

Méthodes numériques d'ordre élevé pour les écoulements diphasiques

Modèle one-fluid ; méthodes level set ; tension superficielle.
Applications aux vagues et gouttes.
Code massivement parallèle Notus CFD.

Mathieu Coquerelle

Florian Desmons Félix Henri Pierre Lubin Stéphane Glockner

SMAI, 24 mai 2023

Symposium : Modèles pour la prédiction d'échouages des algues sargasses

Plan

- 1 Introduction
- 2 Modèle one-fluid (OFM) et quantité de mouvement
- 3 Méthodes level set (LSM) et redistanciation
- 4 Notus
- 5 Conclusion

Introduction



© Ray Collins

Quelques critères pour l'expérimentation numérique

Une lettre au Père Noël

- Choisir son point de vue
- Représenter l'interface
- Calculer la qté de mouvement
- Capturer/modéliser les petites échelles (turbulence, instabilités, échanges air/océan, tension sup.)
- Interaction avec les obstacles
- ...

Quelques critères pour l'expérimentation numérique

Une lettre au Père Noël

- Choisir son point de vue : Eulerien (DF, VF), Lagrangien (SPH)^a, ALE, maillage struct., non structuré
- Représenter l'interface
- Calculer la qté de mouvement
- Capter/modéliser les petites échelles (turbulence, instabilités, échanges air/océan, tension sup.)
- Interaction avec les obstacles
- ...

a. AVESANI et al. 2021.

Quelques critères pour l'expérimentation numérique

Une lettre au Père Noël

- Choisir son point de vue
- Représenter l'interface : VOF ^a, MOF ^b, FT ^c, LSM ^d
- Calculer la qté de mouvement
- Capter/modéliser les petites échelles (turbulence, instabilités, échanges air/océan, tension sup.)
- Interaction avec les obstacles
- ...

a. HIRT et NICHOLS 1981 ; FUSTER et al. 2009.

b. MILCENT et LEMOINE 2020 ; DYADECHKO et SHASHKOV 2005.

c. TRYGGVASON et al. 2001.

d. SOLOMENKO et al. 2017 ; SUSSMAN, SMEREKA et OSHER 1994.

Quelques critères pour l'expérimentation numérique

Une lettre au Père Noël

- Choisir son point de vue
- Représenter l'interface
- Calculer la qté de mouvement : WENO5^a, SL^b, OFM^c, GFM^d
- Capter/modéliser les petites échelles (turbulence, instabilités, échanges air/océan, tension sup.)
- Interaction avec les obstacles
- ...

a. JIANG et SHU 1996.

b. QIU et SHU 2011 ; HU 2016.

c. KATAOKA 1986.

d. FEDKIW, ASLAM et XU 1999 ; LALANNE et al. 2015.

Quelques critères pour l'expérimentation numérique

Une lettre au Père Noël

- Choisir son point de vue
- Représenter l'interface
- Calculer la qté de mouvement
- Capturer/modéliser les petites échelles (turbulence, instabilités, échanges air/océan, tension sup.)
- Interaction avec les obstacles
- ...
- **Simple à paramétrer et exploiter !**

Modèle one-fluid (OFM) et quantité de mouvement



© Ray Collins



© Desmons et Coquerelle

Il faut bien démarrer...

Hypothèses / contraintes

- On veut simuler les deux phases air+océan **simultanément**
- Écoulement **incompressible**
 - $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$
 - $\rho = \text{const}$ et $\mu = \text{const}$ par phase
- On sait bien **séparer** les phases par une **interface mobile** $\Gamma(t)$

Il faut bien démarrer...

2 phases / 2 ambiances

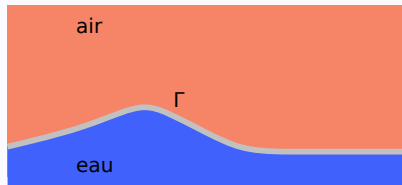
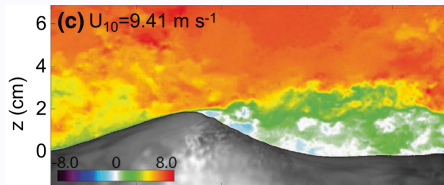


Schéma d'une simulation numérique



Expérience (PIV) de vague+vent^a

a. BUCKLEY et VERON 2017.

Il faut bien démarrer...

Équations de Navier-Stokes

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\mu \mathbf{D}) - \nabla p + \rho \mathbf{g} \quad (2)$$

Masse volumique et viscosité constantes par phase

χ : fonction caractéristique de Ω_1 (c.f. Γ)

$$\rho = \rho_1 \chi + \rho_2 (1 - \chi) \quad (3)$$

$$\mu = \mu_1 \chi + \mu_2 (1 - \chi) \quad (4)$$

Modèle one-fluid (OFM) : tellement simple !

Par simplifications algébriques

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) &= \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) + \mathbf{u} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) \\
 &= \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{u} \right) \\
 &= \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \right)
 \end{aligned}$$

OFM *standard*^a

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \rho^{-1} \nabla \cdot (\mu \mathbf{D}) - \rho^{-1} \nabla p + \mathbf{g} \quad (6)$$

a. KATAOKA 1986.

Modèle one-fluid (OFM) : c'est génial !

Des problèmes ?

- Vitesse \mathbf{u} : champ continu
 - advection : on sait *bien* faire...
 - mais grandes variations ($Re \uparrow$ et $Fr \uparrow$) !
 - $[\mu \mathbf{D}]_{\Gamma} = 0$ avec $\mu_1/\mu_2 \simeq 50$
- ρ et μ discontinus et grands *sauts* ($|\rho_1 - \rho_2|$)
 - $\nabla \cdot (\mu \mathbf{D}) = \nabla \cdot (\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T))$: diffusion \Rightarrow on sait bien faire
 - ρ^{-1} : très (très) sensible aux erreurs sur ρ !

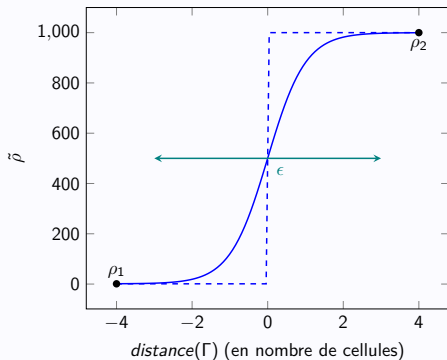
Une solution : régulariser ρ et μ sur quelques Δx

- via $\tilde{\chi}$: fraction volumique **lisse** fonction de l'**interface** Γ : $\tilde{\chi} = g(\Gamma)$
- $\rho \mathbf{u}$ discontinu devient $\tilde{\rho} \mathbf{u}$ **continu** \Rightarrow ouf! (?)

Modèle one-fluid (OFM) : c'est génial !

Une solution : **régulariser** ρ et μ sur quelques Δx

- via $\tilde{\chi}$: fraction volumique **lisse** fonction de l'**interface** Γ : $\tilde{\chi} = g(\Gamma)$
- $\rho \mathbf{u}$ discontinu devient $\tilde{\rho} \mathbf{u}$ **continu** \Rightarrow ouf! (?)



Modèle one-fluid (OFM) : quel bel algorithme !

OFM : non preserving method

$$\begin{array}{l} \text{Step 1 :} \\ \text{Interface } (\Rightarrow \text{ Mass } t^{n+1}) \end{array} \quad \Gamma^{n+1} = \text{Adv}(\Gamma^n) \Rightarrow \tilde{\chi}^{n+1} \Rightarrow \tilde{\rho}^{n+1}, \tilde{\mu}^{n+1}$$

$$\begin{array}{l} \text{Step 2 :} \\ \text{Velocity prediction } \mathbf{u}^* \end{array} \quad \mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) dt + \frac{1}{\tilde{\rho}^{n+1}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \nabla \cdot (\tilde{\mu}^{n+1} \mathbf{D}) dt + \mathbf{g}$$

$$\begin{array}{l} \text{Step 3 :} \\ \text{Pressure } p^{n+1} \end{array} \quad \nabla \cdot \left(\frac{\delta t}{\tilde{\rho}^{n+1}} \nabla p^{n+1} \right) = \nabla \cdot \mathbf{u}^*$$

$$\begin{array}{l} \text{Step 4 :} \\ \text{Velocity correction } ^1 \end{array} \quad \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\delta t}{\tilde{\rho}^{n+1}} \nabla p^{n+1}$$

1. CHORIN 1968 ; GODA 1979.

Modèle one-fluid (OFM) : oui... mais ?

De nouveaux problèmes

- **Dépend grandement** de la régularisation : $\tilde{\rho} = f(\tilde{\chi}) = f(g(\Gamma))$
 - VOF/MOF : $g \equiv K^*$ lissage par un noyau Gaussien (i.e. chaleur)
 - LS : $g \equiv H_\epsilon$, Heaviside régularisée
- On a oublié qu'il y a **splitting** des éq. $\tilde{\rho}$, $\tilde{\rho}\mathbf{u}$, χ (via Γ) !
 - Sensible à l'ordre de résolution : $(\Gamma^{n+1} \rightarrow \mathbf{u}^{n+1})$ ou $(\mathbf{u}^{n+1} \rightarrow \Gamma^{n+1})$
 - Erreurs d'ordre 1, même si schéma d'ordre élevé
 - **Incohérences** (spat. et temp.) dans les éq. de transport de $\tilde{\rho}$, $\tilde{\rho}\mathbf{u}$
- **Saut de densité important** $|\rho_1 - \rho_2| \gg 1$
 - Les erreurs en $O(|\nabla\rho|)$ ne sont pas à négliger...
 - Épaisseur $\epsilon = k\Delta x$ (**convergence** de $|\nabla\rho|$ à questionner !)

⇒ Importants **transferts parasites** de qté de mouvement
(notamment en **affinant** le maillage)

Modèle one-fluid (OFM) : erreurs temporelles

Pb. simplifié (sous forme intégrale)

$$\rho^{n+1} - \rho^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) dt = 0$$

$$(\rho \mathbf{u})^{n+1} - (\rho \mathbf{u})^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) dt = 0$$

Difficultés

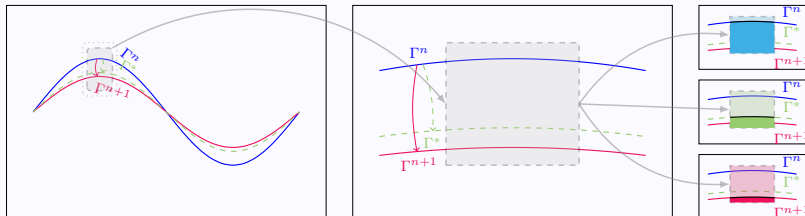
- ρ et \mathbf{u} varient en temps \Rightarrow intégrales non fusionables
- Idée : si ρ varie peu : simplifier la 2^o équ. par $\rho(t) \equiv \rho^n \simeq \rho^{n+1}$:

$$\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) dt = 0$$

Modèle one-fluid (OFM) : erreurs temporelles

Illustration

- Γ^{n+1} (donc ρ^{n+1}) : solution *exacte* (ou VOF/LS)
- Γ^* (donc ρ^*) : solution approchée / prédite
- Transition franche (*sharp*) : $\epsilon = 0$
- Erreur sur ρu en $O(\int_{\Omega} \rho^{n+1} - \rho^* dx)$ (ordre 1 et $|\rho_1 - \rho_2|$ grand)



Modèle one-fluid (OFM) : erreurs spatiales

D'autres problèmes (en Volumes Finis)

- $\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \rho \mathbf{u} \, dx = \overline{\rho \mathbf{u}} = \overline{\bar{\rho} \bar{\mathbf{u}}} + \overline{\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}} = \overline{\bar{\rho} \bar{\mathbf{u}}} + O(\Delta x^2 \rho' u')$ } : ordre 2... mais
 - $|\rho_1 - \rho_2|$ grand !
 - $\tilde{\rho} \propto |\nabla \rho| \propto \epsilon^{-1} \propto \Delta x^{-1}$!
- Potentielle inconsistance du flux advectif discret Complet / Séparé

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{\Omega_j} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) \, dx = \frac{\overline{\partial \rho u}}{\partial x} = \frac{(\rho u)_{i+1/2} - (\rho u)_{i-1/2}}{\Delta x}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x} \int_{\Omega_j} \rho u \frac{\partial}{\partial x} (u) + u \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) \, dx &= \overline{\rho u \frac{\partial u}{\partial x}} + \overline{u \frac{\partial \rho u}{\partial x}} = \overline{\bar{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}} + \overline{\bar{u} \frac{\partial \rho u}{\partial x}} + \overline{\tilde{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}} + \overline{\tilde{u} \frac{\partial \rho u}{\partial x}} \\ &= \overline{\bar{\rho} \frac{\partial u}{\partial x}} + \overline{\bar{u} \frac{\partial \rho u}{\partial x}} + O(\Delta x^2 \rho' u') \\ &\simeq \overline{\bar{\rho} u}_i \frac{(u)_{i+1/2} - (u)_{i-1/2}}{\Delta x} + \overline{\bar{u}}_i \frac{(\rho u)_{i+1/2} - (\rho u)_{i-1/2}}{\Delta x} \end{aligned}$$

Modèle one-fluid (OFM) : erreurs spatiales

D'autres problèmes (en Volumes Finis)

- $\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \rho \mathbf{u} \, d\mathbf{x} = \overline{\rho \mathbf{u}} = \bar{\rho} \bar{\mathbf{u}} + \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}} = \bar{\rho} \bar{\mathbf{u}} + O(\Delta x^2 \rho' u')$ } : ordre 2... mais
 - $|\rho_1 - \rho_2|$ grand !
 - $\tilde{\rho} \propto |\nabla \rho| \propto \epsilon^{-1} \propto \Delta x^{-1}$!
- Potentielle inconsistance du flux advectif discret
 - Schéma linéaire 1D, ordre 1 :

$$\frac{\rho_i u_i u_i - \rho_{i-1} u_{i-1} u_{i-1}}{\Delta x} \neq \rho_i u_i \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + u_i \frac{\rho_i u_i - \rho_{i-1} u_{i-1}}{\Delta x}$$

- Schémas non linéaires (WENO) : encore plus délicat !

Solution : méthodes Momentum Preserving (MP)

Idée directrice

- Advection **consistante** de ρ/Γ et $\rho\mathbf{u}$ (flux de **matière** et **mvt**)
- Fortement liée à l'interface : VOF^a, MOF^b et LSM^c
- Souvent d'ordre 1 ou 2

a. RUDMAN 1998 ; BUSSMANN, KOTHE et SICILIAN 2009 ; OWKES et DESJARDINS 2017 ; FUSTER et POPINET 2018.

b. JEMISON, SUSSMAN et ARIENTI 2014.

c. NANGIA et al. 2019 ; RAESSI et PITSCH 2012.

Notre approche : High Order Momentum Preserving (HOMP)^a

a. DESMONS et COQUERELLE 2021.

- Compatible avec les **schémas WENO** (ordre 5)
- **Indépendante de la représentation** de Γ
- **Aisée à intégrer** dans un code existant

HOMP : un principe simple

Point clef : advection d'un scalaire auxiliaire

- Masse volumique $\rho^n \rightarrow \rho^*$ prédite avec ordre élevé
- Qté de mouvement $(\rho\mathbf{u})^n = \rho^n\mathbf{u}^n \rightarrow (\rho\mathbf{u})^*$ avec ordre élevé
- Importance d'utiliser le même schéma (WENO3, WENO5)

HOMP : l'algorithme

Momentum Preserving method

Step 1 :
Interface (\Rightarrow Mass t^{n+1})

$$\Gamma^{n+1} = \text{Adv}(\Gamma^n) \Rightarrow \tilde{\chi}^{n+1} \Rightarrow \tilde{\rho}^{n+1}, \tilde{\mu}^{n+1}$$

Step 2 :
Mass prediction

$$\chi^* = \text{Adv}(\chi^n) \Rightarrow \rho^*, \mu^*$$

Step 3 :
Momentum prediction $(\rho\mathbf{u})^*$

$$(\rho\mathbf{u})^* - (\rho\mathbf{u})^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes (\rho\mathbf{u})) dt = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \nabla \cdot (\mu\mathbf{D}) + \rho g dt$$

Step 4 :
Pressure p^{n+1}

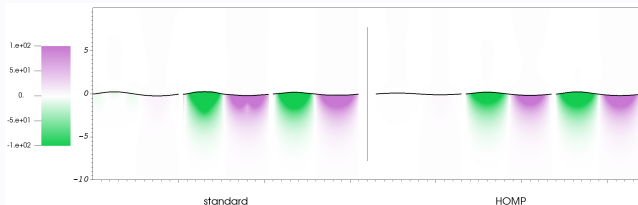
$$\nabla \cdot \left(\frac{\delta t}{\rho^*} \nabla p^{n+1} \right) = \nabla \cdot \mathbf{u}^*$$

Step 5 :
Velocity correction

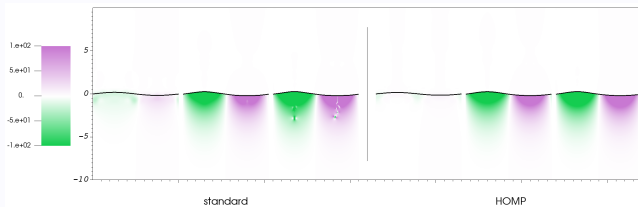
$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\delta t}{\rho^*} \nabla p^{n+1}$$

Validation : vague gravitaire stationnaire

Quantité de mouvement, convergence spatiale



First order



WENO 5

Validation : vague gravitaire stationnaire

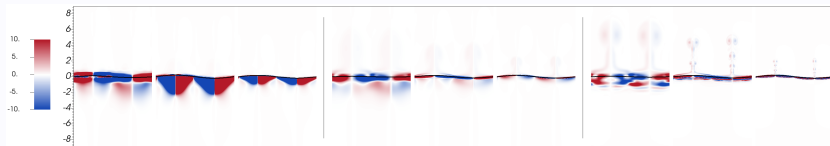
Vorticité, convergence spatiale

$$\frac{D\mathbf{w}}{Dt} = (\mathbf{w} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{\nabla\rho \times \nabla p}{\rho^3}$$

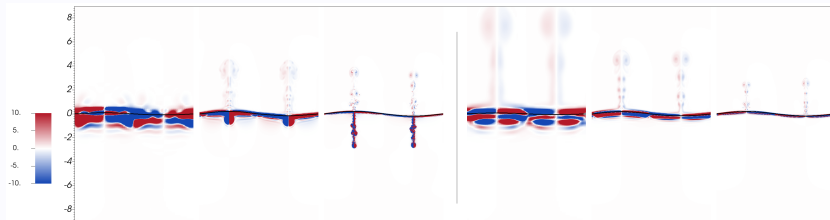
- Source de vorticité à l'interface
- Transfert dans les deux phases

Validation : vague gravitaire stationnaire

Vorticité, convergence spatiale



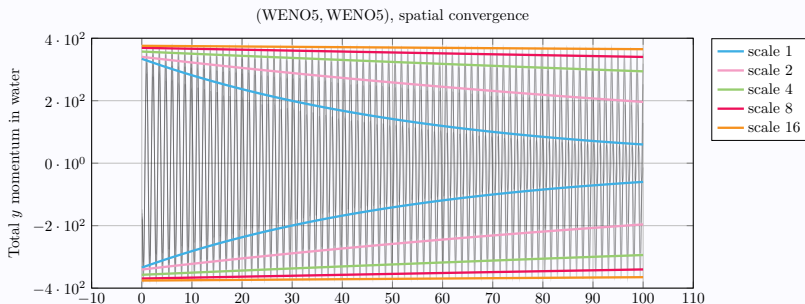
First order: standard method (left), MP(O1, O1) (center), MP(O1, WENO5) (right)



WENO 5: standard method (left), HOMP(WENO5, WENO5) (right)

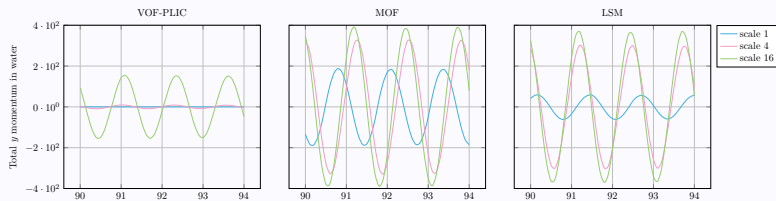
Validation : vague gravitaire stationnaire

Quantité de mvt dans l'eau, convergence spatio-temporelle

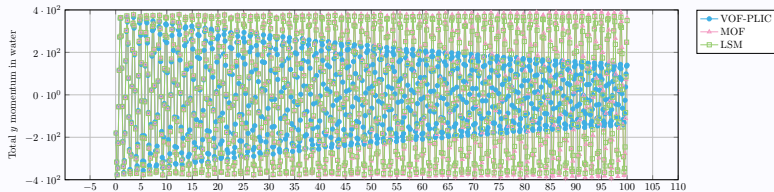


Validation : vague gravitaire stationnaire

Quantité de mvt dans l'eau, méthodes d'interface



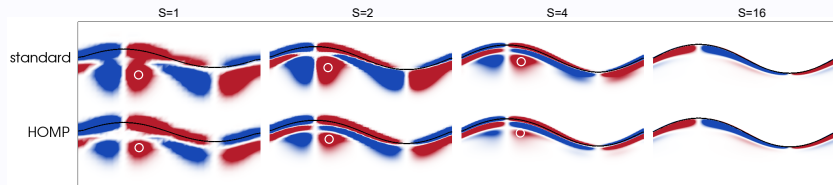
VOF-PLIC, MOF and LSM results after around 70 periods.



Comparing the three interface methods at the finest scale

Validation : vague capillaire stationnaire

Convergence spatiale



Scale (S)	1	2	4	16
standard	4.0	5.2	2.0	∅
HOMP	2.4	2.4	1.2	∅

Vorticité maximum au point d'intérêt

- LSM + WENO5
- Beaucoup moins de **débord** de chaque côté de l'interface

Application : vague plongeante

Paramétrage

- Conditions initiales :

$$\eta_0(x) = A \cdot \cos(kx)$$

$$\mathbf{u}_0(x, y) = Ac \begin{pmatrix} \frac{\cosh(k(y+d))}{\sinh(kd)} \cdot \cos(kx) \\ \frac{\sinh(k(y+d))}{\sinh(kd)} \cdot \sin(kx) \end{pmatrix}$$

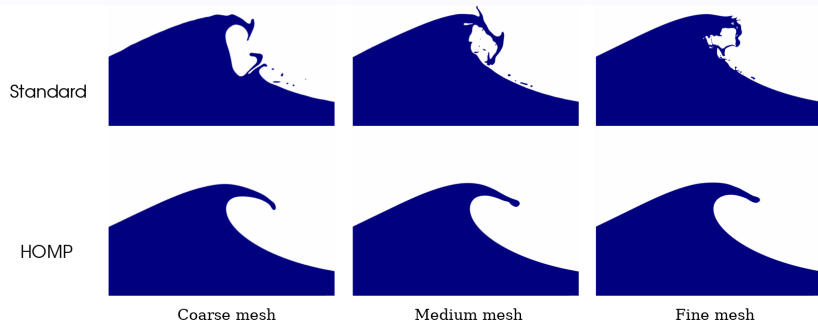
$$c = \sqrt{(gk + \gamma\rho_w k^3) \tanh(kd)}$$

- Domaine : $1m \times 1m$, $d = 0.5m$, $\lambda = 2\pi/k = 1m$, $Ak = 0.45$
- Méthodes numériques : VOF (smooth x3) + WENO5, CFL = 0.3
- Mesh : $512^2 \simeq 0.2 M$ cells (coarse), $1024^2 \simeq 1 M$ cells (medium), $2048^2 \simeq 4 M$ cells (fine, $\Delta x \simeq 0.5 mm$)
- Voir ^{a b c}

-
- DEIKE, POPINET et MELVILLE 2015.
 - LUBIN et GLOCKNER 2015.
 - IAFRATI, BABANIN et ONORATO 2014.

Application : vague plongeante

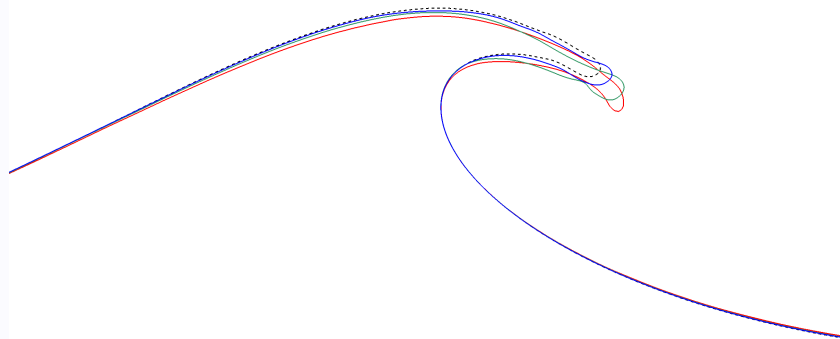
Convergence spatiale



- Instabilités parasites dues au transfert de qté de mvt corrigées

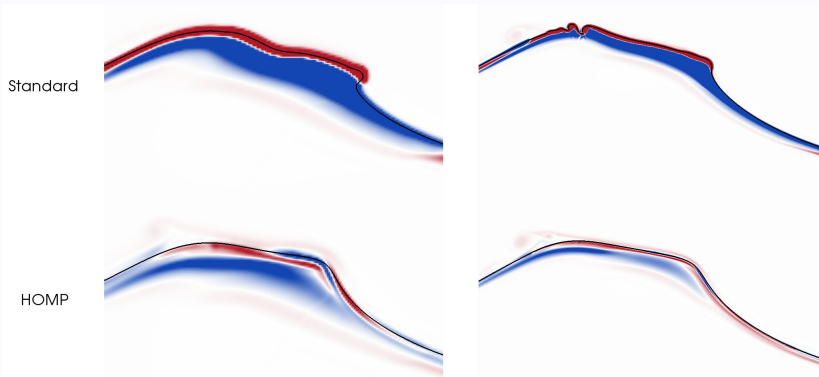
Application : vague plongeante

Convergence spatiale : focus sur le front



Application : vague plongeante

Convergence spatiale : focus sur la crête, vorticité



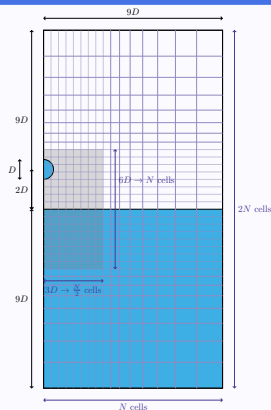
Application : impacts de goutte 

Paramétrage

	Case B from Morton ^a	Case III from Cole ^b
Fr	220	67
We	248	62
Re	7250	3082
$D(m)$	2.9×10^{-3}	2.63×10^{-3}
$U(m/s)$	2.5	1.32

a. MORTON, RUDMAN et JONG-LENG 2000.

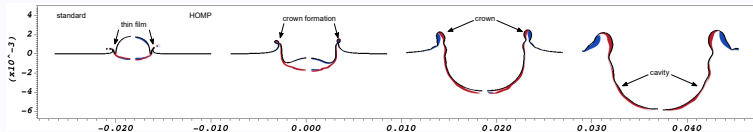
b. COLE 2007.



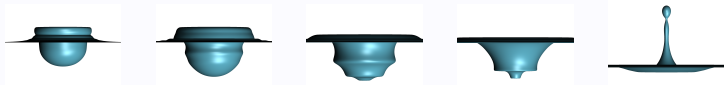
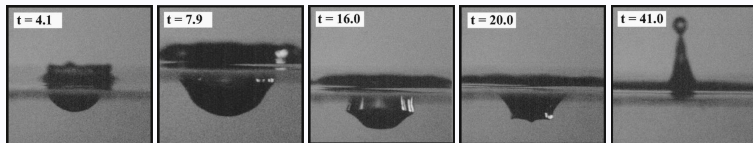
- Avec $2M$ de cellules, soit $\Delta x \simeq 1.5 \times 10^{-5}m$ et $\Delta x/D = 170$.
- Méthodes num. : LSM + WENO5

Application : impacts de goutte

Morton case B



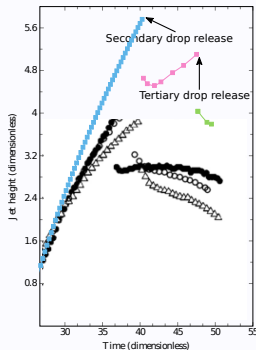
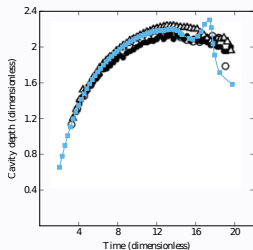
Comparaison des profils de la surface et vorticité



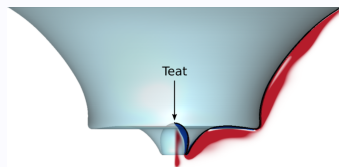
Comparaison avec l'expérience

Application : impacts de goutte

Morton case B



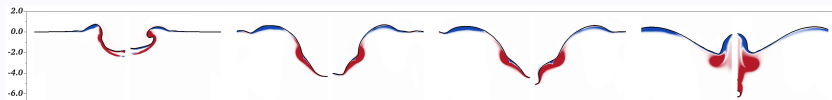
Comparaisons quantitatives



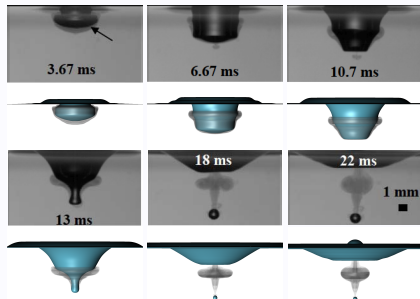
Zoom sur la rétraction de la cavité

Application : impacts de goutte

Cole case III



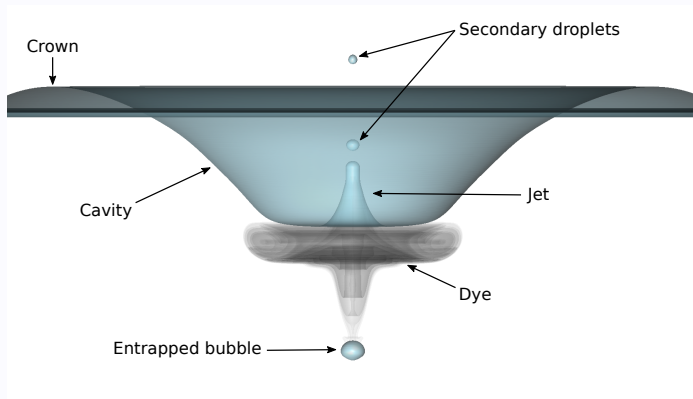
Profils de la surface libre et vorticité (gauche : std, droite : HOMP)



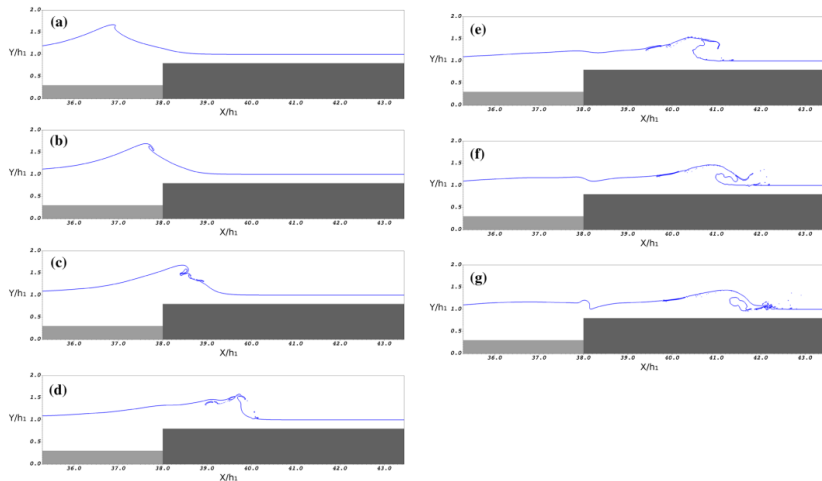
Comparaison avec l'expérience

Application : impacts de goutte

Cole case III



Focus sur les différents phénomènes apparents

Application : Desmons et Lubin in *Water waves 2022*

Time evolutions of the free-surface profiles of the incident solitary waves propagating over the double reef, up to the impact of the subsequent plunging jets, with the early stages of the splash-up generations. $R_1/h_1 = 0.8$, $R_2/h_1 = 0.3$ and $X_1/h_1 = 13$. [Desmons et Lubin in *Water waves 2022*]²

HOMP : à retenir

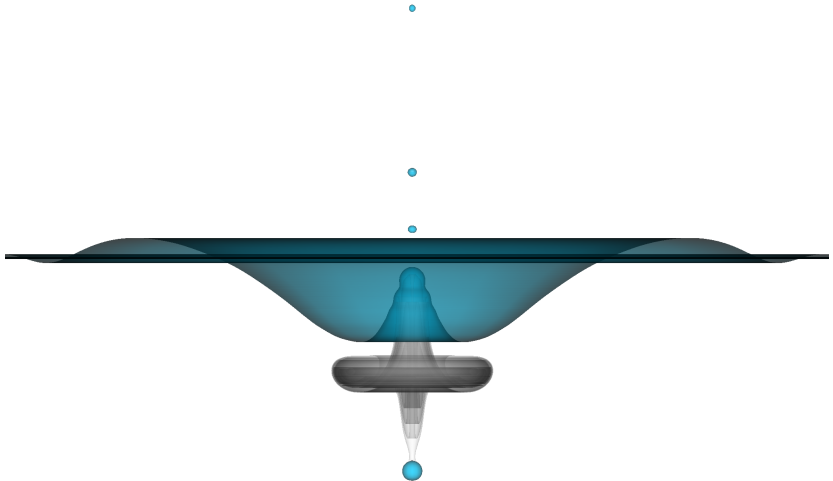
Avantages

- Transport de qté de mouvement **d'ordre élevé**
- **Réduit drastiquement** les transferts de quantité de mouvement
- **Indépendant** de la méthode d'**interface**
- **Très facile à intégrer** (advection scalaire supplémentaire)

Problèmes / pistes de recherche

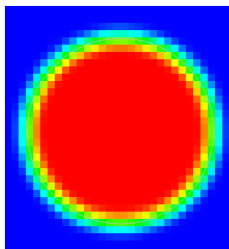
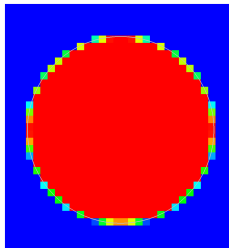
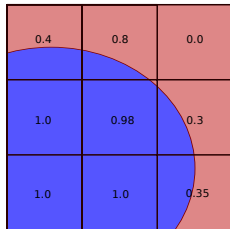
- Anecdote : interpolations grille MAC pour ρ et \mathbf{u}
- Rare : schémas **non monotones** (masse négative $\Rightarrow \rho\mathbf{u}$ instable)
- Persistant : **décalage** entre $\rho(\Gamma^{n+1})$ et $\rho^* : \rho^*\mathbf{u}^{n+1} \rightarrow \rho^{n+1}\mathbf{u}^{n+1}$
- Persistant : **décalage** entre $\overline{\rho^{-1}\nabla\rho}$ et $\overline{\rho^{-1}\nabla\bar{p}}$
- Inhérent : $\epsilon = k\Delta x$ pose des problèmes qd $\Delta x \rightarrow 0$

Méthodes level set (LSM) et redistanciation



Des phases à la fraction volumique (via l'interface Γ)

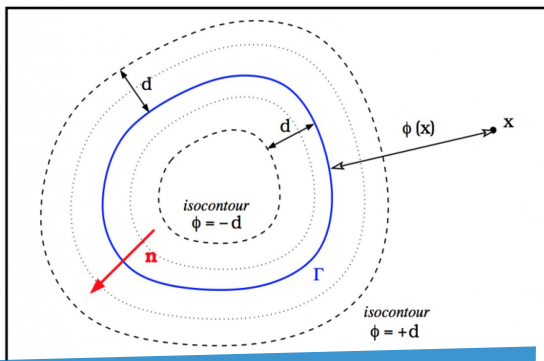
Eau 
 Air 
 Γ 



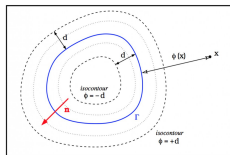
Level set : définition

Formellement

$$\phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \quad \begin{cases} < 0 & \text{à l'intérieur} \\ = 0 & \text{à l'interface } \Gamma \\ > 0 & \text{à l'extérieur} \end{cases}$$



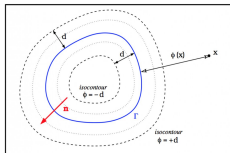
Level set : définition



Level set $\phi \rightarrow$ Fonction caractéristique χ (fraction volumique)

$$\chi \equiv H_{\epsilon}(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \phi < -\epsilon \\ 1 & \text{si } \phi > +\epsilon \\ \frac{1}{2}(\tanh(\phi/\epsilon) + 1) & \text{sinon} \end{cases}$$

Level set : définition



Level set $\phi \rightarrow$ Fonction caractéristique χ (fraction volumique)

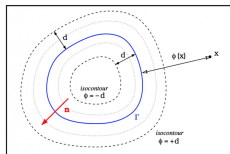
$$\chi \equiv H_\epsilon(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \phi < -\epsilon \\ 1 & \text{si } \phi > +\epsilon \\ \frac{1}{2}(\tanh(\phi/\epsilon) + 1) & \text{sinon} \end{cases}$$

En bonus

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$$

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}$$

Level set : définition



Transport de l'interface

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \phi = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\chi \epsilon$$

$$\Rightarrow$$

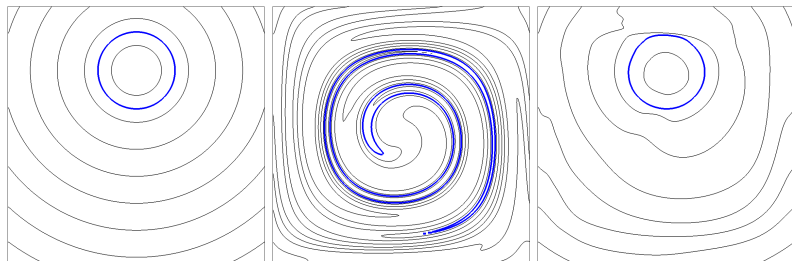
$$\rho$$

$$\Downarrow$$

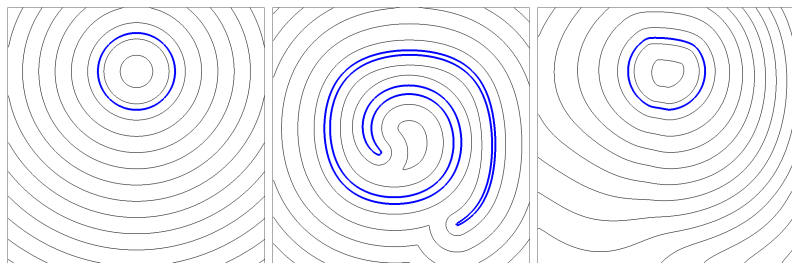
$$N.S.$$

- Schéma WENO5 + RK

Problème de distorsion ?

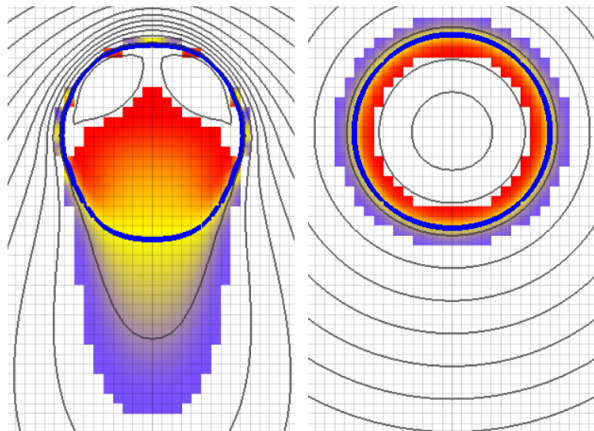



Sans correction



Avec correction

Problème de distorsion !



Comparaison sans et avec *correction*³ , comparaison à l'expérience

3. HENRI 2021.

Redistanciation / Réinitialisation

Principe (eq. Hamilton-Jacobi)

$$\begin{array}{lcl}
 \phi \text{ fonction distance} & \iff & |\nabla\phi| = 1 \\
 & \downarrow & \\
 \frac{\partial\psi}{\partial\tau} + \text{sgn}(\phi)(|\nabla\psi| - 1) = 0 & \text{avec} & \psi(\tau = 0) = \phi(t) \\
 & \text{quand} & \tau \rightarrow +\infty
 \end{array}$$

Difficultés

- WENO5 ($\nabla\phi$) + RK3 : coût CPU
- Conditions limites ?
- **Fréquence** (tous les 10 pas de temps ?)
 - Trop : perturbations importantes (pertes de masse, oscillation, ...)
 - Pas assez : trop de distorsion

Réinitialisation avec les Closest Points (RCP) ⁴

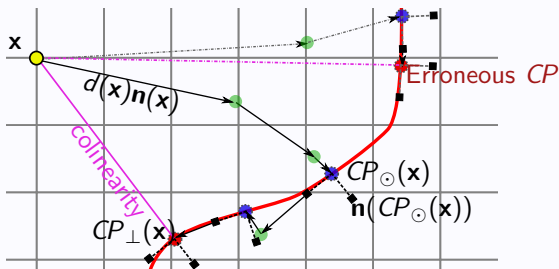
Principe : une approche géométrique

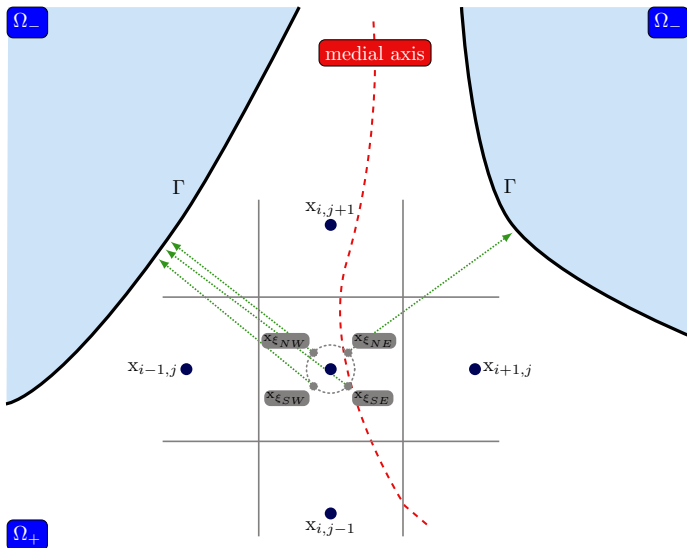
- Distance au point le plus proche :

$$\psi(\mathbf{x}) = \text{sgn}(\phi(\mathbf{x})) \|\overrightarrow{\mathbf{x} \text{CP}(\mathbf{x})}\| \Rightarrow |\psi| = 1$$

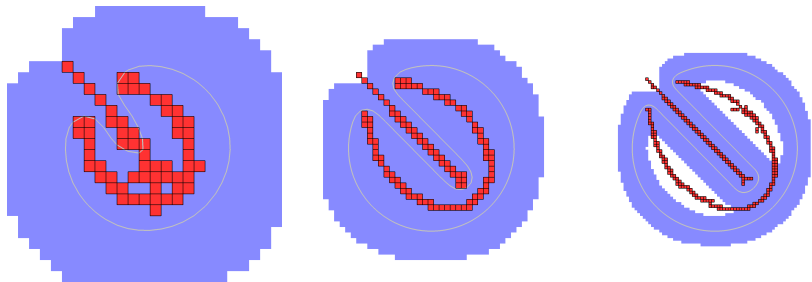
- Closest Point (CP)

- Critères : $\phi(\text{CP}(\mathbf{x})) = 0$ et colinéarité : $\mathbf{n}(\text{CP}(\mathbf{x})) \parallel \overrightarrow{\mathbf{x} \text{CP}(\mathbf{x})}$
- Descente (itérative) : $\text{CP}_k(\mathbf{x}) \simeq \mathbf{x}_k - d_k \mathbf{n}_k \simeq \mathbf{x}_k - \frac{\phi(\mathbf{x}_k)}{|\nabla \phi(\mathbf{x}_k)|} \frac{\nabla \phi(\mathbf{x}_k)}{|\nabla \phi(\mathbf{x}_k)|}$



RCP : quelques difficultés : les *kinks*

RCP : quelques difficultés : les *kinks*

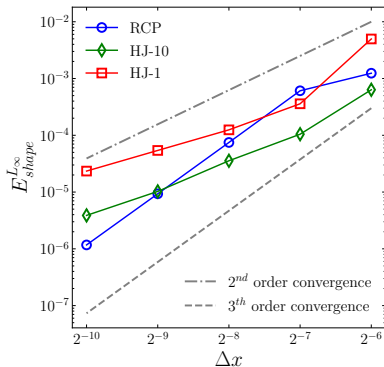
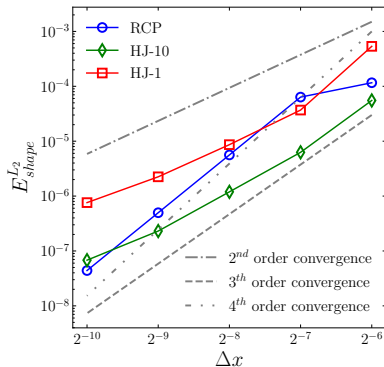


Les kinks ?

- Points équidistants à Γ : ambiguïté
- Champ ϕ pas très bien défini (uniquement C^0)
- Perturbe les méthodes num. à prox. Γ
 - Une des raisons du WENO5
 - Axe de recherche pour les petites structures ?

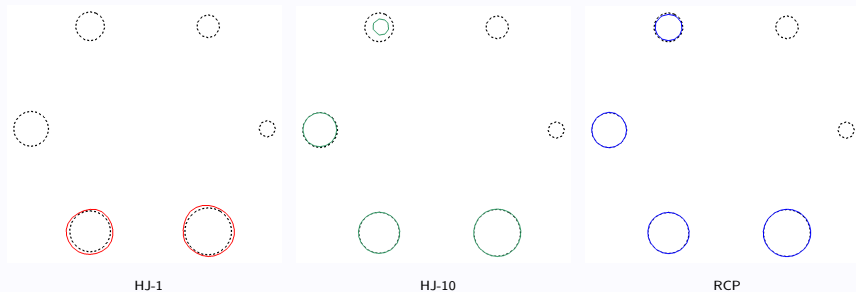
Convergence sur plusieurs cas test

Rotation d'un cercle



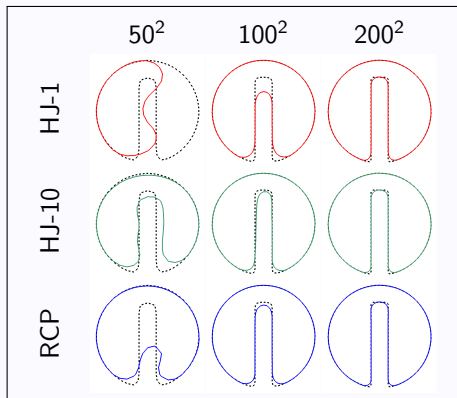
Convergence sur plusieurs cas test

Rotation de plusieurs cercles



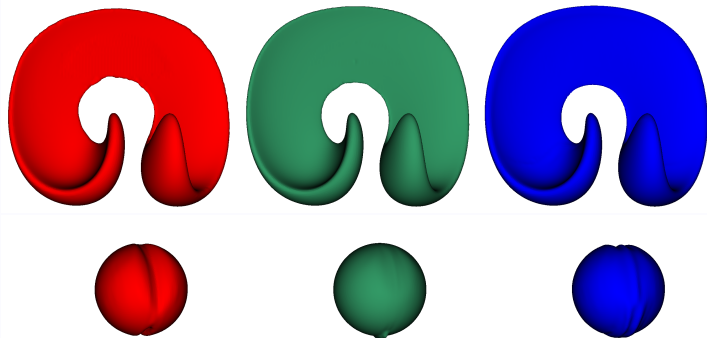
Convergence sur plusieurs cas test

Rotation du disque de Zalesak



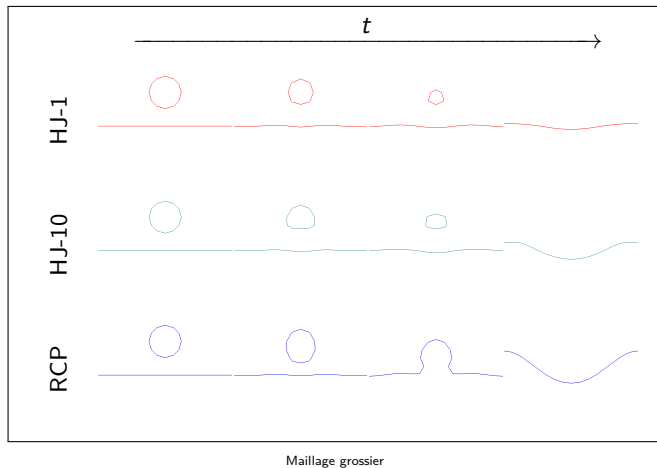
Convergence sur plusieurs cas test

Rotation d'une sphère

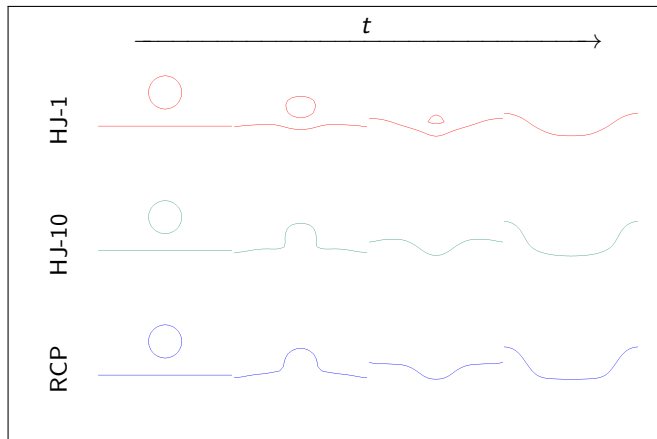


HJ-1 | HJ-10 | RCP

Validation : impact d'une goutte

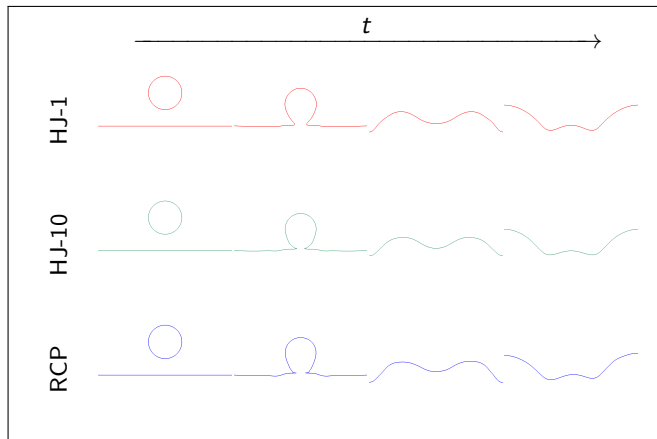


Validation : impact d'une goutte



Maillage intermédiaire

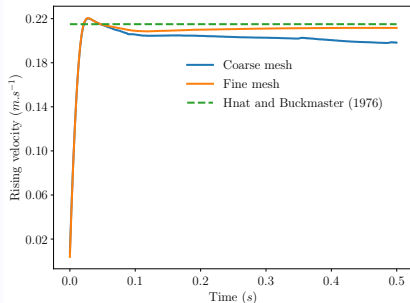
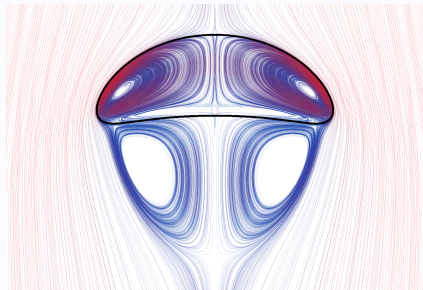
Validation : impact d'une goutte



Maillage fin

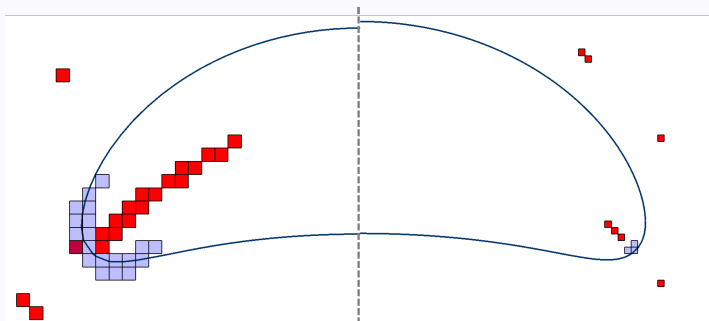
Validation : remontée d'une bulle

Résultats



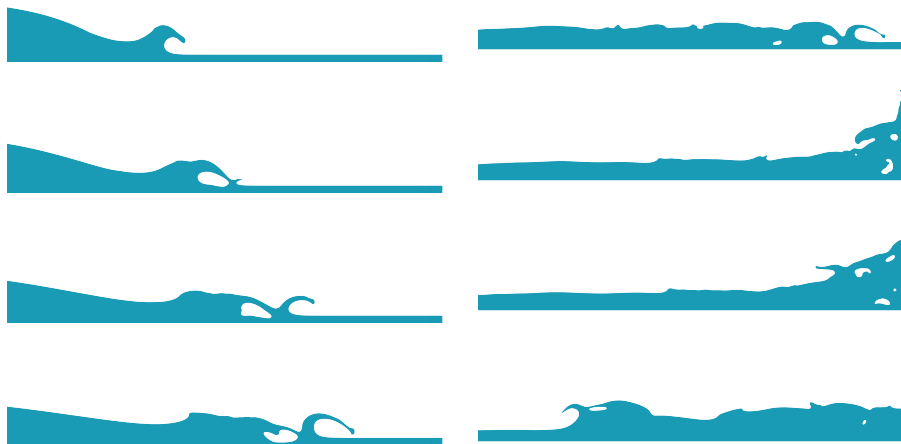
Validation : remontée d'une bulle

Difficulté aux kinks



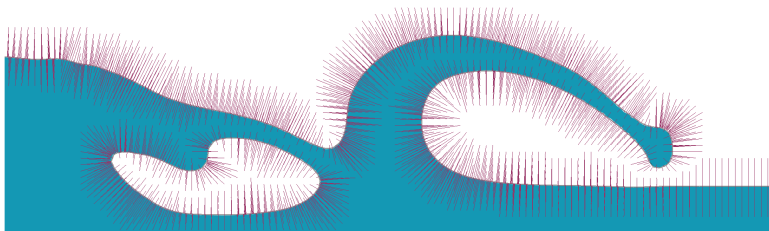
Kinks : maillage grossier (gauche) et fin (droite)

Application : rupture de barrage 2D

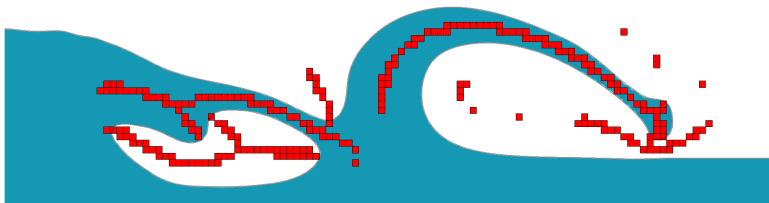


Application : rupture de barrage 2D

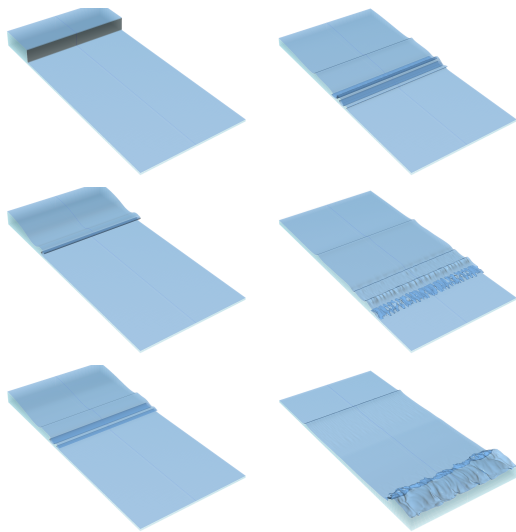
CP



Kinks



Application : rupture de barrage 3D



RCP : à retenir

Avantages

- Réinitialisation **robuste tous** les pas de temps
- Approche géométrique \neq EDP
- Bande restreinte : pas de condition *au loin* à gérer
- Ordre dépend de l'interpolation (ordre 4 ici)

Problèmes / pistes de recherche

- Temps de calcul : HJ-10 \sim RCP \ll HJ-1
- Petites structures : toujours un challenge (prox. kinks)
- Implémentation un peu plus complexe que HJ
- Algorithme descente : autre approche possible ? (minimisation)

notus

Computational Fluid Dynamics

*S. Glockner, M. Coquerelle, A. Lemoine, J. Picot
A. Jost, F. Desmons, F. Salmon, M. Ciallella, J. Jansen, A. Vergnaud
F. Henri, Q. Thomas, O. Gentieu., A. Palencia
H. Bouare, I. Daoudi, A. Lefay, N. Bourdineaud, G. Suau, R. Colombier,
T. Baldaccino, C. Palka*

Code CFD massivement parallèle

Points clefs

- **Open Source** (<https://www.notus-cfd.org>) en Fortran
- Écoulements fluides **incompressibles** et **faiblement compressibles**
- **Volumes Finis** 2D et 3D sur maillage **cartésien**
- **Massivement parallèle** (efficace $> 100k$ CPU pour 10G noeuds!)
 - GENCI/PRACE, mésocentres de calcul MCIA
 - ... ordinateur de bureau et portable!
- Pour les communautés :
 - **Mécanique** : facile à utiliser, méthodes de l'état de l'art, expérimentation numérique intensive, code Fortran utilisateur
 - **Math. numérique** : plate-forme de développement de schémas numériques, importante base de cas de validation et benchmarks, boîte à outils numériques
 - Pour les cours et l'industrie
- **Documenté**, *facile* à installer

Modèles et méthodes natifs

Modèles

- Frontières immergées (1° et 2° ordre)
- Masse volumique variable (Boussinesq), énergie, tables NIST
- LES et RANS $k-\omega$ SST
- Deux-phases (VOF, MOF, LSM, PF) \oplus tension de surface (CSF)
- Scalaires passifs, changement de phase, ...

Méthodes numériques

- Schémas temporels : IMEX, SBDF, RK
- Schémas spatiaux : centrés, TVD \oplus Superbee, WENO5, HOUCL, SL
- Time splitting (Goda, Timmermans)
- Tension de surface et courbure : Heigh Function, Closest Point
- Solveurs : HYPRE, MUMPS, interne, ...

Exemple de fichier d'entrée

```

double H = 1.5; double V_wind=2.0;
system { measure_cpu_time; }
domain { spatial_dimension 2; corner_1_coordinates (0.0, 0.0); corner_2_coordinates (1.0, 2.0); }
grid { grid_type regular; number_of_cells (1024, 1024); }

modeling {
  materials {
    fluid "water_20C"; fluid "air_20C";
    initial_condition { fluid "water" { shape "wave"; } } }
}
equations {
  navier_stokes {
    boundary_condition{ bottom wall; left inlet { instructions { @if(@y>H){@return (V_wind,0.0)} } }; right neumann; top slip;
    gravity_term (0.0, 9.81);
    surface_tension constant 73e-3;
  }
}
}

numerical_parameters {
  time_iterations 1000; time_step fixed 1e-3;
  navier_stokes {
    solver hypre_gmres;
    advection_scheme explicit weno5;
    momentum_preserving_method true;
    gravity_term crank_nicolson;
  }
  phase_advection { levelset { mass_conservation true; } }
}


post_processing {
  output_library adios;
  output_fields velocity, pressure, volume_fraction, levelset field, interface curvature;
}

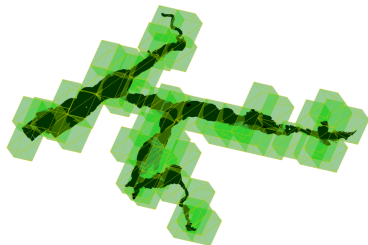
```

Illustration d'autres applications

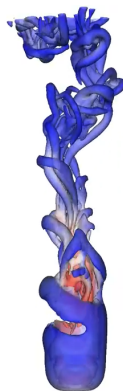
Micro to milli tube-in-tube chemical processes
Production rate 1 → 90




Mélange d'éthanol et de CO₂ supercritique [Glockner et al. 2022] 



Micro climat des grottes de Lascaux [Salmon et al. 2021]



Goutte ($D = 5\text{mm}$) à vitesse terminale [Henri et al. 2019] 

Conclusion

Points clefs

- HOMP
 - Baisse drastique des transferts *parasites* de qté de mouvement
 - Méthode implémentable aisément *partout*
- LSM+RCP
 - Robuste et efficace (similaire HJ)
 - À chaque pas de temps, moins de paramètres
 - Tension superficielle précise et fiable
- Notus : code efficace et utilisable pour mécaniciens et numériciens

Pistes de recherche

- Schémas d'advection monotones d'ordre élevé
- LSM
 - Petites structures / perte de volume (locale)
 - Multiphase (> 2) et ligne triple

Bibliographie I

- HIRT, C. W et B. D NICHOLS (jan. 1981). "Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries". en. In : *Journal of Computational Physics* 39.1, p. 201-225.
- QIU, Jing-Mei et Chi-Wang SHU (fév. 2011). "Conservative high order semi-Lagrangian finite difference WENO methods for advection in incompressible flow". en. In : *Journal of Computational Physics* 230.4, p. 863-889.
- BRACKBILL, J. U, D. B KOTHE et C ZEMACH (juin 1992). "A continuum method for modeling surface tension". en. In : *Journal of Computational Physics* 100.2, p. 335-354.
- JIANG, Guang-Shan et Chi-Wang SHU (juin 1996). "Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes". en. In : *Journal of Computational Physics* 126.1, p. 202-228.

Bibliographie II

- BUCKLEY, Marc P. et Fabrice VERON (oct. 2017). "Airflow measurements at a wavy air-water interface using PIV and LIF". en. In : *Experiments in Fluids* 58.11, p. 161.
- FEDKIW, Ronald P, Tariq ASLAM et Shaojie XU (sept. 1999). "The Ghost Fluid Method for Deflagration and Detonation Discontinuities". en. In : *Journal of Computational Physics* 154.2, p. 393-427.
- COLE, D. (2007). *The Splashing Morphology of Liquid-liquid Impacts*. English. James Cook University.
- CHORIN, Alexandre Joel (1968). "Numerical solution of the Navier-Stokes equations". en. In : *Mathematics of Computation* 22.104, p. 745-762.
- RUDMAN, Murray (1998). "A volume-tracking method for incompressible multifluid flows with large density variations". In : *International Journal for numerical methods in fluids* 28.2. Publisher : Wiley Online Library, p. 357-378.

Bibliographie III

- KATAOKA, I. (sept. 1986). "Local instant formulation of two-phase flow". en. In : *International Journal of Multiphase Flow* 12.5, p. 745-758.
- GODA, Katuhiko (jan. 1979). "A multistep technique with implicit difference schemes for calculating two- or three-dimensional cavity flows". en. In : *Journal of Computational Physics* 30.1, p. 76-95.
- TRYGGVASON, G. et al. (mai 2001). "A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow". en. In : *Journal of Computational Physics* 169.2, p. 708-759.
- NANGIA, Nishant et al. (août 2019). "A robust incompressible Navier-Stokes solver for high density ratio multiphase flows". en. In : *Journal of Computational Physics* 390, p. 548-594.
- AVESANI, Diego et al. (août 2021). "An alternative SPH formulation : ADER-WENO-SPH". en. In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 382, p. 113871.

Bibliographie IV

- HU, Fuxing (déc. 2016). “Conservative and Easily Implemented Finite Volume Semi-Lagrangian WENO Methods for 1D and 2D Hyperbolic Conservation Laws”. en. In : *Journal of Applied Mathematics and Physics* 5.1. Number : 1 Publisher : Scientific Research Publishing, p. 59-82.
- LALANNE, Benjamin et al. (2015). “On the computation of viscous terms for incompressible two-phase flows with Level Set/Ghost Fluid Method”. In : *Journal of Computational Physics* 301, p. 289-307.
- BUSSMANN, Markus, Douglas B. KOTHE et James M. SICILIAN (fév. 2009). “Modeling High Density Ratio Incompressible Interfacial Flows”. en. In : American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, p. 707-713.
- HENRI, Felix (déc. 2021). “Améliorations des méthodes Level Set pour l’impact de goutte de pluie”. These de doctorat. Bordeaux.

Bibliographie V

- SOLOMENKO, Zlatko et al. (oct. 2017). "Mass conservation and reduction of parasitic interfacial waves in level-set methods for the numerical simulation of two-phase flows : A comparative study". en. In : *International Journal of Multiphase Flow* 95, p. 235-256.
- MORTON, David, Murray RUDMAN et Liow JONG-LENG (mar. 2000). "An investigation of the flow regimes resulting from splashing drops". In : *Physics of Fluids* 12.4. Publisher : American Institute of Physics, p. 747-763.
- FUSTER, Daniel et al. (déc. 2009). "Numerical simulation of droplets, bubbles and waves : state of the art". en. In : *Fluid Dynamics Research* 41.6. Publisher : IOP Publishing, p. 065001.
- LUBIN, P. et S. GLOCKNER (mar. 2015). "Numerical simulations of three-dimensional plunging breaking waves : generation and evolution of aerated vortex filaments". en. In : *Journal of Fluid Mechanics* 767. Publisher : Cambridge University Press, p. 364-393.

Bibliographie VI

- OWKES, Mark et Olivier DESJARDINS (mar. 2017). "A mass and momentum conserving unsplit semi-Lagrangian framework for simulating multiphase flows". en. In : *Journal of Computational Physics* 332, p. 21-46.
- DEIKE, Luc, Stephane POPINET et W. Kendall MELVILLE (avr. 2015). "Capillary effects on wave breaking". en. In : *Journal of Fluid Mechanics* 769. Publisher : Cambridge University Press, p. 541-569.
- FUSTER, Daniel et Stéphane POPINET (déc. 2018). "An all-Mach method for the simulation of bubble dynamics problems in the presence of surface tension". en. In : *Journal of Computational Physics* 374, p. 752-768.
- RAESSI, Mehdi et Heinz PITSCH (juin 2012). "Consistent mass and momentum transport for simulating incompressible interfacial flows with large density ratios using the level set method". en. In : *Computers & Fluids* 63, p. 70-81.

Bibliographie VII

- DESMONS, Florian et Mathieu COQUERELLE (2021). “A generalized high-order momentum preserving (HOMP) method in the one-fluid model for incompressible two phase flows with high density ratio”. In : *Journal of Computational Physics* 437, p. 110322.
- MILCENT, Thomas et Antoine LEMOINE (mai 2020). “Moment-of-fluid analytic reconstruction on 3D rectangular hexahedrons”. en. In : *Journal of Computational Physics* 409, p. 109346.
- IAFRATI, A., A. BABANIN et M. ONORATO (août 2014). “Modeling of ocean-atmosphere interaction phenomena during the breaking of modulated wave trains”. en. In : *Journal of Computational Physics. Frontiers in Computational Physics* 271, p. 151-171.

Bibliographie VIII

- COQUERELLE, Mathieu et Stéphane GLOCKNER (jan. 2016). "A fourth-order accurate curvature computation in a level set framework for two-phase flows subjected to surface tension forces". en. In : *Journal of Computational Physics* 305, p. 838-876.
- DESMONS, Florian et Pierre LUBIN (nov. 2022). "Numerical Simulations of Waves Breaking over a Rectangular Submerged Reef Consisting of a Double Step : Analogies with massive Natural Wave Breaking over Abrupt Bathymetries". en. In : *Water Waves* 4.3, p. 379-407.
- DYADECHKO, Vadim et Mikhail SHASHKOV (2005). *Moment-of-fluid interface reconstruction*. Rapp. tech. Los Alamos National Laboratory, Oct 2005.
- SUSSMAN, Mark, Peter SMEREKA et Stanley OSHER (sept. 1994). "A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow". en. In : *Journal of Computational Physics* 114.1, p. 146-159.

Bibliographie IX

- HENRI, Félix, Mathieu COQUERELLE et Pierre LUBIN (2022). “Geometrical level set reinitialization using closest point method and kink detection for thin filaments, topology changes and two-phase flows”. In : *Journal of Computational Physics* 448, p. 110704.
- JEMISON, Matthew, Mark SUSSMAN et Marco ARIENTI (déc. 2014). “Compressible, multiphase semi-implicit method with moment of fluid interface representation”. en. In : *Journal of Computational Physics* 279, p. 182-217.

Tension superficielle et courbure

Modèle et méthodes numériques

Modèle CSF^a

$$[\rho]_{\Gamma} = \sigma \kappa \quad \Rightarrow \quad \mathbf{f} = \sigma \kappa \mathbf{n}_{\Gamma} \delta_{\Gamma}$$

$$\mathbf{f} \simeq \sigma \kappa \nabla \chi_{\epsilon}$$

a. BRACKBILL, KOTHE et ZEMACH 1992.

Modèle et méthodes numériques

Modèle CSF^a

$$[\rho]_{\Gamma} = \sigma \kappa \quad \Rightarrow \quad \mathbf{f} = \sigma \kappa \mathbf{n}_{\Gamma} \delta_{\Gamma}$$

$$\mathbf{f} \simeq \sigma \kappa \nabla \chi_{\epsilon}$$

a. BRACKBILL, KOTHE et ZEMACH 1992.

Challenge : (bien) calculer κ

Modèle et méthodes numériques

Modèle CSF^a

$$[p]_{\Gamma} = \sigma\kappa \Rightarrow \mathbf{f} = \sigma\kappa\mathbf{n}_{\Gamma}\delta_{\Gamma}$$

$$\mathbf{f} \simeq \sigma\kappa\nabla\chi_{\epsilon}$$

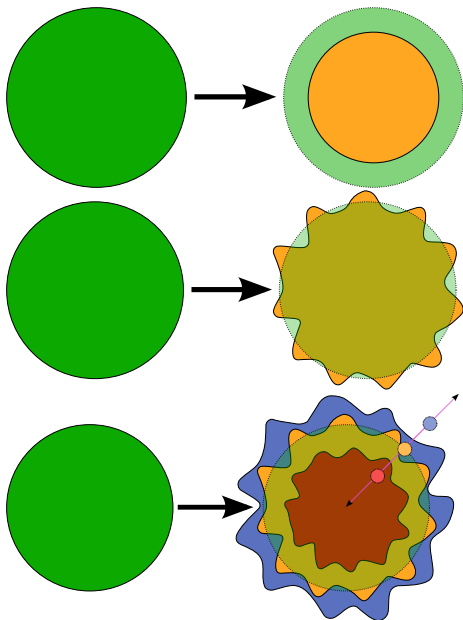
a. BRACKBILL, KOTHE et ZEMACH 1992.

Difficultés

- *Well balanced* avec équation sur p .
- $\kappa = f(\Delta\chi_{\epsilon}) = f(\text{"dérivées secondes"} \text{ de } \Gamma)$
 - Ordre élevé?... Ok... (VOF : HF en 2D/3D, LS : $\nabla \cdot (\nabla\phi/|\nabla\phi|)$)
 - Dérivées secondes Γ **convergent** ssi Γ à l'ordre > 2 !^a
- *Sens* de κ hors interface ?

a. COQUERELLE et GLOCKNER 2016.

Extension de la courbure



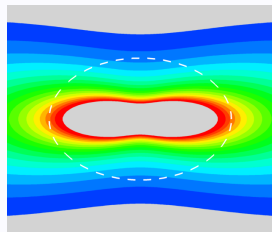
Extension de la courbure

Idée

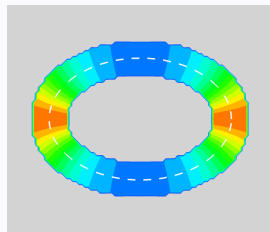
- La courbure doit être constante le long de la normale

Solution

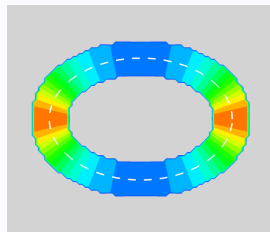
$$\kappa(\mathbf{x}) = \kappa(\text{CP}(\mathbf{x}))$$



Standard



CP non colinéaire



CP colinéaire