathcal{F}_{\Sigma, \epsilon}^{\text{triph}}$

équation de flot de gradient de $\mathcal{F}_{\Sigma, \epsilon}^{\text{triph}}$

Contrainte $1 = c_1 + c_2 + c_3$

technique de multiplicateur de Lagrange

Equations d'évolution

- pour $i = 1, 2, 3$

$$\begin{cases} \frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \right), \\ \mu_i = \frac{4\Sigma_T}{\epsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F - \partial_j F) \right) - \frac{3}{4} \epsilon \Sigma_i \Delta c_i. \end{cases}$$

μ_i : inconnue supplémentaire appelée **potentiel chimique généralisé**

M_0 : coefficient de diffusion appelé **mobilité**

- seulement deux équations de Cahn-Hilliard à résoudre $c_3 = 1 - c_1 - c_2$
- conditions de Neumann homogènes sur le bord

\Rightarrow conservation du volume de chaque phase $\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} c_i = 0$

Consistance algébrique

Définition

Le modèle est *algébriquement consistant* avec les systèmes diphasiques sous-jacents si :

(P_1) quand la phase i est absente, l'énergie libre du modèle doit être celle du modèle diphasique,

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

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

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

(P_2) Quand la phase i est absente à l'instant initial, elle ne doit pas apparaître.

Consistance algébrique

Définition

Le modèle est *algébriquement consistant* avec les systèmes diphasiques sous-jacent si :

(P_1) quand la phase i est absente, l'énergie libre du modèle doit être celle du modèle diphasique,

(P_2) quand la phase i est absente à l'instant initial, elle ne doit pas apparaître, *i.e.* toute solution c du système triphasique doit vérifier

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

Consistance algébrique

Définition

Le modèle est *algébriquement consistant* avec les systèmes diphasiques sous-jacent si :

- (P_1) quand la phase i est absente, l'énergie libre du modèle doit être celle du modèle diphasique,
- (P_2) Quand la phase i est absente à l'instant initial, elle ne doit pas apparaître

Théorème

Le modèle de C-H triphasique est *algébriquement consistant* avec les systèmes diphasiques sous-jacents ssi

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

$$F = \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2 + c_1c_2c_3(\Sigma_1c_1 + \Sigma_2c_2 + \Sigma_3c_3) \\ + c_1^2c_2^2c_3^2G(c_1, c_2, c_3) + (c_1 + c_2 + c_3 - 1)H(c_1, c_2, c_3)$$

Lentille piégée entre deux phases

Premiers exemples de fonctions F

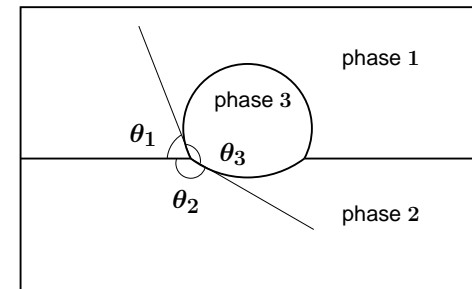
$$\tilde{F}_0(c_1, c_2, c_3) = \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2 \quad \text{ne vérifie pas } (P_1) \text{ et } (P_2)$$

$$F_0(c_1, c_2, c_3) = \tilde{F}_0(c_1, c_2, c_3) + c_1c_2c_3(\Sigma_1c_1 + \Sigma_2c_2 + \Sigma_3c_3)$$

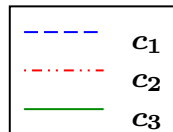
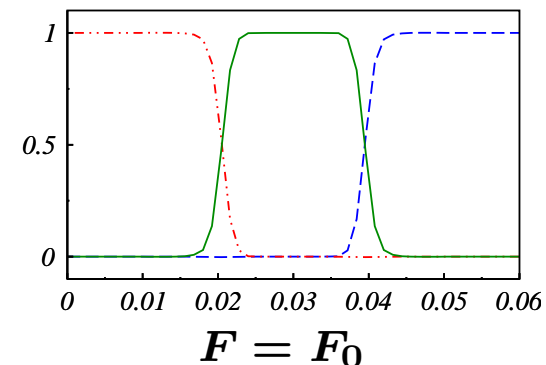
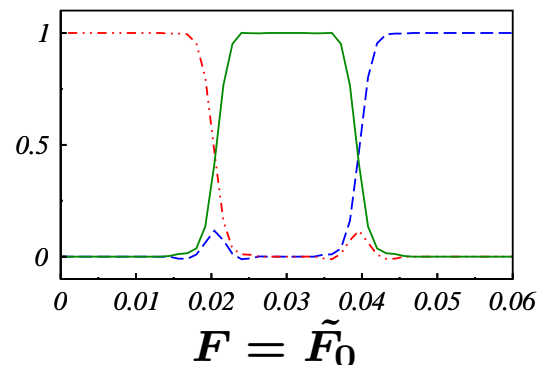
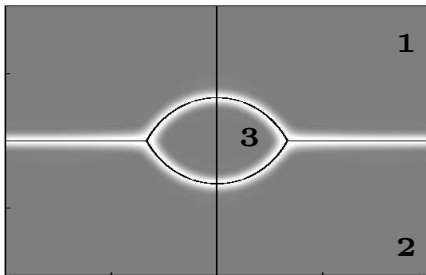
Solution à l'équilibre

la lentille prend la forme de l'intersection entre deux disques et :

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



Résultats vue en coupe verticale de c_1, c_2, c_3 , pour $(\sigma_{12} ; \sigma_{13} ; \sigma_{23}) = (1 ; 1 ; 1)$



Existence et unicité de la solution

Une des hypothèses

F doit être minorée

Théorème

Soient $c_i^0 \in H^1$ données initiales avec $\sum_{i=1}^3 c_i^0 = 1$.

$\exists! (c_i, \mu_i)$ sur $[0, +\infty[$ t.q.

$$c_i \in L^\infty(0, T; H^1) \cap L_{loc}^2(0, T; H^3) \cap C^0([0, T[; H^1) \quad \text{et} \quad \mu_i \in L_{loc}^2(0, T; H^1)$$

Problème

- $F = F_0 = \frac{\Sigma_1}{2} c_1^2 (1 - c_1)^2 + \frac{\Sigma_2}{2} c_2^2 (1 - c_2)^2 + \frac{\Sigma_3}{2} c_3^2 (1 - c_3)^2$

\hookrightarrow Si $\exists \Sigma_i < 0$ alors F n'est pas toujours minorée

- $F = F_\Lambda = F_0 + \Lambda c_1^2 c_2^2 c_3^2$

\hookrightarrow F est minorée pour Λ assez grand ssi $\Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_1 \Sigma_3 + \Sigma_2 \Sigma_3 > 0$

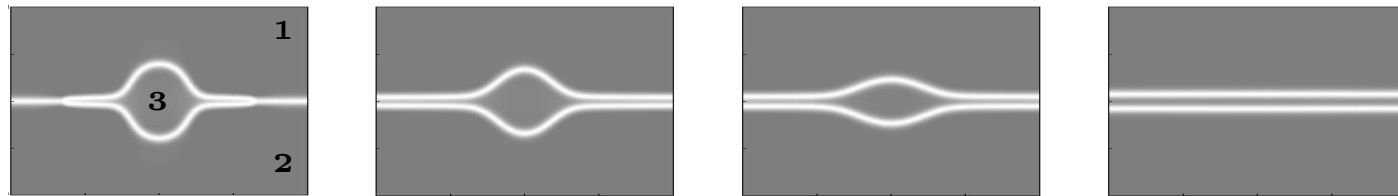
Exemple d'étalement total $\Sigma_i < 0$

Utilisation de F_0

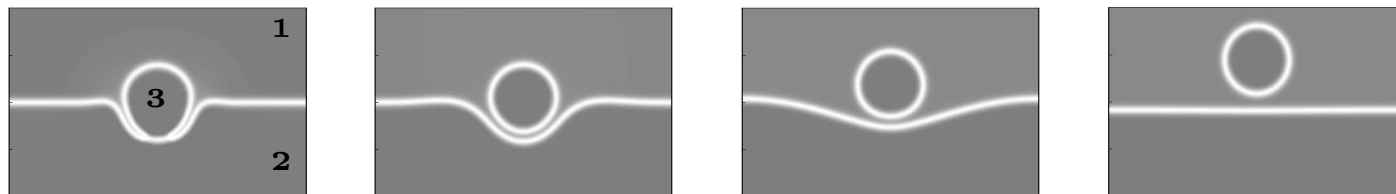
↳ divergence du calcul

Utilisation de F_Λ

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



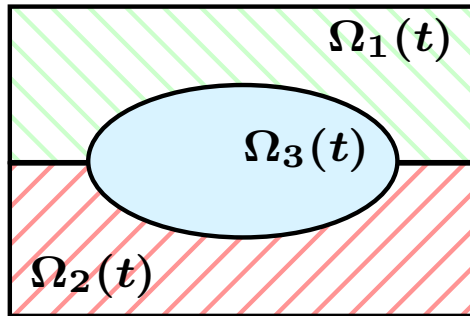
- $(\sigma_{12} ; \sigma_{13} ; \sigma_{23}) = (1 ; 1 ; 3), \Sigma_1 < 0$



1. Introduction
2. Modèle de Cahn-Hilliard triphasique
3. Couplage hydrodynamique et applications numériques
4. Conclusion

Couplage hydrodynamique

Résolution dans tout Ω



régularisation des paramètres en fonction de $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3)$:

- masse volumique $\rho(\mathbf{c})$ en kg.m^{-3}
- viscosité $\eta(\mathbf{c})$ en Pa.s

Equations de Cahn-Hilliard

ajout du terme de transport $(\mathbf{u} \cdot \nabla)c_i$ (\mathbf{u} la vitesse)

Equations de Navier-Stokes

ajout de la force capillaire $F_{ca} = \mu_1 \nabla c_1 + \mu_2 \nabla c_2 + \mu_3 \nabla c_3$

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \\ \rho(\mathbf{c}) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\eta(\mathbf{c})(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^t)) + \rho(\mathbf{c})g + F_{ca} \end{cases}$$

Implémentation avec la plate-forme PELICANS développée à l'IRSN

Semi-discrétisation temporelle

découplage des problèmes de Cahn-Hilliard et Navier-Stokes dans un pas de temps

- résolution des équations de Cahn-Hilliard avec la vitesse d'advection explicite
- résolution des équations de Navier-Stokes en utilisant les valeurs (c_i, μ_i) calculées précédemment

Discrétisation spatiale méthode des éléments finis

- (c_i, μ_i) en $\mathbb{P}_1 / \mathbb{P}_1$
- (\mathbf{u}, p) en \mathbb{P}_1 bulle / \mathbb{P}_1 (éléments vérifiant la condition inf-sup)

Résolution du système discret

- (c_1, μ_1, c_2, μ_2) : méthode de Newton
- (\mathbf{u}, p) : méthode d'Uzawa avec terme d'augmentation, ou méthode de projection

Passage d'une bulle à travers une interface

Comportement de la bulle

- soit elle reste piégée dans l'interface liquide/liquide,
- soit elle pénètre dans la phase légère

Critère sur le volume de la bulle V pour prédire le passage

Greene et al. (1988) proposent

$$V > V^* = \left[\frac{2\pi \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \sigma_{23}}{g(\rho_2 - \rho_1)} \right]^{\frac{3}{2}}$$

Paramètres physiques

	ρ (kg.m ⁻³)	η (Pa.s)
bulle	1	10 ⁻⁴
liquide léger	1000	10 ⁻¹
liquide lourd	1200	1.5 10 ⁻¹

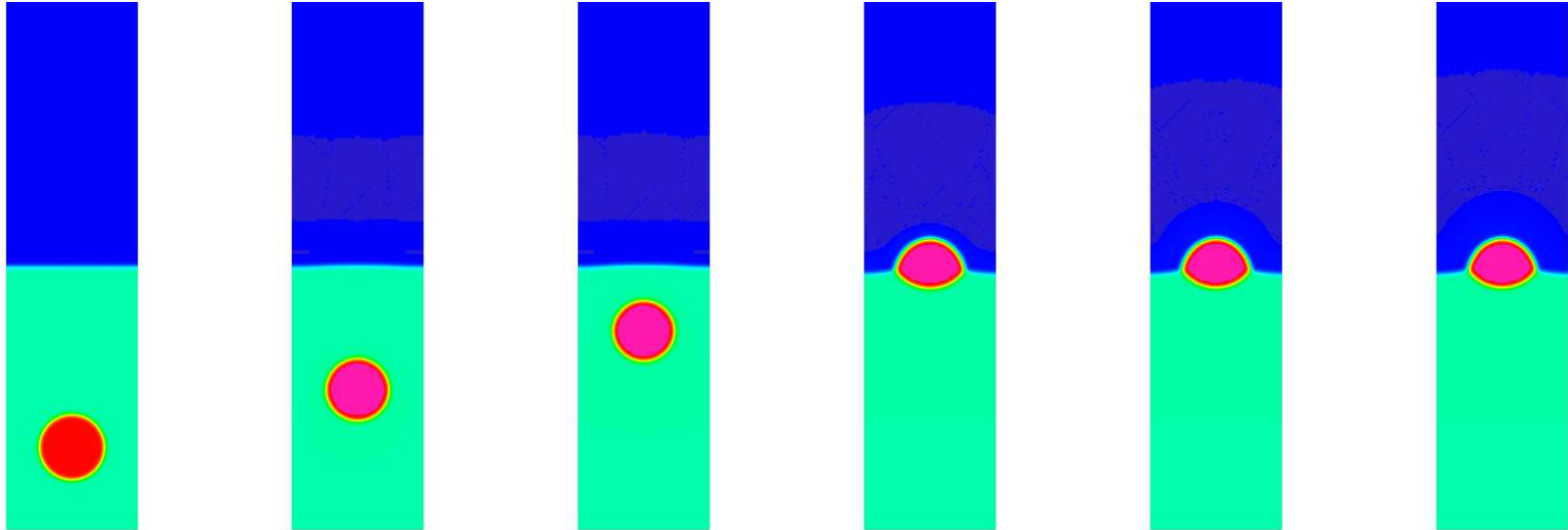
tensions de surface (N.m ⁻¹)	
bulle/liquides σ_{12}, σ_{13}	0.07
liquide léger/liquide lourd σ_{23}	0.05

On trouve $r^* \simeq 2.76\text{mm}$

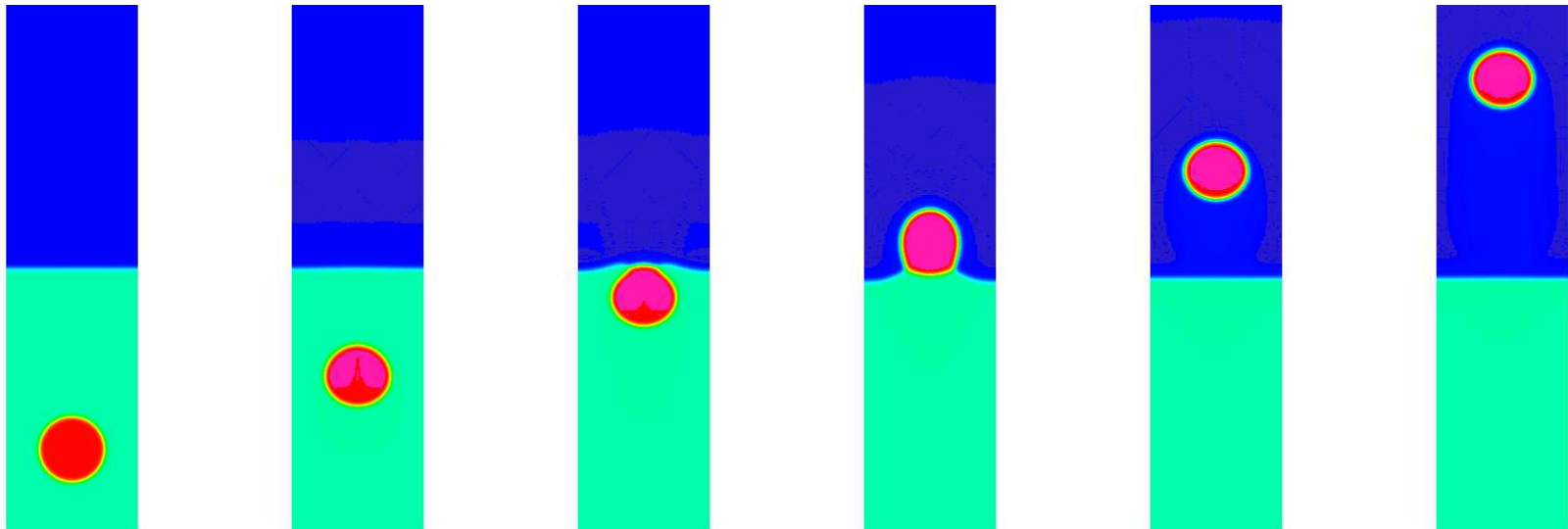
Numériquement, on obtient un rayon critique $r_{\text{num}}^* \simeq 2.6\text{mm}$.

Passage d'une bulle à travers une interface

Situation 1 pour un rayon petit $r = 2\text{mm}$, la bulle est piégée



Situation 2 pour un rayon grand $r = 2.9\text{mm}$, la bulle traverse



Train de bulles

Conditions aux bords

- sur Γ_S :

$$\nabla \mu_i \cdot n = \nabla c_i \cdot n = 0$$

$$-pn + 2\eta D(u)n = 0$$

- sur Γ :

$$\nabla \mu_i \cdot n = \nabla c_i \cdot n = 0$$

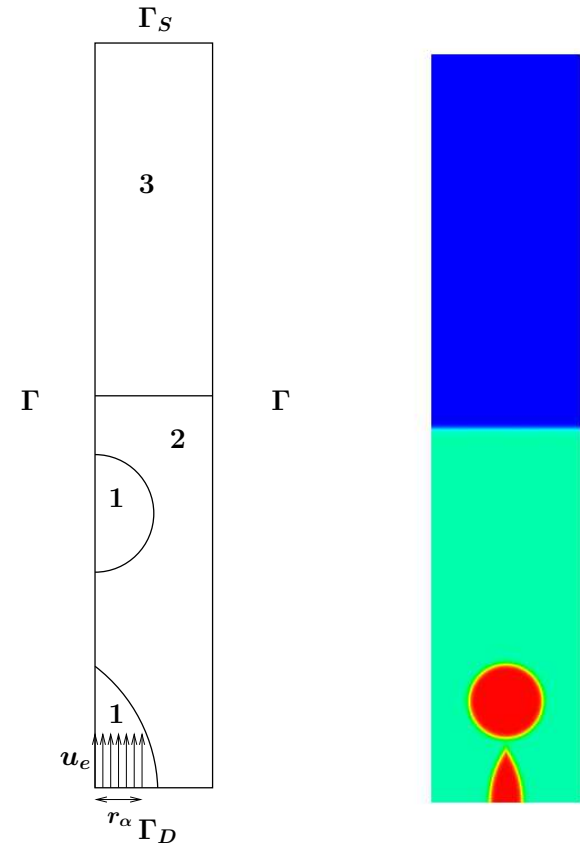
$$u \cdot n = 0 \quad \text{et} \quad (-pn + 2\eta D(u)n) \cdot t = 0$$

- sur Γ_D :

$$\nabla c_i \cdot n = 0$$

$$c_1 = c_{1D}, \quad c_2 = c_{2D} = 1 - c_{1D}, \quad c_3 = 0$$

$$u = \begin{cases} u_e \text{ si } r < r_\alpha, \\ 0 \text{ sinon.} \end{cases}$$



Paramètres physiques

	ρ (kg.m ⁻³)	η (Pa.s)
bulle	1	10 ⁻⁴
liquide léger	1000	10 ⁻¹
liquide lourd	1200	1.5 10 ⁻¹

tensions de surface (N.m ⁻¹)	
bulle/liquides σ_{12}, σ_{13}	0.07
liquide léger/liquide lourd σ_{23}	0.05

1. Introduction
2. Modèle de Cahn-Hilliard triphasique
3. Couplage hydrodynamique et applications numériques
- 4. Conclusion**

Conclusions et perspectives

Conclusions

- extension des modèles de type Cahn-Hilliard au cadre triphasique immiscible
- importance de la propriété de consistance
- résultats numériques satisfaisants

Travaux en cours et perspectives

- amélioration de la méthode numérique pour les calculs 3D
 - raffinement local adaptatif
 - calculs parallèles
- application au cas industriel (études de sûreté nucléaire)
 - prise en compte des écoulements anisothermes
 - ↔ études des échanges de masse et de chaleur, calculs de coefficients d'échange
 - difficultés : tensions de surface grandes, écart de masses volumiques important et faibles viscosités