



HAL
open science

Recent advances in the numerical approximation of non-Newtonian fluid flows: viscoelasticity and viscoplasticity

Pierre Saramito

► **To cite this version:**

Pierre Saramito. Recent advances in the numerical approximation of non-Newtonian fluid flows: viscoelasticity and viscoplasticity. CFM 2007 - 18ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2007, Grenoble, France. hal-03361587

HAL Id: hal-03361587

<https://hal.science/hal-03361587>

Submitted on 1 Oct 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Quelques résultats récents en calcul numérique des écoulements de fluides non-newtoniens : viscoélasticité et viscoplasticité

Pierre Saramito

CNRS

Laboratoire Jean Kuntzmann

B.P. 53, 38041 Grenoble cedex 9, France

mél : Pierre.Saramito@imag.fr

[http : //www-ljk.imag.fr/membres/Pierre.Saramito](http://www-ljk.imag.fr/membres/Pierre.Saramito)

Résumé :

Cette communication est une introduction à quelques méthodes récentes pour la simulation numérique des fluides non-newtoniens viscoplastiques et viscoélastiques. Pour ces deux types de problèmes, on présente des calculs concrets ainsi que des résultats d'estimation d'erreur dans le cadre de la méthode des éléments finis mixtes. Dans la première partie, on considère de nouveaux algorithmes pour l'approximation des écoulements de fluides viscoélastiques à loi de comportement différentielle. Dans une deuxième partie, on développe des méthodes récentes de méthodes d'adaptation automatique de maillages pour la résolution des problèmes viscoplastiques. Enfin, la troisième partie est une introduction à Rheolef, une solution logicielle libre pour la résolution de ce type de problèmes par la méthode des éléments finis.

Abstract :

This communication is an introduction to recent methods for the numerical simulation of non-Newtonian viscoplastic and viscoelastic fluid flows. For both viscoelastic and viscoplastic problems, practical computations and recent error estimates results are presented in the framework of the mixed finite elements method. In the first part of the presentation, new algorithms for the numerical approximation of viscoelastic fluid with a differential constitutive equation are considered. In a second part, some recent auto-adaptive mesh methods for the resolution of viscoplastic problems are developed. The third part of the presentation is an introduction to the Rheolef library, a free software solution for the resolution of such problems with the finite elements method.

Mots-clefs :

Viscoélasticité ; viscoplasticité ; méthode des éléments finis

1 Fluides viscoélastiques

1.1 Introduction

Pour les fluides viscoélastiques à loi de comportement de type Oldroyd (1950), le tenseur des contraintes totales de Cauchy est donné par : $\sigma_{\text{tot}} = -pI + 2\eta_1 D(\mathbf{u}) + \tau$ où p est la pression hydrostatique, \mathbf{u} le champ des vitesses, $D(\mathbf{u}) = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)/2$ le tenseur des taux de déformation, et $\eta_1 > 0$ une première viscosité. Le tenseur τ des contraintes supplémentaires satisfait une loi de comportement de type différentiel :

$$\lambda \overset{\square}{\tau} + \tau - 2\eta_2 D(\mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

où λ est le temps de relaxation, $\eta_2 \geq 0$ est une seconde viscosité et $\overset{\square}{\tau}$ est une notation pour la dérivée d'Oldroyd du tenseur τ :

$$\overset{\square}{\tau} = \frac{\partial \tau}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \tau + W(\mathbf{u})\tau - \tau W(\mathbf{u}) - a(D(\mathbf{u})\tau + \tau D(\mathbf{u}))$$

où $W(\mathbf{u}) = (\nabla\mathbf{u} - \nabla\mathbf{u}^T)/2$ est le tenseur de vorticit  et $a \in [-1, 1]$ est un param tre de la d riv e d'Oldroyd. La loi de comportement (1) est coupl e aux  quations de conservation de la quantit  de mouvement et de la masse :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) - \operatorname{div} \tau - \eta_1 \Delta \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f} \quad (2)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad (3)$$

o  ρ est la densit , suppos e constante ( coulement incompressible). Les  quations (1)-(3)  tant pos es dans un domaine Ω de \mathbb{R}^N , $N = 2, 3$, le probl me aux inconnues (τ, \mathbf{u}, p) est compl t  par des conditions aux limites sur \mathbf{u} , sur le bord entrant pour τ , ainsi que des conditions initiales pour \mathbf{u} et τ . Le cas limite $\lambda = 0$ correspond   un fluide newtonien. Pour $\lambda > 0$, ce mod le permet de d crire des solutions de polym re dans un solvant newtonien ou bien des m langes de polym res. La loi (1) peut s' tendre   d'autres mod les diff rentiels, tels que le mod le de Phan-Thien et Tanner (1977) :

$$\lambda \overset{\square}{\tau} + (1 + \varepsilon \operatorname{tr} \tau) \tau - 2\eta_2 D(\mathbf{u}) = 0$$

o  $\varepsilon \geq 0$ est un param tre du mod le. Ce mod le a l'avantage de pr dire, pour un  coulement en  longation simple, une viscosit   longationnelle croissante (Saramito, 1995, p. 203) et pr sentsant un plateau, analogue   ce qui est observ  pour les solutions de polym res. Par ailleurs ces r sultats peuvent s' tendre   plusieurs temps de relaxation. Ce probl me fait appara tre trois nombres sans dimension principaux : We le nombre de Weissenberg, Re le nombre de Reynolds, ainsi que le param tre $\alpha = \eta_2/(\eta_1 + \eta_2) \in]0, 1]$.

1.2 Algorithme par d composition d'op rateur

Afin de simplifier l'analyse de la m thode num rique propos e, on suppose l' coulement lent, et on n glige dans la suite le terme d'inertie $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ dans (2). Il s'agit d'une hypoth se classique dans ce type de simulation ; la difficult  du probl me porte d sormais sur la non-lin arit  dans l' quation (1) de la d riv e d'Oldroyd. L'id e directrice consiste   s parer les termes de viscosit  des termes de transport. On se ram ne ainsi   r soudre deux sous-probl mes plus simples, l'un de type Stokes, l'autre de type transport du tenseur des contraintes suppl mentaires. Le probl me peut se mettre sous la forme : trouver $\mathcal{U} = (\tau, \mathbf{u})$ tel que :

$$S \frac{d\mathcal{U}}{dt} + A(\mathcal{U}) = \mathcal{F} \quad \text{et} \quad \mathcal{U}(0) = \mathcal{U}_0$$

o  $S = \operatorname{diag}(We, Re)$, $\mathcal{F} = (0, f)^t$, $\mathcal{U}_0 = (\tau_0, \mathbf{u}_0)^t$ et $A(\mathcal{U}) = A_1(\mathcal{U}) + A_2(\mathcal{U}; \mathcal{U})$ est donn  par la d composition suivante :

$$A_1(\tau, \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \nu \tau & -2\alpha D(\mathbf{u}) \\ -\operatorname{div} \tau & -(1-\alpha)P\Delta \mathbf{u} \end{bmatrix} ; \quad A_2(\sigma, \mathbf{v}; \tau, \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \nu' \tau + We T(\mathbf{v})\tau \\ 0 \end{bmatrix}$$

o  $\nu' = 1 - \nu$ et $\nu \in [0, 1]$ est un param tre de la d composition et $P\Delta$ repr sente l'op rateur de Stokes. Dans la d composition pr c dente, $T(\mathbf{v})$ d signe l'op rateur de transport : $T(\mathbf{v})\tau = \mathbf{v} \cdot \nabla \tau + W(\mathbf{v})\tau - \tau W(\mathbf{v}) - a(D(\mathbf{v})\tau + \tau D(\mathbf{v}))$. Inspir  par les travaux de Glowinski (1986) sur les  quations de Navier-Stokes, introduisons   pr sent l'approximation en temps du probl me. Soit $\Delta t > 0$ un pas de temps et θ un param tre, $\theta \in]0, 1/2[$. Consid rons

les notations $\theta' = 1 - 2\theta$, $\mathcal{U}^0 = \mathcal{U}_0$ et $\mathcal{U}^{n+\delta} \approx \mathcal{U}((n+\delta)\Delta t)$. Puisque A_1 et A_2 sont plus simples que A , utilisons cette décomposition pour résoudre le problème par le θ -schéma :

$$\frac{S\mathcal{U}^{n+\theta} - S\mathcal{U}^n}{\theta\Delta t} + A_1(\mathcal{U}^{n+\theta}) + A_2(\mathcal{U}^n; \mathcal{U}^n) = \mathcal{F}^{n+\theta} \quad (4)$$

$$\frac{S\mathcal{U}^{n+1-\theta} - S\mathcal{U}^{n+\theta}}{\theta'\Delta t} + A_1(\mathcal{U}^{n+\theta}) + A_2(\mathcal{U}^n; \mathcal{U}^{n+1-\theta}) = \mathcal{F}^{n+1-\theta} \quad (5)$$

$$\frac{S\mathcal{U}^{n+1} - S\mathcal{U}^{n+1-\theta}}{\theta\Delta t} + A_1(\mathcal{U}^{n+1}) + A_2(\mathcal{U}^n; \mathcal{U}^{n+1-\theta}) = \mathcal{F}^{n+1} \quad (6)$$

La résolution de (4) et (6) se réduit à celle d'un problème de type Stokes, et la résolution de (5), à celle d'un problème de type transport pour l'opérateur $I + \beta T(\mathbf{v})$, avec $\beta > 0$. Pour les aspects pratiques de la programmation de l'algorithme, voir Saramito (1994, 1995).

1.3 Propriétés élongationnelles et recirculations

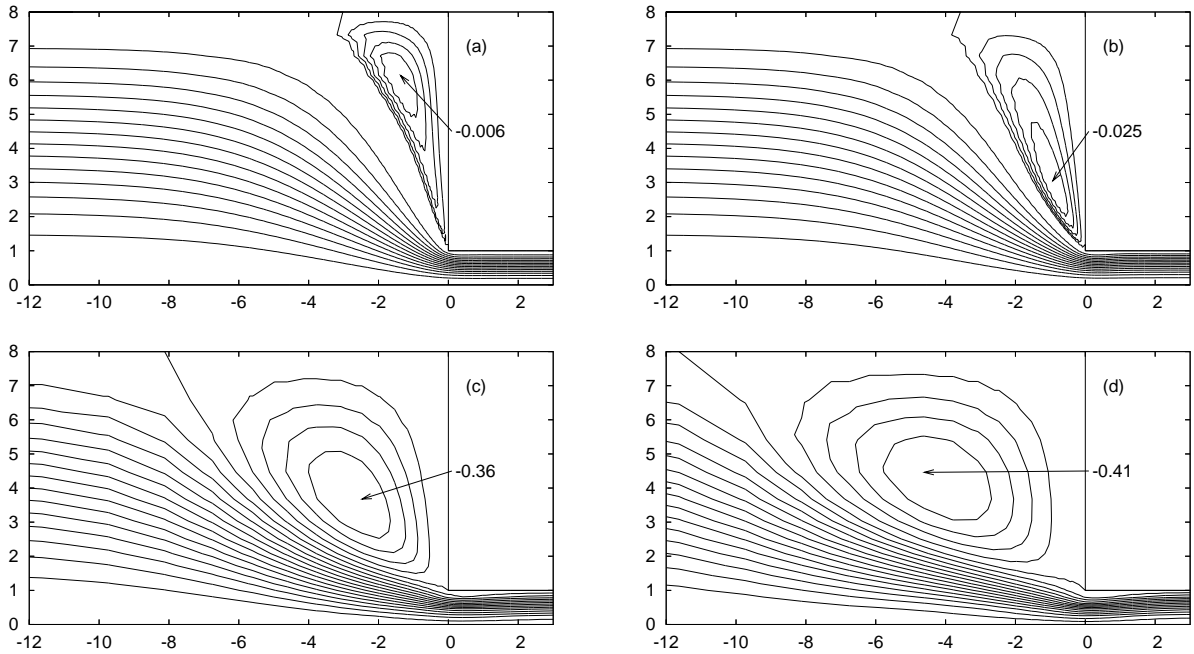


FIG. 1 – Modèle de Phan-Thien Tanner : (a) $We=2$; (b) $We=4.6$; (c) $We=14$; (d) $We=69$.

Le problème-test de l'écoulement viscoélastique en contraction brusque possède l'avantage de mettre en évidence le comportement du modèle sur une très large gamme de taux de déformation : l'écoulement est élongationnel le long de l'axe et cisailé près des parois. De plus, la singularité due au coin ré-entrant sollicite le modèle dans la plage des très grandes déformation et contraintes. La FIG. 1 présente la branche de solution pour des valeurs croissantes du nombre de Weissenberg et $\varepsilon = 5 \times 10^{-4}$, ce pour une géométrie à contraction brusque axisymétrique. Ce calcul met en évidence le développement d'une zone de recirculation située dans la partie amont de l'écoulement, cette zone tendant asymptotiquement vers une taille maximale (FIG. 1.d) pour les grandes valeurs de We . Ces résultats mettent en évidence les mécanismes de développement des recirculations et leur corrélation avec les propriétés élongationnelles du matériau. Pour une extension de ces travaux, notamment au calcul de la correction de Couette, c'est-à-dire la perte de pression due à la contraction, voir Saramito *et al.* (1994).

2 Fluides viscoplastiques

Les modèles viscoplastiques deviennent difficiles à résoudre lorsque le nombre sans dimension de Bingham, noté Bi (nombre sans dimension mesurant les effets de seuil de plasticité dus aux micro-structures de type agrégats) devient grand. En effet, des zones rigides apparaissent, et la solution à la traversée des frontières de séparation entre les zones rigides et les zones déformées est peu régulière. Aussi les méthodes d'approximation numériques utilisées jusqu'à récemment concentraient des erreurs de calcul dans les régions au voisinage de ces frontières. En conséquence, les zones rigides étaient mal identifiées. Une autre source d'erreur venait du fait que la plupart des auteurs remplaçaient le problème viscoplastique singulier par un problème régularisé mais ne présentant plus de zones rigides : c'est le cas par exemple par exemple des modèles dit *bi-visqueux*. Dans ce cas, la localisation des frontières s'en trouve d'autant plus perturbée. Dans Saramito et Roquet (2001), on introduit une méthode d'adaptation de maillage combinée à un algorithme de Lagrangien augmenté qui permet de résoudre rigoureusement ce problème difficile pour obtenir pour la première fois les contours corrects des zones rigides dans un écoulement de Poiseuille en section carrée. Pour un écoulement plus complexe autour d'un

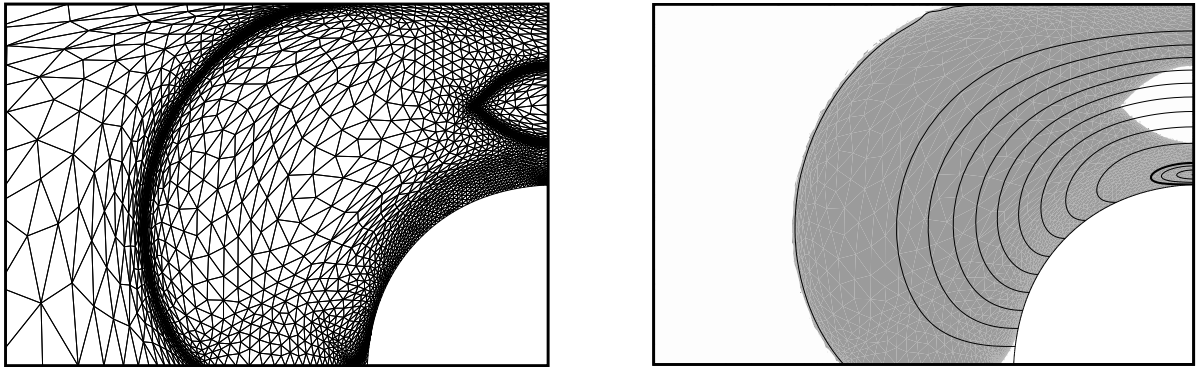


FIG. 2 – *Matériau viscoplastique en grandes déformations autour d'un cylindre : à gauche, le maillage adapté, à droite, trajectoires et, en grisé, localisation de la zone déformée Roquet et Saramito (2003).*

cylindre (voir Fig. 2), nous avons montré dans Roquet et Saramito (2003) que les simulations proposées jusque là étaient également entachées d'erreurs importantes et avaient conduit à des interprétations fausses : ainsi la zone en forme d'amande sur la Fig. 2 n'avait jamais encore auparavant été mise en évidence.

3 Introduction à Rheolef

Le développement de la librairie Rheolef (Saramito *et al.* (2007)) est issu du constat qu'il n'existait pas d'environnement logiciel satisfaisant pour la simulation numérique des fluides non-newtoniens. L'interface s'appuie sur la formulation variationnelle du problème à résoudre. En plus des notions de **maillage** et de **matrice creuse** apparaissant habituellement dans ce type de code, nous avons introduit les notions d'**espace** d'approximation, de **forme** bilinéaire et de **champs**. À titre d'exemple, considérons le très classique problème de Poisson avec une condition de Dirichlet homogène sur le bord dans un ouvert borné $\Omega \subset \mathbb{R}^N$, $N = 1, 2, 3$.

(P) : trouver u , défini dans Ω , telle que : $-\Delta u = 1$ dans Ω et $u = 0$ sur $\partial\Omega$,
dont la formulation variationnelle s'écrit :

$$(FV) : \text{trouver } u \in H_0^1(\Omega) \text{ tel que : } a(u, v) = m(1, v), \forall v \in H_0^1(\Omega),$$

où les formes bilinéaires $a(.,.)$ et $m(.,.)$ sont définies pour tout $u, v \in H_0^1(\Omega)$ par :

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx \quad \text{et} \quad m(u, v) = \int_{\Omega} uv \, dx.$$

La forme $a(.,.)$ définit un produit scalaire dans $H_0^1(\Omega)$ et est appelée forme d'**énergie**. Elle est

```
#include "rheolef/rheolef.h"
int main (int argc, char**argv) {
    geo omega (argv[1]);
    space Vh (omega, argv[2]);
    Vh.block ("boundary");
    form a (Vh, Vh, "grad_grad");
    form m (Vh, Vh, "mass");
    field fh (Vh, 1);
    field uh (Vh);
    uh ["boundary"] = 0;
    ssk<Float> fact = ldlt(a.uu);
    uh.u = fact.solve (m.uu*fh.u + m.ub*fh.b - a.ub*uh.b);
    cout << uh;
    return 0;
}
```

FIG. 3 – Résolution du problème de Poisson avec la librairie Rheolef.

associée à l'opérateur $-\Delta$. La forme $m(.,.)$ est ici simplement le produit scalaire de $L^2(\Omega)$, et est appelée forme de **masse**. L'approximation par éléments finis de Lagrange s'obtient en introduisant \mathcal{T}_h , un maillage de Ω et V_h , le sous-espace de $H_0^1(\Omega)$ des fonctions continues, polynomiales par morceaux de degré $k \leq 1$: $V_h = \{v \in H_0^1(\Omega); v|_K \in P_k, \forall K \in \mathcal{T}_h\}$. Le problème approché s'énonce :

$(FV)_h$: trouver $u_h \in V_h$ tel que : $a(u_h, v_h) = m(1, v_h), \forall v_h \in V_h$. Le code C++ de la FIG. 3 met en œuvre la résolution du problème de Poisson dans l'environnement Rheolef. Ce code s'applique pour des maillages en dimension un, deux et trois, et pour des approximations par éléments finis linéaires ou quadratiques par morceaux. La Fig. 4 représente des coupes et isosurfaces de la solution en dimension trois, ainsi que deux rendus volumiques du type lancer de rayon. Les problèmes linéaires standards de la mécanique sont aussi traités : problème de Stokes et système de l'élasticité. Ces problèmes sont les fondements de la plupart des modèles non-linéaires de la mécanique. Le lecteur intéressé pourra consulter le guide de l'utilisateur (Saramito *et al.* (2007)). Soulignons enfin l'extrême concision de l'interface : le code présenté dans ce guide, et permettant de résoudre le problème du talus en élasticité linéaire bi- ou tri-dimensionnelle, représente seulement 27 lignes de C++ dans sa version sans adaptation de maillage, et 52 lignes avec adaptation automatique de maillage.

Références

- R. Glowinski (1986). Numerical methods for the numerical solution of the incompressible Navier-Sokes equations. In *Vistas in Applied Mathematics, Optimization Software*, pages 57–95, New York.

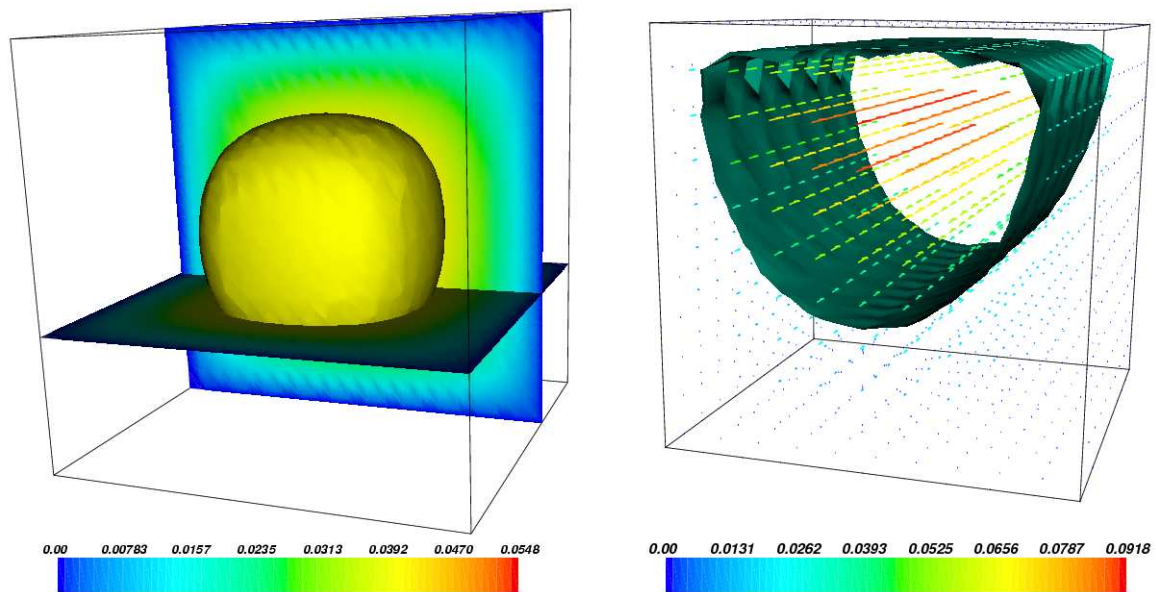


FIG. 4 – Rheolef : visualisation de la solution (gauche) du problème de Poisson ; (droite) de la cavité entraînée.

- J. G. Oldroyd (1950). On the formulation of rheological equations of states. *Proc. Roy. Soc., London*, A 200 :523–541.
- N. Phan-Thien and R. I. Tanner (1977). A new constitutive equation derived from network theory. *J. Non Newtonian Fluid Mech.*, 2 :353–365.
- N. Roquet and P. Saramito (2003). An adaptive finite element method for Bingham fluid flows around a cylinder. *Comput. Appl. Meth. Mech. Engrg.*, 192(31-32) :3317–3341.
- P. Saramito (1994). Numerical simulation of viscoelastic fluid flows using incompressible finite element method and a θ -method. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 28 :1–35.
- P. Saramito (1995). Efficient simulation of nonlinear viscoelastic fluid flows. *J. Non Newtonian Fluid Mech.*, 60 :199–223.
- P. Saramito and J.-M. Piau (1994). Flow characteristics of viscoelastic fluids in an abrupt contraction by using numerical modeling. *J. Non Newtonian Fluid Mech.*, 52 :263–288.
- P. Saramito and N. Roquet (2001). An adaptive finite element method for viscoplastic fluid flows in pipes. *Comput. Meth. Applied Mech. Engrg.*, 190(40-41) :5391–5412.
- P. Saramito, N. Roquet, and J. Étienne (2007). *Efficient advanced scientific computing with Rheolef*. <http://www-ljk.imag.fr/membres/Pierre.Saramito/rheolef.pdf>.
- P. Saramito, N. Roquet, and J. Étienne (2007). *Rheolef : a finite element environment*. <http://www-ljk.imag.fr/membres/Pierre.Saramito/rheolef>.