

CANUM 29 Mai - 2 Juin 2006

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

**Franck Boyer<sup>1</sup>, Céline Lapuerta<sup>2</sup>, Bruno Piar<sup>2</sup>**

**IRSN**

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

<sup>2</sup> 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  $\varepsilon$
- 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

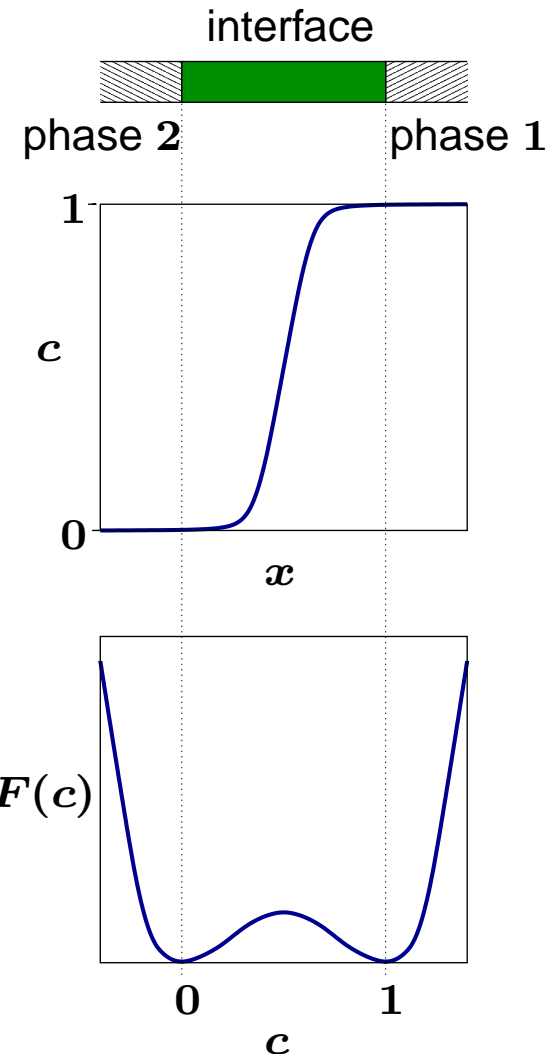
## Energie libre

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

- 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

$\sigma$  : tension de surface,  $\varepsilon$  : 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  $i = 1, 2, 3$

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

$\mu_i$  : 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 $F$

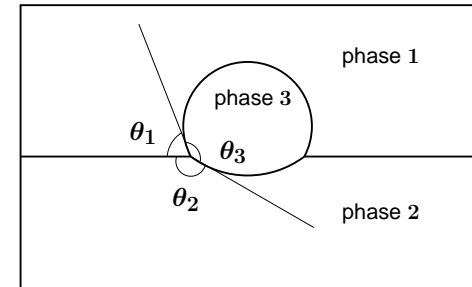
$$\tilde{F}_0(c_1, c_2, c_3) = \sigma_{12}c_1^2c_2^2 + \sigma_{13}c_1^2c_3^2 + \sigma_{23}c_2^2c_3^2 \quad \text{ne vérifie pas } (P_1) \text{ et } (P_2)$$

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

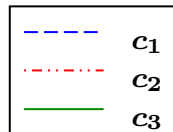
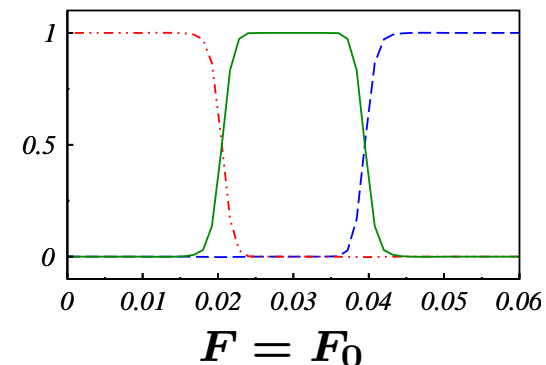
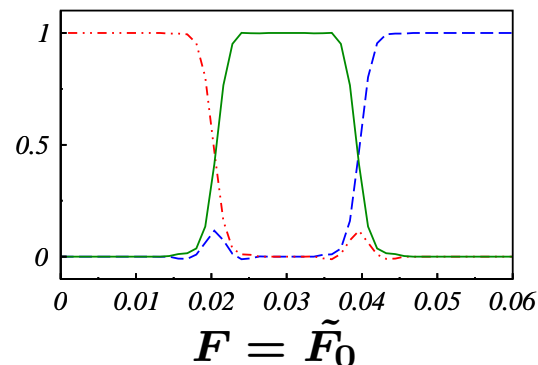
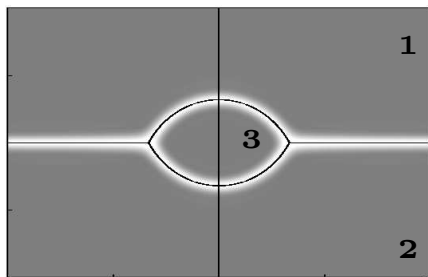
## Solution à l'équilibre

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  $\Lambda$  assez grand ssi  $\Sigma_1 \Sigma_2 + \Sigma_1 \Sigma_3 + \Sigma_2 \Sigma_3 > 0$

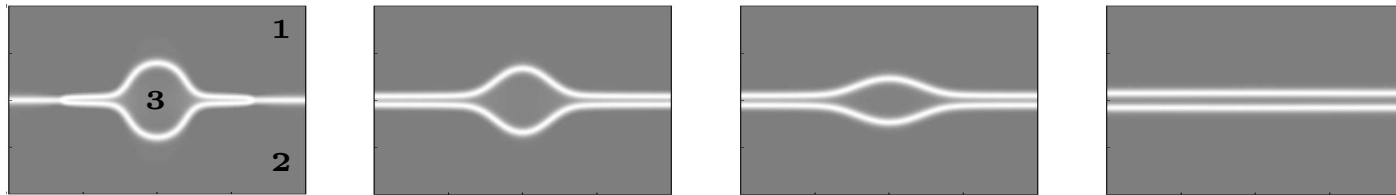
# Exemple d'étalement total $\Sigma_i < 0$

## Utilisation de $F_0$

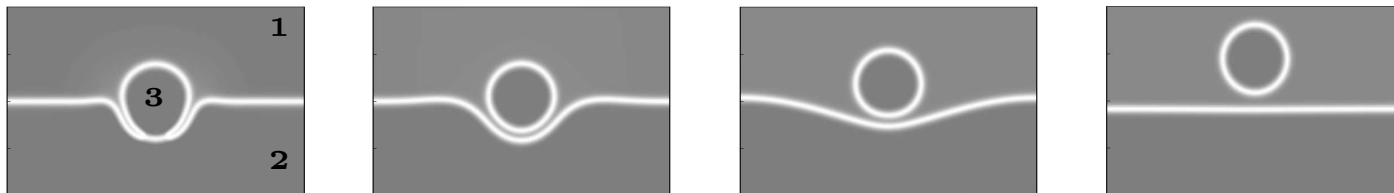
↳ divergence du calcul

## Utilisation de $F_\Lambda$

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



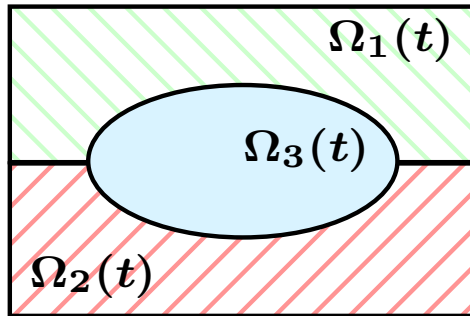
- $(\sigma_{12} ; \sigma_{13} ; \sigma_{23}) = (1 ; 1 ; 3), \Sigma_1 < 0$



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

# Couplage hydrodynamique

## Résolution dans tout $\Omega$



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

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

## Equations de Cahn-Hilliard

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

## Equations de Navier-Stokes

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

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

# Résolution numérique

## 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  $(c_i, \mu_i)$  calculées précédemment

### Discrétisation spatiale    méthode des éléments finis

- $(c_i, \mu_i)$  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

- $(c_1, \mu_1, c_2, \mu_2)$  : 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

	$\rho$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$\eta$ (Pa.s)
bulle	1	10 <sup>-4</sup>
liquide léger	1000	10 <sup>-1</sup>
liquide lourd	1200	1.5 10 <sup>-1</sup>

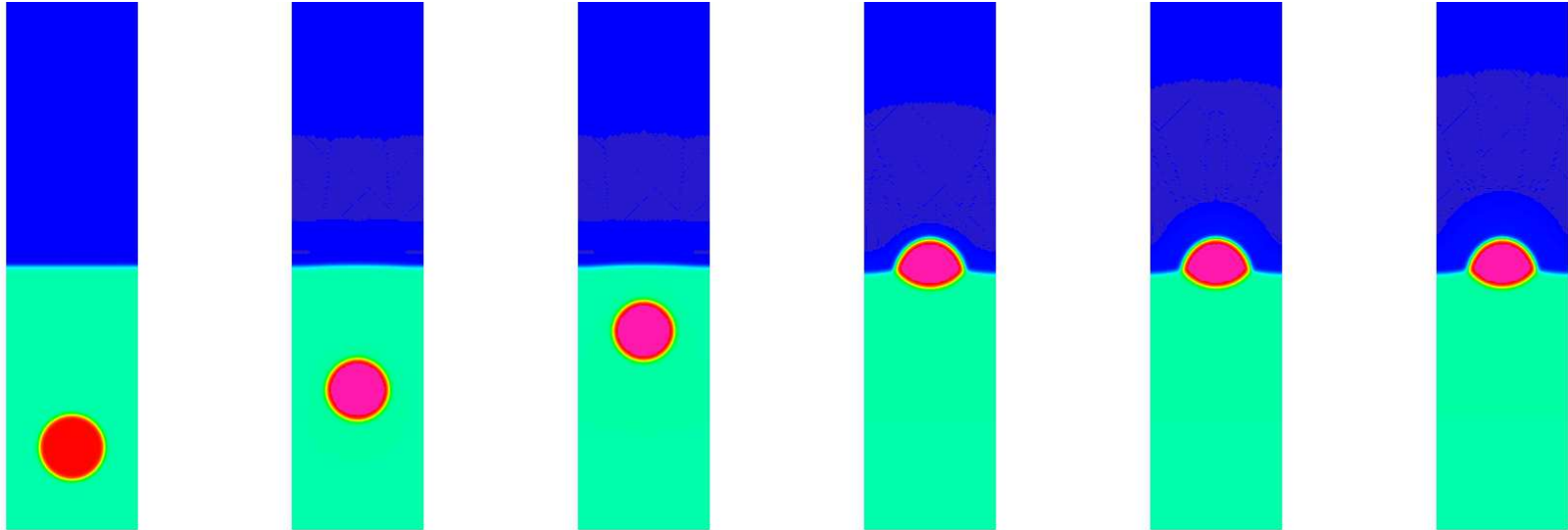
tensions de surface (N.m <sup>-1</sup> )	
bulle/liquides $\sigma_{12}, \sigma_{13}$	0.07
liquide léger/liquide lourd $\sigma_{23}$	0.05

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

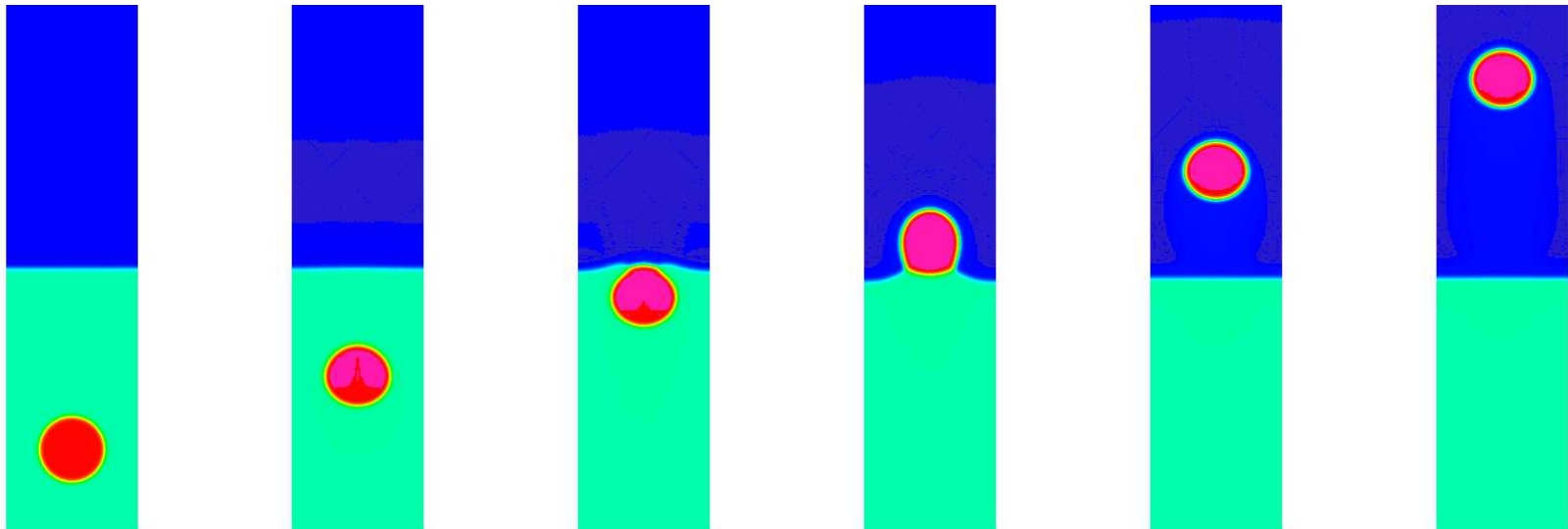
Numériquement, on obtient un rayon critique  $r_{\text{num}}^* \simeq 2.6\text{mm}$ .

# 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  $\Gamma_S$  :

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

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

- sur  $\Gamma$  :

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

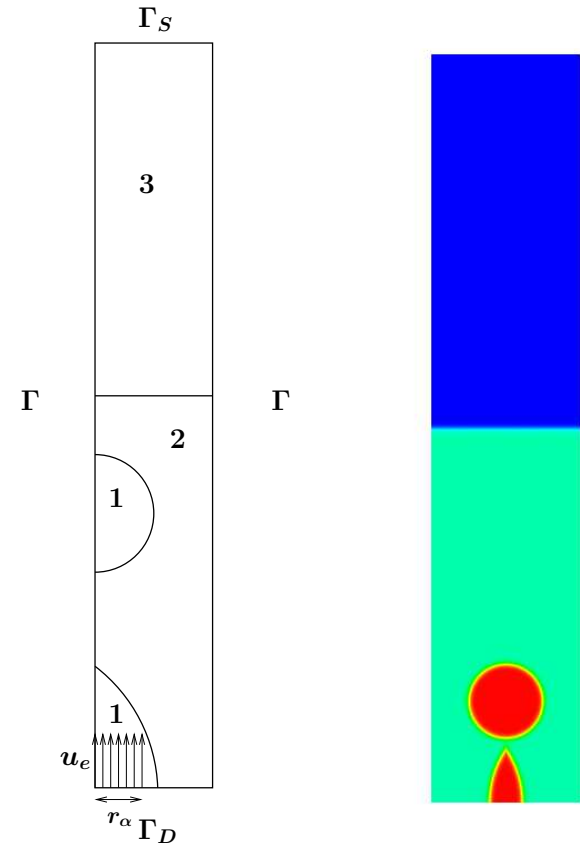
$$u \cdot n = 0 \quad \text{et} \quad (-pn + 2\eta D(u)n) \cdot t = 0$$

- sur  $\Gamma_D$  :

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

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

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



## Paramètres physiques

	$\rho$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$\eta$ (Pa.s)
bulle	1	10 <sup>-4</sup>
liquide léger	1000	10 <sup>-1</sup>
liquide lourd	1200	1.5 10 <sup>-1</sup>

tensions de surface (N.m <sup>-1</sup> )	
bulle/liquides $\sigma_{12}, \sigma_{13}$	0.07
liquide léger/liquide lourd $\sigma_{23}$	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