Décomposition d'opérateurs pour des fluides à loi de comportement de type différentiel

Pierre SARAMITO

December 6, 1996

1 Lois de comportement

Considérons les fluides viscoélastiques à loi de comportement de type Oldroyd [?], gouvernés par les équations suivantes :

$$We\left(\frac{\partial \tau}{\partial t}+\mathbf{u}.\nabla\tau+\beta_a(\tau,\nabla\mathbf{u})\right) + \tau - 2\alpha D(\mathbf{u}) = 0 \quad \text{dans } \Omega \qquad (1)$$

$$Re\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}+\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}\right) - \mathbf{div}\,\tau - (1-\alpha)\Delta\mathbf{u}+\nabla p = f \quad \text{dans } \Omega \qquad (2)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{u} = 0 \quad \text{dans } \Omega \qquad (3)$$

où Ω est un domaine régulier de $\mathbb{R}^N$, $N=2,3$, τ est le tenseur des extra-contraintes, les contraintes totales étant données par $\sigma=-pI+2(1-\alpha)D(u)+\tau$, $\mathbf{u}$ est le champ des vitesses, et p est la pression hydrostatique ; $\beta_a(\tau,\nabla\mathbf{u}) = W\tau-\tau W-a(D\tau+\tau D)$, où $a\in[-1,1]$, $D=(1/2)(\nabla\mathbf{u}+\nabla\mathbf{u}^t)$ est le tenseur des taux de déformation et $W=(1/2)(\nabla\mathbf{u}-\nabla\mathbf{u}^t)$ est le tenseur de vorticité ; enfin, $f\in(L^2(\Omega))^N$ est une donnée, We est le nombre sans dimension de Weissenberg, Re le nombre de Reynolds, et $\alpha\in]0,1]$ un paramètre de retard.

Remarquons que le cas limite $We=0$ correspond à un fluide newtonien. Pour $We>0$, ce modèle permet de décrire des solutions de polymères dans un solvant newtonien. Cette loi peut s'étendre aux modèles différentiels, tels que le modèle de Phan-Thien et Tanner [?] de Giesekus [?], ou bien à plusieurs temps de relaxation.

Ces équations peuvent être complétées par des conditions initiales $\tau(0)=\tau_0$ et $\mathbf{u}(0)=\mathbf{u}_0$, ainsi qu'une condition aux bords $\mathbf{u}=0$ sur $\Gamma=\partial\Omega$. Lorsque la frontière Γ est régulière, et $\mathbf{u}_0$, τ_0 et f sont suffisament petits, on montre alors dans [?] l'existence globale de solutions.

2 Décomposition du problème

Afin de simplifier l'analyse des méthodes numériques proposées, nous supposerons le fluide lent, et négligerons dans la suite le terme d'inertie $\mathbf{u}.\nabla\mathbf{u}$ dans (??). Il s'agit d'une hypothèse classique dans ce type de simulation ; la difficulté du problème est désormais portée par la non-linéarité de l'équation (??).

Soit $\mathbf{n}$ la normale unitaire extérieure à Γ. Introduisons les espaces classiques :

$$\begin{aligned} T &= \{\tau \in L^2(\Omega)^{N\times N};\ \tau = \tau^t\} \\ V &= \{\mathbf{u} \in H_0^1(\Omega)^N;\ \mathrm{div}\,\mathbf{u} = 0\},\quad \text{de norme } \|\,.\,\| \\ H &= \{\mathbf{u} \in L^2(\Omega)^N;\ \mathrm{div}\,\mathbf{u} = 0,\ \mathbf{u}.\mathbf{n}_\Gamma = 0\} \end{aligned}$$

où T et H sont munis de la norme $|.|$. Nous noterons indifféremment $(.,.)$ et $|.|$ les normes et produits scalaires de $L^2(\Omega)^{N\times N}$ et $L^2(\Omega)^N$. Le problème précédent peut alors se mettre sous la forme :

(P): trouver $\mathcal{U} = (\tau, \mathbf{u}) \in L^\infty(\mathbb{R}^+; T \times V)$ tel que :

$$\left\{ \begin{array}{rl} S\dfrac{d\mathcal{U}}{dt} + A(\mathcal{U}) & = \mathcal{F} \\ \mathcal{U}(0) & = \mathcal{U}_0 \end{array} \right. \tag{4}$$

où $S = \mathrm{diag}\,(We,\, Re)$, $\mathcal{F} = (0, f)^t$, $\mathcal{U}_0 = (\tau_0, \mathbf{u}_0)^t$ et $A(\mathcal{U}) = A_1(\mathcal{U}) + A_2(\mathcal{U};\, \mathcal{U})$, défini de $T \times V$ dans $T' \times V'$, est donné par la décomposition suivante :

$$A_1(\tau, \mathbf{u}) = \left[\begin{array}{ccc} \nu\,\tau & - & 2\alpha D(\mathbf{u}) \\ -\mathbf{div}\,\tau & - & (1-\alpha)\Delta\mathbf{u} \end{array} \right] \tag{5}$$

$$A_2(\sigma, \mathbf{v};\, \tau, \mathbf{u}) = \left[\begin{array}{c} \nu'\,\tau + We\mathrm{T}(\mathbf{v})\tau \\ 0 \end{array} \right] \tag{6}$$

où $\nu' = 1 - \nu$ et $\nu \in\ [0,1]$ est un paramètre de la décomposition. Dans (??), $\mathrm{T}(\mathbf{v})$ désigne l'opérateur de transport des contraintes : $\mathrm{T}(\mathbf{v})\tau = \mathbf{v}.\nabla\tau + \beta_a(\tau, \nabla\mathbf{v})$. Remarquons que léquation (??) prend ici un sens faible, dans V'. Cette formulation permet aussi de réduire le problème à la recherche de τ et $\mathbf{u}$.

Introduisons à présent la semi-approximation de (P). Soit $\Delta t > 0$ un pas de temps et θ un paramètre, $\theta \in\,]0, \frac{1}{2}[$. Introduisons les notations $\mathcal{U}^0 = \mathcal{U}_0$ 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 (P) par le θ-schéma suivant (voir [?], par exemple) :

$$\frac{S\mathcal{U}^{n+\theta} - S\mathcal{U}^n}{\theta\Delta t} + A_1(\mathcal{U}^{n+\theta}) + A_2(\mathcal{U}^n;\, \mathcal{U}^n) = \mathcal{F}^{n+\theta} \tag{7}$$

$$\frac{S\mathcal{U}^{n+1-\theta} - S\mathcal{U}^{n+\theta}}{\theta'\Delta t} + A_1(\mathcal{U}^{n+\theta}) + A_2(\mathcal{U}^n;\, \mathcal{U}^{n+1-\theta}) = \mathcal{F}^{n+1-\theta} \tag{8}$$

$$\frac{S\mathcal{U}^{n+1} - S\mathcal{U}^{n+1-\theta}}{\theta\Delta t} + A_1(\mathcal{U}^{n+1}) + A_2(\mathcal{U}^n;\, \mathcal{U}^{n+1-\theta}) = \mathcal{F}^{n+1} \tag{9}$$

où $\theta' = 1 - 2\theta$.

Proposition 1 (*cas newtonien*)
Pour $We = 0$, le schéma (??)-(??) est inconditionnellement stable et du premier ordre en temps. De plus, la méthode est d'ordre deux en temps pour $\theta = 1 - 1/\sqrt{2}$.

Indication sur la démonstration – Etudions le cas $\nu = 1$. Le problème étant linéaire, on se rammène au cas $f = 0$. Soit $(\mathbf{w}_m, \lambda_m)_{m\geq 0}$, le couple d'éléments propres associée à l'opérateur de Stokes : $(\nabla\mathbf{w}_m,\, \nabla\mathbf{v}) = \lambda_m\,(\mathbf{w}_m,\, \mathbf{v})$, $\forall\mathbf{v} \in V$; $(\mathbf{w}_m)$ est une base de V, orthonormale dans H. Introduisons la décomposition $\mathbf{u}^{n+\delta} = \sum_{m=0}^{\infty} u_m^{n+\delta}\mathbf{w}_m$. De (??)-(??), il vient : $u_m^{n+1} = r(\lambda_m\Delta t/Re)\,u_m^n$, où on a posé :

$$r(x) = \frac{1 - \theta' x}{(1+\theta x)^2}$$

La solution exacte du problème se décompose selon : $\mathbf{u}(t) = \sum_{m=0}^{\infty} u_m(t)\mathbf{w}_m$, où $u_m(t) = u_m(0)\exp(-\lambda_m t/Re)$. Le développement limité :

$$e^x - r(x) = (2\theta^2 - 4\theta + 1)\,\frac{x^2}{2} \;+\; x^2\,\eta(x)$$

avec $\lim_{x\to 0}\eta(x) = 0$ permet d'obtenir le résultat de convergence au premier ordre, et au second ordre pour $\theta = 1 - 1/\sqrt{2}$. La stabilité découle de $|r(x)| < 1$, $\forall x \in \mathbb{R}^+$. La démonstration pour $\nu \neq 1$ est semblable, en introduisant $\gamma_m = D(\mathbf{w}_m)$. Remarquons que $\lim_{x\to\infty} r(x) = 0$, ce qui assure la décroissance rapide de la contribution haute fréquence à l'erreur, et la convergence rapide vers la solution stationnaire pour les grands pas de temps. □

Remarque 1 – La résolution de (??) et (??) se réduit à celle d'un problème de type Stokes pour l'opérateur $\epsilon I - P\Delta$, avec $\epsilon > 0$, et la résolution de (??), à celle d'un problème de type transport pour l'opérateur $\epsilon' I + \mathrm{T}(\mathbf{v})$, avec $\epsilon' > 0$.

Remarque 2 – Aucun résultat n'a été établi à présent dans le cas viscoélastique ($We > 0$). Numériquement, l'algorithme (??)-(??) est bien adapté à la recherche des solutions stationnaire, la vitesse de converge dépend alors de θ et Δt. Les exemples qui suivent abordent le cas viscoélastique.

3 Exemples

3.1 Elongation uniaxiale

Le tenseur gradient de vitesse est donné par $\nabla\mathbf{u} = \mathrm{diag}(\dot\varepsilon, -\dot\varepsilon/2, -\dot\varepsilon/2)$, où $\dot\varepsilon > 0$ est le taux d'élongation (sans dimension). Le problème se ramène à trouver τ_{11}, τ_{22} et τ_{33} dans $L^\infty(\mathbb{R}^+)$ statisfaisant à :

$$\begin{aligned}
We\frac{d\tau_{11}}{dt} &+ (1 - 2a\dot\varepsilon We)\,\tau_{11} - 2\alpha\dot\varepsilon &= 0\\
We\frac{d\tau_{22}}{dt} &+ (1 + a\dot\varepsilon We)\,\tau_{22} + \alpha\dot\varepsilon &= 0\\
We\frac{d\tau_{33}}{dt} &+ (1 + a\dot\varepsilon We)\,\tau_{33} + \alpha\dot\varepsilon &= 0
\end{aligned}$$

avec $\tau(0) = 0$, par exemple, pour un démarrage en élongation. Les valeurs propres du problème sont $\lambda_1 = 1/We - 2a\dot\varepsilon$ et $\lambda_2 = \lambda_3 = 1/We + a\dot\varepsilon$, et la solution τ^* obtenue pour $\partial/\partial t = 0$ n'est stable que pour $a\dot\varepsilon We < 1/2$. En conséquence, la solution du problème instationnaire n'est dans $L^\infty(\mathbb{R}^+)$ que pour $a\dot\varepsilon We < \frac{1}{2}$. Posant $e_i^n = \tau_{ii}^n - \tau_{ii}^*$, $1 \le i \le 3$, l'algorithme (??)-(??) pour $\nu = 0$ conduit à $e_i^{n+1} = r(\lambda_i\Delta t)\,e_i^n$, avec :

$$r(x) = \frac{(1-\theta x)^2}{1 + \theta' x}$$

Un développement limité à l'ordre deux montre que :

$$e^{-x} - r(x) = -(2\theta^2 - 4\theta + 1)\,x^2 + x^2\,\varphi(x)$$

avec $\lim_{x\to 0}\varphi(x) = 0$. Le schéma est donc précis au second ordre pour $\theta = 1 - 1/\sqrt{2}$. L'algorithme est stable ($|r| < 1$) si et seulement si :

$$\Delta t < \Delta t_{crit} \overset{\text{déf}}{=} \frac{We}{\theta^2(1 - 2a\dot\varepsilon We)} \tag{10}$$

Enfin, l'élimination des modes 1 et 2 à l'erreur peut être réalisée en deux itérations de pas Δt_1 et Δt_2 tels que $r(\lambda_1 \Delta t_1) = r(\lambda_2 \Delta t_2) = 0$, soit encore :

$$\Delta t_1 = \frac{We}{\theta(1 - 2a\dot{\varepsilon}We)} \quad ; \quad \Delta t_2 = \frac{We}{\theta(1 + a\dot{\varepsilon}We)} \tag{11}$$

Ainsi, un cycle de deux pas de temps donnés par (**??**) permet d'obtenir exactement τ^*.

3.2 Cisaillement simple

L'écoulement est bidimensionnel, et le tenseur gradient des vitesses est donné par :

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma}/2 \\ \dot{\gamma}/2 & 0 \end{pmatrix}$$

où $\dot{\gamma} > 0$ est le taux de cisaillement (sans dimension). Le problème se ramène à trouver τ_{11}, τ_{22} et τ_{12} dans $L^\infty(\mathbb{R}^+)$ statisfaisant à :

$$\begin{array}{lllllllll}
We\dfrac{d\tau_{11}}{dt} & + & \tau_{11} & & & - & (1+a)\dot{\gamma}We\tau_{12} & = & 0 \\
We\dfrac{d\tau_{22}}{dt} & & & + & \tau_{22} & + & (1-a)\dot{\gamma}We\tau_{12} & = & 0 \\
2We\dfrac{d\tau_{12}}{dt} & + & (1-a)\dot{\gamma}We\tau_{11} & - & (1+a)\dot{\gamma}We\tau_{22} & + & 2\tau_{12} & = & 2\alpha\dot{\gamma}
\end{array}$$

avec $\tau(0) = 0$ pour un démarrage en cisaillement (figure **??**.a).

$$\Delta t_1 = \frac{We}{\theta} \tag{12}$$

Les valeurs propres du problème sont $\lambda_1 = 1/We$, $\lambda_2 = \lambda = 1/We + i\dot{\gamma}\sqrt{1-a^2}$ et

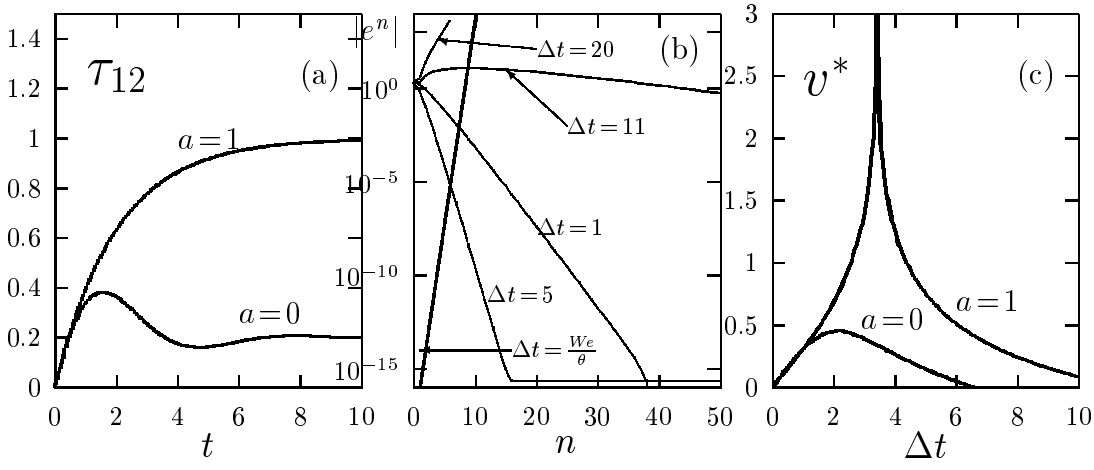

Figure 1: Cisaillement ($\alpha = 1$) : (a) démarrage en cisaillement ($\dot{\gamma}We = 2$; $\Delta t = 0.1$) ; (b) erreur $|e^n|$ selon l'itéré n ($\dot{\gamma}We = 1$) ; (c) vitesse de convergence v selon Δt ($\dot{\gamma}We = 1$).

$\lambda_3 = \bar{\lambda}$. La solution τ^* obtenue pour $\partial/\partial t = 0$ est toujours stable. En conséquence, la solution du problème instationnaire est toujours dans $L^\infty(\mathbb{R}^+)$. Posant $\hat{e}^n_{ij} = \hat{\tau}^n_{ij} - \hat{\tau}^*_{ij}$, où

$\hat{(.)}$ désigne la transformation dans la base propre associée aux valeurs propres $(\lambda_i)_{1\leq i\leq 3}$, l'algorithme (??)-(??) pour $\nu = 0$ conduit à $\hat{e}_{ij}^{n+1} = r(\lambda_i \Delta t)\, \hat{e}_{ij}^{n}$, avec :

$$r(z) = \frac{(1-\theta z)^2}{1+\theta' z}$$

Le schéma est ici aussi précis au second ordre pour $\theta = 1 - 1/\sqrt{2}$, et la stabilité est conditionnelle. Enfin, l'annulation de la contribution du premier mode à l'erreur peut être réalisée avec : Dans le cas $|a| = 1$, la solution τ^* est obtenue par (??) en une itération (figure ??.b). La quantité $-\log|e^n|/n$ tend vers une limite v^*, appelée vitesse de convergence asymptotique (figure ??.c). La quantité $1/v^*$ est alors le nombre moyen d'itérations asymptotiquement nécéssairement à une réduction de la norme de l'erreur d'un facteur égal au nombre e. Lorsque $|a| < 1$, la convergence ne peut plus être obtenue en une itération, et est alors généralement plus lente.

3.3 Ecoulements complexes et singularités

On considère le schéma (??)-(??), ayant en vue de remplacer T et V par des espaces de dimension finie T_h et V_h, et de rechercher la solution stationnaire approchée $(\tau_h^*, \mathbf{u}_h^*)$ correspondante (voir [?] pour une présentation détaillée des formes matricielles correspondantes).

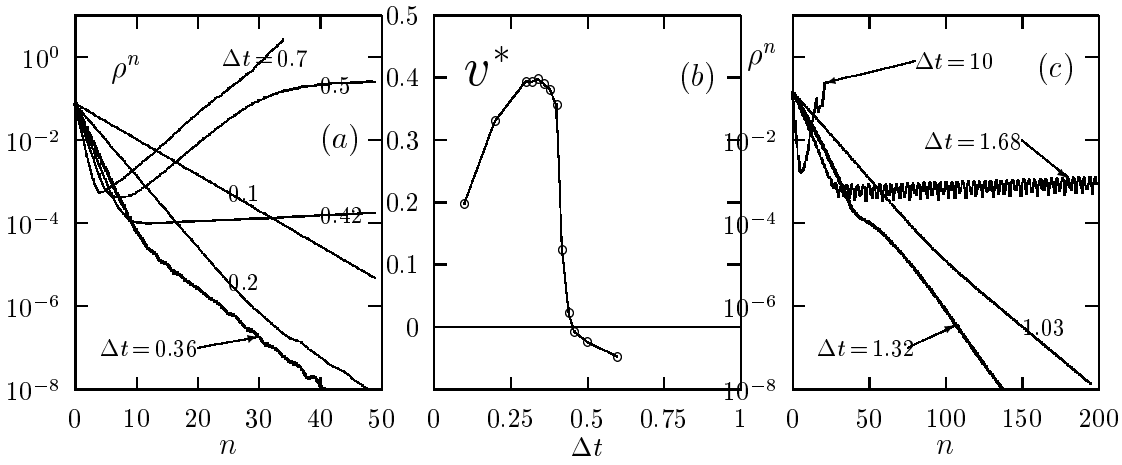

Figure 2: Ecoulement bidimensionnel en contraction brusque 4:1 ($a = 1$, $\alpha = 8/9$) : (a) résidu ρ^n selon l'itéré n ($We = 0.5$) ; (b) vitesse de convergence v^* selon Δt ($We = 0.5$). (c) résidu ρ^n selon l'itéré n ($We = 11$).

Observons les résultats rassemblés dans la figure ??. L'écoulement a lieu dans une géométrie plane à contraction brusque de rapport 4 à 1. La solution stationnaire approchée $\mathcal{U}_h^*$ n'étant pas connue a priori, nous mesurons la convergence de l'itéré $\mathcal{U}_h^n$ vers $\mathcal{U}_h^*$ à l'aide de ρ^n, la norme du résidu $A(\mathcal{U}_h^n) - \mathcal{F}$ du problème stationnaire. Pour un pas de temps choisis assez petit, le résidu $A(\mathcal{U}_h^*) - \mathcal{F}$ tend zéro. Par conséquent, le schéma (??)-(??) apparaît comme une méthode itérative découplée pour la résolution du problème stationnaire $A(\mathcal{U}_h^*) = \mathcal{F}$. Le problème résolu n'est pas plus *diffusif* (ou plus régulier), comme ce peut être le cas dans certaines approches itératives pour ce type de simulation, mais bien $A(\mathcal{U}_h^*) = \mathcal{F}$.

La figure ??.a met en évidence des changement de pente durant les itérations. La deuxième partie de la courbe exprime la convergence plus lente d'un groupe spécifique de composantes du résidu. Nous conjecturons que ces composantes sont dues à la présence de grandes valeurs propres de l'opérateur A_2. En effet, A_2 fait intervenir le terme $\beta_a(., \nabla \mathbf{u}_h^*)$, et $\nabla \mathbf{u}_h^*$ devient grand au voisinage de la singularité. D'où la nécéssité de réduire Δt afin de maîtriser les valeurs propres de $(I - \theta \Delta t S^{-1} A_2)$ et $(I + \theta' \Delta t S^{-1} A_2)^{-1}$ apparaîssant dans l'opérateur d'itération du schéma.

Par un choix particulier de Δt, on annule la vitesse asymptotique de convergence $v^* = \lim_{n\to\infty}(-\log|\rho^n|)/n$ (figure ??.b) ; le résidu se stabilise (figure ??.a, $\Delta t = 0.42$, et figure ??.c, $\Delta t = 1.68$). On ne manquera pas de faire le rapprochement avec la méthode de la puissance itérée pour les problèmes de valeurs propres (c.f. [?], par exemple). En particulier, les pulsations du résidu, au voisinage du pas de temps critique (figure ??.c, $\Delta t = 1.68$), expriment la présence de valeurs propres complexes conjugées. Pour des pas de temps plus élevés, ces composantes vont aller en amplitude croissante, d'où l'aspect particulier, en 'V', des courbes obtenues (figure ??.a, $\Delta t = 0.6$ et figure ??.c, $\Delta t = 10$). On pourra aussi faire l'analogie avec une condition de type Courant-Friedrichs-Léwy, remarquant cependand qu'ici la condition de stabilité dépend de plus de la nature de la singularité et du maillage au voisinage de cette singularité.

Signalons enfin que schéma a été étendu au cas du modèle de Phan-Thien et Tanner mentionné au paragraphe 1. Dans [?], sur une géométrie complexe, et dans le cas $|a| < 1$, on construit par un procédé de cheminement des branches de solutions stationnaires, et on met en évidence les propriétés asymptotiques des écoulements pour les grandes valeurs de We, ceci pour différents paramètres du modèle. Ces résultats de propriétés asymptotiques sont, à notre connaissance, les premiers relatifs à ce type de simulation pour les modèles viscoélastiques à loi de comportement de type différentiel.

Nous pouvons résumer les principales conclusion comme suit :

- La résolution du problème (??)-(??) par le schéma (??)-(??) se ramène à résoudre une succession de problèmes plus simple, de type Stokes et de type transport du tenseur des extra-contraintes.
- $\theta = 1 - 1/\sqrt{2}$ est un choix intéréssant dans le cas newtonien ($We = 0$, c.f. proprosition 1), et dans le cas viscoélastique (c.f. paragraphes ?? et ??), la méthode étant alors d'ordre deux en temps.
- Le schéma (??)-(??) est conditionnellement stable dès que $We > 0$.
- Lors de la recherche de la solution stationnaire, le pas de temps Δt apparaît comme un paramètre de commande sur la vitesse de convergence de la méthode. La vitesse maximum de convergence dépend aussi des paramétres a et We du modèle.
- Dans le cas particulier de l'approximation de la solution stationnaire d'un écoulement présentant une singularité, la vitesse maximum de convergence dépend principalement de l'aspect de la solution approchée dans un voisinage de la singularité. En particulier, elle va alors dépendre fortement du maillage dans ce voisinage. Le pas de temps doit alors être choisi d'autant plus petit que les éléments sont petits dans ce voisinage (on pourra penser à une condition de type CFL mais locale à la singularité, et dépendante de la nature de cette singularité).

[1] J. G. OLDROYD. On the formulation of rheological equations of states. *Proc. Roy. Soc, London A 200* (1950), 523–541.

[2] N. PHAN-THIEN et R. I. TANNER. A new constitutive equation derived from network theory. *J. Non Newtonian Fluid Mech. 2* (1977), 353–365.

[3] H. GIESEKUS. A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation dependant tensorial mobility. *J. Non Newtonian Fluid Mech. 11* (1982), 69.

[4] C. GUILLOPÉ et J. C. SAUT. Résultat d'existence pour les fluides viscoélastiques à loi de comportement de type différentiel. *C. R. Acad. Sci. Paris t.305, série I* (1987), 489–492.

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

[6] P. SARAMITO. *Simulation numérique d'écoulements de fluides viscoélastiques par éléments finis incompressibles et une méthode de directions alternées ; applications.* thèse de l'Institut National Polytechnique, Grenoble, 1990.

[7] F. CHATELIN. *Valeurs propres de matrices.* Masson, 1988.

[8] P. SARAMITO et J. M. PIAU. Flow characteristics of viscoelastic fluids in an abrupt contraction by using numerical modeling. *In International Conference on Rheology of Polymers, may 1993,* submitted to *J. Non Newtonian Fluid Mech.* (1993).