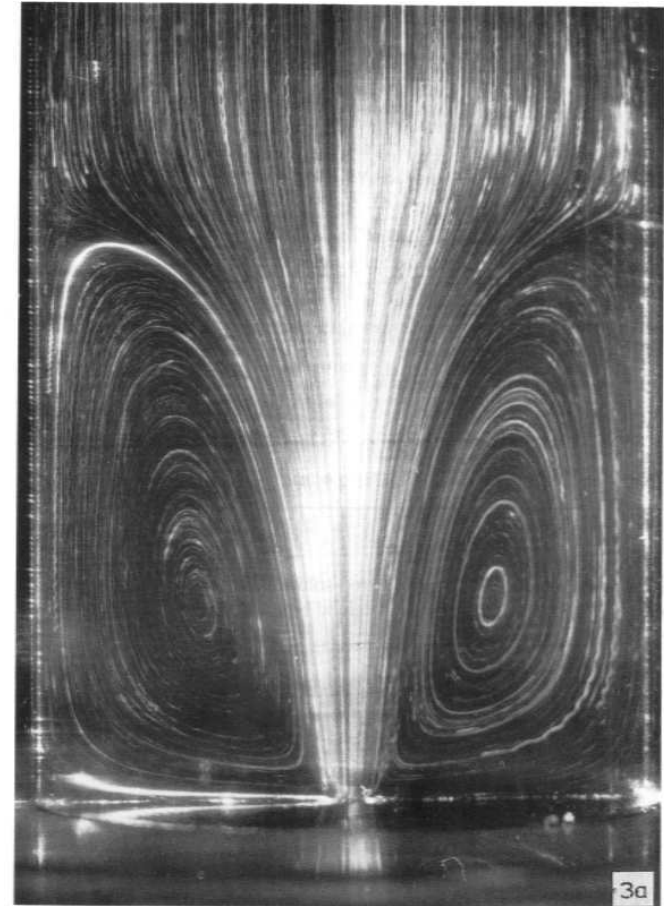
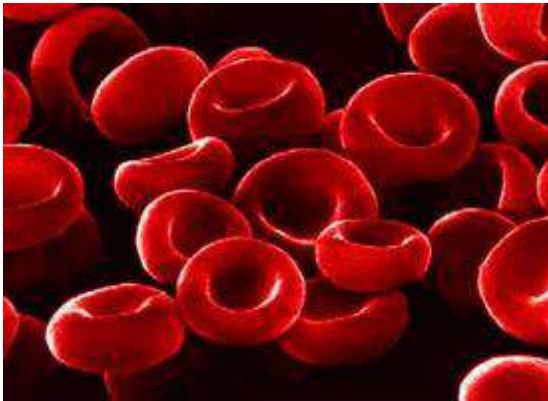


Modélisation et calcul de fluides complexes

Pierre Saramito

CNRS / LJK Grenoble

Motivations



Motivations

Applications

mécanique : analyse de charge limite, rupture

risques naturels : avalanches, coulées de lave

mise en forme : caoutchouc, métaux

biologie : développement des embryons, morphogénèse

Aspects fondamentaux

grandes déformation

visco-**plasticité** : fluide + **élasticité** sous le seuil

seuil : phénomène **abrupt**, milieu **continu**

aspects thermodynamiques (second principe)

Plan

1. Modélisations
2. Exemples d'écoulements
3. Logiciel Rhéolef

1900 : modèle de Schwedoff

pour des suspensions de gélatine

$$\left\{ \begin{array}{ll} \dot{\varepsilon} = 0 & \text{si } \tau \leq \tau_Y \\ \frac{1}{G} \frac{d\tau}{dt} + \frac{1}{K} (\tau - \tau_Y) = \dot{\varepsilon} & \text{si } \tau > \tau_Y \end{array} \right.$$

où

G : module élastique

τ_Y : contrainte seuil

K : viscosité

- le premier modèle élasto-visco-plastique
- matériau = solide rigide, puis fluide visco-élastique

1920 : le modèle de Bingham

$$\begin{cases} |\tau| \leq \tau_Y & \text{si } \dot{\varepsilon} = 0 \\ \tau = K\dot{\varepsilon} + \tau_Y \frac{\dot{\varepsilon}}{|\dot{\varepsilon}|} & \text{si } \dot{\varepsilon} \neq 0 \end{cases}$$

\Leftrightarrow

$$\max \left(0, \frac{|\tau| - \tau_Y}{|\tau|} \right) \tau = \eta_m \dot{\varepsilon}$$

- équivalent au modèle stationnaire ($1/G = 0$) de Schwedoff
- corrige le traitement du signe par des valeurs absolues
- matériau = solide rigide, puis fluide newtonien

Remarque : $|\tau| \leq \tau_Y \Rightarrow \tau$ indéterminé

1926 : Herschel & Bulkley

$$\begin{cases} |\tau| \leq \tau_Y & \text{si } \dot{\varepsilon} = 0, \\ \tau = K|\dot{\varepsilon}|^{n-1}\dot{\varepsilon} + \tau_Y \frac{\dot{\varepsilon}}{|\dot{\varepsilon}|} & \text{sinon} \end{cases}$$

\Leftrightarrow

$$\max \left(0, \frac{|\tau| - \tau_Y}{K|\tau|^n} \right)^{\frac{1}{n}} \tau = \dot{\varepsilon}$$

- $n \in \mathbb{R}^+$: loi de puissance
- $n = 1$: Bingham

1950 : le modèle d'Oldroyd

$$\frac{1}{G} \overset{\nabla}{\tau} + \frac{1}{\eta_m} \tau = \dot{\varepsilon}$$

- équivalent au modèle de Schwedoff quand $\tau_Y = 0$
- contrainte totale : $\sigma = K_s \dot{\varepsilon} + \tau$ où K_s : viscosité de *solvant*
- étendu au cas 3D: avec une dérivée *objective* de tenseur

$$\overset{\nabla}{\tau} = \frac{\partial \tau}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \tau - \tau \cdot \nabla \mathbf{v}^T - \nabla \mathbf{v} \cdot \tau.$$

Condition initiale :

$$\tau(t=0) = \tau_0$$

2009 : élasto-visco-plastique

$$\frac{1}{G} \nabla \tau + \max \left(0, \frac{|\tau| - \tau_Y}{K |\tau|^n} \right)^{\frac{1}{n}} \tau = \dot{\varepsilon}$$

- $1/G = 0$: Herschel-Bulkley
- $\tau_Y = 0$ et $n = 1$: Oldroyd
- $1/G = \tau_Y = 0$ et $n = 1$: Navier-Stokes

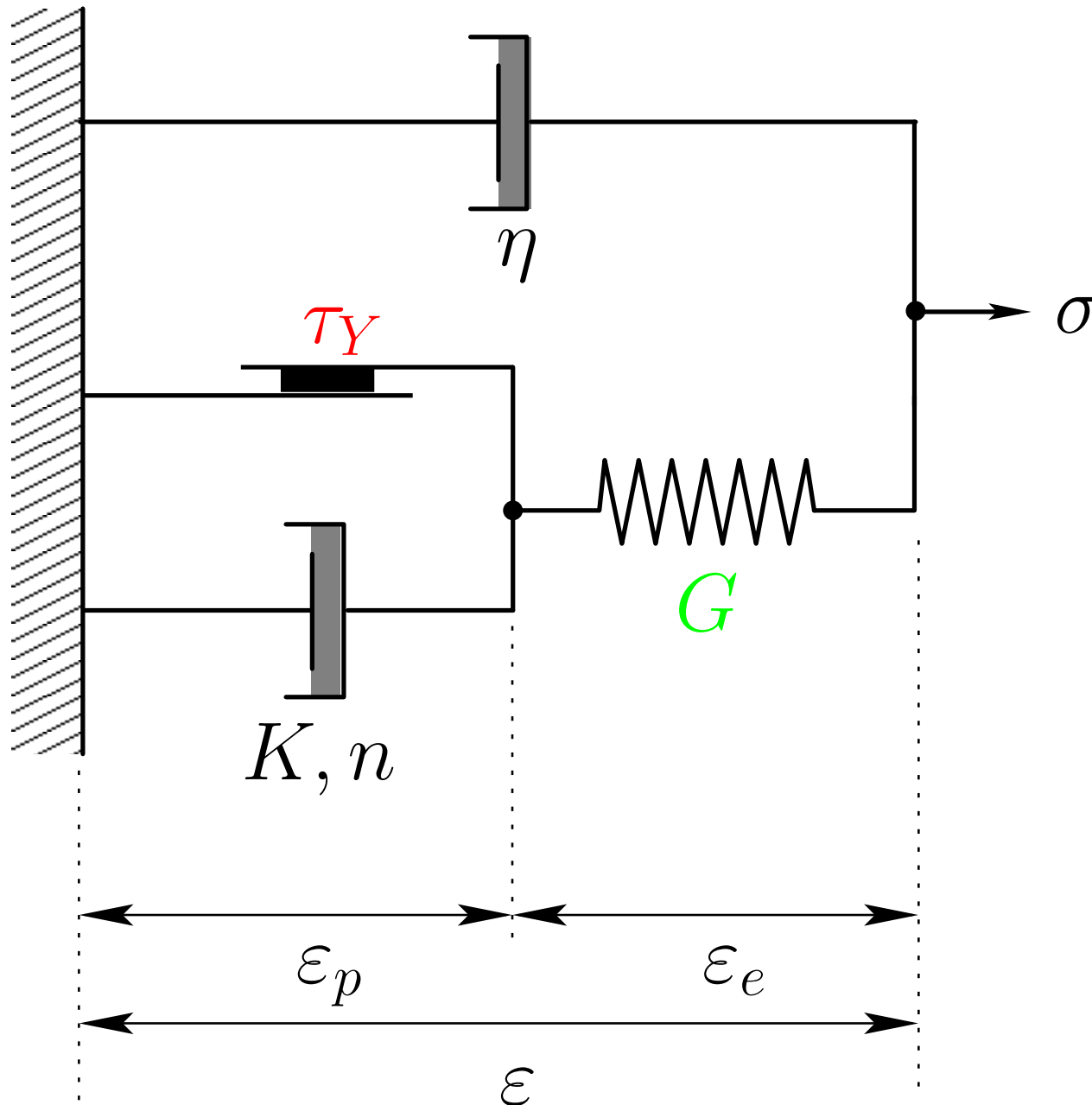
Condition initiale : $\tau(t=0) = \tau_0$

Remarque : $|\tau| \leq \tau_Y \Rightarrow \tau$ déterminé par τ_0

Saramito (2009), J. non-Newt. Fluid Mech., 158:154-161.

Saramito (2007), J. non-Newt. Fluid Mech., 145:1-14.

Représentation graphique



Second principe de la thermodynamique

Déformation : élastique + plastique

$$\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_p$$

Énergie libre et de dissipation :

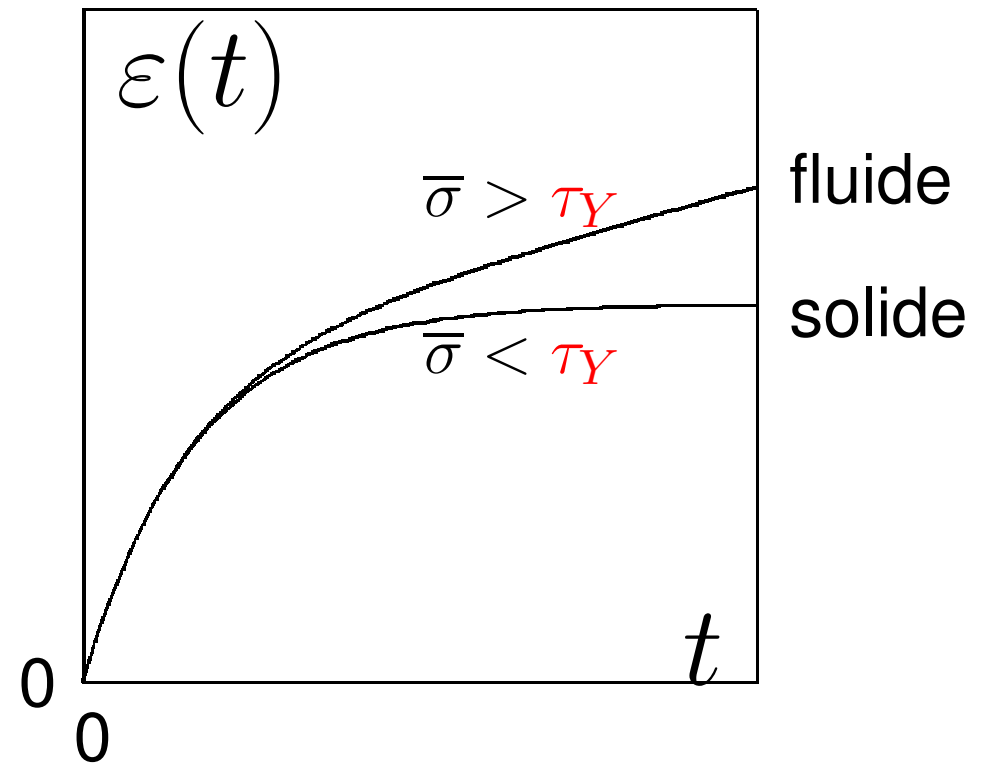
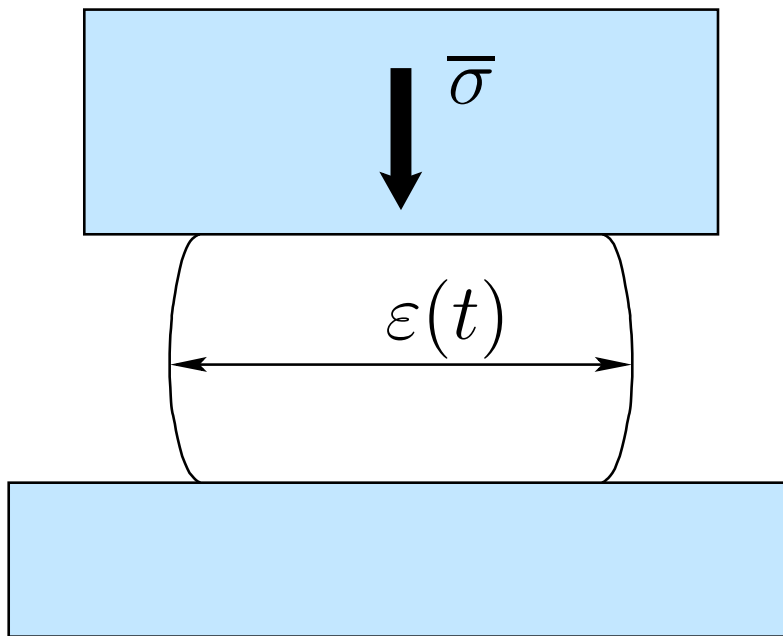
$$\mathcal{E}(\varepsilon, \varepsilon_e) = G |\varepsilon_e|^2$$

$$\mathcal{D}(\dot{\varepsilon}, \dot{\varepsilon}_e) = K_s |\dot{\varepsilon}|^2 + K |\dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}_e|^n + \tau_Y |\dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}_e|$$

\mathcal{E} et \mathcal{D} sont convexes

\implies second principe vérifié

Test d'aplatissement



- matériau = solide visco-élastique, puis fluide visco-élastique

Grandes déformation et problèmes 3D

(P): trouver τ , \mathbf{v} et p tels que

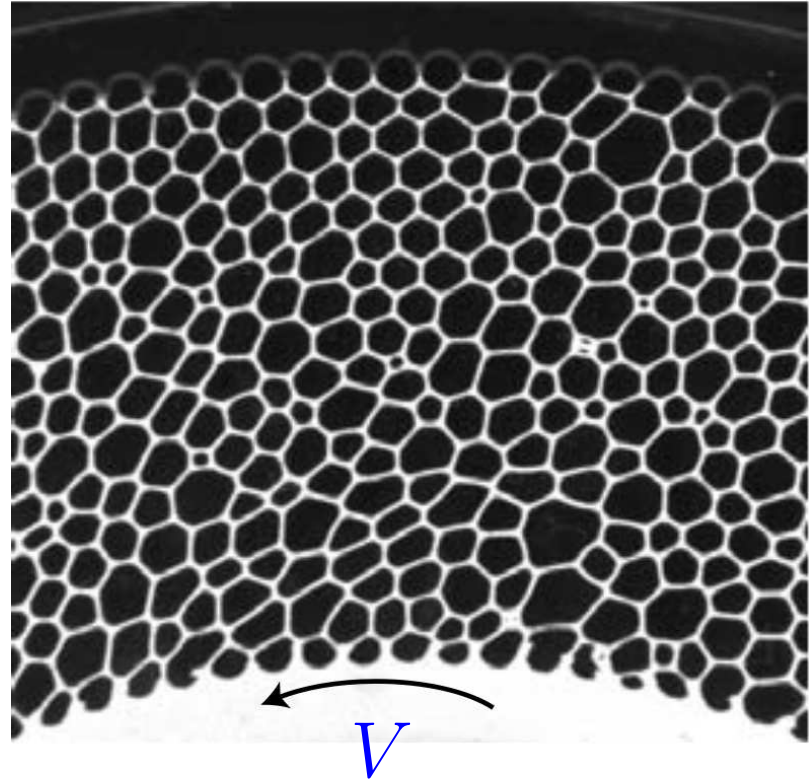
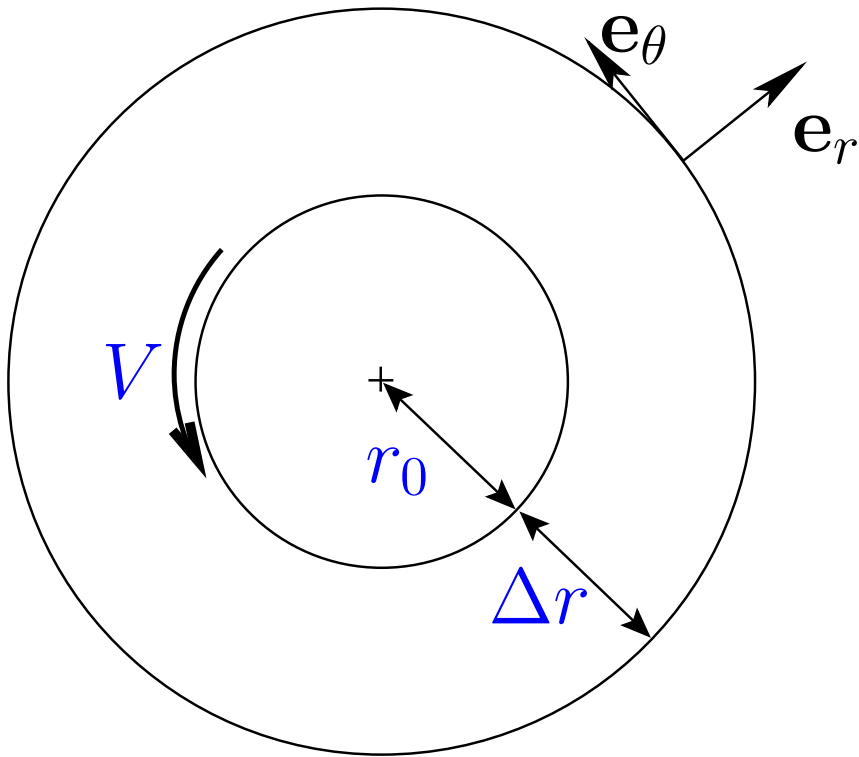
$$\frac{1}{G} \square \tau + \max \left(0, \frac{|\tau| - \tau_Y}{K |\tau|^n} \right)^{\frac{1}{n}} \tau - 2D(\mathbf{v}) = 0$$
$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) - \mathbf{div} \tau - \mathbf{div}(2K_s D(\mathbf{v})) + \nabla p = \mathbf{f}$$
$$-\mathbf{div} \mathbf{v} = 0$$
$$+C.L + C.I.$$

Dérivée de Gordon-Schowalter : ($a \in [-1, 1]$) :

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

Tenseur de CAUCHY : $\sigma_{\text{tot}} = -pI + 2K_s D(\mathbf{v}) + \tau$

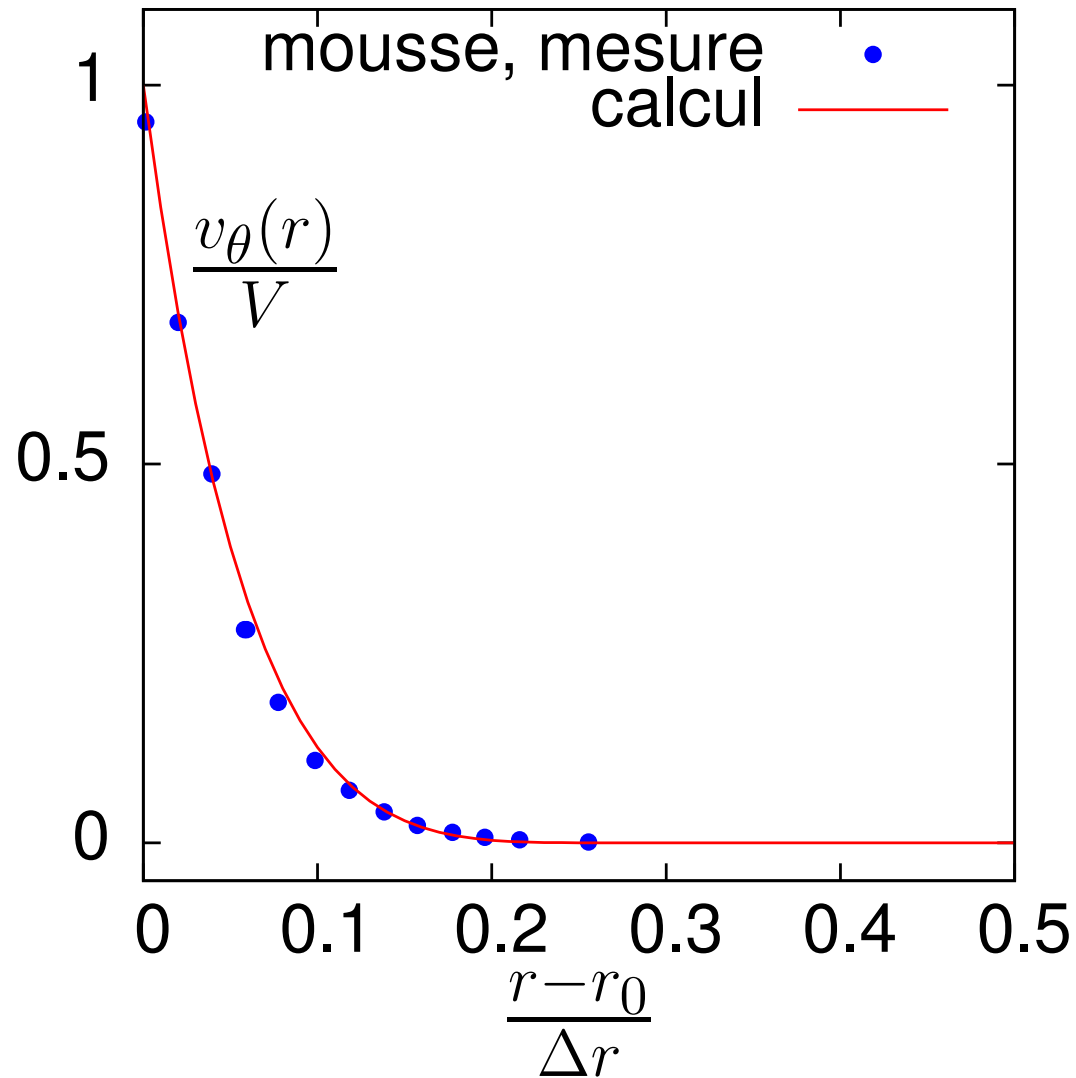
Géométrie de Couette



$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 0 \\ v_\theta(r) \end{pmatrix}$$

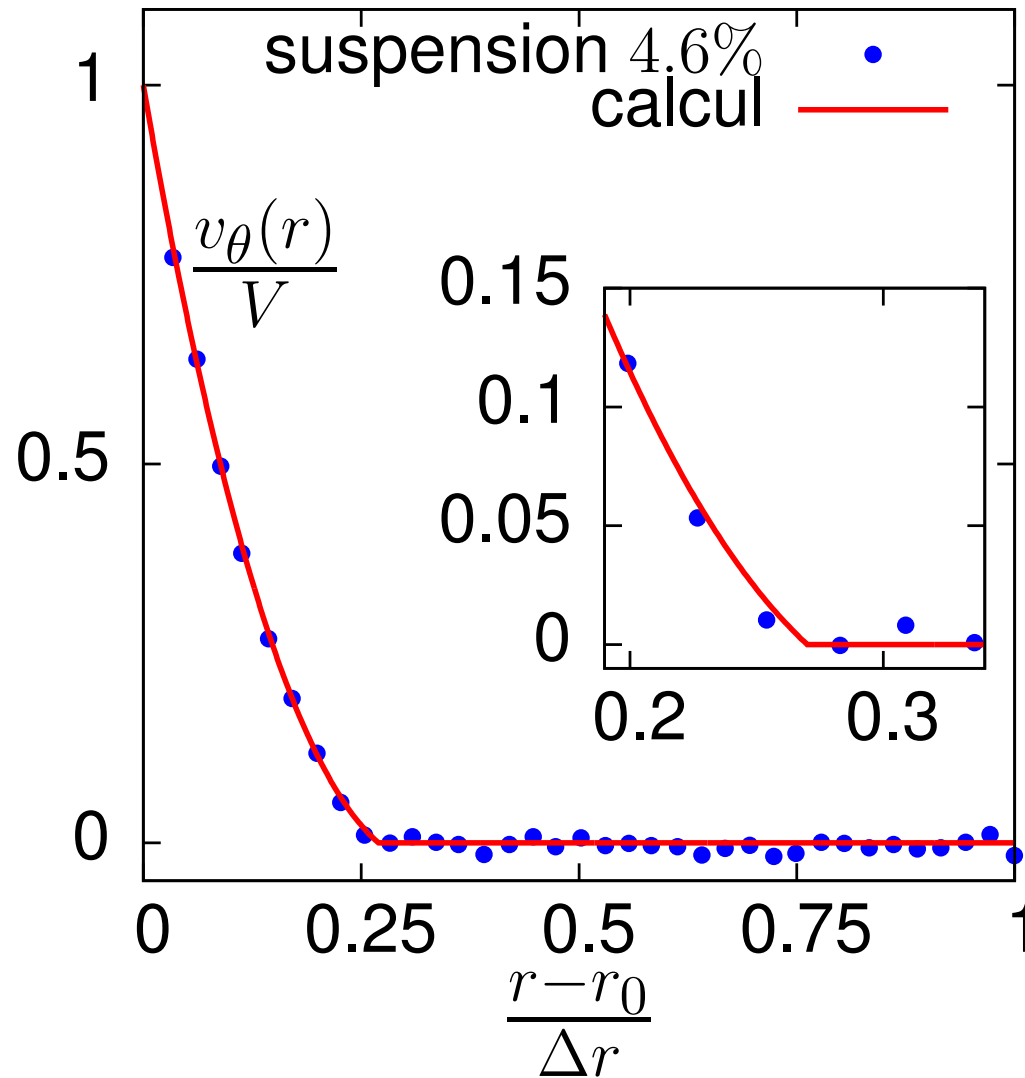
$$\boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} \tau_{rr}(r) & \tau_{r\theta}(r) \\ \tau_{\theta r}(r) & \tau_{\theta\theta}(r) \end{pmatrix}$$

Observation : (1) profil lisse



mesures : *Debrégeas et al. (2001), PRL 87:178305.*

Observation : (2) profil abrupt



mesures : *Coussot et al. (2002), PRL 88:218301.*

Un questionnement depuis 10 ans

année	profil	auteurs	matériau
2001	lisse	<i>Debrégeas et al.</i>	mousses
2002	abrupt	<i>Coussot et al.</i>	suspensions, émulsions
2003	abrupt	<i>Salmon et al.</i>	micelles géantes
2004	abrupt	<i>Gilbreth et al.</i>	mousses
2006	abrupt	<i>Dennin et al.</i>	mousses

⇒ les profils seraient donc **abrupts** ?

Un questionnement depuis 10 ans

année	profil	auteurs	matériau
2001	lisse	<i>Debrégeas et al.</i>	mousses
2002	abrupt	<i>Coussot et al.</i>	suspensions, émulsions
2003	abrupt	<i>Salmon et al.</i>	micelles géantes
2004	abrupt	<i>Gilbreth et al.</i>	mousses
2006	abrupt	<i>Dennin et al.</i>	mousses
2008	lisse	<i>Kätgert et al.</i>	mousses
2010	lisse	<i>Coussot et al.</i>	suspensions, émulsions
2010	lisse	<i>Ovarlez et al.</i>	mousses
2010	lisse	<i>Kätgert et al.</i>	mousses

⇒ les profils seraient plutôt **lisses** ?

⇒ Analyse théorique + simulation numérique...

Influence des contraintes initiales ?

$$\tau(t=0) = \begin{pmatrix} \tau_{rr} & \tau_{r\theta} \\ \tau_{\theta r} & \tau_{\theta\theta} \end{pmatrix} \Leftarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \tau_{\theta\theta}^* \end{pmatrix}$$

Trois cas extrêmes :

$\tau_{\theta\theta}^*$	
0	non précontraint
$+\sqrt{2}\tau_Y$	précontraint
$-\sqrt{2}\tau_Y$	précontraint

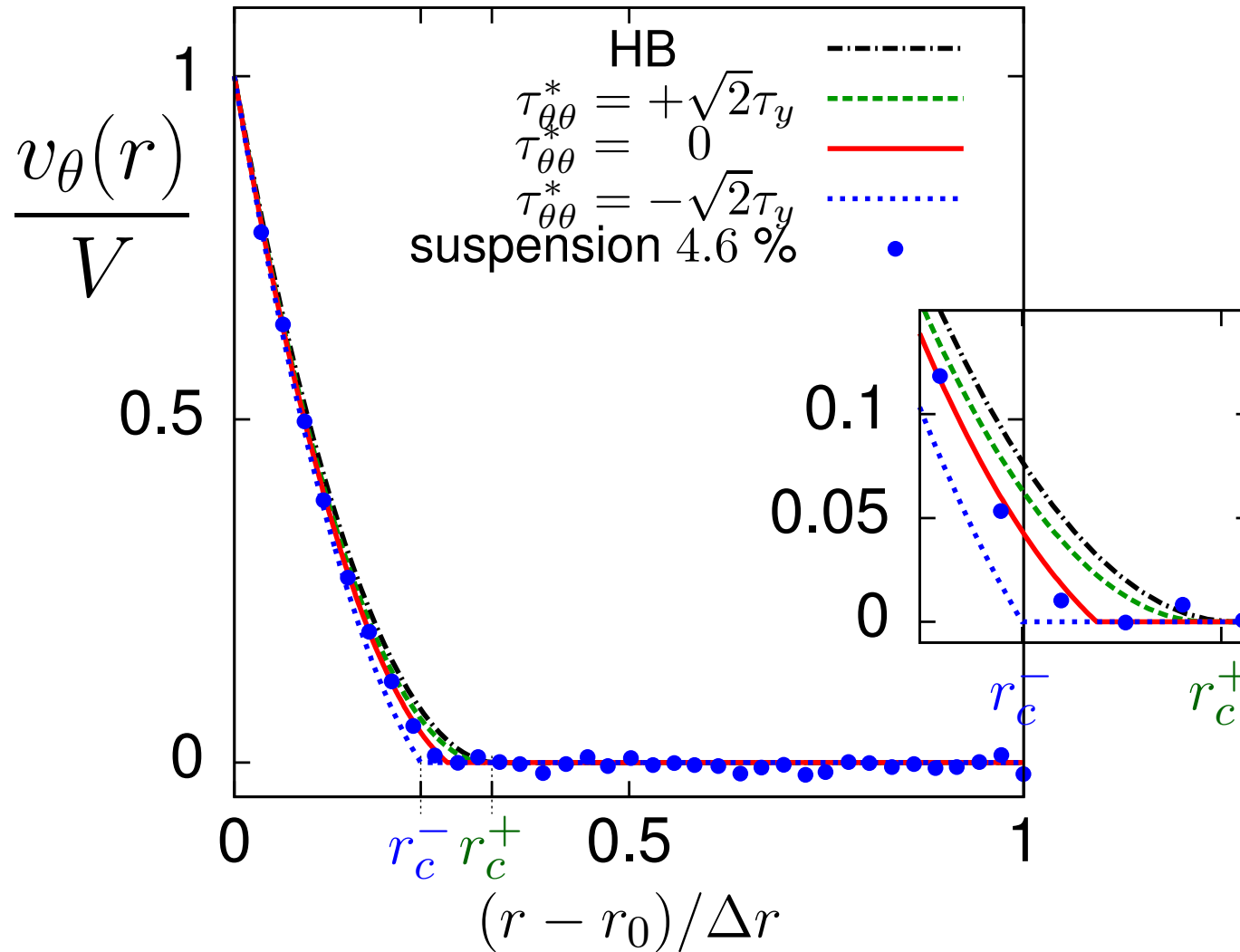
Nombres sans dimension

$$We = \frac{\eta \dot{\gamma}}{G} \quad \text{viscoélasticité}$$

$$Bi = \frac{\tau_Y}{\eta \dot{\gamma}} \quad \text{viscoplasticité}$$

avec $\eta = K \dot{\gamma}^{n-1}$: dimension d'une viscosité.

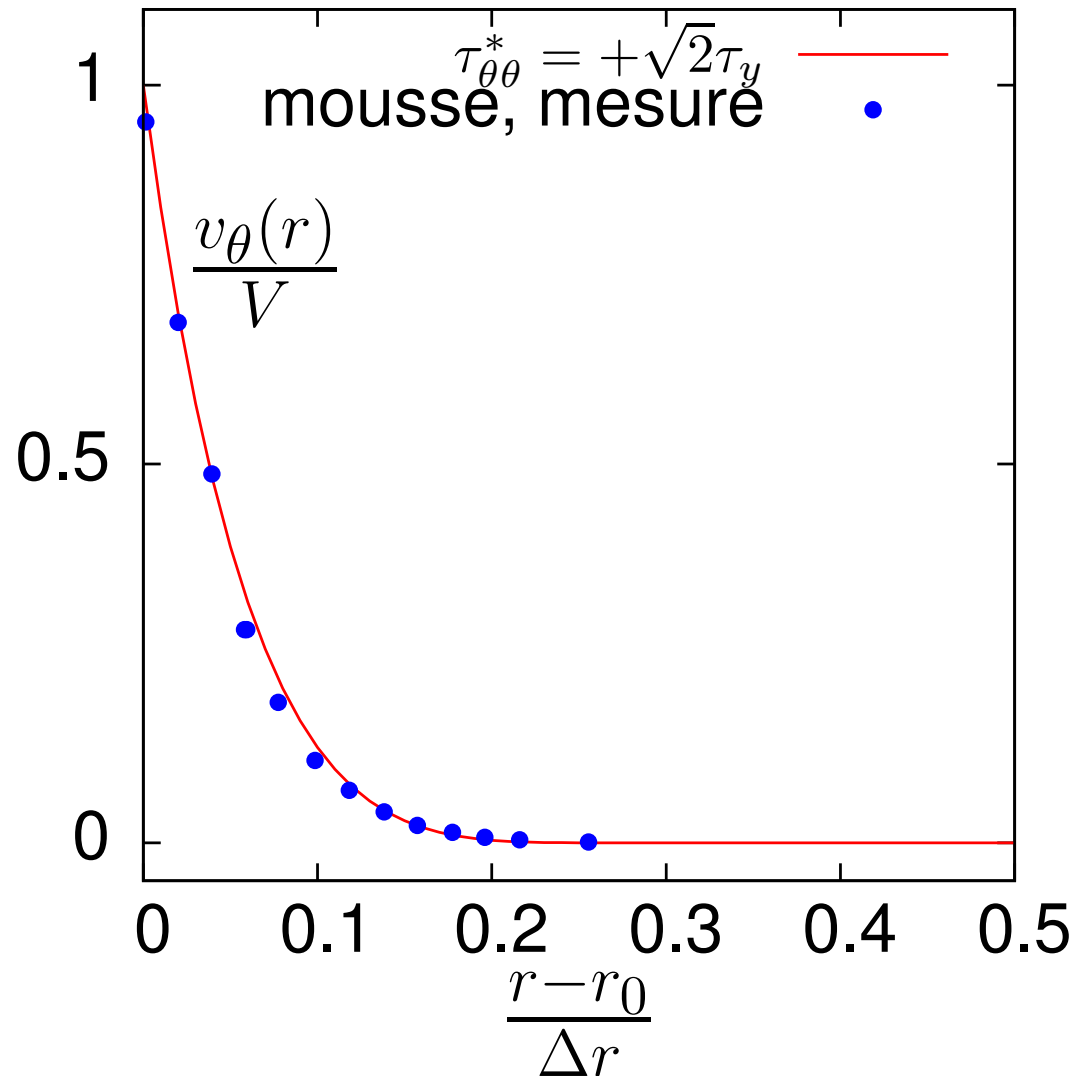
Couette stationnaire : (1) profil abrupt



modélisation : $We = 0.026$, $Bi = 27$, $n = 1$.

mesures : *Coussot et al. (2002), PRL 88:218301.*

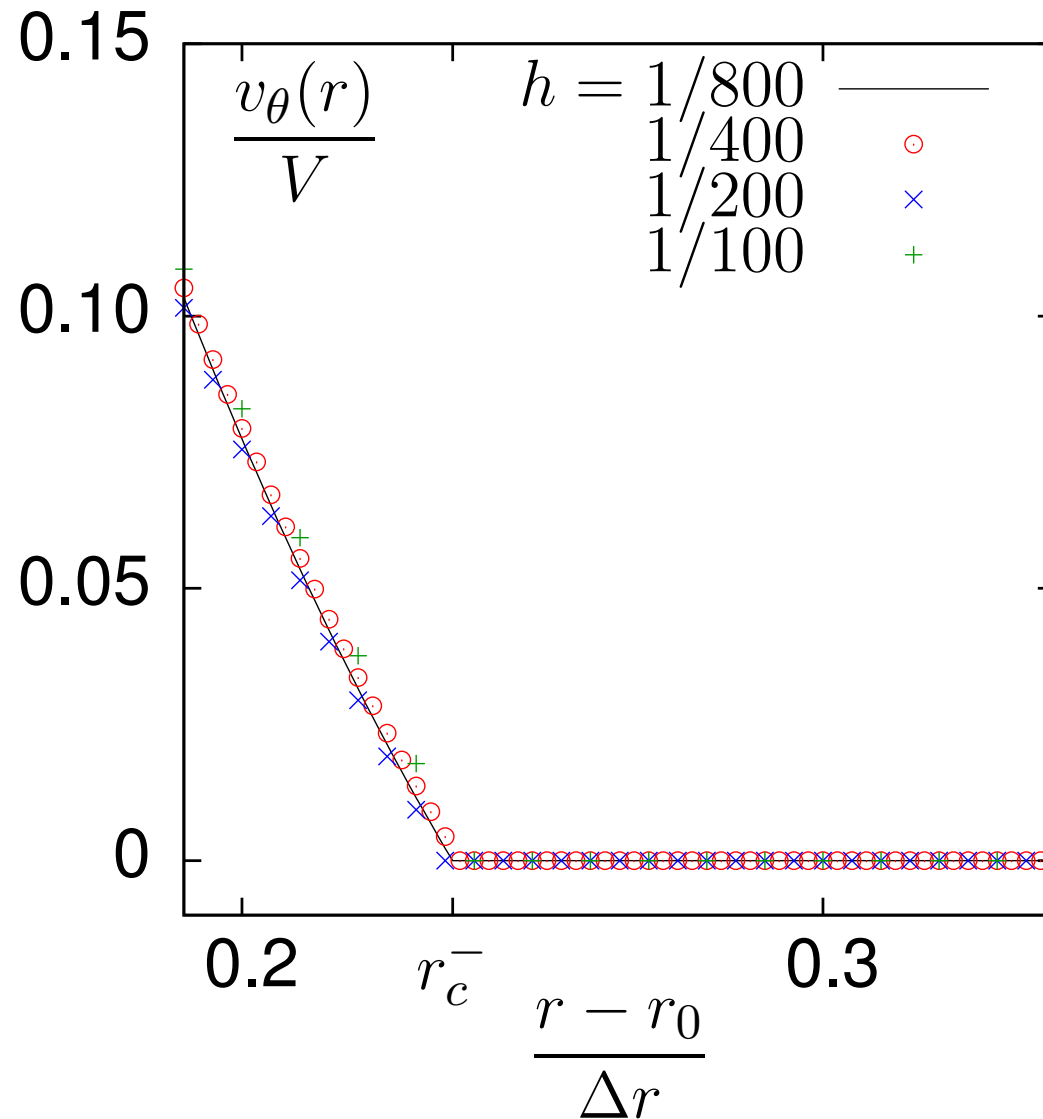
Couette stationnaire : (2) profil lisse



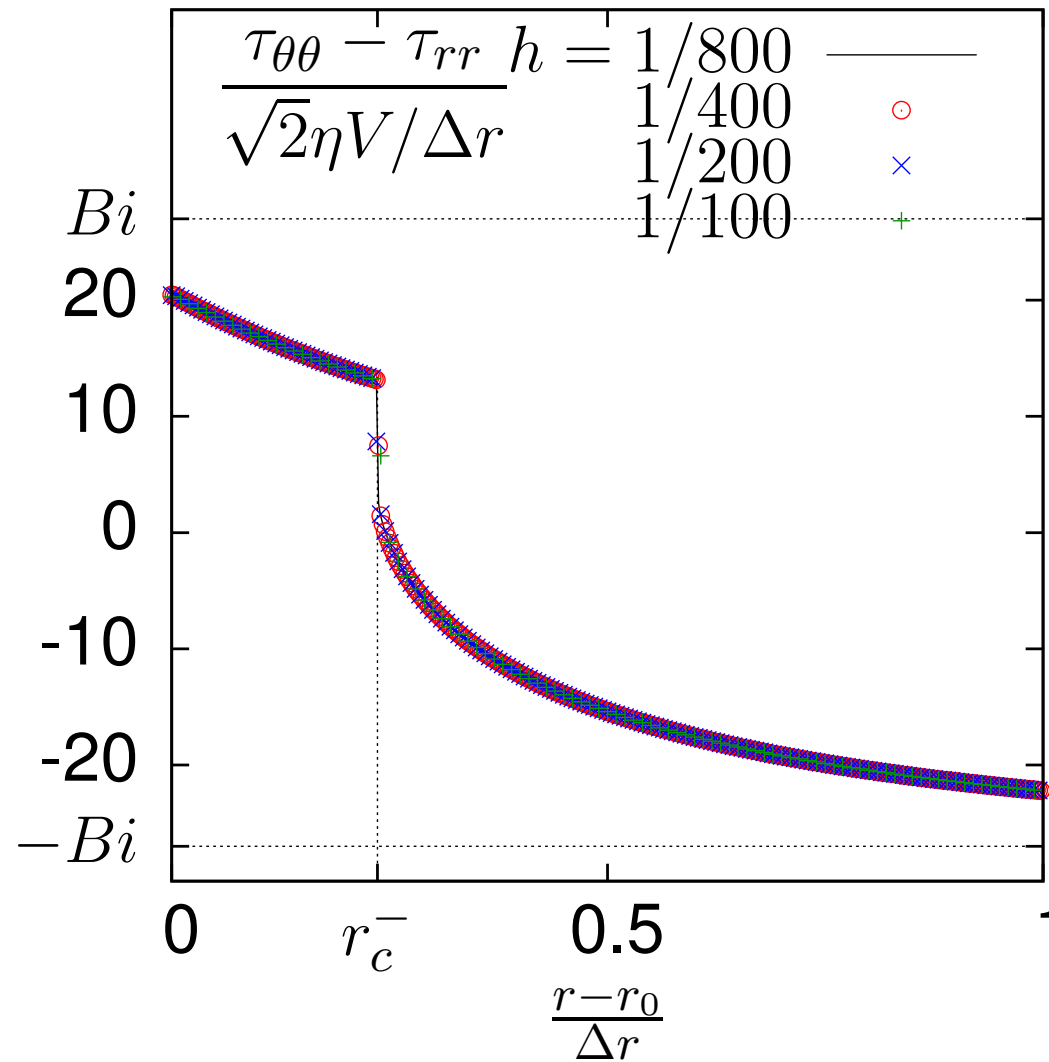
modélisation : $We = 0.035$, $Bi = 10$, $n = 1/3$

mesures : *Debrégeas et al. (2001), PRL 87:178305.*

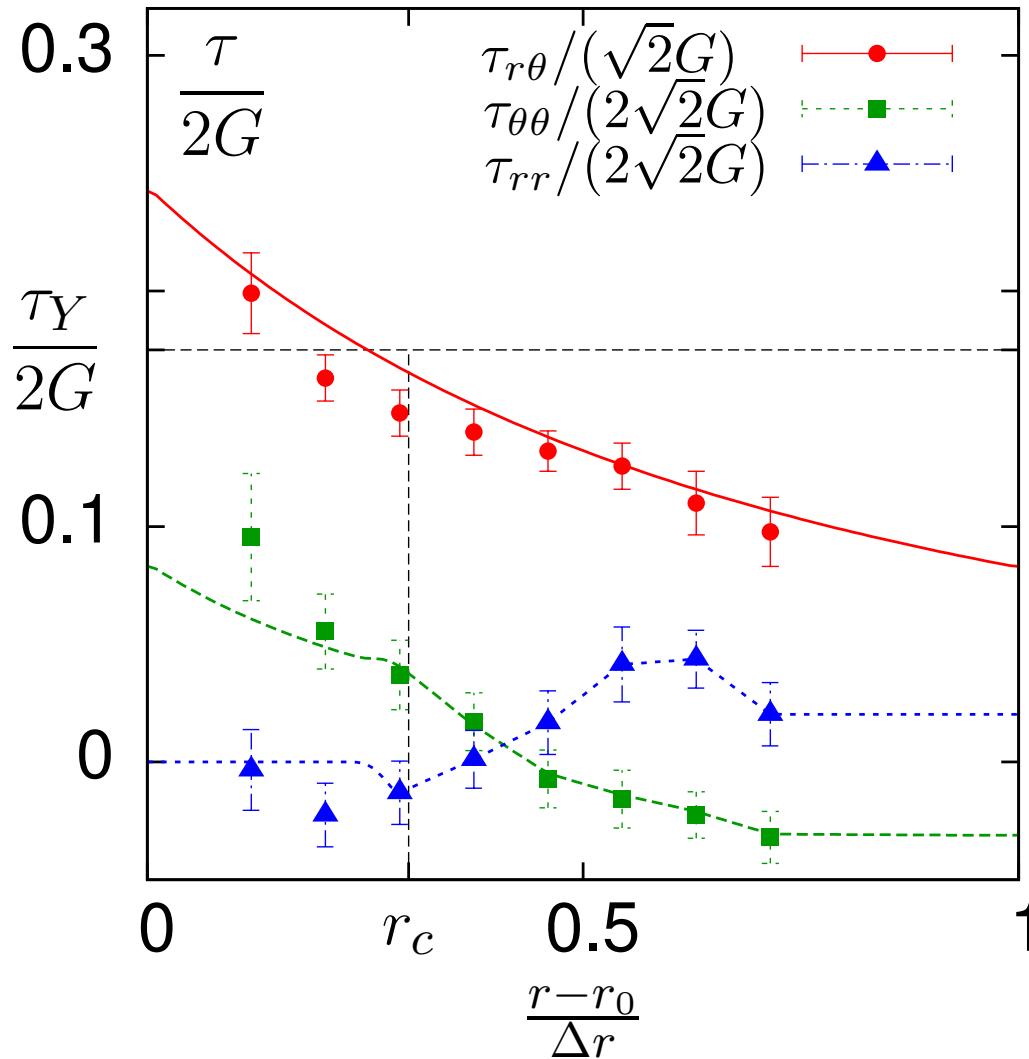
Convergence des solutions abruptes



Convergence des solutions abruptes



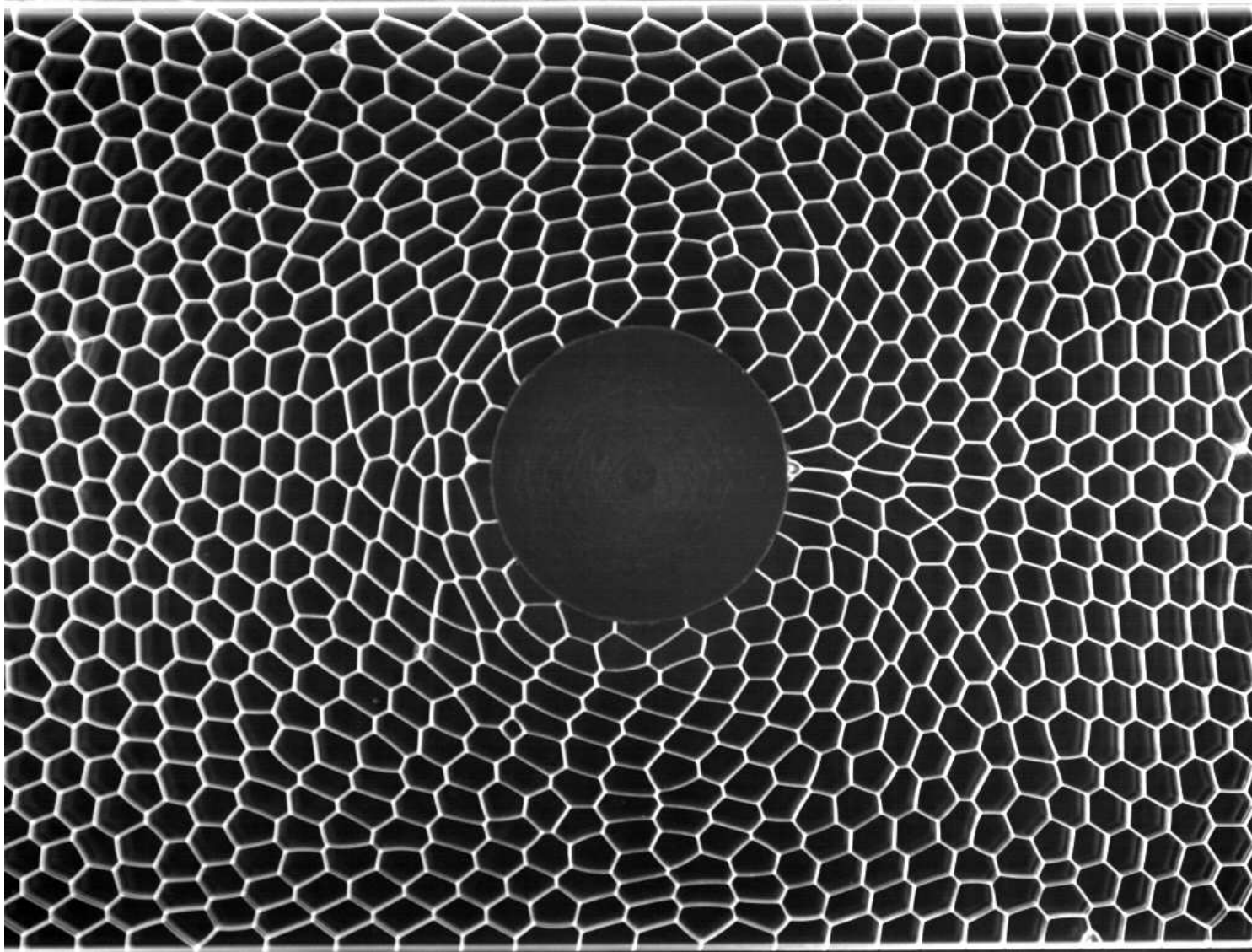
Tenseur des contraintes : comparaisons



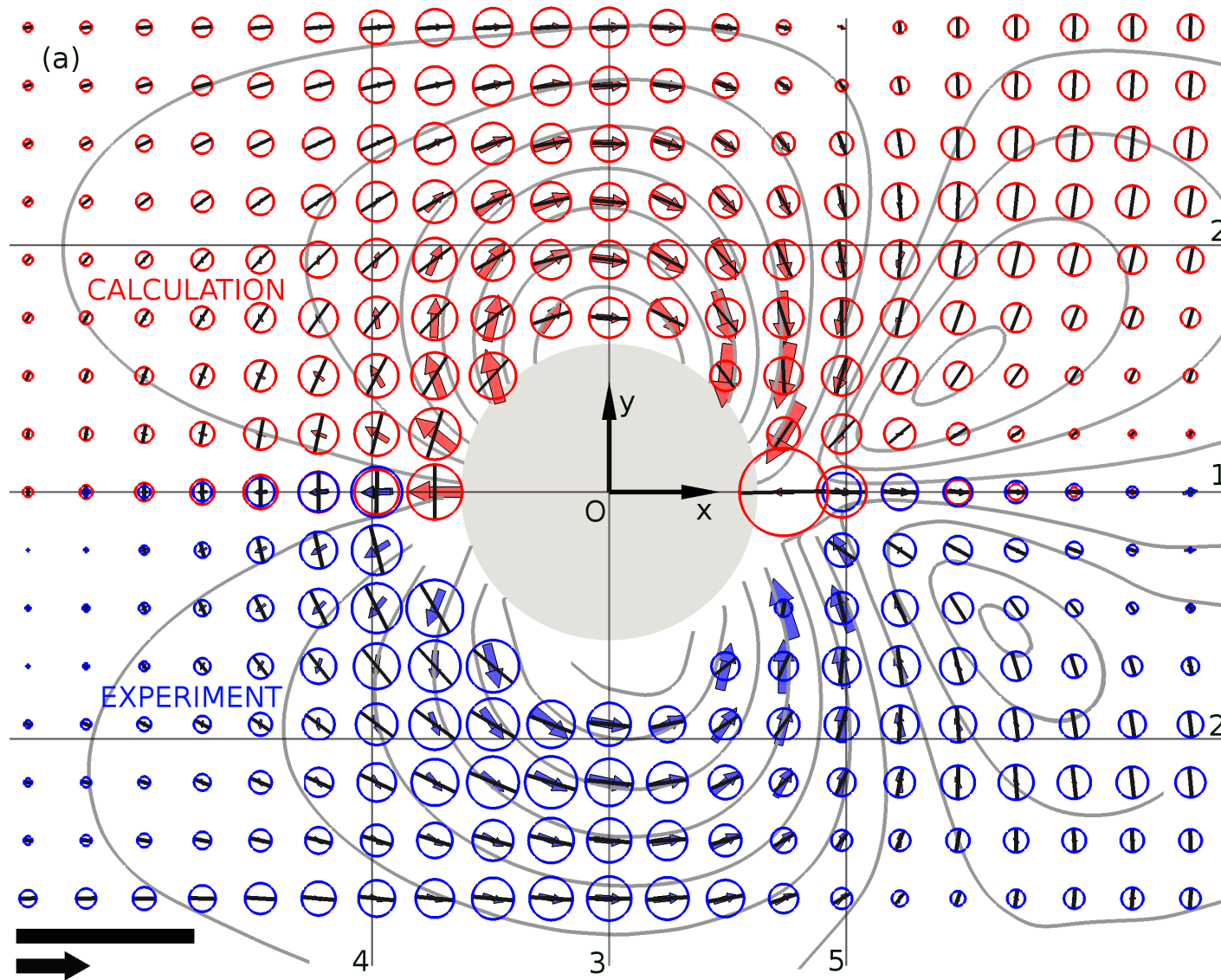
modélisation : $We = 0.035$, $Bi = 10$, $n = 1/3$

mesures : *Debrégeas et al. (2001), PRL 87:178305.*

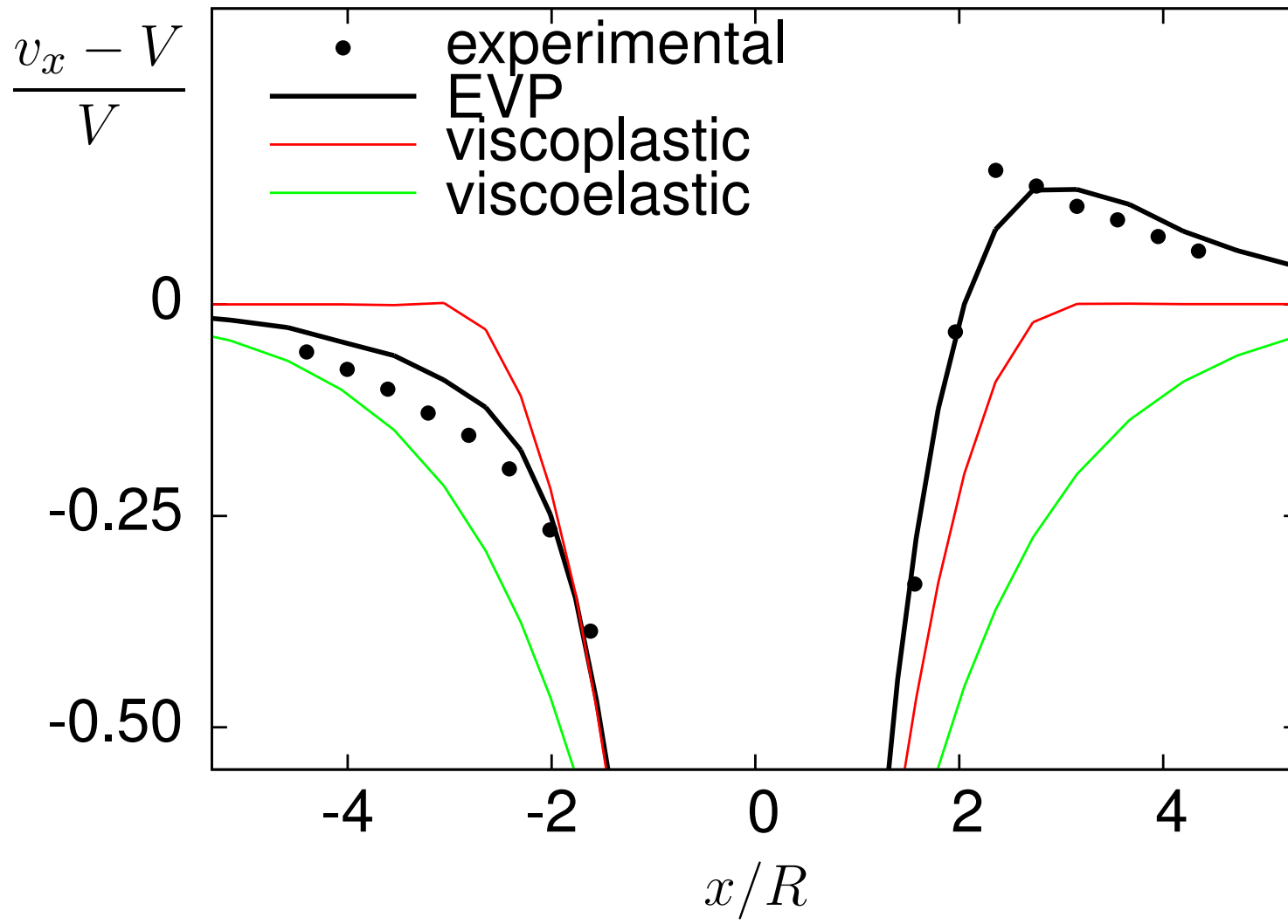
Écoulement autour d'un obstacle



Validation : tenseur des contraintes



Vitesse suivant l'axe de symétrie



Rhéolef: logiciel libre

Problèmes et outils

- problèmes standards : Poisson, élasticité, Stokes
- méthode des caractéristiques : thermique, Navier-Stokes
- solveurs non-linéaires : point fixe, Newton

Spécifications

- formalisme variationnel
- langage C++, parallélisme (MPI)
- installation : sources, binaires debian et ubuntu

Bonus

- géométrie 1D, 2D, 3D, axisymétrique
- maillages auto-adaptatifs

Rhéolef

$$\text{Exemple : } -\lambda \nabla(\operatorname{div} \mathbf{u}) - \operatorname{div}(2\mu D(\mathbf{u})) = \mathbf{f} \text{ dans } \Omega$$
$$\mathbf{u} = 0 \text{ sur } \partial\Omega$$

```
int main (int argc, char** argv) {  
  geo omega (argv[1]);  
  space Xh (omega, argv[2], "vector");  
  Xh.block ("boundary");  
  form m (Xh, Xh, "mass");  
  form a0 (Xh, Xh, "div-div");  
  form a1 (Xh, Xh, "2D-D");  
  form a = lambda*a0 + mu*a1;  
  field fh (Xh);  
  fh[0]=0; fh[1]=-1;  
  field uh (Xh);  
  uh ["boundary"] = 0;  
  solver fact = ldlt(a.uu);  
  uh.u = fact.solve ((m*fh).u);  
  cout << uh;  
}
```

soit $\Omega \subset \mathbb{R}^N, N = 1, 2, 3$

$X_h = \{\mathbf{v} \in H^1(\Omega)^N; \mathbf{v}|_K \in (P_k)^N, \forall K \in \mathcal{T}_h\}$

$V_h = X_h \cap H_0^1(\Omega)^N$

$m(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \, dx$

$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \lambda \int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u}) \operatorname{div}(\mathbf{v}) \, dx$

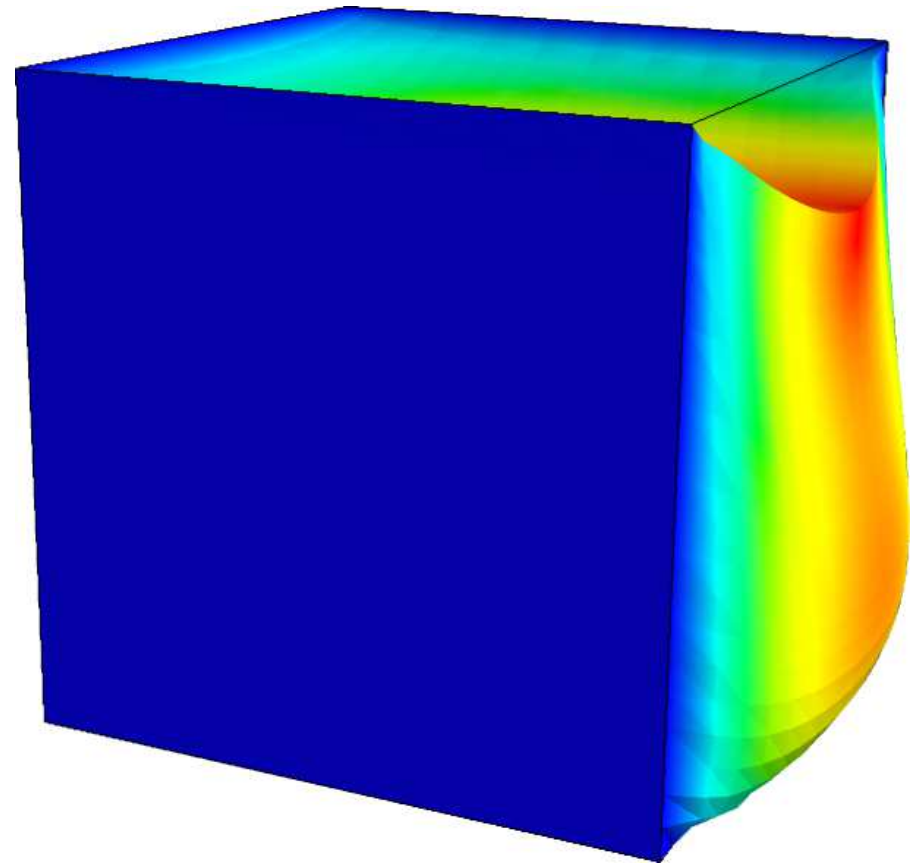
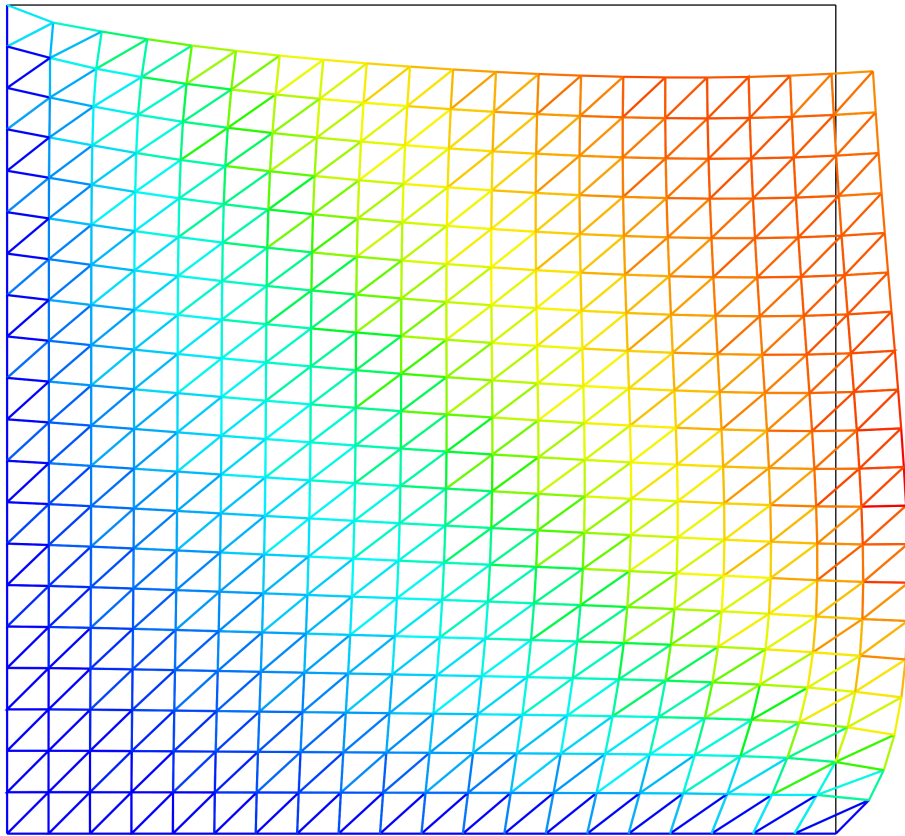
$+ \mu \int_{\Omega} 2D(\mathbf{u}) : D(\mathbf{v}) \, dx$

$\mathbf{f}_h = (0, -1)$

(P) : trouver $\mathbf{u}_h \in V_h$ tel que

$a(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) = m(\mathbf{f}_h, \mathbf{v}_h), \forall \mathbf{v}_h \in V_h$

Rhéolef : élasticité incompressible



Conclusion

- modélisation : 3D, 2nd principe, dérivée objective
- peu de paramètres, tous mesurables :

$$G, \tau_Y, K, n.$$

- Couette : profils lisses et abrupts corrects
dépend de la préparation du matériau avant l'expérience !
- milieu continu, solutions abruptes
- Obstacle 2D : validation
- Rhéolef : logiciel généraliste d'éléments finis