UNIVERSITE CATHOLIQUE DE LOUVAIN
Faculté des Sciences Appliquées
Département de Mécanique
Unité de Mécanique Appliquée
Place du Levant, 2 1348 - LOUVAIN-LA-NEUVE

BIBLIOTHEQUE DES SCIENCES EXACTES
3, Place des Sciences
1348 LOUVAIN-LA-NEUVE - Belgium

METHODES D'ELEMENTS FINIS POUR LE CALCUL D'ECOULEMENTS TRIDIMENSIONNELS A SURFACES LIBRES

V. LEGAT

Promoteurs :
Prof. M.J. Crochet
Dr. J.M. Marchal

Thèse présentée en vue de
l'obtention du grade de
Docteur en Sciences Appliquées

Septembre 1992

A l'issue de mes travaux de recherches , je souhaite exprimer mes plus sincères remerciements à tous ceux qui ont contribué à la réalisation de cette thèse de doctorat.

Tout d'abord, je voudrais exprimer ma gratitude aux promoteurs de ce travail. Le Professeur Marcel Crochet a su apporter son inestimable compétence dans un souci de grande rigueur, tandis que le Docteur Jean-Marie Marchal m'a soutenu de son enthousiasme vif et créatif.

Je tiens également à exprimer ma reconnaissance aux Professeurs Le Tallec, Meinguet et Keunings d'avoir accepté de participer au jury.

L'édition de ce travail est l'oeuvre de Monsieur Victor Vermeulen que je remercie vivement pour sa disponibilité et sa compétence.

Les années passées au sein d'une équipe débordante de vitalité sont une des facettes les plus souriantes de cette thèse . Les discussions amicales et efficaces ont créé une complicité qui a été un ingrédient indispensable à la réalisation de ce travail. Que les chercheurs de l'unité MEMA sachent combien j'ai apprécié leur compétence et leur enthousiasme. Mes remerciements vont également aux collègues de la "filiale" Polyflow qui ont toujours été disponibles pour un coup de main occasionnel ou un échange fructueux.

Enfin, il me faut souligner le soutien discret et efficace que Pascale et Camille m'ont apporté tout au long de la réalisation de ce travail.

Table des matières.

	Introduction	1
Chapitre 1	Equations d'un écoulement à surfaces libres	7
1.1	Equations de champ	7
1.2	Equations de constitution	9
1.3	Problème d'un écoulement viscoélastique à surfaces libres	13
1.3.1	Résultats théoriques	13
1.3.2	Formulation du problème	15
Chapitre 2	Déformation du maillage	23
2.1	Topologie des maillages	24
2.1.1	Orientation et dimension des objets	25
2.1.2	Algèbre de sous-maillages	31
2.1.3	Macro-structure d'un maillage	33
2.2	Critères de déformation d'un maillage	36
2.3	Techniques de déformation de maillages	37
2.3.1	Transformation en Laplacien	39
2.3.2	Transformation de Thompson	41
2.3.3	Transformation par analogie au treillis	44
2.3.4	Transformations par proportionnalité	45
2.4	Hiérarchie des déformations	55

Chapitre 3	Simulation d'écoulements à surfaces libres	67
3.1	Position du problème	68
3.1.1	Techniques des éléments finis	69
3.1.2	Schémas itératifs	71
3.1.3	Techniques de continuation	73
3.2	Simulation d'écoulements tridimensionnels à surfaces libres	81
	"Prediction of Three-Dimensional General Shape Extrudates by an Implicit iterative Scheme" (Int. J. Num. Meth. Fluids)	82
Chapitre 4	Multiplicateurs de Lagrange et contraintes	109
4.1	Eléments finis contraints	110
4.2	Eléments finis et multiplicateurs de Lagrange	115
4.2.1	Choix d'un interpolant pour un multiplicateur de Lagrange	118
4.2.2	Multiplicateurs générés au sein d'une méthode de Galerkin	121
4.3	Multiplicateurs, contraintes et problèmes aux frontières libres	123
4.4	Multiplicateurs, contraintes et éléments finis hiérarchiques	127
4.5	Multiplicateurs, contraintes et problèmes inverses	131
	"Die design : an Implicit Formulation based for the Inverse Problem" (Int. J. Num. Meth. Fluids)	133
	"Three-Dimensional Extrusion : an Implicit Formulation for Generalized Newtonian Fluids" (Proc. of XIth Int. Cong. Rheol.)	157
4.6	Multiplicateurs, contraintes et conditions aux limites	166
4.6.1	Points de détachement en présence de capillarité	167
4.6.2	Points de détachement en l'absence de capillarité	171

Chapitre 5 Simulations d'écoulements viscoélastiques 177

5.1 Equations hyperboliques 178
5.1.1 Méthode de Galerkin 179
5.1.2 Méthodes d'intégration en amont 182
5.1.3 Méthodes de substitution 184
5.2 Méthodes numériques pour les fluides viscoélastiques 186
5.2.1 A la recherche d'équations modèles 188
"On the Stability and Accuracy of Fully-Coupled Finite Element Techniques Used to Simulate the Flow of Differential Viscoelastic Fluids : a One-Dimensional Model" (J. of Rheology) 189
5.2.2 A la recherche d'une méthode stable et précise 217
"The Consistent Streamline-Upwind/Petrov-Galerkin Method for Viscoelastic Flow Revisited"" (J. Non-Newtonian Fluid Mech) 218

Annexe Conception d'un logiciel numérique 245

6.1 Structures de données d'un code d'éléments finis 247
6.1.1 Structure du maillage et des sous-maillages 249
6.1.2 Structure des champs 253
6.1.3 Structure des sous-problèmes 255
6.1.4 Structure des contraintes 255
6.1.5 Structure de résolution de problèmes 257
6.2 Définition d'un méta-langage pour un code d'éléments finis 258

Conclusions 263

Bibliographie

Introduction.

Depuis quelques années, les méthodes numériques connaissent un essor impressionnant. Ce développement est dû d'une part à l'arrivée d'ordinateurs aux performances sans cesse croissantes. D'autre part, les perspectives offertes par la simulation numérique sont particulièrement prometteuses en mécanique des fluides.

L'approche du numéricien permet l'étude de nombreux problèmes dont la complexité rend vaine toute recherche de solutions par voie analytique. Par ailleurs, la simulation numérique complète harmonieusement l'expérimentation réelle qui demeure la base incontournable de la connaissance du monde matériel. Mais la difficulté d'obtenir un nombre réduit de grandeurs mesurées exige un soin et une patience élevés de la part de l'opérateur, alors que la simulation numérique est apte à fournir de manière quasi-immédiate une carte complète des vitesses et des pressions.

L'intérêt économique de la compréhension des phénomènes entre également en ligne de compte. Comme l'influence de la forme de la filière d'une extrudeuse est un facteur capital pour l'obtention d'un extrudat de forme prescrite, il importe d'accorder à la géométrie de la filière toute l'attention requise. Déterminer la forme de cette géométrie est

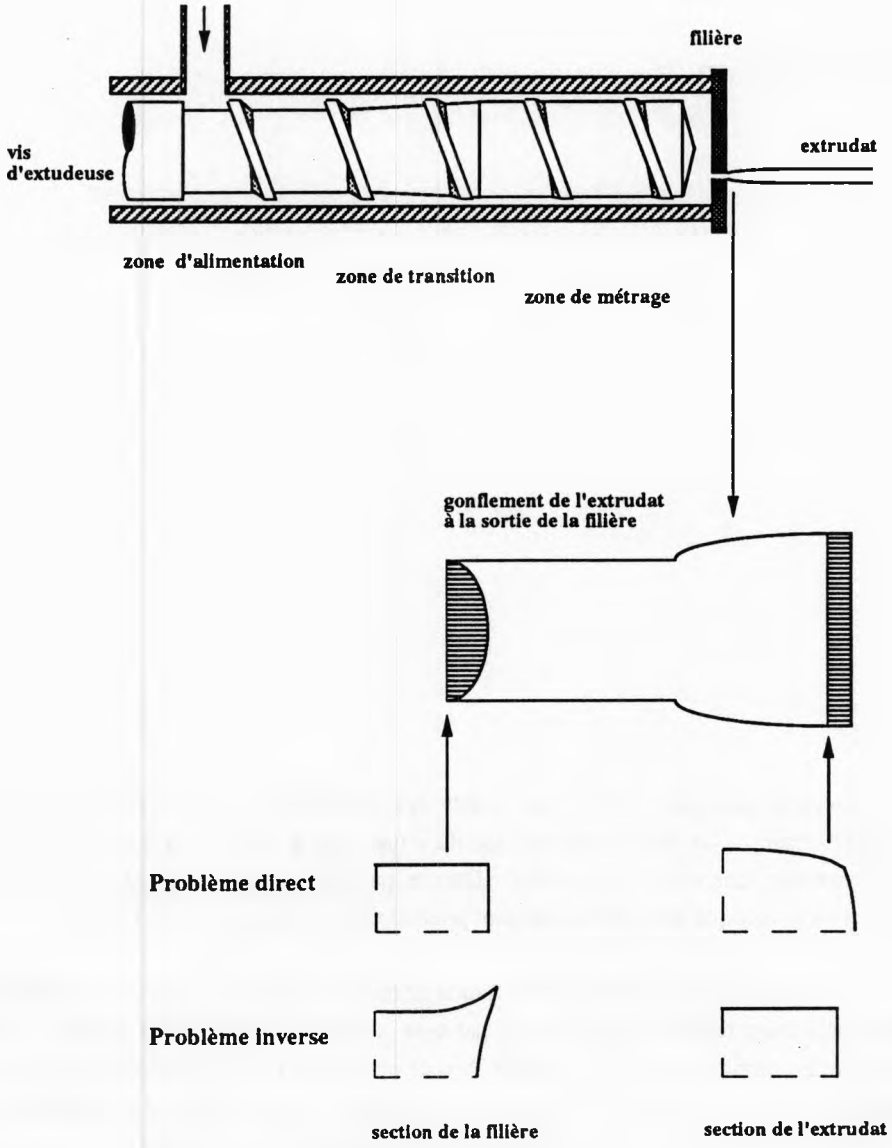


Fig. 1 Présentation schématique du procédé d'extrusion.

actuellement obtenu par voie purement expérimentale. Le bon concepteur doit anticiper ou prévoir le gonflement du jet pour dessiner de manière adéquate la filière. C'est un des aspects où la science de l'ingénieur reste du domaine de l'art, car la géométrie tridimensionnelle de l'extrudeuse se prête mal à une modélisation mathématique simple. Il est nécessaire d'ajuster la filière par une technique d'essais successifs sur le site de production. Malheureusement, la fabrication des filières est coûteuse et l'obtention rapide de la filière correcte n'est liée qu'au don du concepteur. Le recours à des techniques de calcul par éléments finis apparaît comme une façon aisée d'obtenir un grand nombre de renseignements à bien moindres frais (Fig. 1). La simulation numérique peut également servir à poser un diagnostic sur la stabilité de l'écoulement. Un écoulement instable est en effet à proscrire en production industrielle.

Le recours à la puissance de l'ordinateur s'inscrit donc naturellement dans le courant des efforts déployés pour maîtriser la technique de l'extrusion. La simulation numérique nécessite cependant la modélisation physique des phénomènes et des matériaux ainsi que la construction de méthodes numériques adaptées. Ce sont les enjeux respectifs du rhéologiste et du numéricien.

La rhéologie est née, il y a trentaine d'années, avec l'apparition de nouveaux matériaux aux caractéristiques particulières : le caoutchouc, les matières plastiques... Ce courant de recherche vise par exemple, à mieux comprendre les phénomènes étonnants se produisant lors de l'écoulement d'un blanc d'oeuf ou de dentifrice. Ces phénomènes inexplicables sur base du modèle newtonien sont appellés effets non-newtoniens (Bird 77). Citons le gonflement de 200 % de certains fluides polymériques à la sortie d'un tube alors que le fluide newtonien se contente d'un modeste 13 %. Dans la même optique, l'effet de retour est une manifestation de la mémoire de certains fluides : le fluide a tendance à retourner à une configuration antérieure lorsque les sollicitations extérieures qui entretenaient la configuration actuelle sont soudainement annulées. Cet effet de mémoire est lié au caractère élastique du fluide. Le matériau élastique a une mémoire parfaite car il retient sa configuration de référence et y revient dès le moment où il est sans sollicitation. A l'opposé, le fluide newtonien n'a aucune mémoire et ses contraintes ne dépendent que du taux instantané de déformation. Entre les deux extrêmes dont la modélisation est bien connue, se trouve l'immense domaine des fluides viscoélastiques. La rhéologie a pour objet de proposer des lois de constitution pour ces fluides. Mais le caractère complexe des lois des rhéologistes pose la difficulté de la résolution des équations. Par voie analytique, il est seulement possible d'obtenir les solutions d'écoulements élémentaires qui ne suffisent pas toujours pour valider, ou pour rejeter les modèles de fluides.

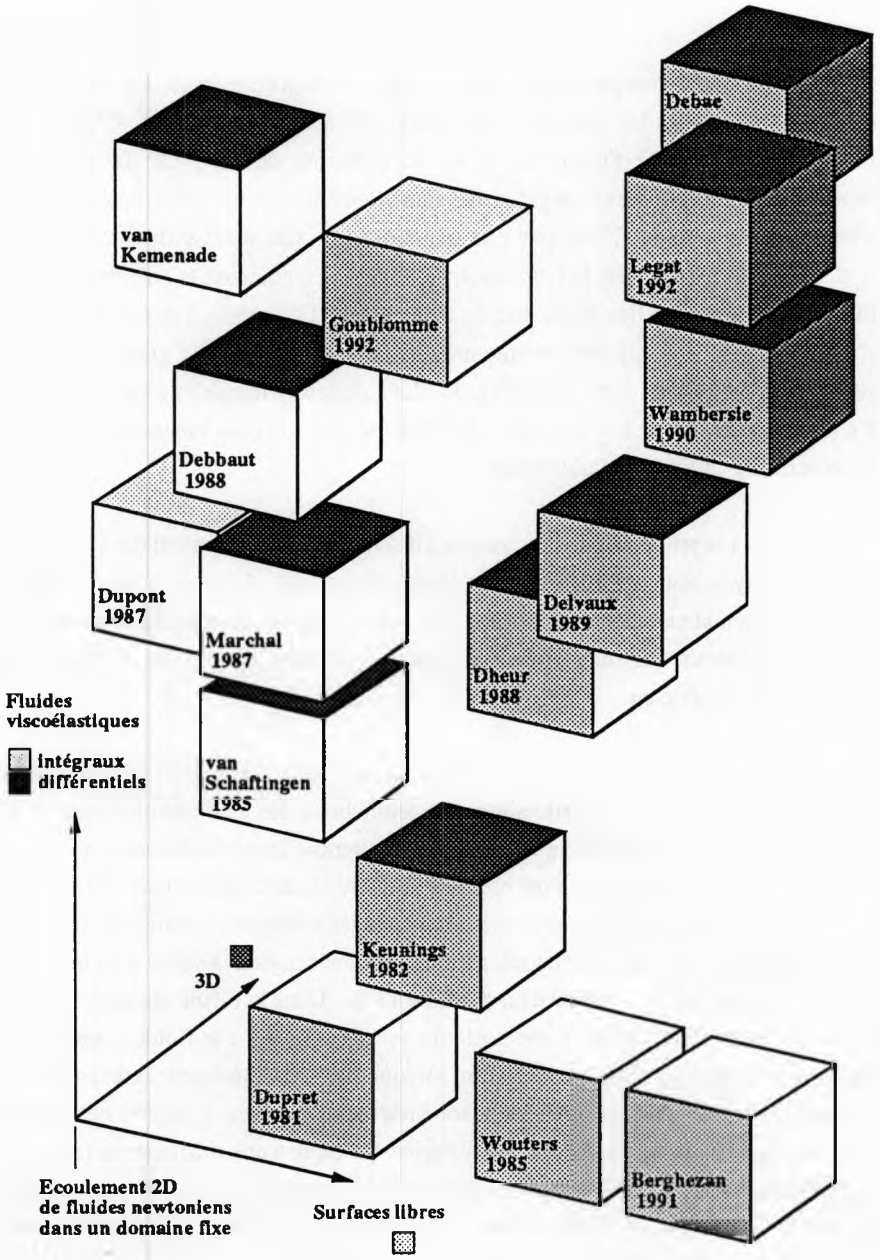


Fig. 2 Simulation d'écoulements viscoélastiques à surfaces libres :
Cadre général des recherches de l'unité de Mécanique et Mathématiques Appliquées UCL.

C'est la raison initiale de la simulation numérique des fluides viscoélastiques. Les équations de comportement de ces fluides présentent un caractère particulier qui est le résultat de leur position intermédiaire entre le corps élastique et le fluide visqueux newtonien. Ceci entraîne une difficulté numérique considérable et la construction de méthodes numériques spécialisées est le second enjeu de la recherche actuelle. C'est dans ce domaine que se situe notre travail dans le cadre général des recherches effectuées au sein de l'unité de Mécanique et Mathématiques Appliquées de Louvain-la-Neuve depuis une dizaine d'années (Crochet 89)(Fig. 2). En particulier, notre thèse s'inscrit dans l'effort global de recherche de l'unité en vue de la simulation numérique de fluides non-newtoniens en présence de surfaces libres (Dupret 81) (Keunings 82) (van Schaftingen 85) (Wouters 85) (Marchal 87) (Dupont 87) (Debbaut 88) (Dheur 88) (Delvaux 89) (Wambersie 90) (Berghezan 91).

Une vue synoptique des travaux peut être résumée comme suit.

- Nous rappellons au chapitre un l'ensemble des équations qui régissent un écoulement à surfaces libres.
- La présence de surfaces libres implique que le domaine de calcul est inconnu. La déformation résultante du maillage doit être contrôlée. La définition d'un algorithme original de contrôle est décrite au chapitre deux.
- La question de la discrétisation et de la résolution des équations est abordée au chapitre trois. La non-linéarité des équations nécessite le recours à des méthodes itératives. Le choix d'une technique implicite basé sur un schéma itératif de type Newton-Raphson permet des simulations efficaces.
- L'utilisation de multiplicateurs de Lagrange et de contraintes constitue une facette originale de la technique des éléments finis. L'objet du chapitre quatre est de détailler la manière dont nous avons tiré profit de ces outils. C'est par le biais de multiplicateurs que la prédiction numérique d'une filière d'extrusion a pu être réalisée de manière efficace.
- Le traitement des difficultés particulières aux équations viscoélastiques est repris au chapitre cinq. La recherche d'une méthode précise et stable guide nos développements. Une analyse théorique sur un modèle simple est menée pour pouvoir choisir de manière sereine un algorithme tridimensionnel.
- Finalement, l'implémentation informatique des méthodes numériques est détaillée dans le chapitre six. De nouvelles structures de données sont requises pour une extension tridimensionnelle des méthodes d'éléments finis. Par ailleurs, la définition d'un "méta-langage" permet de réduire le coût de programmation.

Chapitre 1.

Equations d'un écoulement à surfaces libres.

Dans ce premier chapitre, nous rappelons le système d'équations aux dérivées partielles qui régit l'écoulement. On y présente la modélisation mathématique des fluides non-newtoniens qui est une des plus belles applications de la théorie générale des milieux continus. Les lois de conservation, valables pour tout matériau, sont exploitées dans le cadre d'écoulements stationnaires d'un fluide incompressible. On y donne également les modèles constitutifs des fluides et les conditions aux limites.

1.1. Equations de champ.

Considérons le mouvement d'un volume matériel qui occupe le volume V(t) au temps t. Si en chaque point matériel x d'un fluide au moment t, nous définissons :

- la masse volumique $\rho(x, t)$,
- le champ de vitesses $v(x, t)$,
- le tenseur des tensions de Cauchy $\sigma(x, t)$,
- les forces à distance par unité de volume $f(x, t)$,
- l'énergie interne par unité de volume $U(x, t)$,
- la chaleur produite par unité de temps et de volume $r(x, t)$,
- le flux calorifique entrant par unité de temps et d'aire $q(x, t)$,

nous pouvons dès lors écrire sous forme locale les quatre principes fondamentaux de la mécanique de milieux continus. Ce sont les lois de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, du moment de la quantité de mouvement et de l'énergie.

conservation de la masse

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho\, \nabla.\mathbf{v},$$

conservation de la quantité de mouvement

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \nabla.\sigma + \mathbf{f},$$

conservation du moment de la quantité de mouvement

$$\sigma = \sigma^T,$$

conservation de l'énergie

$$\rho \frac{DU}{Dt} = \sigma : \nabla \mathbf{v} + r - \nabla \mathbf{q}.$$

En général, nous nous sommes limités à des écoulements stationnaires et incompressibles. Les lois de conservation se réduisent alors à :

$$\nabla.\mathbf{v} = 0,$$

$$-\nabla.\sigma + \mathbf{f} = \rho\, \mathbf{v}.\nabla \mathbf{v},$$

$$\sigma = \sigma^T,$$

$$\sigma : \nabla \mathbf{v} + r - \nabla \mathbf{q} = \rho\, \mathbf{v}.\nabla U.$$

Ce système des équations de champ est incomplet. En vue de caractériser le comportement d'un matériau précis, il convient d'ajouter au sytème précédent les équations de constitution. Ces équations établiront la dépendance de σ, U et $\mathbf{q}$ en un point matériel par rapport à l'histoire des autres fonctions inconnues. Le choix d'une dépendance fonctionnelle de σ, U et $\mathbf{q}$ est guidé par les résultats d'un ensemble d'expériences effectuées sur le matériau que l'on désire modéliser.

1.2. Equations de constitution.

La modélisation de phénomènes énergétiques se fait sur base d'une théorie classique. La dépendance de la densité de flux de chaleur dans un matériau isotrope est spécifiée par la loi de Fourier :

$$\mathbf{q} = - k \nabla T ,$$

où k est la conductibilité du matériau. La seconde loi de constitution exprime la dépendance d'une variation d'énergie interne à volume constant par rapport à la température :

$$dU = c_v \, dT ,$$

où c_v réprésente la chaleur spécifique du matériau à volume constant.

Il nous reste alors à caractériser le comportement mécanique du matériau par l'écriture d'une loi de constitution pour le tenseur des contraintes. Si nous désirons modéliser un fluide, on distingue principalement :

- les fluides parfaits où le tenseur des contraintes se réduit au tenseur sphérique de la pression hydrostatique,
- les fluides visqueux newtoniens qui permettent de tenir compte du phénomène de viscosité qui entraîne la présence de contraintes de cisaillement,
- les fluides visqueux élastiques ou viscoélastiques qui autorisent l'introduction des effets de mémoire et de tensions normales.

Afin de définir aisément le fluide newtonien, nous décomposons le tenseur des gradients de vitesse en une partie symétrique **d** et une partie non-symétrique ω :

$$\nabla \mathbf{v} = \mathbf{d} + \omega ,$$

où **d** est le tenseur des taux de déformations et ω est le tenseur des taux de rotations.

Il nous est alors possible d'énoncer les hypothèses qui conduisent au modèle de fluide visqueux newtonien :

- le tenseur des contraintes est une fonction linéaire du tenseur d,
- le fluide est isotrope,
- le fluide n'a pas de contraintes de cisaillement au repos.

Ces hypothèses nous permettent de construire l'équation de constitution pour les fluides newtoniens incompressibles :

$$\sigma = -p\,\mathbf{I} + 2\,\eta(T)\,\mathbf{d}\,,$$

Un fluide incompressible newtonien est entièrement caractérisé par le coefficient de viscosité dynamique η. La viscosité d'un fluide newtonien est constante dans un écoulement isotherme. Cependant le comportement expérimental de nombreux fluides au sein d'un écoulement viscométrique suggère un comportement non linéaire pour la relation liant le tenseur des contraintes et le tenseur des taux de déformations. Une façon d'en tenir compte est d'écrire l'équation du fluide newtonien généralisé :

$$\sigma = -p\,\mathbf{I} + 2\,\eta(T, \dot{\gamma})\,\mathbf{d}\,,$$

où le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ est la racine carrée du second invariant du tenseur **d**. Le fluide newtonien généralisé apparaît ainsi comme un cas particulier du modèle de Riener-Rievlin. Diverses lois empiriques pour la viscosité ont été obtenues, en général, sur base d'expériences en écoulement viscométrique. Les lois les plus utilisées sont les suivantes:

<u>loi de puissance</u>

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_0\,(\dot{\gamma})^{\,n-1}\,,$$

<u>loi de Bird-Carreau</u>

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_0\,(1 + (\tau_0\,\dot{\gamma})^2)^{\,(n-1)/2}\,.$$

Les fluides visqueux newtoniens et newtoniens généralisés sont les modèles principaux de fluides visqueux inélastiques. Cependant, pour reproduire des effets élastiques, il est nécessaire de considérer des fluides plus complexes de la théorie de fluides simples (Crochet 84). Cette théorie repose sur cinq principes :

- Le déterminisme des contraintes : les tensions en un point sont déterminées par l'histoire du mouvement du milieu antérieure à l'instant d'observation.
- L'action locale : les tensions en un point sont déterminées uniquement par le mouvement d'un voisinage arbitraire de ce point.
- La mémoire évanescente : les tensions en un point sont davantage influencées par le passé récent du mouvement, que par l'histoire ancienne de celui-ci.
- L'invariance vis-à-vis des coordonnées : la loi de constitution est indépendante du système de coordonnées choisi pour l'exprimer. En d'autres termes, on considère une représentation tensorielle pour la dépendance des tensions aux déformations.
- L'invariance vis-à-vis de l'observateur : les équations de constitution sont indépendantes du mouvement de l'observateur. C'est l'objectivité matérielle.

Un certain nombre de lois empiriques de constitution de fluides viscoélastiques ont été proposées sur base de cette théorie. D'autres approches basées sur l'analyse de la microstructure et des propriétés moléculaires convergent vers certains de ces modèles issus de la mécanique des milieux continus.

Cette approche physique permet de créditer en partie les modèles mathématiques malgré leur difficulté à reproduire tous les effets des fluides réels. En effet, le choix adéquat d'un modèle se révèle souvent lié non seulement au matériau, mais également aux déformations que l'on souhaite simuler. Ceci est contraire à l'idée d'une loi unique caractérisant un matériau, car nous avons en réalité une bibliothèque de lois constitutives approximant chacune une petite partie du domaine des déformations possibles pour ce matériau. Cette sélection de lois constitutives précède la simulation numérique. Ces deux domaines sont intimement liés. La simulation numérique permet de valider ou de rejeter les lois de constitution de plus en plus complexes que les rhéologistes soumettent à des numériciens forcés à réaliser des simulations de plus en plus délicates. Le progrès des ordinateurs actuels permet une accélération de cette recherche.

D'une manière générale, on peut écrire l'équation de constitution viscoélastique sous la forme suivante:

$$\sigma = -p\,\mathbf{I} + 2\,\eta_N(T,\dot{\gamma})\,\mathbf{d} + \tau\,,$$

où nous distinguons successivement le terme de pression, un éventuel terme d'extra-tensions purement visqueuses représentant l'impact du solvant et les extra-tensions viscoélatiques τ. Les modèles actuels pour les extra-tensions viscoélastiques relèvent de deux grandes familles :

- les modèles différentiels,
- les modèles intégraux.

Les équations différentielles s'écrivent sous la forme suivante :

$$g(\tau,T)\,\tau + \lambda(T,\dot{\gamma})\,\overset{\square}{\tau} = 2\,\eta_v(T,\dot{\gamma})\,\mathbf{d}\,,$$

où le symbole de dérivation $\overset{\square}{\tau}$ représente une combinaison linéaire des dérivées temporelles convectives supérieure et inférieure de τ. Le choix de la combinaison linéaire des dérivées convectives ainsi que les dépendances de la fonction tensorielle **g**, du temps de relaxation λ, des viscosités viscoélastique η_v et newtonienne η_N définissent les divers modèles viscoélastiques différentiels. Le choix adéquat des paramètres est particulièrement délicat et reste une question ouverte.

Par ailleurs, les modèles intégraux se présentent sous la forme :

$$\tau = \int_0^{\infty} M(s)\; G(t\text{-}s)\; ds\,,$$

où l'intégration s'effectue le long d'une trajectoire paramétrisée par le temps s. La contribution de l'histoire de la déformation est fournie par le tenseur **G**, tandis que la fonction M décrit la mémoire évanescente du fluide. Les divers modèles intégraux fixent la dépendance de **G** en fonction des tenseurs de déformation de Cauchy-Green et de Finger, tandis que la fonction M se présente en général sous la forme d'une exponentielle décroissante où nous retrouvons une viscosité viscoélastique et un temps de relaxation :

$$M(s) = \frac{\eta_v}{\lambda^2} \exp\left(-\frac{s}{\lambda}\right) .$$

Il est aisé de généraliser ces deux types d'équations à un spectre de n temps de relaxation en considérant que l'extra-tension viscoélastique est la somme des n extra-tensions, solutions d'équations munies de paramètres matériels distincts. Cependant l'augmentation du nombre de paramètres à fixer se heurte parfois à la modestie des données expérimentales.

Dans la suite de ce travail, nous nous limitons à des modèles newtoniens et viscoélastiques différentiels à un temps de relaxation. Nous ne discutons pas la validité de ces différents modèles. Notre objectif est de construire une méthode numérique pour les écoulements tridimensionnels à surfaces libres et de montrer la faisabilité de pareilles simulations. Cependant, l'objectif final de la simulation numérique en elle-même est précisément de tester ces modèles mathématiques. Notre rôle apparaît ici comme celui de l'artisan qui façonne l'outil que l'ouvrier expérimenté utilisera avec une beaucoup plus grande dextérité.

1.3. Problème d'un écoulement viscoélastique à surfaces libres.

1.3.1. Résultats théoriques.

En plus des équations de champ et de constitution, le problème mathématique nécessite l'imposition de conditions aux frontières et en particulier de la surface libre. La nature et la manière de fixer ces conditions sont directement liées par le type des équations différentielles.

Dans le cas d'un écoulement d'un fluide newtonien sans surfaces libres, la théorie est bien établie. On peut spécifier clairement quelles conditions aux limites nous conduisent à un problème bien posé dans le sens où la solution existe, est unique et dépend continûment des données. Il suffit d'appliquer des conditions de Dirichlet ou de Neumann sur la frontière, en imposant éventuellement la pression en un point. Ceci est classiquement appellé "boundary value problem".

Par contre, la théorie des conditions aux limites pour des fluides viscoélastiques est nettement plus limitée. En effet, le système des équations différentielles d'un fluide viscoélastique n'est ni strictement elliptique, ni strictement hyperbolique. Il s'agit d'un

système d'un type mixte. En outre, le nombre de caractéristiques hyperboliques peut s'accroître par une modification du type des équations pour des vitesses et tensions élevées (Delvaux 89)(Joseph 85). C'est le phénomène du changement de type semblable à ce que l'on rencontre dans la théorie des fluides compressibles. Le changement de type implique un niveau de difficulté nettement plus élevé dans l'analyse mathématique des écoulements stationnaires. Seuls des résultats parcellaires au niveau de l'existence de tels écoulements ont été obtenus. En outre, certains modèles risquent d'entraîner des pertes d'évolution et remettent en cause leur validité physique.

Un problème hyperbolique est bien posé lorsqu'on impose les valeurs au début de chaque caractéristique présente dans le domaine de l'écoulement. Il s'agit dès lors d'un "initial value problem". Pour un écoulement viscoélastique, le type des équations est mixte et la théorie mathématique est incomplète. En pratique, il apparaît qu'en sus des conditions de Dirichlet et de Neumann pour les vitesses, des conditions aux limites en extra-tensions doivent être imposées (Renardy 85,87). Les lignes de courant apparaissent comme des caractéristiques de l'équation de constitution et les extra-tensions viscoélastiques doivent être imposées aux sections d'entrée. Nous fixons l'histoire passée du fluide entrant dans le domaine de l'écoulement, ce qui concorde avec la notion physique de mémoire que nous avons incorporée dans le modèle viscoélastique. Dans le cas particulier d'un écoulement bidimensionnel lent d'un fluide de Maxwell, il a été démontré que seules deux des trois extra-tensions doivent être imposées à l'entrée pour obtenir un problème bien posé (Renardy 86). Mais, un éventuel changement de type peut modifier la nature des conditions aux frontières à spécifier : ceci amplifie la difficulté du problème.

Dans le cas d'écoulements à surfaces libres, il n'existe pas de preuve d'existence ou d'unicité. Même le principe variationnel utilisé pour les équations de Stokes ne peut s'étendre au problème de Stokes à surfaces libres (Finlayson 82). L'absence quasi totale de résultat théorique pose de nombreuses incertitudes aux numériciens. La plupart des réponses que nous formulons sont davantage des conjectures que des théorèmes. Une telle démarche d'expériences numériques ouvre donc la voie à un immense domaine de recherche théorique.

1.3.2. Formulation du problème.

La formulation de nos problèmes se réduit en général à la recherche des vitesses, des pressions, des extra-tensions et de la position de la surface libre. Les conditions aux limites peuvent se résumer à ceci :

- aux sections d'entrée $\partial\Omega_{In}$, nous imposons les vitesses (et les extra-tensions dans le cas viscoélastique) à leur profil de Poiseuille correspondant à un débit donné.

- aux parois $\partial\Omega_{Die}$, le fluide colle et la vitesse est imposée. Cependant des conditions de glissement peuvent éventuellement être considérées, dans le cas de filières lubrifiées par divers systèmes technologiques.

- à la section de sortie $\partial\Omega_{Out}$, nous imposons la densité des forces de contact d'un écoulement uniforme.

- sur les surfaces libres $\partial\Omega_{Free}$, deux conditions doivent être satisfaites. La condition cinématique exprime que la surface libre est une ligne matérielle. Par contre, la condition dynamique exprime la continuité des forces de contact de l'interface fluide-milieu extérieur. La densité des forces de contact est égale à la pression extérieure et à la tension superficielle.

Supposons dès lors que la surface libre est décrite par l'équation $h(\mathbf{x},t) = 0$, la condition cinématique peut s'exprimer par :

$$\frac{Dh}{Dt} = 0.$$

Par ailleurs, la tension superficielle est équivalente à une pression proportionnelle à un coefficient γ et à la courbure de la surface libre. La condition dynamique s'écrit sous la forme :

$$\sigma \,.\, \mathbf{n} = -\,(p_{ext} + \gamma\, tr\,(\nabla^{*}\mathbf{n})\,)\,\mathbf{n}.$$

où ∇^{*} est le gradient à la surface libre, tandis que $\mathbf{n}$ est le vecteur normal sortant. Dans le cas d'écoulements stationnaires et d'un milieu extérieur à pression nulle, ces relations deviennent :

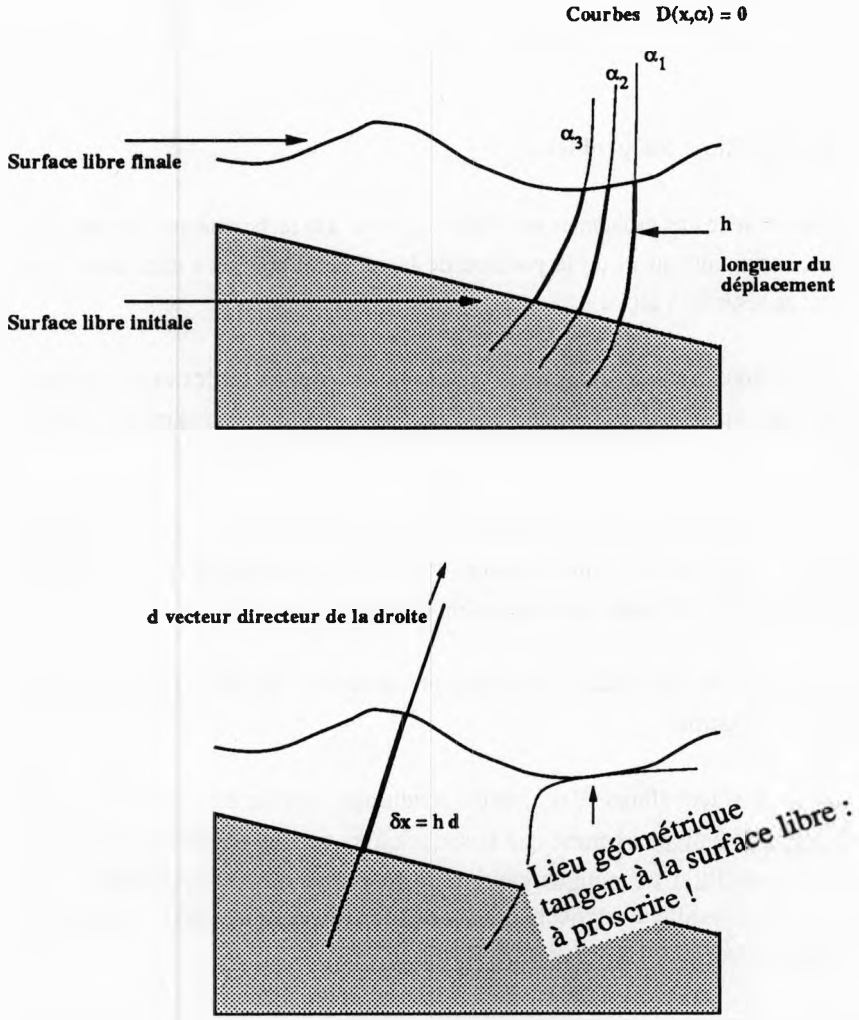


Fig. 1.1 Définition de l'inconnue géométrique.

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0,$$
$$\sigma \cdot \mathbf{n} = -\gamma \, \mathrm{tr}\,(\nabla^* \mathbf{n})\, \mathbf{n}.$$

D'un point de vue mathématique, nous avons une condition limite excédentaire sur les surfaces libres. Mais cette frontière de configuration à priori inconnue crée un degré de liberté supplémentaire introduit par l'indétermination de forme de l'interface. Par la définition d'un nouveau champ scalaire h que nous appellerons inconnue géométrique, il sera possible d'obtenir le respect de toutes les conditions aux limites que la physique impose sur la surface libre.

On peut définir naturellement l'inconnue géométrique sur la surface libre, comme la longueur du déplacement de chaque point le long de courbes données. Ces lieux géométriques sont définis à priori par une équation implicite :

$$D(\mathbf{x}, \alpha) = 0 ,$$

où α est un paramètre permettant de générer une famille de courbes. Ainsi, c'est le choix judicieux de ces courbes qui constitue finalement la définition précise de l'inconnue géométrique (Fig. 1.1). Nous nous restreignons à des courbes qui sont sécantes à la surface libre et dépendent continûment du paramètre. En effet, si les courbes étaient tangentes à la surface libre, le problème serait indéterminé. Ceci crée un dilemme. Pour déterminer une manière correcte de définir la nouvelle configuration inconnue de la surface libre, il faut à priori connaître cette solution. En pratique, des considérations physiques nous guident pour la définition des lieux géométriques. Le choix le plus simple et le plus courant consiste à prendre, en chaque point, la droite perpendiculaire à la configuration initiale de la surface libre. L'équation du lieu géométrique se réduit dès lors à :

$$\delta \mathbf{x} = h \, \mathbf{d} ,$$

où $\delta \mathbf{x}$ est le vecteur déplacement d'un point et $\mathbf{d}$ est le vecteur directeur de la droite. Ce vecteur $\mathbf{d}$ est un paramètre du problème. La variable scalaire h représente bien l'amplitude du déplacement du point considéré.

Dans la formulation avec les conditions aux limites, ces lieux géométriques sont toujours une donnée du problème, même si l'expression de ceux-ci fait recours aux inconnues du problème. En particulier, nous songeons à une éventuelle définition des lieux géométriques comme les droites perpendiculaires à la surface libre finale du problème.

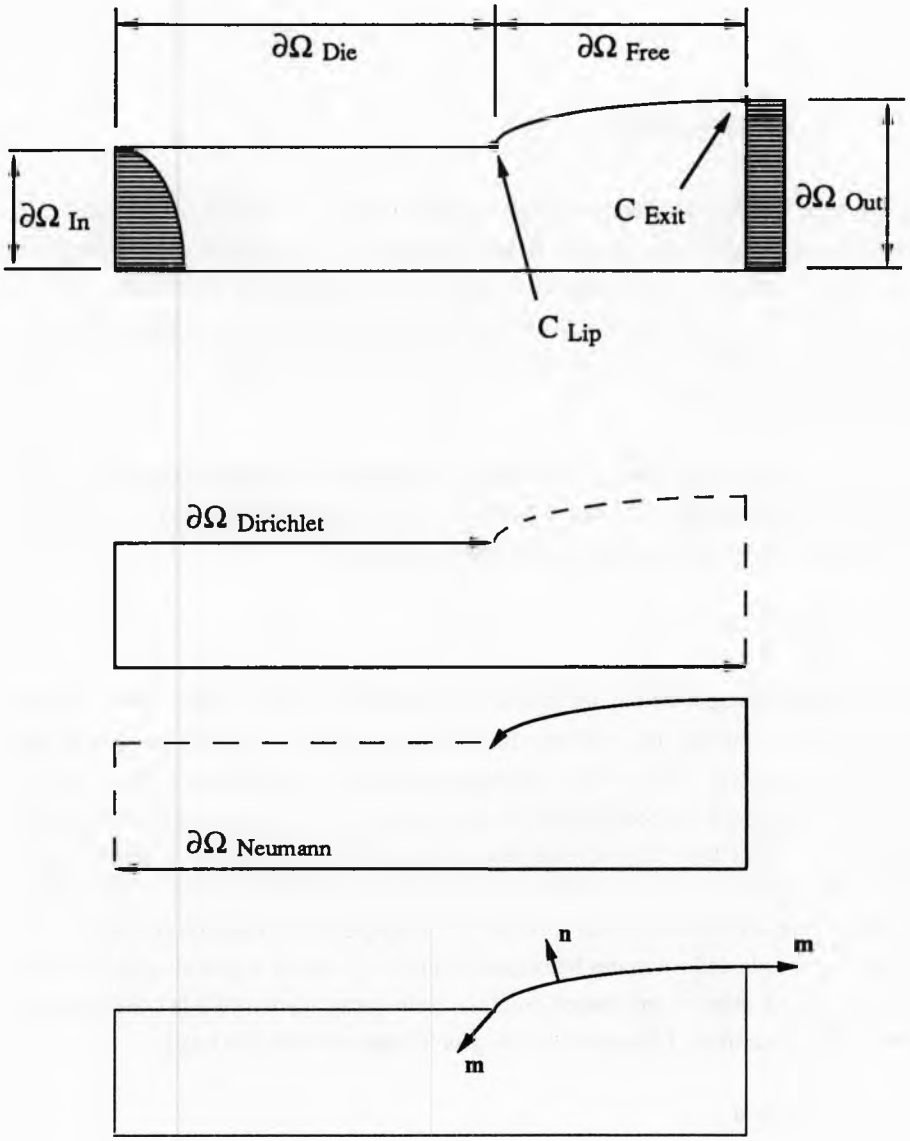


Fig. 1.2 Exemple de géométrie pour un écoulement à surface libre.

Il nous est dès lors possible de formuler le problème d'un écoulement stationnaire isotherme à surface libre d'un fluide newtonien dans un domaine Ω. Dans cette optique, nous introduisons deux sous-espaces de la frontière fixe du domaine (Fig 1.2) :

- $\partial\Omega_{Dirichlet}$ où l'on applique des conditions de Dirichlet,
- $\partial\Omega_{Neumann}$ où l'on applique des conditions de Neumann.

Nous considérons également des espaces associés à la frontière libre elle-même.

- $\partial\Omega_{Free}$ la surface libre elle-même,
- C_{Lip} le point ou la ligne de détachement de $\partial\Omega_{Free}$,
- C_{Exit} l'intersection de $\partial\Omega_{Free}$ avec les sections de sortie.

Les deux derniers espaces permettent d'écrire les conditions aux frontières associées à la déformation de la surface libre. Sans tension superficielle (γ=0), la condition cinématique est une équation différentielle du premier ordre : la condition frontière requise est la position du point de détachement de la surface libre. Lorsque les forces de capillarité ne sont pas négligeables (γ>0), la condition dynamique fait intervenir une équation du second ordre en raison de la présence du rayon de courbure. Cette équation du second ordre exige une deuxième condition qui est fournie par l'imposition d'un vecteur **m** en bout de surface libre. Dans un espace à trois dimensions, le vecteur **m** est défini comme tangent à la surface libre et normal à la courbe C_{Exit}. En deux dimensions, il s'agit simplement de la tangente à l'interface. La pente de la tangente est connue sous le nom d'angle de contact dont la valeur est prescrite par la physique.

En général, l'écoulement est supposé être établi à la sortie du domaine de calcul et un angle de contact nul est imposé à la fin de la surface libre. Cette situation correspond à une condition naturelle homogène.

En l'absence de forces à distance et avec une pression extérieure nulle, la formulation du problème stationnaire isotherme à surfaces libres d'un fluide newtonien s'exprime dès lors comme suit :

- Trouver $(\mathbf{v}, p, h) \in V \times P \times H$ tels que :

$$\begin{aligned} &\nabla.(\eta\,\bar{\nabla}\mathbf{v}) - \nabla p = 0, && \text{sur } \Omega, \\ &\nabla.\mathbf{v} = 0, && \text{sur } \Omega, \\ &\mathbf{v}.\mathbf{n} = 0, && \text{sur } \partial\Omega_{Free}, \end{aligned}$$

avec les contraintes suivantes :

$$\begin{aligned} &\mathbf{v} = \hat{\mathbf{v}}, && \text{sur } \partial\Omega_{Dirichlet}, \\ &(\eta\,\bar{\nabla}\mathbf{v} - p\mathbf{I}).\mathbf{n} = \mathbf{t}, && \text{sur } \partial\Omega_{Neumann}, \\ &(\eta\,\bar{\nabla}\mathbf{v} - p\mathbf{I}).\mathbf{n} = -\gamma\,\mathrm{tr}\,(\nabla^{*}\mathbf{n}).\mathbf{n}, && \text{sur } \partial\Omega_{Free}, \\ &\delta\mathbf{x} = h\,\mathbf{d}, && \text{sur } \partial\Omega_{Free}, \\ &h = 0, && \text{sur } C_{Lip}, \\ &\mathbf{m} = \hat{\mathbf{m}}, && \text{sur } C_{Exit}, \end{aligned}$$

où $\bar{\nabla}$ est une notation pour la partie symétrique du gradient. Les symboles V et P représentent les espaces fonctionnels adéquats pour les vitesses et les pressions définies sur Ω. H est l'espace fonctionnel pour la variable géométrique définie sur $\partial\Omega_{Free}$.

Par ailleurs la formulation d'un problème à surface libre pour un fluide viscoélastique différentiel nécessite l'introduction des variables d'extra-tensions viscoélastiques. Dans le cas de ce travail, nous nous sommes limités de nous-même à des modèles de Maxwell-B ou d'Olroyd-B. La formulation du problème différentiel à surface libre s'écrira alors sous la forme suivante :

- Trouver $(\tau, v, p, h) \in T \times V \times P \times H$ tels que :

$$\begin{aligned}
&\tau + \lambda \overset{\nabla}{\tau} - (\eta \bar{\nabla} v) = 0, && \text{sur } \Omega,\\
&\nabla.(\eta \bar{\nabla} v) - \nabla p + \nabla \tau = 0, && \text{sur } \Omega,\\
&\nabla . v = 0, && \text{sur } \Omega,\\
&v.n = 0, && \text{sur } \partial\Omega_{Free},
\end{aligned}$$

avec les contraintes suivantes :

$$\begin{aligned}
&\tau = \hat{\tau}, && \text{sur } \partial\Omega_{In},\\
&v = \hat{v}, && \text{sur } \partial\Omega_{Dirichlet},\\
&(\eta \bar{\nabla} v - pI).n = t, && \text{sur } \partial\Omega_{Neumann},\\
&(\eta \bar{\nabla} v - pI).n = -\gamma\, tr\,(\nabla^* n).n, && \text{sur } \partial\Omega_{Free},\\
&\delta x = h\, d, && \text{sur } \partial\Omega_{Free},\\
&h = 0, && \text{sur } C_{Lip},\\
&m = \hat{m}, && \text{sur } C_{Exit},
\end{aligned}$$

où le symbole T représente l'espace fonctionnel adéquat pour les extra-tensions définies sur Ω. L'espace $\partial\Omega_{In}$ représente la portion de la frontière où l'on impose les valeurs des extra-tensions. Le symbole de dérivation $\overset{\nabla}{\tau}$ représente la dérivée convective supérieure.

La généralisation à des écoulements transitoires non-isothermes peut être effectuée de manière classique. La démarche effectuée dans le cadre des équations de Navier-Stokes dans un domaine fixe est reprise dans un grand nombre d'ouvrages de référence et peut être transposée telle quelle dans le cas de problèmes à surfaces libres.

Chapitre 2.

Déformation du maillage.

L'introduction de surfaces libres ou d'interfaces signifie qu'une partie des frontières du domaine Ω est inconnue. La résolution fournit dès lors à chaque itération une nouvelle configuration de $\partial\Omega_{Free}$. La grille d'éléments finis ne peut plus être définie à priori. A chaque itération, il s'agit d'adapter ou de générer un nouveau maillage en imposant une correspondance discrète entre les sommets externes du maillage et la frontière courante du domaine. Ensuite, les sommets internes du maillage sont positionnés afin d'éviter d'engendrer d'importantes distorsions géométriques ou une mauvaise configuration de la grille.

Dans ce chapitre, nous considérons les diverses approches qui ont été développées dans le cadre de la génération ou de la déformation de maillages. Ensuite, nous justifions le choix d'une déformation algébrique qui nous permet de garder inaltérée la structure topologique du maillage. Cette restriction interdit des grandes déformations, mais est largement compatible avec une méthode de Newton-Raphson qui requiert une certaine proximité entre la solution finale et l'approximation initiale. Ainsi, les limitations du schéma itératif et celles de l'algorithme de remaillage se rejoignent pour imposer des déformations modérées. L'avantage d'une technique algébrique provient de son faible coût et de sa relative souplesse. En outre, ce choix permet la construction d'une matrice tangente exacte lors de la mise en oeuvre d'un schéma de Newton-Raphson.

Si la qualité du maillage déformé peut paraître faible en regard d'autres techniques, l'hypothèse de petites déformations diminue fortement l'impact de cet inconvénient. Cependant lors de certains processus transitoires, cette hypothèse n'est valable que pour un nombre limité de pas de temps. Il sera dès lors nécessaire de modifier la structure topologique du maillage lorsque l'ampleur des déformations le rend inacceptable.

2.1. Topologie des maillages.

Avant de décrire la manière de déformer le maillage, il nous paraît judicieux de détailler ce qu'est un maillage. Le maillage est le résultat de la discrétisation qui est nécessaire dans la plupart des méthodes numériques utilisées pour des équations aux dérivées partielles.

Discrétiser consiste à remplacer une représentation continue des inconnues par une représentation plus simple généralement réduite à la valeur de l'inconnue et éventuellement de ses dérivées en un nombre fini de points. La discrétisation de la méthode des éléments finis consiste en deux étapes. D'une part, on découpe le domaine Ω en N éléments Ω_i qui ne se recouvrent pas. Ces éléments sont tels que :

$$\cup_{i=1,N} (\Omega_i) = \Omega,$$
$$\cap_{i=1,N} (\Omega_i) = \varnothing.$$

Le maillage est l'ensemble de ces éléments finis. Un maillage est donc caractérisé par la suite des éléments qui le composent. Tout d'abord, nous souhaitons introduire un formalisme pour décrire un élément. En fonction de la dimension géométrique de Ω, nous distinguons les éléments suivants :

- $\dim(\Omega) = 0$. Le domaine se compose de points isolés, un seul maillage est possible. Chaque élément appellé sommet consiste en un de ces points.

- $\dim(\Omega) = 1$. Le domaine se compose de courbes, un élément est un arc de courbe définie par les deux points extrémités. Ces deux points sont des sommets, tandis que l'élément est baptisé segment.

- $\dim(\Omega) = 2$. Le domaine se compose de surfaces, un élément est un quadrilatère défini par ses quatre sommets. Cet élément sera appellé face et se compose de quatre segments et de quatre sommets.

- $\dim(\Omega) = 3$. Le domaine se compose de volumes, un élément est un octoèdre défini par ses huit sommets. Cet élément sera appellé brique et se compose de six faces, douze segments et de huit sommets.

Nous constatons ainsi qu'un maillage tridimensionnel se compose de briques mais également des faces, de segments et de sommets. Nous distinguons cependant l'élément des autres objets inclus dans ce maillage. En d'autre termes, nous définissons les objets d'un tel maillage comme étant l'ensemble des briques, des faces, des segments et des sommets présents tandis que les éléments sont définis comme étant uniquement les briques.

Il faut noter que par souci de simplicité dans l'exposé, nous nous sommes limités volontairement à des quadrilatères comme éléments bidimensionnels et à des briques comme éléments tridimensionnels. Cependant, nous souhaitons pouvoir utiliser d'autres éléments dans les dimensions deux et trois : nous pensons en particulier aux triangles, aux prismes et aux tétraèdres qui permettent d'accroître la souplesse géométrique de la méthode. Ainsi de tels éléments ont été implémentés mais leur utilisation est cependant limitée dans plusieurs des algorithmes de déformation.

La seconde étape de la discrétisation des éléments finis consiste à définir une interpolation des inconnues sur chaque élément. Cette interpolation se présente comme une somme pondérée de fonctions de forme. Les poids associés à ses fonctions de forme sont appelés valeurs nodales. Le sens des valeurs nodales peut être multiple en fonction du type de l'interpolation : valeur de l'inconnue aux sommets ou en d'autres points, valeur de dérivées spatiales de l'inconnue en un point. Les points auxquels on associe une valeur nodale, sont appelés noeuds et sont en général plus nombreux que les sommets. Il est important de distinguer dès à présent le concept de sommet et de noeud.

2.1.1. Orientation et dimension des objets.

Introduisons quelques précisions sur le concept d'objet :

- la dimension d'un objet (ou d'un élément) est définie de manière usuelle. Les dimensions respectives d'un brique, d'une face, d'un segment et d'un sommet sont trois, deux, un et zéro.

- la dimension d'un maillage est la dimension des éléments qui apparaissent dans le maillage.

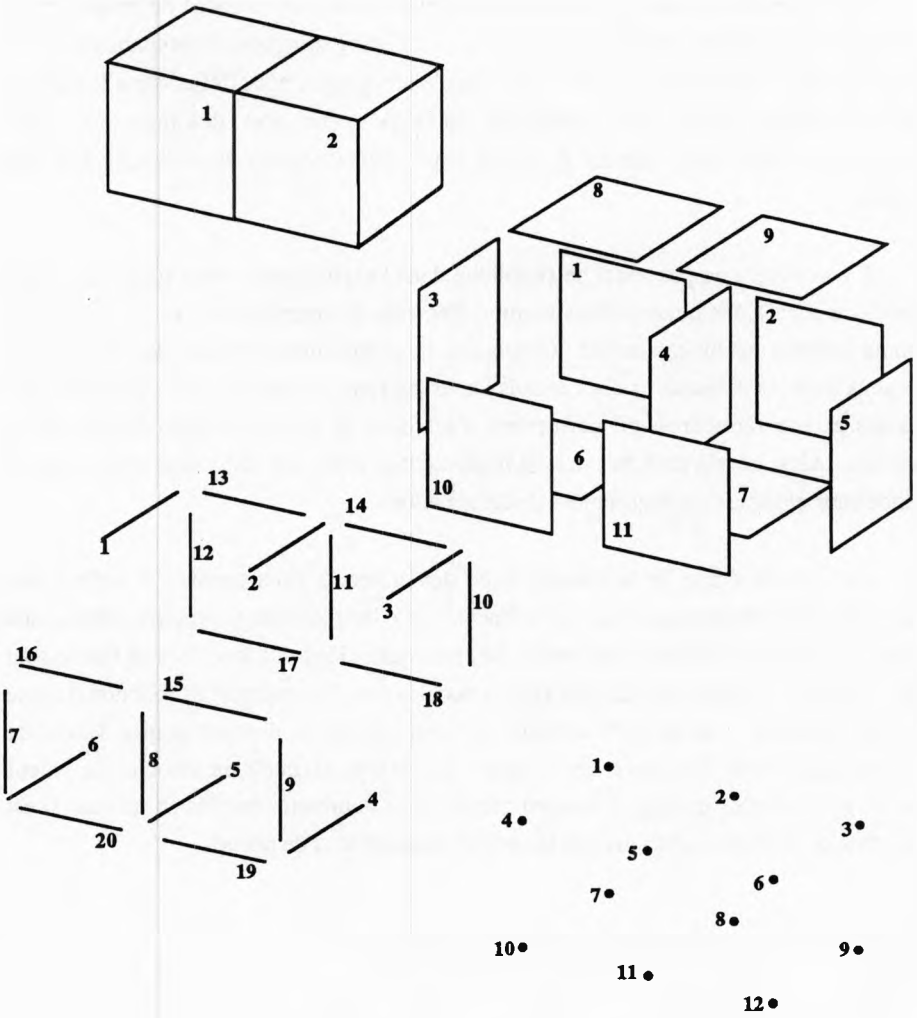


Fig. 2.1 Briques, faces, segments et sommets d'un maillage.

Définition des briques

1	(-6,-10,4,1,-3,8)
2	(-7,-11,5,2,-4,9)

Définition des faces

1	(17,12,13,11)
2	(18,-11,14,10)
3	(6,7,1,-12)
4	(5,-8,2,11)
5	(4,-9,3,10)
6	(-6,-17,5,20)
7	(-5,-18,4,19)
8	(1,13,-2,-16)
9	(2,14,-3,-15)
10	(20,7,16,8)
11	(19,-8,15,9)

Définition des segments

1	(4,1)
2	(5,2)
3	(6,3)
4	(9,12)
5	(8,11)
6	(7,10)
7	(-10,-4)
8	(5,11)
9	(6,12)
10	(-3,-9)
11	(-2,-8)
12	(7,-1)
13	(1,2)
14	(-2,3)
15	(5,-6)
16	(4,-5)
17	(8,-7)
18	(9,-8)
19	(-12,11)
20	(-11,10)

Définition du maillage (1,2)

Définition du sous-maillage frontière (1,2,-3,5,-6,-7,8,9,-10,-11)

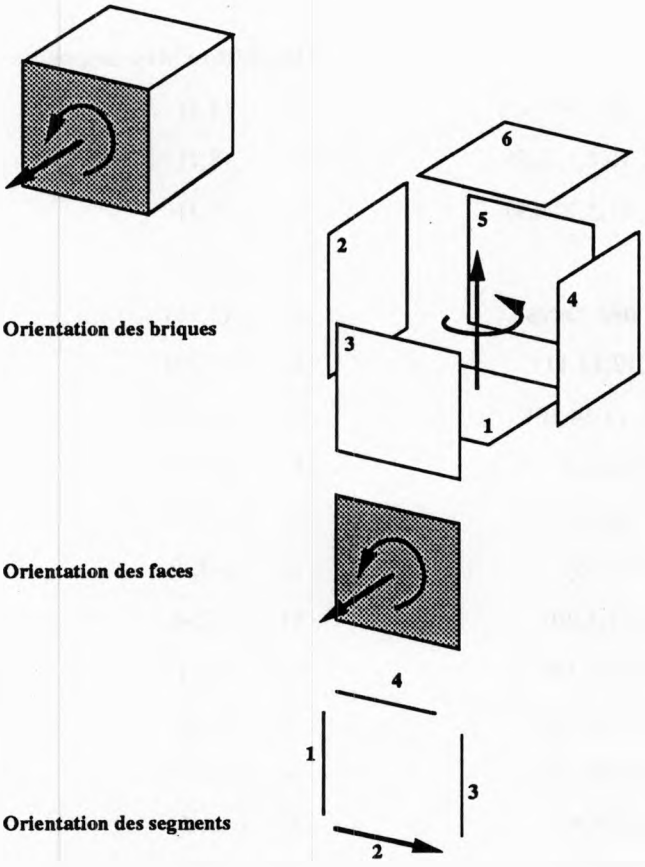


Fig 2.2 Définition de l'orientation des objets.

- la dimension spatiale est le nombre de composantes des coordonnées associées aux sommets. La dimension d'un maillage, d'un élément ou d'un objet est toujours inférieure ou égale à la dimension spatiale.

Par ailleurs, les objets de dimensions distinctes sont reliés entre eux. En effet, pour construire un objet d'une dimension n, nous réalisons l'assemblage d'objets de dimension n-1. La démarche inverse permet de décomposer un objet de dimension n en objets de dimension n-1. Une brique peut ainsi être décomposée successivement en faces, en segments et en sommets (Fig.2.1). Nous choisissons de caractériser un objet par la liste ordonnée des objets de dimension n-1 qui le composent.

Ainsi une face est décrite par la suite ordonnée des quatre segments qui la composent. L'ordre de cette suite est convenu arbitrairement. L'énumération des faces d'une brique se fait de la manière suivante : la face inférieure, les quatres faces latérales parcourues de manière anti-horlogique par rapport au vecteur normal à la première face, et la face supérieure. L'énumération des segments d'une face apparaissant dans une brique et l'énumération des sommets d'un segment de cette face se fait de manière anti-horlogique le long de la normale sortant de la brique par la face considérée (Fig. 2.2). Cette convention entraîne l'orientation des objets de dimension n-1 par rapport aux objets de dimension n.

En effet, considérons une face coincée entre deux briques et définie par une unique liste de segments. Son orientation est définie par l'ordre de la suite de segments la composant. Cet ordre est en accord avec la convention d'une des briques et en désaccord avec la convention de l'autre. C'est pourquoi l'orientation de cette face est dite positive pour la première brique et négative pour la seconde. L'orientation des segments et des sommets se définit de la même manière : un segment est signé par rapport aux faces auxquels il appartient un sommet est signé par rapport aux segments auxquels il appartient. Il est opportun de signer les objets de dimension n-1 qui composent la liste caractérisant un objet de dimension n. Un signe négatif d'un composant précise que l'orientation de ce dernier est incompatible avec l'orientation de l'objet de dimension n. L'orientation négative d'une brique pourrait être envisagée mais n'aurait d'utilité que si nous devions considérer des éléments de dimension quatre : une telle possibilité sort largement du cadre de notre travail.

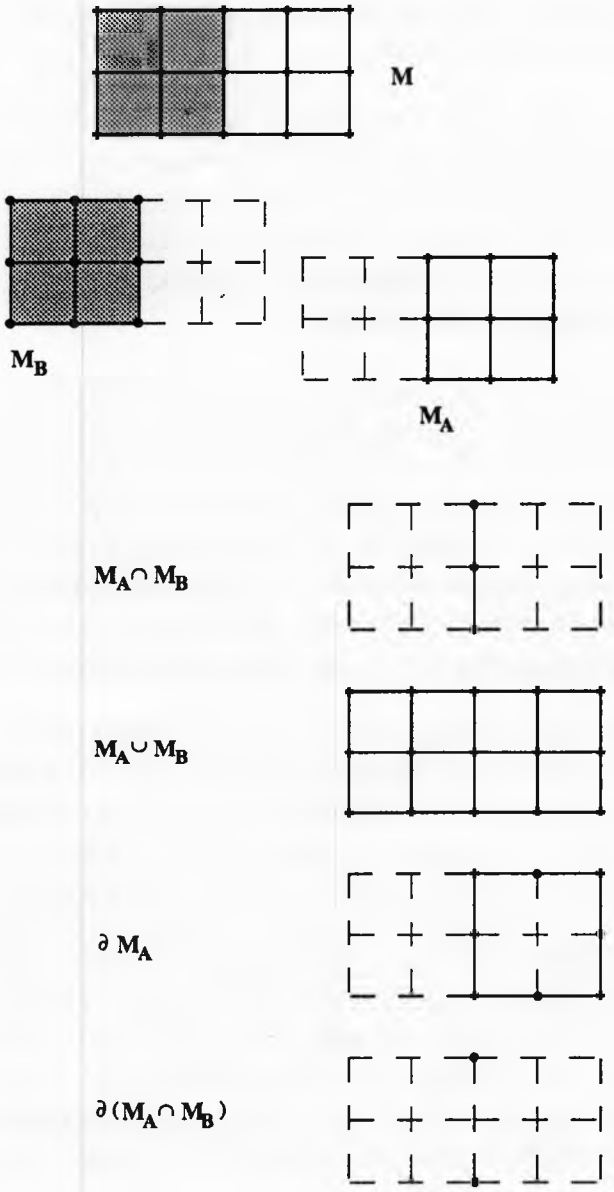


Fig. 2.3 Algèbre entre deux sous-maillages
Intersection, union, frontière, frontière de l'intersection.

2.1.2. Algèbre de sous-maillages.

Nous pouvons partitionner un maillage de dimension n en sous-maillages de même dimension qui se composent d'une partie des éléments. Une telle démarche peut être étendue à des sous-maillages de dimension inférieure. On peut ainsi reprendre une partie des objets de dimension m présents dans un maillage de dimension n pour former un sous-maillage de dimension $m < n$. Un sous-maillage est défini par une liste signée de ses éléments de manière à former une suite d'éléments orientés de manière compatible. La compatibilité d'orientation requiert qu'un objet de dimension m-1 coincé entre deux objets de dimension m soit orienté positivement pour l'un et négativement pour l'autre. On définit l'orientation d'un maillage comme celle de ses éléments.

Ensuite il est possible de définir des opérations topologiques sur ces maillages : intersection, réunion, soustraction, négation et calcul de frontière (Fig. 2.3) :

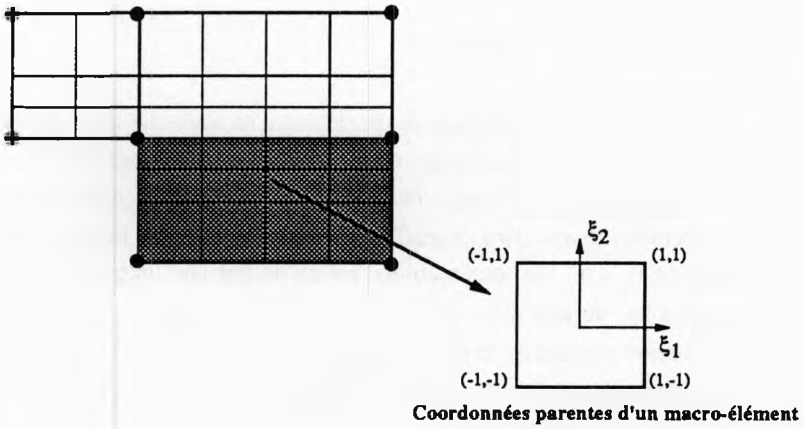
- $M_C = M_A \cap M_B$: l'intersection de deux maillages M_A et M_B de dimension n et d'orientation compatible est définie comme un maillage M_c dont les éléments sont les objets de dimension n-1 présents dans M_A et M_B. Les éléments de M_C sont orientés positivement par rapport aux éléments de M_A.

- $M_C = M_A \cup M_B$: l'union de deux maillages M_A et M_B de dimension n et d'orientation compatible est définie comme un maillage M_C dont les éléments sont ceux de M_A et M_B.

- $M_C = M_A - M_B$: la différence de deux maillages M_A et M_B de dimension n et d'orientation compatible est définie comme un maillage M_C dont les éléments sont les éléments de M_A qui ne sont pas éléments de M_B.

- $M_C = -M_A$: la négation du maillage M_A est composée des éléments de M_A dont on a inversé l'orientation.

- $M_C = \partial M_A$: la frontière du maillage M_A de dimension n est définie comme un maillage M_C dont les éléments sont les objets de dimension n-1 qui ne sont présents que dans un des éléments de M_A. Les éléments de M_C sont orientés positivement par rapport aux éléments de M_A.



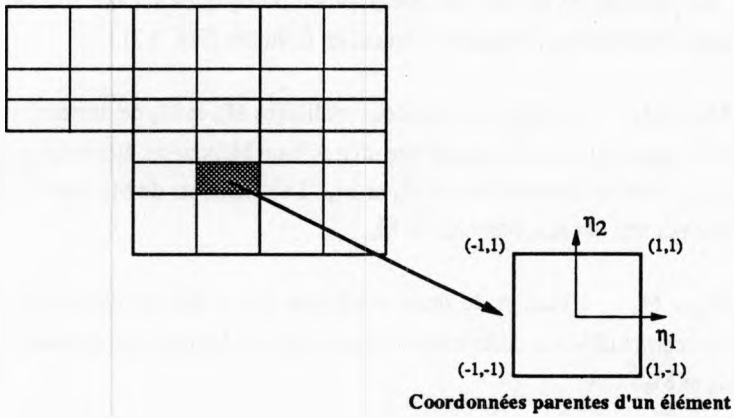


Fig. 2.4 Macro-éléments et éléments d'un maillage.

Une telle algèbre de maillage permet l'intégration aisée de problèmes distincts. L'obtention d'éléments frontières sur une surface libre ou une interface est immédiate en considérant le sous-maillage adéquat. L'orientation des éléments est un outil topologique capital : elle permet par exemple de pouvoir déduire la normale sortante de la condition cinématique exprimée sur un élément frontière.

2.1.3. Macro-structure d'un maillage.

En pratique, nos maillages sont générés sur base du logiciel Polymesh®. Ce programme interactif réalise un bon compromis entre la souplesse de génération et l'économie de temps de l'utilisateur. Le principe de base est d'établir une structure hiérarchique à deux niveaux. Au premier niveau, on construit un maillage fort grossier, appellé "macro-maillage" qui est constitué de "macro-sommets", de "macro-segments", de "macro-faces" et de "macro-briques". Cette première étape s'effectue assez rapidement car le degré de difficulté de ce macro-maillage est directement proportionnel à la complexité géométrique du domaine. L'utilisation de logiciels spécialisés de DAO s'y justifie donc pour des problèmes d'une très grande complexité géométrique. La seconde étape consiste à diviser chaque macro-élément en plusieurs éléments à l'aide d'un minimum de spécifications. Celles-ci se réduisent à décrire la répartition des sommets le long des côtés du macro-élément, le programme génère ensuite automatiquement les sommets intérieurs sur base de règles d'interpolation (Fig. 2.4).

Nous désirons tirer profit de la macro-structure du maillage. En particulier, tout comme il est habituel de considérer un élément parent avec un système de coordonnées simples pour chaque élément, nous définissons pour chaque macro-élément, un système de coordonnées parentes ξ. Par ailleurs, les éléments générés au sein d'un macro-élément se présentent sous forme d'un quadrillage construit de manière régulière. Une telle organisation peut être efficacement reprise dans un algorithme de déformation. On distingue ainsi clairement trois directions privilégiées au sein d'un maillage créé sur base d'un macro-élément tridimensionnel.

D'une manière plus générale, dans les géométries des processus d'extrusion, il n'apparaît clairement qu'une direction privilégiée en tout point du domaine. Cette direction correspond au mouvement global de l'écoulement à partir de la sortie de l'extrudeuse. Une telle propriété peut se traduire de la manière suivante lors de la génération du maillage : celui-ci se compose d'une série de sous-maillages semblables se composant d'une couche d'éléments.

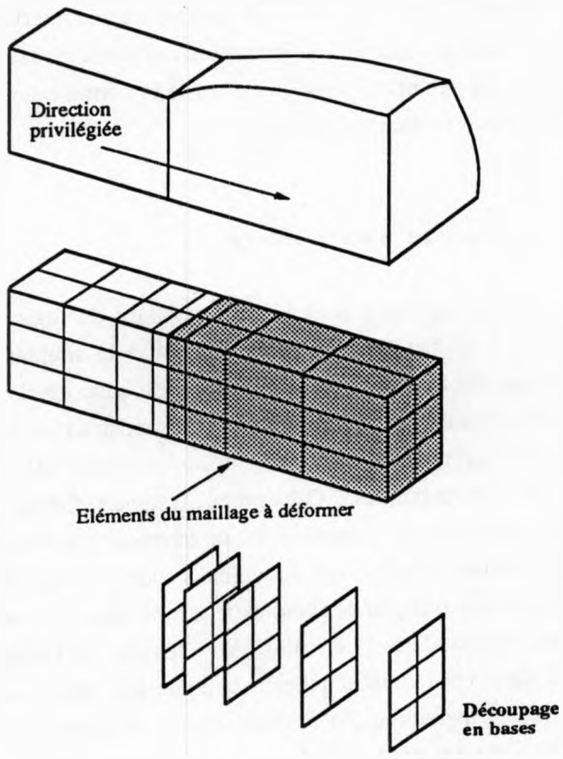


Fig. 2.5 Découpage en bases,
une direction privilégiée est requise.

Si le maillage respecte une telle propriété, l'algèbre des sous-maillages permet de décomposer le maillage en une série de bases. Le principe consiste à découper un maillage d'éléments comme un saucisson où la hauteur d'une tranche serait égale à une couche d'éléments. L'intersection des tranches entre elles fournit une série de sous-maillages de dimension inférieure appellés bases (Fig. 2.5). Ainsi, une telle procédure consiste à décomposer un maillage de dimension trois en une série de sous-maillages bidimensionnels. En d'autres termes, "le volumineux saucisson est découpé en une série de fines tranches planes".

Cette propriété du maillage nous permet de déformer des grilles de dimension n sur base d'une règle de remaillage de dimension n-1. La déformation de chaque base sera indépendante et ne se basera que sur le mouvement de sa frontière. C'est ainsi que la méthode des bases (Ruschak 78,80)(Saito 81) permet l'adaptation de maillages bidimensionnels en considérant une règle de remaillage unidimensionnelle. Chaque base est une droite dont la frontière est limitée aux deux extrémités. Le mouvement de ces extrémités est propagé de manière proportionnelle pour les sommets intérieurs de la droite. Cependant la simple transposition d'une telle technique pour des maillages tridimensionnels nécessite de considérer une seconde direction privilégiée dans le maillage. Cette seconde hypothèse limite fortement la généralité géométrique des bases qui ne peuvent plus être quelconques, mais doivent être susceptibles d'être elles-même décomposées en sous-bases (Fig. 2.6). Une approche de ce type a été développée par Karagiannis, Hrymak et Vlachopoulos (Karagiannis 88,89,90).

Mais lorsque la section de la filière devient quelconque, il devient bien délicat de pouvoir lier le déplacement de chaque sommet intérieur au déplacement d'un unique ou de deux sommets de la surface libre. Pour ce type de section, il est donc nécessaire de concevoir une nouvelle méthode de relocalisation plus générale.

2.2. Critères de déformation du maillage.

La première qualité requise pour le remaillage est la souplesse d'utilisation découlant de l'automatisme de la procédure. On souhaite obtenir un bon maillage à partir d'un minimum d'informations de départ, réduites si possible au déplacement de la surface libre. Cette exigence s'accompagne naturellement d'un besoin de généralité pour le type de géométrie admissible.

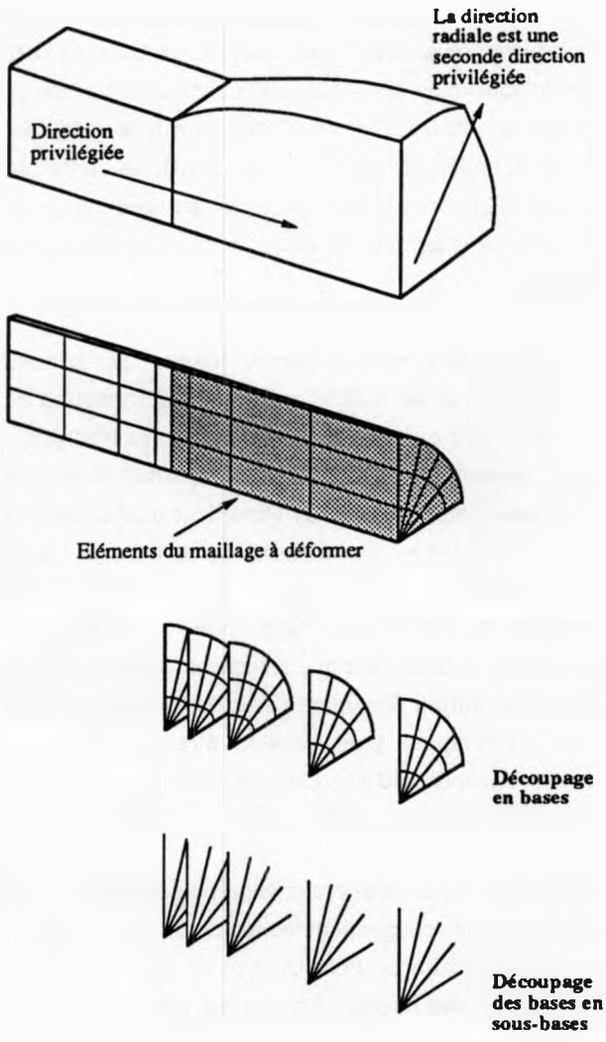


Fig. 2.6 Découpage en bases et en sous-bases, deux directions privilégiées requises.

Un deuxième critère essentiel tient à la qualité du découpage effectué pour lequel une certaine régularité topologique est indispensable. Un "bon" maillage se caractérise par une variation progressive de la taille des cellules, de même que par une non-dégénérescence de leur forme. D'autre part, on souhaite que les zones de hauts gradients qui exigent la plus grande finesse de résolution et qui ont un découpage plus raffiné dans le maillage initial conservent cette caractéristique.

La troisième exigence tient à l'utilisation du schéma de Newton-Raphson. Ce dernier requiert la nécessité de pouvoir calculer des dérivées des coordonnées par rapport aux inconnues géométriques. Nous devons donc être en mesure de pouvoir fournir les dérivées de la "fonction" de relocalisation.

Le dernier souhait est lié à l'usage de la méthode frontale. L'heureuse combinaison entre celle-ci et les éléments finis est due en grande partie au support réduit des fonctions de forme. Ceci définit un principe de localité qui est également souhaitable pour la déformation du maillage.

2.3. Techniques de déformation de maillages.

La déformation consiste en une transformation de coordonnées entre le maillage initial et le nouveau maillage. L'idée n'est pas neuve et a été fréquemment utilisée lors de la génération de maillages. En particulier, la technique des différences finies et les méthodes spectrales posent le problème de transformer un maillage quelconque en maillage rectangulaire compatible avec les différences finies. Le maillage initial est dès lors une grille parente dont la géométrie est particulièrement simple (Aubert 83)(Schneidesh 92)(Henrici 86). La grille finale dont les frontières sont compatibles avec la géométrie réelle du problème est obtenue par la transformation judicieuse du maillage parent.

Les procédures de transformations de maillages appartiennent à plusieurs familles distinctes (Thompson 85) :

- celles qui sont solutions de systèmes d'équations aux dérivées partielles,
- celles qui redressent le treillis formé par le maillage d'éléments finis,
- celles qui sont construites à l'aide d'une fonction algébrique.

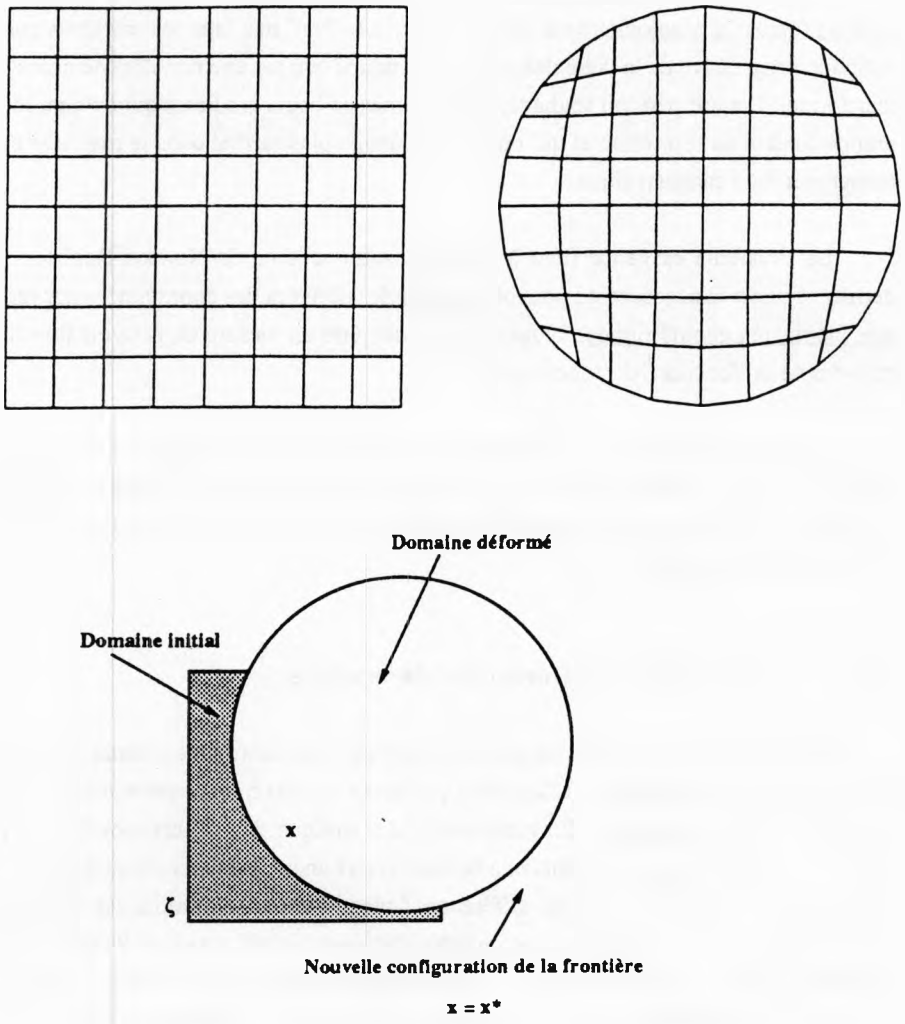


Fig. 2.7 Transformation en Laplacien,
déformation d'un maillage carré en maillage circulaire.

Les coordonnées **x** du nouveau maillage sont donc une fonction des coordonnées ζ au sein du maillage initial et **x*** les coordonnées de la frontière du maillage transformé. La discrétisation de la frontière du nouveau maillage est un argument de la transformation. En d'autres mots, ces techniques se limitent à propager, à l'intérieur d'un maillage de dimension n, une déformation donnée de sa frontière de dimension n-1.

Dans le contexte général de la génération de maillages, les méthodes de déformation sont concurrencées par des méthodes qui créent une nouvelle structure topologique. Ces méthodes de génération offrent évidemment davantage de degrés de liberté et permettent les déformations spectaculaires typiques de processus transitoires. Le remplissage d'un moule en offre un exemple significatif. L'harmonie du maillage réclame alors la génération de nouveaux éléments en cours de simulation (Couniot 91). Cependant, la complexité de telles méthodes pose la question de leur opportunité lorsqu'elles ne s'avèrent pas indispensables. Un choix judicieux serait d'imaginer leur introduction lorsque le maillage fourni par une méthode plus simple ne satisfait plus à certains critères géométriques sur les éléments. Une telle stratégie tirerait profit du caractère continu de tout processus qui impose de petits déplacements entre deux pas de temps proches même si le processus complet implique une grande déformation.

2.3.1. Transfomation en Laplacien.

Les systèmes d'équations à la base de transformations de coordonnées sont généralement elliptiques. Le caractère elliptique s'impose naturellement en raison des conditions aux limites que l'on souhaite satisfaire : la nouvelle configuration de la frontière libre du domaine.

Une des transformations elliptiques les plus simples est régie par un système d'équations de Laplace (Denayer 78)(Fig. 2.7) :

$$\Delta_\zeta \mathbf{x} = 0, \qquad \text{sur } \Omega,$$
$$\mathbf{x} = \mathbf{x}^*, \qquad \text{sur } \partial\Omega.$$

Les solutions (harmoniques par définition) sont continûment différentiables et obéissent à un principe de maximum qui assure entre autres le caractère biunivoque de la transformation. L'emploi du Laplacien équivaut à imposer que tout noeud interne du maillage couvrant le domaine physique soit situé au barycentre du polygone formé par les sommets adjacents. Cela crée un effet de lissage qui garantit une certaine régularité au coeur du maillage généré. Par contre, on provoque également un écartement des noeuds au

voisinage des frontières concaves et un rapprochement des noeuds aux frontières convexes.

Cependant nous ne souhaitons pas générer un nouveau maillage mais déformer un maillage existant. A priori, les coordonnées de ce maillage initial ne satisfont pas les équations de Laplace. Et donc l'application de la transformation en Laplacien modifiera la configuration interne du maillage même si les frontières parentes et réelles coincident. Cette modification n'est évidemment pas souhaitable si nous supposons que le maillage initial a une configuration optimale. Il s'agit de préserver cette configuration en particulier si les frontières ne sont pas modifiées. D'autre part, se limiter à des grilles satisfaisant aux équations de Laplace est une contrainte inacceptable.

Exprimer la transformation en terme de déplacements contourne cette dernière difficulté. Définissons le déplacement d'un point par :

$$\delta \mathbf{x} = \mathbf{x} - \zeta,$$

et écrivons les équations de Laplace en terme de déplacement :

$$\Delta_\zeta \, \delta \mathbf{x} = 0, \qquad \text{sur } \Omega,$$
$$\delta \mathbf{x} = \delta \mathbf{x}^*, \qquad \text{sur } \partial\Omega.$$

La modification de la configuration du maillage initial est du même ordre de grandeur que les déformations de la frontière. Pour de petites déformations, la transformation en Laplacien en terme de déplacements fournit des maillages faiblement perturbés dont la configuration conserve les qualités topologiques du maillage initial. Pour de grandes déformations, les effets du Laplacien impliquent une reconfiguration partielle des maillages initiaux ne satisfaisant pas les équations de Laplace. Ainsi, l'utilisation d'une fine couche d'éléments le long d'une surface libre peut produire des maillages mal conformés. Il est donc aisé de mettre la fiabilité de cette transformation en défaut.

Cependant la transformation en Laplacien reste attractive grâce à une remarquable propriété. Cette déformation basée sur un opérateur différentiel peut être écrite sous une forme totalement algébrique. Ceci peut être obtenu de deux manières distinctes.

- Soit écrire les équations correspondant à la discrétisation des équations de Laplace. Ces équations sont linéaires, il est donc possible d'effectuer algébriquement l'élimination afin d'obtenir le déplacement des noeuds intérieurs $\delta x(\zeta)$ sous la forme de la combinaison linéaire des déplacements frontières δx^*.

- Soit recourir aux fonctions de Green. L'intégration numérique de la dérivée normale de la fonction de Green de pôle ζ le long de la frontière fournit de la même manière le déplacement de $\delta x(\zeta)$ sous la forme d'une combinaison linéaire des déplacements frontières δx^*. Une telle démarche requiert, faut-il le préciser, des conditions minimales de régularité sur la frontière en raison du concept de dérivée normale (Henrici 86).

L'expression d'une transformation sous forme algébrique permet de la réaliser de manière particulièrement économique. Dans la mesure du possible, nous recherchons cette économie bien qu'elle soit inévitablement synonyme de simplicité. La faible qualité topologique des maillages générés découle de cette simplicité.

2.3.2. Transformation de Thompson.

En raison des qualités topologiques relativement modestes des maillages générés par la transformation en Laplacien, des alternatives ont été proposées dont la transformation de Thompson (Thompson 82,84,85) qui s'écrit sous la forme :

$$\Delta_x \zeta = 0, \qquad \text{sur } \Omega,$$
$$x = x^*, \qquad \text{sur } \partial\Omega.$$

L'inconnue est le vecteur x et la relative simplicité d'un tel problème cache un délicat système d'équations non linaires aux dérivées partielles. Mais ce type de transformation fournit des maillages de meilleure qualité (Fig. 2.8). En outre, il est possible d'adjoindre des fonctions sources pour contrôler la génération du réseau.

Pour résoudre les équations de déformation, il est dès lors nécessaire de recourir à une méthode numérique comme pour les équations de champ. Le problème d'un écoulement à surfaces libres dont le réseau est contrôlé par une transformation de Thompson devient :

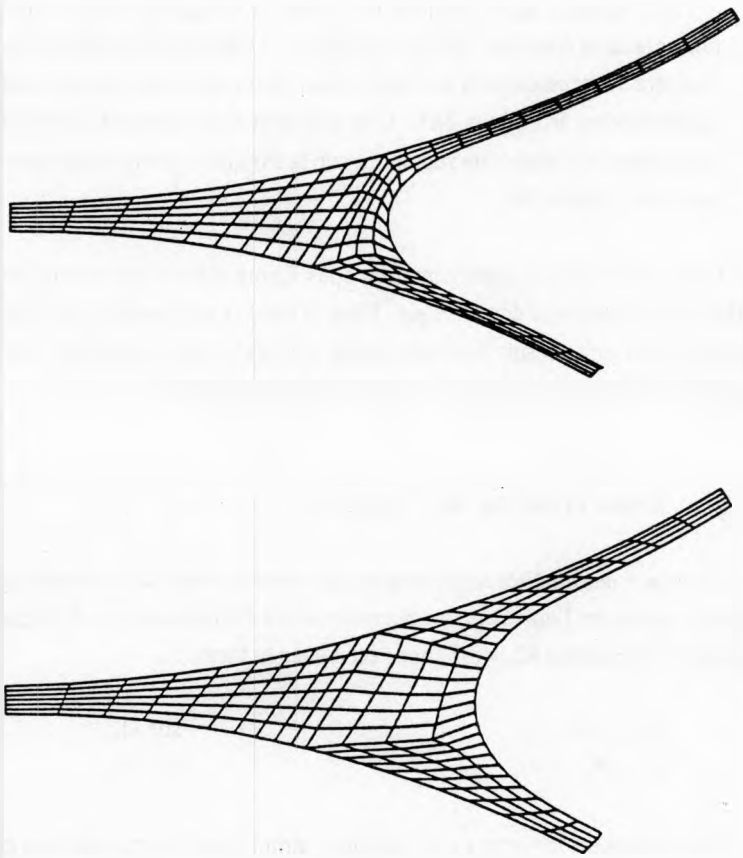


Fig. 2.8 Maillages déformés par une transformation de Thompson.

- Trouver $(\mathbf{v}, p, h, \mathbf{x}) \in V \times P \times H \times X$ tels que :

$$\begin{aligned}
&\nabla.(\eta\bar{\nabla}\mathbf{v}) - \nabla p = 0, && \text{sur } \Omega,\\
&\nabla.\mathbf{v} = 0, && \text{sur } \Omega,\\
&\mathbf{v}.\mathbf{n} = 0, && \text{sur } \partial\Omega_{Free},\\
&\Delta_{\mathbf{x}}\,\zeta = 0, && \text{sur } \Omega,
\end{aligned}$$

avec les contraintes suivantes :

$$\begin{aligned}
&\mathbf{v} = \hat{\mathbf{v}}, && \text{sur } \partial\Omega_{Dirichlet},\\
&(\eta\bar{\nabla}\mathbf{v} - p\mathbf{I}).\mathbf{n} = 0, && \text{sur } \partial\Omega_{Neumann},\\
&h = 0, && \text{sur } C_{Lip},\\
&\delta\mathbf{x} = h\ \mathbf{d}, && \text{sur } \partial\Omega_{Free}.
\end{aligned}$$

La dernière équation est la condition frontière associée à l'opérateur de remaillage. Le couplage entre les équations de remaillage et les équations de l'écoulement a plusieurs conséquences :

- La taille du système est quasiment doublée, puisque le nombre d'inconnues de coordonnées est égal au nombre de vitesses. La pression est scalaire et les inconnues géométriques sont définies sur un maillage de dimension inférieure. Le nombre d'inconnues discrètes de pression et d'inconnues géométriques est donc faible par rapport aux vitesses discrètes. Le coût de résolution est multiplié par un facteur huit si nous utilisons une méthode frontale.

- Si la non-linéarité des équations de contrôle du maillage est plus forte que le problème à surface libre, nous arrivons au paradoxe que notre technique provoque la divergence du schéma itératif, alors qu'elle est destinée à garder un maillage bien conformé pour assurer la convergence. Ce type de difficulté apparaît en particulier pour les équations de Thompson.

- La non-linéarité des équations de contrôle implique que celles-ci sont satisfaites uniquement à la convergence du processus itératif. Ainsi, les bonnes qualités topologiques de certains opérateurs ne sont pas assurées lors du cheminement suivi par le schéma itératif. Or, c'est durant le processus itératif que nous souhaitons conserver un maillage bien conformé afin d'éviter une divergence par une distorsion du maillage.

Il apparaît ainsi que seul un opérateur linéaire tel que la transformation en Laplacien lève les deux derniers obstacles. Par contre, la transformation de Thompson n'a pu être utilisée que lors de simulations simples comme l'extrusion d'un rectangle (Legat 92a). En effet, les équations de déformation accroissent sensiblement la difficulté pour faire converger le schéma itératif et augmentent le coût de résolution d'un facteur élevé (approximativement de l'ordre de 7...8).

Une solution intéressante consiste à découpler remaillage et écoulement au prix de la perte de la convergence quadratique pour une convergence globale "quasi-quadratique" au mieux. Nous augmentons donc le nombre total d'itérations, tandis que la taille des systèmes est divisée par deux. Mais cela nous permet de faire converger les équations du remaillage à chaque itération de surface libre, et donc de construire une configuration convergée et bien conformée du maillage à chaque adaptation des surfaces libres. Au niveau informatique, les ressources mémoires requises pour une telle procédure sont nettement plus modestes, tandis que le coût calcul peut être qualifié d'économique par rapport à une procédure couplée.

2.3.3. Transformation par analogie au treillis.

Une autre manière de déformer globalement un maillage a été introduite par D. Berghezan et F. Dupret (Berghezan 90,91). Ce redressement de maillage consiste à traiter le maillage de référence comme un treillis articulé. La transformation se base donc uniquement sur un maillage discret dont les côtés d'éléments sont les barres du treillis et les noeuds représentent les articulations.

On définit alors un système de forces liées à la configuration même du maillage et exercées aux noeuds des éléments. Les noeuds internes seront déplacés jusqu'à une configuration d'équilibre. L'équilibre du treillis et une bonne qualité topologique coincident grâce à une définition adéquate des forces qui empêche l'apparition de dégénérescences angulaires en y associant des forces non bornées. La méthode consiste finalement à minimiser l'énergie du treillis formé par le maillage d'éléments finis. L'avantage du recours à une énergie pour le calcul tient au principe de minimum qui garantit une solution.

Il faut mettre à l'actif de la méthode la régularité topologique des maillages déformés ainsi que la conservation des raffinements introduits dans le maillage initial. Par contre, les équations du redresseur sont fortement non-linéaires et elles nécessitent l'usage d'une

méthode de Newton-Raphson avec une introduction progressive des déplacements de la frontière.

En conclusion, la technique de redressement du maillage semble posséder des qualités et des défauts semblables à la transformation de Thompson. Son coût dans une résolution couplée est tout à fait prohibitif et risque en sus de provoquer une divergence du système. Ainsi, D. Berghezan prône son usage avec une méthode où calcul de l'écoulement et contrôle du maillage sont découplés. Mais la bonne régularité des maillages générés est le point d'honneur de ces méthodes plus complexes.

2.3.4. Transformations par proportionnalité.

Les procédures algébriques comprennent toute une série de techniques. L'attrait des méthodes algébriques réside évidemment dans une plus grande simplicité d'application, puisqu'on ne doit pas résoudre un système d'équations.

Malgré les qualités de la démarche découplée pour le redressement ou la transformation de Thompson et malgré la relative qualité des maillages générés par les transformations algébriques, notre volonté de construire une méthode implicite économique basée sur un schéma de Newton-Raphson nous impose des techniques purement algébriques. Notre problème d'écoulement à surfaces libres avec un maillage contrôlé par une technique linéaire devient :

- Trouver $(\mathbf{v}, p, h) \in V \times P \times H$ tels que :

$$\begin{aligned} &\nabla.(\eta \bar{\nabla}\mathbf{v}) - \nabla p = 0, && \text{sur } \Omega, \\ &\nabla.\mathbf{v} = 0, && \text{sur } \Omega, \\ &\mathbf{v}.\mathbf{n} = 0, && \text{sur } \partial\Omega_{Free}, \end{aligned}$$

avec les contraintes suivantes :

$$\begin{aligned} &\mathbf{v} = \hat{\mathbf{v}}, && \text{sur } \partial\Omega_{Dirichlet}, \\ &(\eta \bar{\nabla}\mathbf{v} - p\mathbf{I}).\mathbf{n} = 0, && \text{sur } \partial\Omega_{Neumann}, \\ &h = 0, && \text{sur } C_{Lip}, \\ &\delta x = \Phi(h), && \text{sur } \Omega, \end{aligned}$$

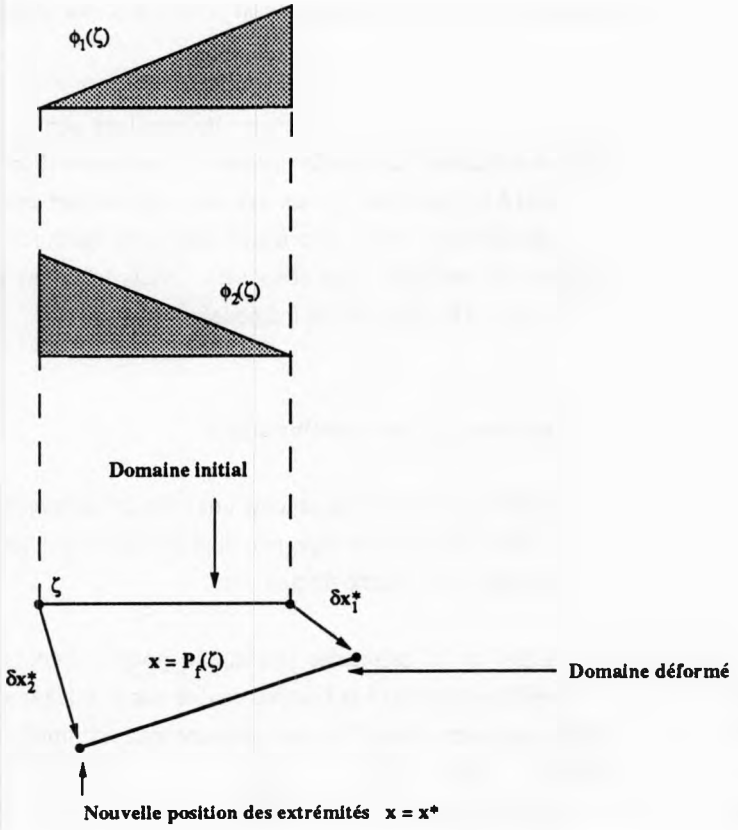


Fig. 2.9 Déformation d'un segment de courbe sur base d'une interpolation linéaire.

où la fonctionnelle de relocalisation Φ est définie de $\partial\Omega_{Free}$, vers Ω. Si nous supposons que dans la formulation discrète, Φ est linéaire par rapport aux valeurs nodales de l'inconnue géométrique h, il sera possible d'intégrer le contrôle du maillage par une algèbre linéaire sur la matrice discrète du schéma de Newton-Raphson, sans accroître la taille du système discret. Une telle procédure sera décrite dans le quatrième chapitre du présent travail. Le contrôle du maillage n'augmente ainsi quasiment pas le coût d'un problème à surfaces libres. Il ne reste dès lors qu'à sélectionner la transformation algébrique la plus performante.

Les transformations algébriques de coordonnées basées sur des techniques d'interpolation sont très nombreuses. Ces transformations reposent sur le principe suivant. On postule l'existence d'une fonction continue qui déforme un domaine de référence.

$$\delta x = f(\zeta) \qquad \text{sur } \Omega.$$

Mais cette fonction est inconnue, il s'agit dès lors de l'interpoler sur base des uniques valeurs de δx connues, en l'occurence δx^* sur $\partial\Omega$. Dans le cas où Ω est une courbe, une interpolation linéaire paraît appropriée, puisque nous ne connaissons que les déformations des deux extrémités de la courbe δx_1^* et δx_2^*. Ainsi, la projection de f dans l'espace des fonctions linéaires s'écrit :

$$\delta x = P_f(\zeta) = \delta x_1^* \phi_1(\zeta) + \delta x_2^* \phi_2(\zeta) \qquad \text{sur } \Omega,$$

où ϕ_i sont des fonctions linéaires définies sur Ω tels que $\phi_i(\zeta)$ prenne une valeur unitaire à l'extrémité i et s'annule au côté opposé. Ceci revient à propager, proportionnellement à la distance sur le maillage initial, les déplacements des extrémités au sein de la courbe (Fig. 2.9). La transposition de ce processus à la déformation de surfaces (volumes) se heurte à une difficulté importante. En effet, l'information à propager n'est plus réduite à deux données ponctuelles mais consiste en une courbe (surface). Certes, la discrétisation de la frontière, réduit cette information en un nombre fini de valeurs nodales. On peut donc imaginer une interpolation de f sur base sur de ces valeurs nodales.

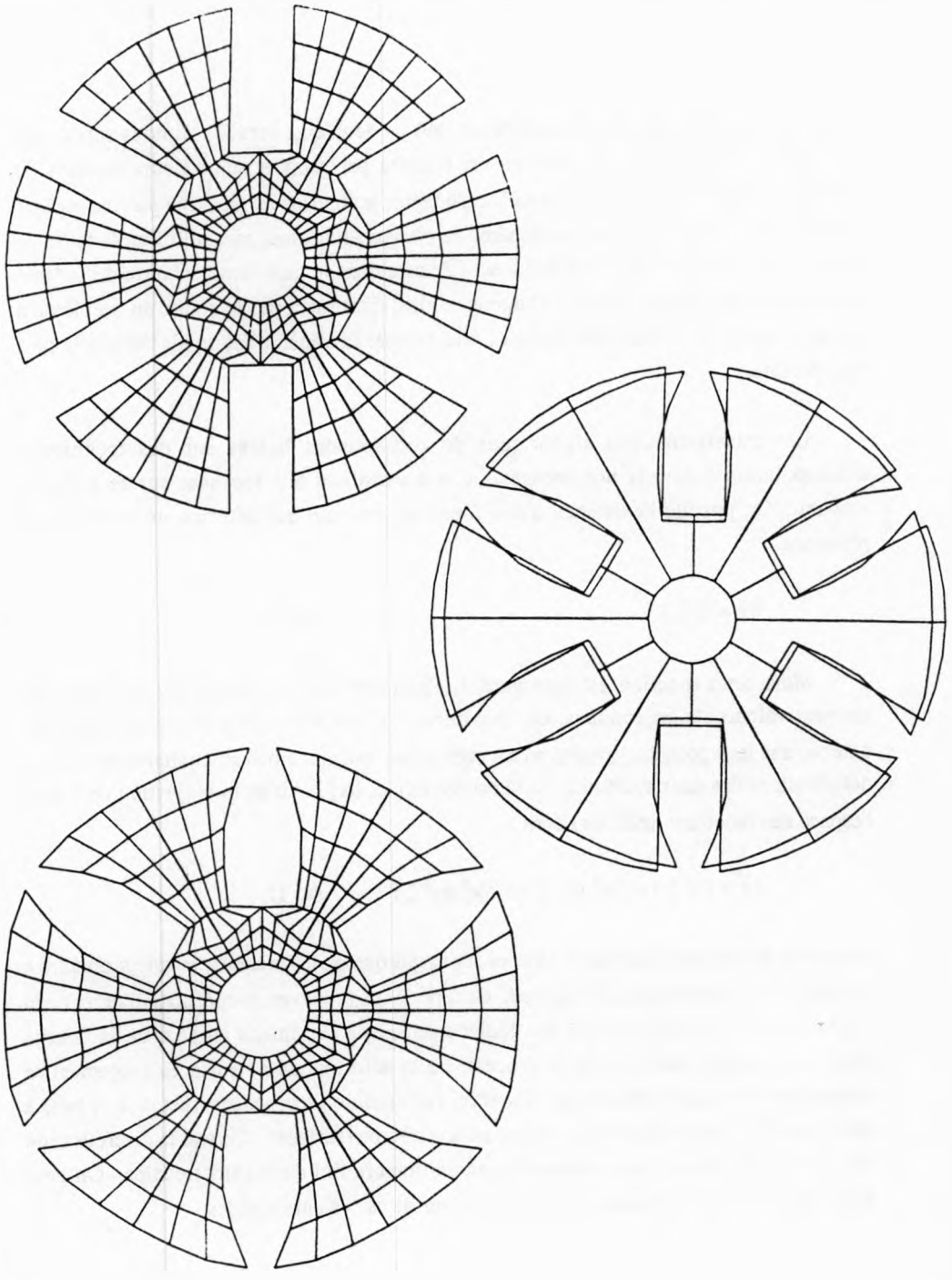


Fig. 2.10 Exemple de maillage déformé par la transformation d'Euclide.

Une première manière de procéder est une interpolation basée sur les distances séparant le sommet intérieur d'indice i et les N sommets résultat de la discrétisation de la frontière. Le déplacement s'exprime comme :

$$\delta x_i = \sum_{j=1,N} w_{ij}\, \delta x_j^*,$$

où le poids w_{ij} est une fonction de la distance euclidienne entre les noeuds i et j.

$$w_{ij} = \frac{\sum_{k=1,N} \| \zeta_i - \zeta_k \|_2}{N \,.\, \| \zeta_i - \zeta_j \|_2}$$

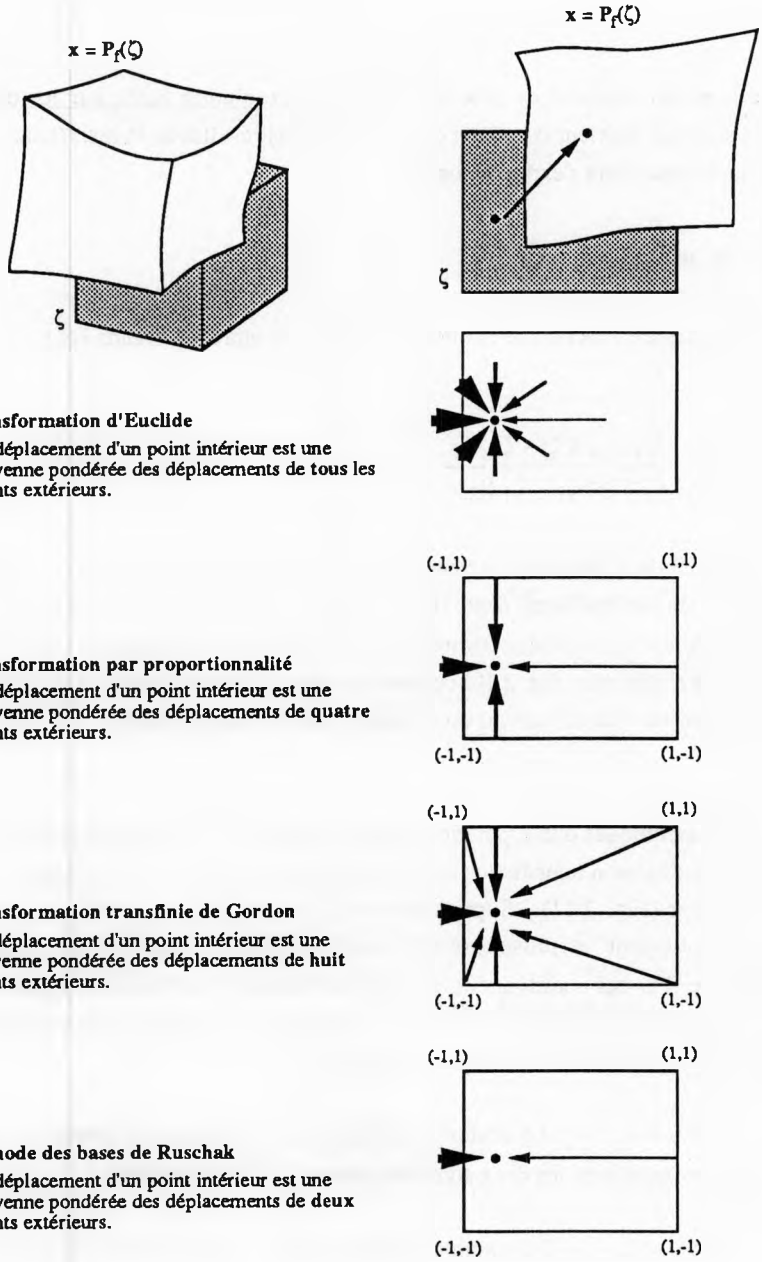
Une telle règle a l'avantage majeur de ne pas requérir une organisation topologique particulière au sein du maillage. Cette règle dégénère en une interpolation linéaire pour la déformation d'une courbe unidimensionnelle rectiligne. Les performances topologiques d'une telle règle algébrique (Fig. 2.10) concurrencent certainement un opérateur différentiel tel que le Laplacien. Par ailleurs, il est très aisé d'affiner ou de modifier la définition des poids.

D'autres techniques d'interpolation bidimensionnelle ou tridimensionnelle peuvent également être utilisées si nous fixons une importante restriction sur les maillages que nous allons considérer (Fig. 2.11). Supposons que le maillage a été généré sur base d'un unique "macro-élément" et utilisons le système de coordonnées parentes ξ définies sur le macro-élément. Par ces coordonnées, un sommet intérieur peut être directement mis en correspondance avec un nombre limité de sommets intérieurs. De manière plus précise, nous écrivons en fonction de la dimension du maillage :

- $\dim(\Omega) = 1$. Le sommet intérieur (ξ_1) du macro-segment est mis en correspondance avec les deux sommets extrémités de coordonnées (-1) et (+1).

- $\dim(\Omega) = 2$. Le sommet intérieur (ξ_1,ξ_2) de la macro-face est mis en correspondance avec les quatre sommets frontières de coordonnées ($-1,\xi_2$), ($+1,\xi_2$), ($\xi_1,-1$) et ($\xi_1,+1$).

- $\dim(\Omega) = 3$. Le sommet intérieur (ξ_1,ξ_2,ξ_3) de la macro-brique est mis en correspondance avec les huit sommets frontières de coordonnées ($-1,\xi_2,\xi_3$), ($+1,\xi_2,\xi_3$), ($\xi_1,-1,\xi_3$), ($\xi_1,+1,\xi_3$), ($\xi_1,\xi_2,-1$) et ($\xi_1,\xi_2,+1$).



Transformation d'Euclide

Le déplacement d'un point intérieur est une moyenne pondérée des déplacements de tous les points extérieurs.

Transformation par proportionnalité

Le déplacement d'un point intérieur est une moyenne pondérée des déplacements de quatre points extérieurs.

Transformation transfinie de Gordon

Le déplacement d'un point intérieur est une moyenne pondérée des déplacements de huit points extérieurs.

Méthode des bases de Ruschak

Le déplacement d'un point intérieur est une moyenne pondérée des déplacements de deux points extérieurs.

Fig. 2.11 Transformations algébriques.

La transformation de proportionnalité (Fig. 2.11) consiste à fournir la déformation en un point intérieur de la manière suivante :

- $\dim(\Omega) = 1.$

$$\delta x(\xi_1) = 1/1 \left(\delta x^*(-1)\, \phi_1(\xi_1) + \delta x^*(+1)\, \phi_2(\xi_1) \right).$$

- $\dim(\Omega) = 2.$

$$\delta x(\xi_1,\xi_2) = 1/2 \left(\delta x^*(-1,\xi_2)\, \phi_1(\xi_1) + \delta x^*(+1,\xi_2)\, \phi_2(\xi_1) + \delta x^*(\xi_1,-1)\, \phi_1(\xi_2) + \delta x^*(\xi_1,+1)\, \phi_2(\xi_2) \right).$$

- $\dim(\Omega) = 3.$

$$\delta x(\xi_1,\xi_2,\xi_3) = 1/4 \left(\delta x^*(-1,\xi_2,\xi_3)\, \phi_1(\xi_1) + \delta x^*(+1,\xi_2,\xi_3)\, \phi_2(\xi_1) + \delta x^*(\xi_1,-1,\xi_3)\, \phi_1(\xi_2) + \delta x^*(\xi_1,+1,\xi_3)\, \phi_2(\xi_2) + \delta x^* (\xi_1,\xi_2,-1\, \phi_1(\xi_3) + \delta x^*(\xi_1,\xi_2,+1)\, \phi_2(\xi_3) \right).$$

Une telle manière de procéder peut s'interpréter comme suit : pour construire l'interpolation bidimensionnelle (tridimensionnelle) de la fonction f en un point, on effectue une moyenne algébrique des déformations induites sur deux (trois) courbes passant par le point considéré. La moyenne algébrique nous donne les transformations proportionnelles.

La transformation transfinie de Gordon (Gordon 73)(Fig. 2.11) apparaît comme une variante un peu plus sophistiquée de cette procédure. Sur base de la théorie de l'interpolation, on remplace la moyenne arithmétique par une somme booléenne pour généraliser une interpolation linéaire unidimensionelle à des dimensions supérieures. L'interpolation transfinie pour un problème à deux dimensions peut se définir comme suit :

- $\dim(\Omega) = 2.$

$$\delta x(\xi_1,\xi_2) = \left(\delta x^*(-1,\xi_2)\, \phi_1(\xi_1) + \delta x^*(+1,\xi_2)\, \phi_2(\xi_1) + \delta x^*(\xi_1,-1)\, \phi_1(\xi_2) + \delta x^*(\xi_1,+1)\, \phi_2(\xi_2) - \delta x^*(-1,-1) - \delta x^*(+1,-1) - \delta x^*(-1,+1) - \delta x^*(+1,+1) \right).$$

L'interpolation transfinie et la transformation par proportionnalité présentent de multiples avantages. Entre autres, il n'est pas nécessaire de résoudre de systèmes d'équations, et la topologie des maillages générés est correcte dans la majorité des cas (Fig 2.12). Toutefois aucune assurance de qualité pour les maillages produits ne nous est donnée. En outre dans le cadre d'écoulements tridimensionnels à interfaces mobiles,

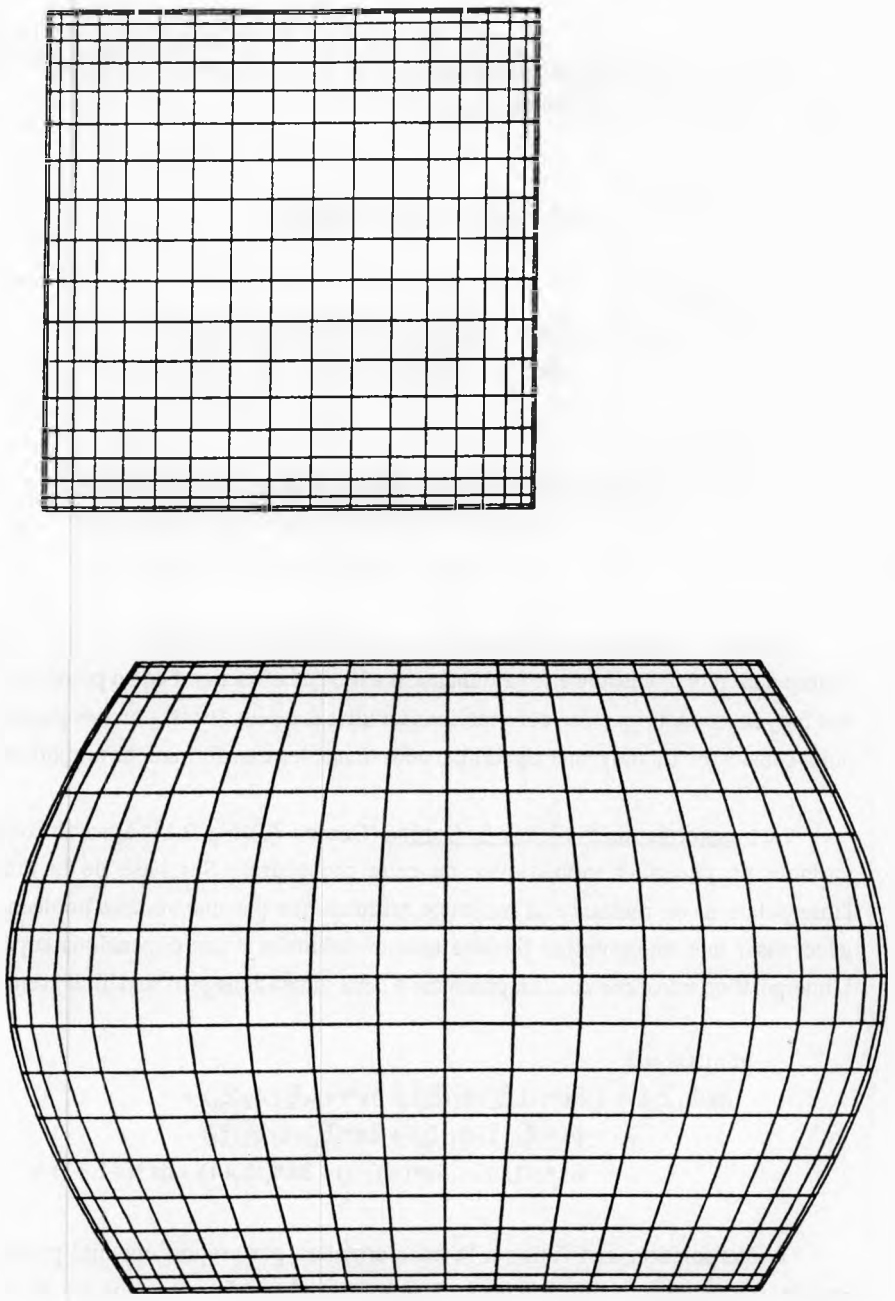


Fig. 2.12 Transformation transfinie de Gordon appliqué à un maillage rectangulaire.

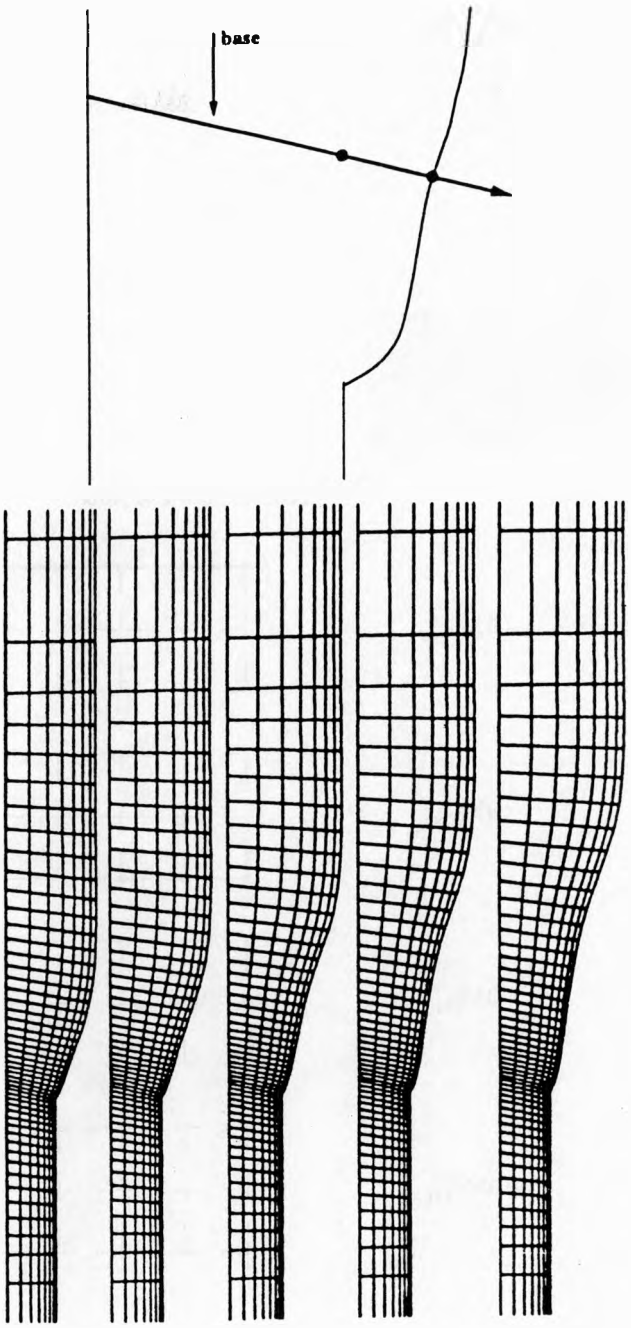


Fig. 2.13 Exemple de maillages déformés par la technique de bases.

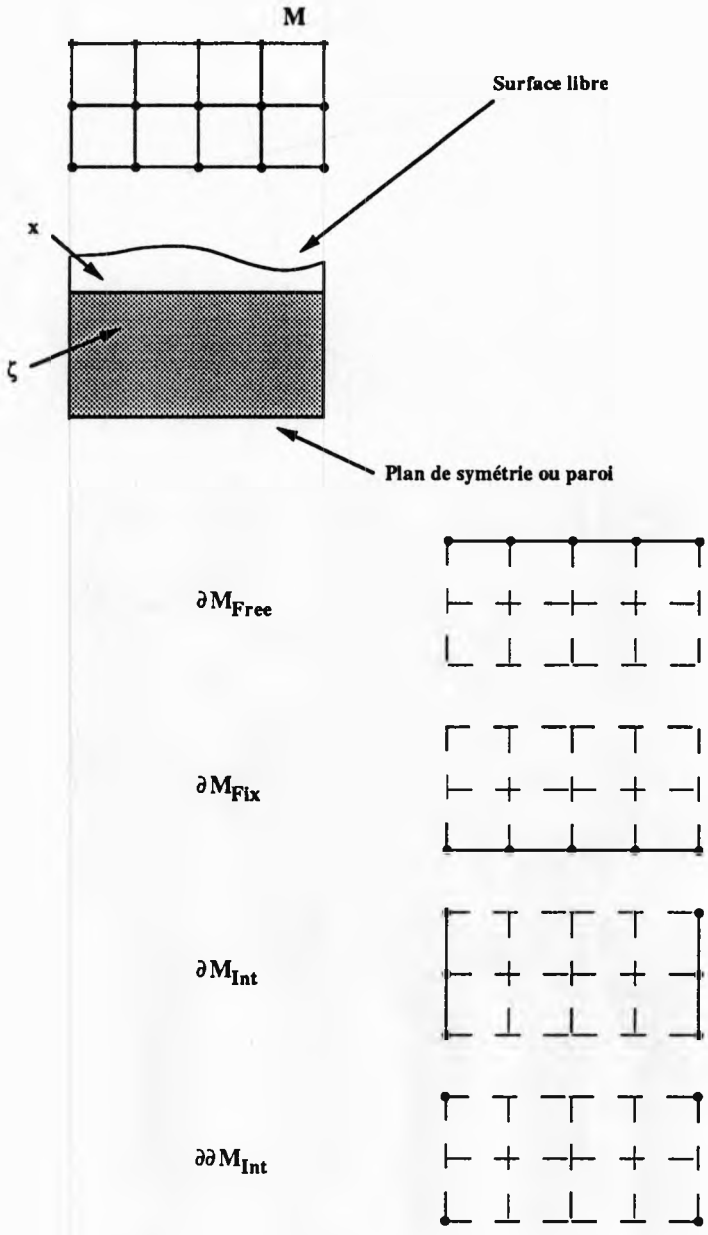


Fig. 2.14 Illustration de la hiérarchie des déformations, définition de sous-maillages.

l'inconvénient majeur de ce type de techniques est l'exigence d'isomorphisme du maillage avec un macro-élément.

Ainsi, la méthode des bases (Fig. 2.11) est une adaptation particulière des règles de proportionnalité. Cette méthode est particulièrement adaptée pour le gonflement de jets et a été initialement développée par Ruschak, puis par Saito et Kistler (Ruschak 78,80)(Saito 82)(Fig. 2.13). Tous les sommets sont assujettis à un faisceau de droites. Les surfaces libres ne sont composées que des extrémités des droites. C'est donc uniquement le déplacement de ces extrémités qui est imposé. Par contre, les sommets internes du maillage sont déplacés sur les droites par une interpolation linéaire du déplacement des extrémités. Une telle règle de déformation peut s'écrire :

- $\dim(\Omega) = 2$.
  $\delta x(\xi_1,\xi_2) = (\delta x^*(-1,\xi_2)\, \phi_1(\xi_1) + \delta x^*(+1,\xi_2)\, \phi_2(\xi_1))$.

Les exigences requises pour le maillage se réduisent à l'isomorphisme de celui-ci avec un macro-élément et l'imposition de déformation sur seulement deux macro-segments opposés. En pratique, ce type d'exigence est rencontré dans les problèmes bidimensionnels de gonflement de jets. Mais ceci n'est pas une règle générale.

2.4. Hiérarchie des déformations

La dernière étape consiste à mettre en oeuvre ces techniques de déformation. Considérons un exemple simple de déformation de maillage requis par la simulation d'un écoulement à surfaces libres. Nous supposons donc que nous déformons le maillage connexe M de dimension deux en présence d'une surface libre connexe. Les sous-maillages ∂M_{Free} et ∂M_{Fix} sont composés des sommets appartenant respectivement à la surface libre et à l'axe de symétrie. Il convient évidemment de ne pas déformer cet axe. Les sous-maillages ∂M_{Int} et $\partial\partial M_{Int}$ sont caractérisés par les égalités :

$$\partial M_{Int} = \partial M - (\partial M_{Fix} \cup \partial M_{Free}),$$
$$\partial\partial M_{Int} = \partial M_{Int} \cap (\partial M_{Fix} \cup \partial M_{Free}).$$

Nous avons ainsi décomposé le sous-maillage frontière en trois sous-maillages distincts de dimension une. Seuls deux sommets de ∂M_{Int} sont mobiles, ce sont deux éléments de $\partial\partial M_{Int}$ de dimension zéro.

Revenons aux techniques décrites dans le paragraphe précédent qui sont une série de manières d'induire une déformation δx à l'intérieur du maillage M sur base du déplacement de la frontière ∂M. Les arguments de la transformation sont les coordonnées ζ au sein du maillage initial et le déplacement δx^* de la frontière. Mais ces arguments nous sont-ils réellement connus ?

La connaissance des coordonnés ζ du maillage initial M nous est évidemment acquise, tandis que le déplacement d'interfaces mobiles a été défini par le biais de la contrainte suivante :

$$\delta \mathbf{x} = \mathrm{h}\ \mathbf{d},$$

Ceci fournit une représentation déformée de la frontière ∂M_{Free} mais rien n'assure que la discrétisation fournie est optimale. En effet, le déplacement des interfaces mobiles est régi uniquement en vue de satisfaire la condition cinématique. Aucun critère topologique n'est inclus lors de la résolution afin que les noeuds frontières soient répartis de manière harmonieuse. Un choix malheureux ou simplement non-optimal de la direction **d** peut induire une répartition fantaisiste des noeuds sur les interfaces mobiles.

Il s'agit également de préciser le déplacement des noeuds frontières de ∂M_{Int}. Considérons deux sommets voisins l'un sur un axe de symétrie et l'autre obéissant à une importante déformation de la surface libre à laquelle il appartient. Il est clair que ne pas déplacer les sommets de ∂M_{Int} n'est pas compatible avec la conservation de la configuration topologique du maillage. Deux manières de procéder s'offrent naturellement à nous :

- Une première solution consiste à appliquer des conditions de symétrie sur ∂M_{Int} pour l'opérateur de déformation. De telles conditions aux limites peuvent être aisément imposées pour les opérateurs différentiels elliptiques. Mais il est apparu que la qualité topologique de la discrétisation fournie de cette manière sur l'axe de symétrie est décevante.

- Une seconde possibilité considère préalablement une déformation de dimension une aux sommets intérieurs de ∂M_{Int} sur base des déplacements des sommets de $\partial\partial M_{Int}$. Ensuite, sur base des déplacements de ∂M_{Int} et de ∂M_{Free}, on applique la déformation de seconde dimension à M. Une telle solution est apparue nettement plus fiable.

Cet exemple résume l'écriture du principe hiérarchique. Le principe repose sur l'utilisation hiérarchique et successive de règles de déformations de dimensions géométriques différentes. De manière plus formelle, nous pouvons décrire le principe hiérarchique comme la démarche suivante.

Nous définissons n+1 ensembles sur base d'un maillage de dimension n :

P_n		qui contient une partition du maillage donné en maillages de dimension n,
P_i	i=1,n-1	qui contient une partition des frontières des maillages de P_{i+1} en maillages de dimensions i,
P_0		qui contient tous les sommets des interfaces mobiles.

Nous définissons n+1 transformations :

F_i	i=1,n	qui fournissent les déformations δx des sommets d'un maillage de dimension i sur base du déplacement de la frontière de ce maillage
F_0		qui fournit le déplacement des sommets de P_0.

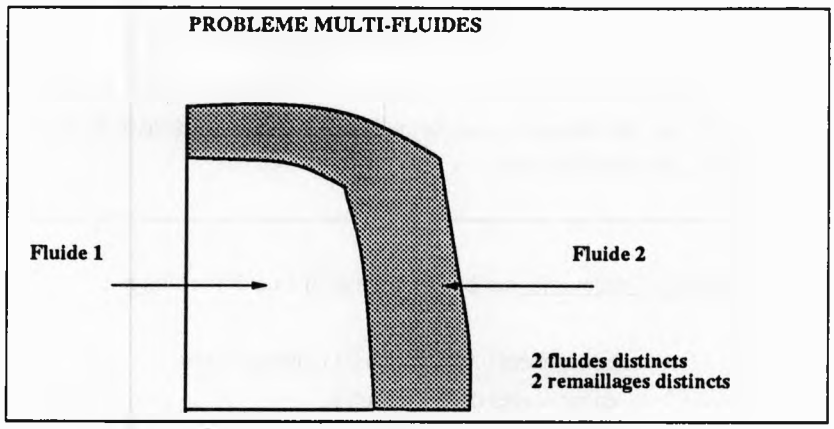
Nous appliquons successivement :

F_0 aux sommets des éléments de P_0
F_1 aux sommets des éléments de P_1
....
F_n aux sommets des éléments de P_n

Les caractéristiques d'un tel algorithme sont les suivantes :

- Le caractère général à l'égard du choix des techniques de déformations. Nous pouvons considérer une bibliothèque de toutes les techniques de déformation et utiliser alternativement celles qui nous paraissent les plus appropriées. En effet, les règles de dimensions distinctes peuvent être de nature tout à fait différentes.

- D'autre part, ceci permet d'introduire un principe de localité (Fig. 2.15). Celui-ci consiste en la division d'un maillage en un grand nombre de sous-maillages de



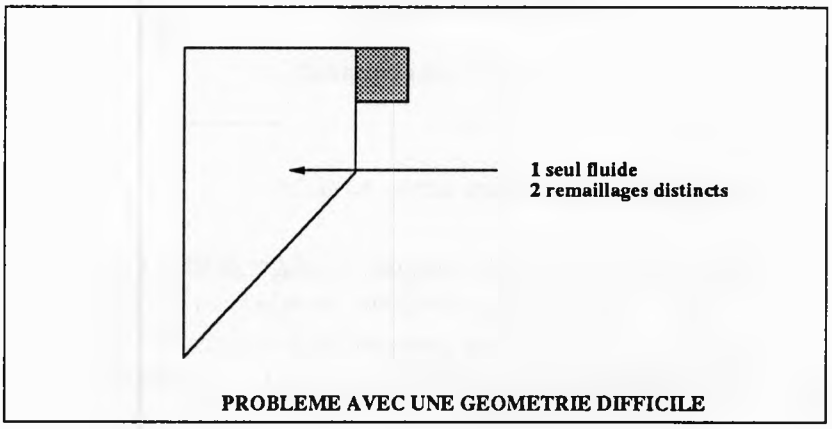
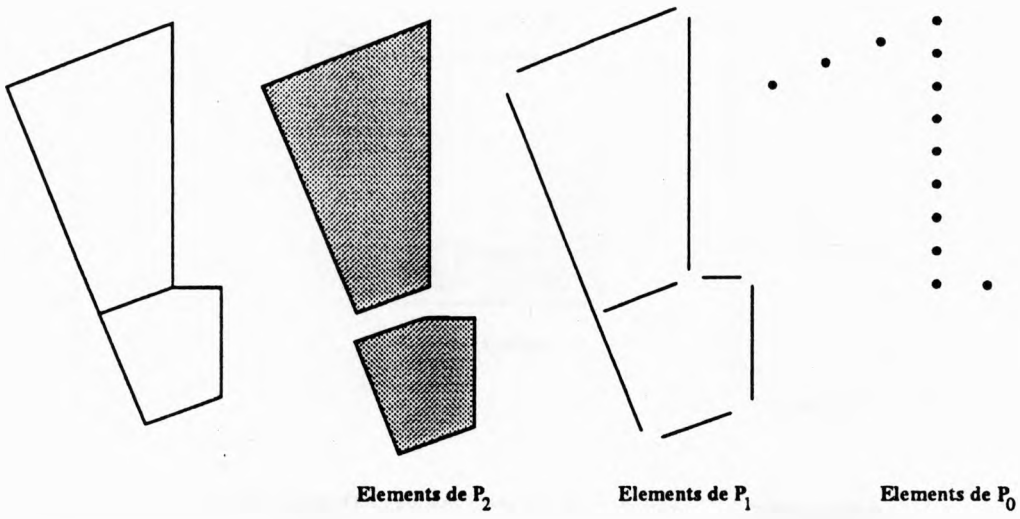


Fig. 2.15 Applications du principe de localité au sein d'un algorithme hiérarchique.



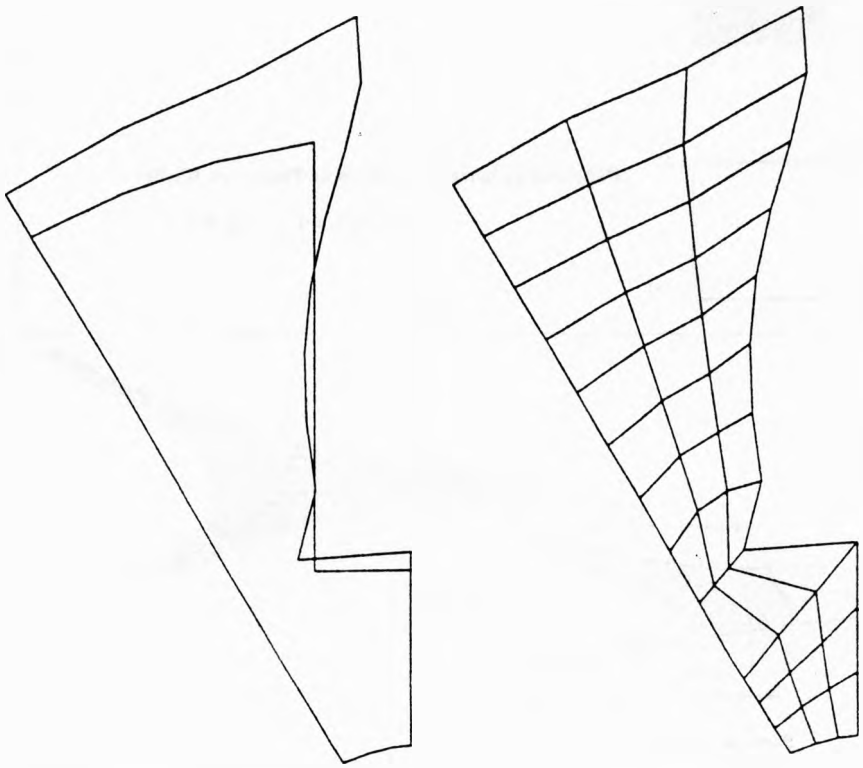


Fig. 2.16 Définition des partitions de sous-maillages.

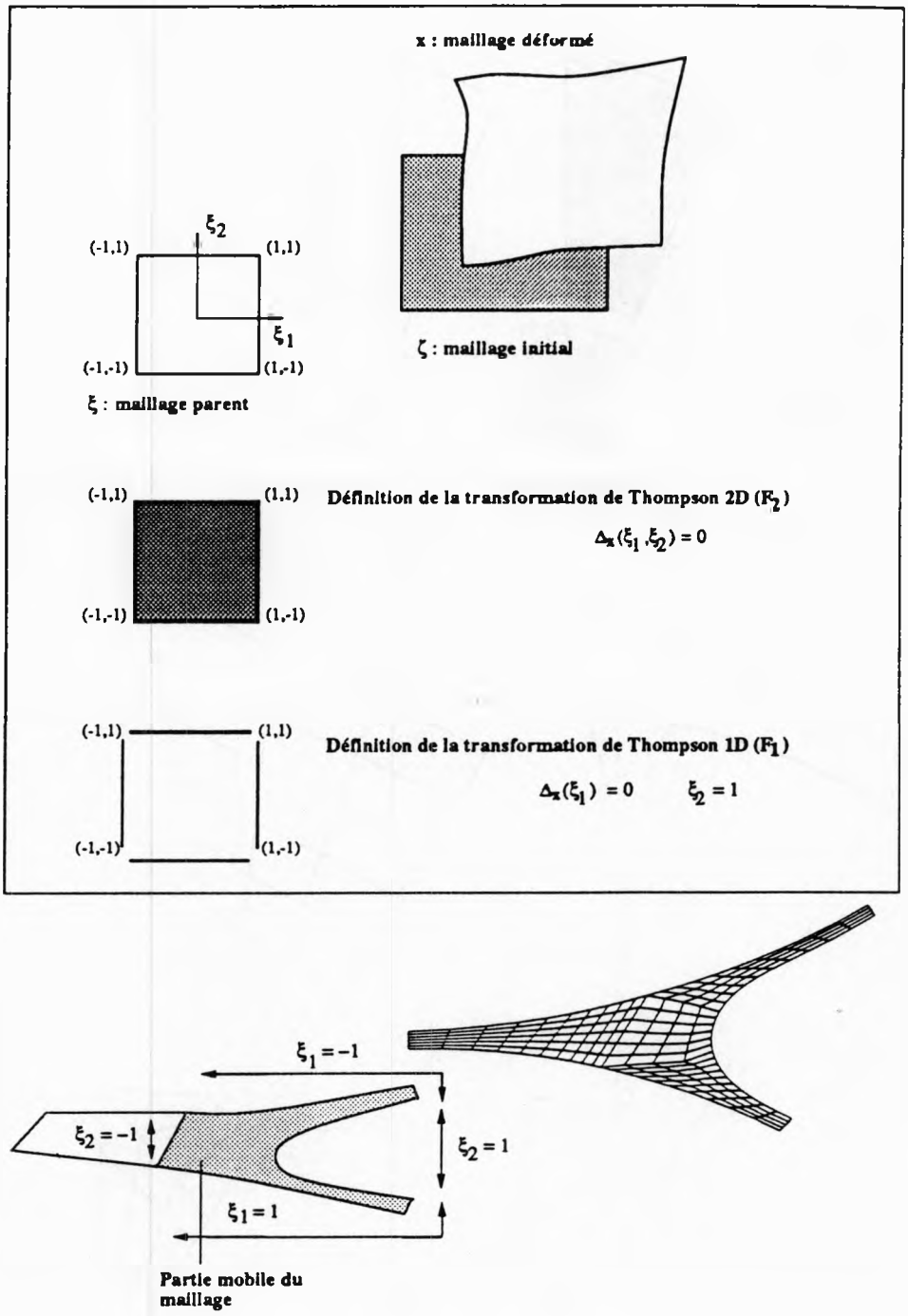


Fig. 2.17 Mise en oeuvre de transformations de Thompson de dimension deux et une dans une approche hiérarchisée.

dimension n que nous déformons indépendamment (Fig. 2.16). Le seul couplage s'effectue par le biais des sous-maillages de P_{n-1} qui ont été déformés préalablement. La méthode des bases est un cas extrême de cette partition : l'ensemble des sommets est inclus dans les sous-maillages de P_{n-1} et la déformation ne fait pas appel à F_n.

- Ensuite, il est possible d'intégrer une technique de contrôle sur la surface libre. On déplace les sommets d'abord le long de la direction **d**, puis de manière tangentielle par une technique de déformation. Le fait de résoudre de manière couplée les équations de déformations et la condition cinématique doit nous assurer la bonne conformation d'un maillage même si le choix de la direction **d** ne fut pas judicieux. Comme on proscrit une direction **d** tangente à la surface libre, l'unicité de la combinaison des déplacements est acquise.

- Une dernière qualité de l'algorithme réside dans la souplesse géométrique à l'égard du maillage considéré. Il permet de tenir compte de facteurs géométriques tels que coins et arêtes. En effet, les partitions successives permettent de préserver certains points du maillage : nous pensons par exemple à l'intersection des plans de symétrie qui ne doit pas être modifiée.

Détaillons de manière séquentielle les diverses parties de l'algorithme hiérarchique pour un maillage tridimensionnel. La première étape est la définition des ensembles P_i. Les éléments de P_0 sont les sommets des frontières mobiles. Ensuite, nous décomposons le maillage en une série de macro-briques qui sont les éléments de P_3. Les frontières de ces macro-briques sont décomposées en macro-faces qui forment les éléments de P_2. Finalement, les frontières de ces macro-faces sont décomposées en macro-segments qui forment les éléments de P_1.

La seconde étape est la définition des transformations (Fig. 2.17) de déformations F_i. A cet égard, les macro-coordonnées parentes ξ peuvent se révéler particulièrement utiles. Par exemple, le recours à des transformations de Thompson dans le cadre de l'algorithme hiérarchique nécessite d'y faire appel. En effet, il est aisé de définir une transformation bidimensionnelle de Thompson sur une macro-face à partir de deux composantes des coordonnées parentes. La troisième composante est figée à une valeur unitaire positive ou négative. De même, on définit facilement une transformation unidimensionnelle sur base d'une composante sur chaque macro-segment. Les coordonnées parentes nous fournissent de manière immédiate une représentation paramétrique requise pour la définition d'une transformation de Thompson au sein d'une

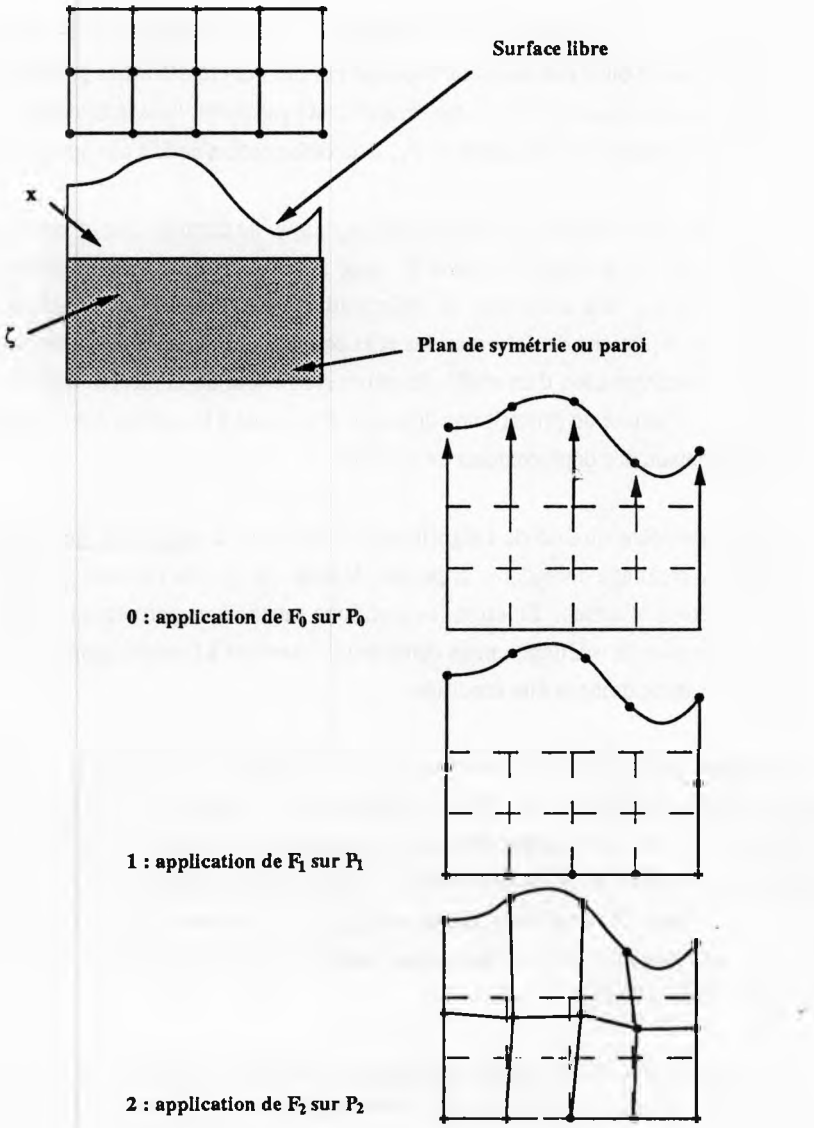


Fig. 2.18 Application successive des transformations de déformation de dimension géométrique distincte au sein de l'algorithme hiérarchique.

macro-face ou d'un macro-segment. Et dans le cas où de telles macro-coordonnées parentes ne nous sont pas connues, il est aisé d'en obtenir une bonne approximation par la résolution du problème suivant :

$$
\begin{aligned}
&\Delta_\zeta \xi = 0 && \text{sur } \Omega,\\
&\xi_1 = +1, && \text{sur } \partial\Omega_1,\\
&\xi_1 = -1, && \text{sur } \partial\Omega_2,\\
&\xi_2 = +1, && \text{sur } \partial\Omega_3,\\
&\xi_2 = -1, && \text{sur } \partial\Omega_4,\\
&\xi_3 = +1, && \text{sur } \partial\Omega_5,\\
&\xi_3 = -1, && \text{sur } \partial\Omega_6,
\end{aligned}
$$

où $\partial\Omega_i$ sont les six macro-faces d'une macro-brique. Il reste à préciser également que les transformations de Thompson déforment ici le maillage parent en maillage déformé et non plus le maillage initial en maillage déformé. Cette modification n'est pas sans influence en particulier lorsque les coordonnées initiales ne satisfont pas l'équation de Laplace.

La dernière étape est l'application successive des transformations de déformation. Tout d'abord, il faut spécifier le caractère virtuel du mot successif. En réalité, l'algorithme est simultané. En effet, si le système des équations de déformation et des équations de l'écoulement est résolu de manière couplée, la simultanéité de la résolution nous assure le respect de nos objectifs : un maillage déformé et bien conformé sur lequel les divers interpolants respectent les équations de l'écoulement. Cependant, on peut également décider de résoudre de manière découplée la relocalisation du maillage et les équations de l'écoulement. Cette optique peut d'ailleurs se révéler prometteuse car le découplage allie la souplesse, un appétit moindre en mémoire et une plus grande facilité d'implémentation. Dans ce dernier cas et uniquement dans ce cas, la présentation séquentielle des quatre parties de l'algorithme correspondrait à la réalité (Fig. 2.18).

0 : application de F_0 sur P_0 :

Il s'agit de la relocalisation des noeuds des surfaces libres sur base de la condition cinématique. A chaque noeud mobile, nous associons un déplacement dans la direction **d** afin de satisfaire localement la condition cinématique.

1 : application de F_1 sur P_1 :

Ensuite, nous lions chaque macro-segment du maillage à une transformation unidimensionnelle. Cette transformation modifiera uniquement la répartition des noeuds au sein de l'arête afin de conserver celle du maillage initial. Par contre, la forme générale

de la courbe est conservée. Ainsi une courbe, dont aucun des sommets n'a été déplacé lors de l'étape précédente, ne sera pas modifiée.

2 : application de F_2 sur P_2 :

Le même processus s'applique aux macro-faces du maillage. Nous y appliquons une transformation de dimension deux sur base de la frontière de ces faces. Cette frontière a été préalablement rediscrétisée lors des transformations de dimension un. La transformation modifie la répartition des noeuds, en préservant la forme géométrique de la surface. La déformation géométrique des macro-segments et des macro-faces a été uniquement générée par l'application de F_0.

3 : application de F_3 sur P_3 :

Pour chaque macro-brique, nous disposons d'une frontière dont la forme a été modifiée sur base de la règle de dimension zéro et dont la discrétisation a été adaptée lors des transformations de dimensions un et deux. La nouvelle forme de la frontière a été choisie afin de satisfaire aux équations de l'écoulement, tandis que sa discrétisation a été modifiée afin de conserver au mieux le découpage du maillage initial. L'intérieur du domaine est ensuite associé à une transformation de dimension trois qui en modifiera la discrétisation sur base de la frontière.

La question cruciale consiste à définir efficacement les partitions P_i. Nous avons ici un outil à maîtriser avec délicatesse. En effet, séparer un maillage en deux maillages distincts permet d'accroître la localité de la déformation : le déplacement d'un sommet intérieur ne dépend plus que des sommets mobiles présents sur la frontière du sous-maillage. Par contre, le découpage implique une coupure dans le transfert de l'information. Il faut donc conserver des sous-maillages avec un nombre d'éléments suffisants pour propager le déplacement de la surface libre à l'intérieur du maillage. Un découpage excessif est à proscrire. Ainsi découper un maillage en sous-maillages d'un seul élément revient à ne pas déformer l'intérieur du maillage.

La gestion du découpage résulte donc d'un compromis entre plusieurs objectifs. Dans les simulations d'extrusion que nous avons réalisées, le découpage est effectué sur base des directions privilégiées des maillages.

Considérons un maillage généré sur base d'un faisceau de droites. Un choix idéal pour la décomposition en macro-briques et en macro-faces consisterait à ne définir que des sous-maillages dans P_3 et dans P_2 dépourvus de sommets intérieurs et à identifier les éléments de P_1 aux droites du faisceau. Ceci n'est évidemment possible que pour un nombre réduit de maillages. Mais une telle décomposition permet le remaillage de

l'entièreté de la grille sur base d'une règle unidimensionnelle de déformation. C'est ce type de démarche qu'ont effectuée Karagiannis, Hrymak et Vlachopoulos. Le remaillage d'un domaine tridimensionnel est régi uniquement par des règles de proportionnalité le long de droites.

Une facon d'élargir les hypothèses sur la génération du maillage est de considérer un maillage généré sur base d'un faisceau de plans. Un tel cas se présente dans les simulations d'extrusion où une direction privilégiée apparaît en tout point du maillage. Découper le maillage en tranches correspond à une identification des plans avec les éléments de P_2. En général, la frontière d'une tranche est un polygone avec plusieurs coins : la partition de P_1 sépare chaque côté de la frontière. C'est ce type de démarche que nous utilisons principalement. Quelquefois, une tranche est découpée en plusieurs parties. Une telle manière de faire se justifie pour des problèmes de coextrusion ou pour des sections complexes

Le cas le plus général est de n'imposer aucune hypothèse géométrique sur le maillage. Dans cette optique, le maillage de dimension n est déformé par un ensemble de transformations de dimension 1 à n. L'inconvénient d'une telle démarche est évidemment le coût élevé au sein d'une méthode frontale. Cependant, l'application de transformations bidimensionnelles d'Euclide et de Thompson pour des maillages bidimensionnels s'est révélée utile dans un grand nombre d'applications où aucune direction privilégiée n'est présente. Un exemple typique de ce genre d'application est la simulation de la déformation d'une inclusion sous forme de goutte d'un fluide dans un autre liquide.

Chapitre 3.

Simulation d'écoulements à surfaces libres.

Nous présentons la méthode numérique que nous avons sélectionnée pour résoudre des écoulements tridimensionnels à surfaces libres. Nous abordons également les stratégies utilisées afin d'obtenir la convergence du schéma itératif. Nous montrons ensuite des résultats de simulation du problème direct tridimensionnel pour des fluides newtoniens.

Pour aborder la simulation des écoulements à surfaces libres, les premières méthodes élaborées se tournaient vers un problème restreint. Ce dernier s'obtenait en fixant la frontière libre et en abandonnant une des deux conditions associées. La relation rejetée était ensuite mise à profit pour calculer la forme du domaine. Ces deux étapes sont répétées alternativement pour obtenir la solution du problème complet. De telles procédures sont appelées explicites.

Une autre technique a été introduite plus récemment (Ruschak 80). De nouvelles inconnues géométriques sont introduites afin de pouvoir résoudre simultanément le problème global. Cette méthode offre un avantage majeur : la vitesse de convergence quadratique des méthodes de Newton-Raphson. Il n'est pas nécessaire de recourir à une technique découplée qui est tributaire de l'importance de la capillarité dans les interfaces. Comme un grand nombre de numériciens ont utilisé avec succès des variantes de la méthode de Ruschak (Saito 81)(Kistler 84)(Dheur 85)(Delvaux 89)(Christodoulou 92)(Berghezan 91), nous avons également adopté une adaptation des méthodes implicites pour le cas tridimensionnel.

3.1. Position du problème.

Le système d'équations régissant un écoulement isotherme à surfaces libres pour un fluide newtonien se compose d'une part des équations de Navier-Stokes associées aux vitesses et pressions :

$$\nabla.(\eta \bar{\nabla} v) - \nabla p = 0, \qquad \text{sur } \Omega,$$
$$\nabla.v = 0, \qquad \text{sur } \Omega.$$

D'autre part, l'inconnue géométrique décrivant la position de la surface libre est fixée par la conditon cinématique.

$$v.n = 0, \qquad \text{sur } \partial\Omega_{Free}.$$

Finalement, on associe aux coordonnées les équations vectorielles suivantes :

$$x = r(h), \qquad \text{sur } \Omega.$$

Ces équations correspondent à la définition d'une déformation du maillage. Nous avons vu que les possibilités de choix de déformation pour le maillage et les manières d'effectuer ce choix sont très nombreuses. En conséquence, dans un souci de généralité, nous allons présenter la méthode numérique sur base de cette équation tout à fait générique pour les coordonnées.

Le vecteur des inconnues du problème peut être écrit sous la forme :

$$z(\zeta) = (v(\zeta), p(\zeta), h(\zeta), x(\zeta))$$

où nous exprimons que les vitesses v, les pressions p, les inconnues géométriques h et les coordonnées x sont des fonctions des coordonnées matérielles ζ définies sur le domaine initial.

En reprenant un formalisme classique (Collatz 66), on distingue trois types d'approches pour l'intégration des conditions frontières d'un problème :

- les équations différentielles sont satisfaites par tout approximant et les paramètres sont déterminés pour satisfaire les conditions frontières.
Ceci est appelé méthode frontière ("boundary method").

- les conditions frontières sont satisfaites par tout approximant et les paramètres sont déterminés pour satisfaire les équations différentielles.
Ceci est connu sous le nom de méthode intérieure ("interior method").

- les approximants ne vérifient à priori ni les équations, ni les conditions frontières. Il faut déterminer les paramètres afin que l'équation et les conditions frontières soient satisfaites. C'est une méthode mixte ("mixed method").

C'est une approche mixte que l'on considère dans le cas des problèmes à surfaces libres. En effet, nous définissons un espace Z comme le produit de sous-espaces de V, P, H et X. Le respect des conditions aux limites, exception faite de la condition cinématique, définit les restrictions de nos espaces fonctionnels. Nous pouvons ainsi écrire le problème sous la forme :

- Trouver $\mathbf{z} \in Z$ tels que :

$$f(\mathbf{z}) = 0, \qquad \text{sur } \Omega,$$

où toutes les équations sont reprises en une seule expression compacte. Il faut rappeler que c'est par le biais des conditions aux limites incluses dans la définition de la restriction de X que les coordonnées sont contraintes par l'inconnue géométrique sur la surface libre.

3.1.1. Techniques des éléments finis.

Les coordonnées du domaine à priori inconnues introduisent une difficulté particulière. D'un point de vue mathématique, nous ne disposons d'aucun résultat théorique sur l'existence ou l'unicité d'une solution. D'un point de vue pratique, nous devons considérer des domaines d'intégration variables. Il devient également quasi impossible de déterminer des solutions analytiques si ce n'est dans certains cas limites à tension superficielle infinie (Richardson 70). Cela nous amène naturellement à considérer l'emploi de méthodes numériques. La grande souplesse géométrique des éléments finis

rend cette technique particulièrement attrayante pour le calcul des surfaces libres. Cependant, des transformations de coordonnées permettent de considérer ce genre de problème pour des méthodes géométriquement plus rigides, par exemple les différences finies ou les méthodes spectrales (Aubert 83)(Schneidesh 92).

La discrétisation des éléments finis consiste à diviser le domaine en un nombre fini d'éléments et de noeuds. Le vecteur inconnu **z** est interpolée par $\mathbf{z}^h$. L'interpolation est donnée par la somme de fonctions de formes <u>données</u> sur base des valeurs <u>inconnues</u> aux noeuds.

$$\mathbf{v}^h(\zeta) = \sum_{i=1,N} \Phi_i(\zeta) \cdot \mathbf{V}_i,$$
$$p^h(\zeta) = \sum_{i=1,M} \Pi_i(\zeta) \cdot P_i,$$
$$h^h(\zeta) = \sum_{i=1,M} T_i(\zeta) \cdot H_i,$$
$$\mathbf{x}^h(\zeta) = \sum_{i=1,P} \Theta_i(\zeta) \cdot \mathbf{X}_i,$$

Dans le cas de la technique des éléments finis, le support des fonctions de forme Φ_i, Π_i, T_i, et Θ_i se réduit à quelques éléments. A priori, ces interpolations ne satisfont pas les équations du problème qui donnent lieu à des résidus. Il s'agit dès lors de définir une manière pour fixer les valeurs nodales inconnues afin de minimiser les résidus. En général, on recourt au <u>principe de Galerkin</u> qui consiste à imposer l'orthogonalité des résidus aux fonctions de forme.

$$< \Psi_i \; ; \nabla.(\eta \bar{\nabla} \mathbf{v}^h) - \nabla p^h > = 0,$$
$$< \Pi_i \; ; \nabla.\mathbf{v}^h > = 0,$$
$$<< T_i \; ; \mathbf{v}^h.\mathbf{n} >> = 0,$$
$$< \Theta_i \; ; \mathbf{x}^h - \mathbf{r}(h^h) > = 0.$$

où les symboles < > et << >> sont les produits scalaires de $L^2(\Omega)$ et $L^2(\partial\Omega_{Free})$. L'application du théorème de Green aux équations du mouvement nous fournit une formulation faible qui nous autorise à réduire le degré de différentiabilité nécessaire pour les fonctions de forme de vitesses et de pressions. Par ailleurs, l'obtention de la forme faible des équations du mouvement fait apparaitre les forces généralisées $\mathbf{F}_i$ aux noeuds i. Ceci permet d'imposer naturellement les forces de contact. On obtient ainsi la forme faible discrétisée suivante :

$$< \bar{\nabla} \Psi_i \; ; \eta \bar{\nabla} \mathbf{v}^h - p^h \mathbf{I} > = \mathbf{F}_i,$$
$$< \Pi_i \; ; \nabla.\mathbf{v}^h > = 0,$$

$<< T_i ; \mathbf{v}^h.\mathbf{n} >> = 0,$

$< \Theta_i ; \mathbf{x}^h - \mathbf{r}(h^h) > = 0.$

Dans une telle démarche, deux paramètres sont cruciaux :

- le choix des diverses fonctions de formes : le problème discret ne sera bien posé que pour certaines possibilités. Nous reviendrons sur cette question au sein de la quatrième section du présent travail.

- la manière d'annuler les résidus : l'application du principe de Galerkin est motivé par le fait que ceci nous fournit une "meilleure approximation" pour une équation elliptique au sens d'une norme précise. Mais pour des équations non elliptiques, il y a lieu de prévoir des alternatives dans notre formulation. Ce sera l'objet de la cinquième partie de cette thèse.

3.1.2. Schémas itératifs.

La seconde étape de la démarche du numéricien consiste à résoudre le problème discret. Le système discret possède plusieurs non-linéarités dues aux termes d'inertie, à une viscosité non constante et à la dépendance par rapport aux coordonnées. La résolution du système discret nécessite de procéder par approximations successives.

La surface libre est positionnée afin de satisfaire simultanément la condition cinématique et la condition dynamique. Rappellons brièvement les deux principales techniques itératives qui sont évidemment concurrentes :

- les méthodes explicites où l'on recherche des approximations en relaxant alternativement l'une des deux conditions associées à la surface libre. Une telle manière de procéder consiste à découpler la recherche de la surface libre du calcul des autres variables. Plus précisément, une approximation des vitesses et pressions est calculée sur un réseau fixe en relaxant la condition cinématique, puis la surface libre est adaptée uniquement sur base de la condition cinématique. Ce n'est qu'à la convergence du processus itératif que les conditions cinématique et dynamique seront satisfaites simultanément.

- les méthodes implicites où la position de la surface libre est considérée au même titre que les autres inconnues. Aucune contrainte n'est relaxée et les approximations

successives sont calculées afin de satisfaire simultanément l'ensemble des équations et des contraintes.

L'avantage des méthodes explicites réside dans la relative simplicité de mise en oeuvre, tandis qu'elle présente le désavantage d'offrir une vitesse de convergence linéaire due à l'introduction d'un schéma alterné. Ainsi l'introduction de la surface libre par une méthode explicite accroît le coût calcul d'un facteur quatre ou cinq. L'avantage principal d'une méthode implicite est la possibilité de pouvoir construire un schéma itératif de Newton muni d'une convergence quadratique. L'augmentation du coût calcul dû à l'introduction de la surface libre est marginal. Cet avantage s'obtient au prix d'une plus grande complexité de mise en oeuvre, spécialement pour le calcul de la matrice tangente requise par la méthode de Newton. Notons toutefois que le côté fastidieux mais systématiquement et rigoureusement enchaîné de cette mise en oeuvre peut être réalisé de manière automatique.

Initialement proposée dans le cas bidimensionnel en 1980 (Ruschak 80), la méthode implicite s'est fortement développée d'abord pour les fluides newtoniens et ensuite pour les modèles viscoélastiques. En raison des nombreux avantages d'une méthode implicite et de sa plus grande généralité, nous avons choisi ce type d'algorithme.

Par ailleurs, il est essentiel que la différence entre l'estimation initiale du processus itératif ne dépasse pas le rayon de convergence où le schéma itératif est stable. Un des défauts de la méthode de Newton réside en cette limite. En perdant malheureusement la convergence quadratique, cette limite est contournée classiquement par deux moyens :

- la suppression sélective de certains termes de la matrice tangente
- les méthodes de continuation.

Ainsi négliger la dépendance de la viscosité par rapport à la vitesse pour des fluides de type "power law" dans le calcul de la matrice tangente accroît la stabilité du schéma itératif. Une telle façon d'agir connue sous le nom de méthode de Picard est l'exemple classique du premier moyen pour accroître la stabilité du schéma itératif.

Dans les problèmes à surfaces libres, cette manière de faire peut nous faire obtenir la méthode explicite à partir de la méthode implicite où l'on a supprimé dans la matrice tangente les termes qui couplent la condition cinématique aux autres équations. Dans de rares cas en l'absence de tension superficielle, la méthode explicite peut se révèler plus stable. Mais en général la stabilité de la méthode explicite est faible. En particulier en

fonction de l'importance relative des effets capillaires et visqueux, le choix de la contrainte relaxée n'est pas trivial dans la mesure où il peut entraîner une instabilité.

La technique de continuation consiste à incrémenter progressivement un des paramètres du modèle afin de rester dans le rayon de convergence de la méthode. Ainsi une manière efficace pour traiter les non-linéarités dues aux termes d'inertie consiste à augmenter la masse volumique par pas successifs. Ce qui permet d'espérer que l'on se trouvera ainsi à chaque fois dans le domaine de convergence.

Par contre pour les non-linéarités dues aux inconnues géométriques, il est nécessaire de travailler sur des réseaux initiaux relativement proches de ceux escomptés à la solution. Ceci exige une stratégie particulière, car la forme de la solution nous est tout-à-fait inconnue en particulier dans le cas tridimensionnel.

3.1.3. Techniques de continuation.

Les techniques de continuation sont le pendant classique de la mise en oeuvre d'une méthode de Newton-Raphson. La technique de continuation admet une interprétation physique simple : la non-linéarité est appliquée par petits incréments pour lesquels la réponse se rapproche d'un comportement linéaire. A chaque incrément, on peut dès lors prédire une réponse linéaire qui nous fournit une bonne approximation à partir de laquelle la méthode de Newton est susceptible de converger. En général, le point de départ de la procédure est connu : corps élastique a
u repos ou écoulement sans inertie.

Afin de décrire plus précisément la méthode, nous reprenons le formalisme d'Oden (Oden 72) et nous supposons que nous avons un vecteur **f** de plusieurs équations non-linéaires :

- Trouver $\mathbf{z} \in Z$ tels que :

$$\mathbf{f}(\mathbf{z}) = 0, \qquad \text{sur } \Omega.$$

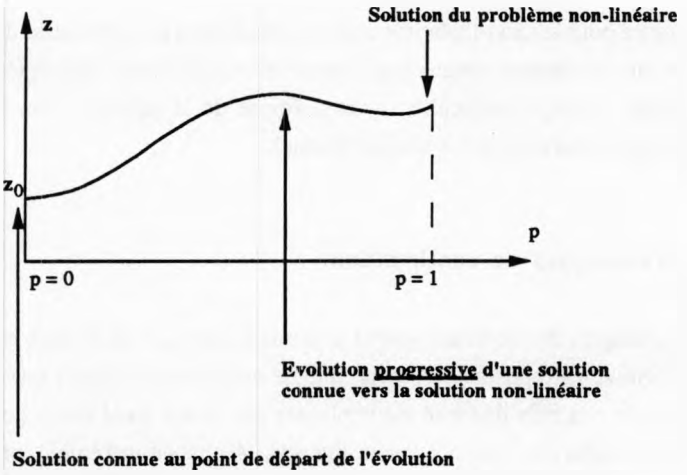


Fig. 3.1 Illustration schématique des techniques de continuation.

Nous modifions ce système en supposant que les équations dépendent non seulement du vecteur inconnu z mais également d'un paramètre réel p :

$$g(z,p) = 0,$$

Le paramètre p correspond à la non-linéarité que l'on désire incrémenter. Typiquement, si nous pensons à la masse volumique ρ, une manière d'écrire le système d'équations est :

$$g(z,p) = (1 - p) (z - z_0) + p\, f(z),$$

où z_0 est la solution connue au point de départ de l'évolution.

Pour chaque valeur de p, nous obtenons une solution z qui correspond à une masse volumique pρ. En particulier, nous obtenons la solution connue d'écoulement de Stokes pour p=0 et la solution de notre problème initial avec une masse volumique de ρ pour p=1 :

$$g(z,0) = (z - z_0),$$
$$g(z,1) = f(z).$$

Supposons que pour chaque valeur de p, nous résolvons le sytème d'équations, nous obtenons les solutions :

$$z = z(p), \qquad p \in [0,1].$$

Ces solutions sont les équations paramétriques d'une courbe dans l'espace Z reliant un point initial connu $z = z_0$ à la solution du système $f(z) = 0$. La technique de continuation est basée sur l'idée de suivre cette courbe pour obtenir la solution du système. Si le système modifié est bien choisi, cette technique nous permet de passer progressivement et de manière continue d'un point de départ connu à une solution très éloignée (Fig. 3.1).

La technique de continuation consiste donc à incrémenter progressivement p et à résoudre le système d'équations modifiées. Notre stratégie finale consiste en la combinaison de deux méthodes :

BIBLIOTHEQUE DES SCIENCES EXACTES
3, Place des Sciences
1348 LOUVAIN-LA-NEUVE - Belgium

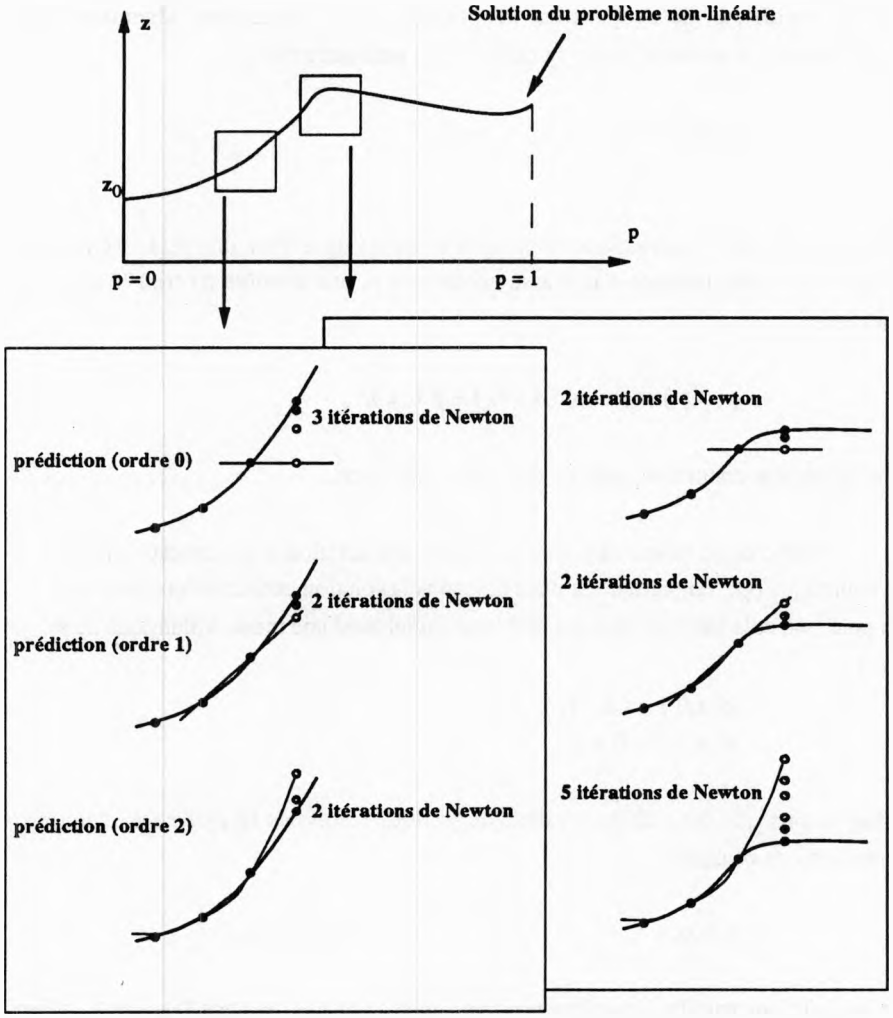


Fig. 3.2 Interpolation au sein d'une technique de continuation.

- une prédiction par une interpolation obtenue à partir des solutions obtenues pour des valeurs antérieures du paramètre p,

- une correction par l'application de la méthode de Newton-Raphson à partir de la prédiction.

La technique de continuation se compose d'une double boucle imbriquée. L'incrémentation en p compose le premier niveau, tandis que les itérations de Newton-Raphson forment la boucle intérieure.

L'usage d'extrapolations d'ordre élevé peut réduire de manière considérable le coût total de la simulation. En effet, une prédiction plus fine permet d'incrémenter plus rapidement le paramètre d'évolution ou de diminuer le nombre d'itérations de la méthode de Newton. Mais une prédiction d'ordre élevé peut également se révéler être néfaste en particulier lors d'un changement brusque de comportement de la solution (Fig. 3.2).

L'incrémentation progressive de l'inertie réalisée de cette manière se révèle particulièrement efficace. D'une manière plus générale, la difficulté principale de cette démarche consiste à proposer un système modifié qui assure une évolution progressive et continue de la solution en fonction du paramètre p.

En particulier, revenons au point central de nos investigations : les problèmes à surfaces libres. Dans ce cas nous désirons créer un cheminement progressif à partir d'une configuration initiale de la surface libre vers la solution finale. A priori, le choix de la configuration initiale est totalement libre, mais la construction d'une progression régulière vers la solution finale nécessite de nous limiter à certain nombre de cas de figures. C'est pourquoi nous nous sommes orientés successivement vers plusieurs stratégies :

- supprimer progressivement le glissement sur la paroi en amont point de détachement de la surface libre. A glissement nul, nous avons la solution finale, et la solution à glissement pur ne provoque aucun gonflement après le point de détachement. Dans les simulations de jets, une telle procédure permet d'obtenir un cheminement progressif vers la solution. Mais ce type de démarche ne peut être appliqué pour tous les problèmes.

- supprimer progressivement la tension superficielle sur la surface libre. Ceci nécessite la connaissance de la solution à tension superficielle élevée, ce qui n'est le cas que pour un nombre limité de cas.

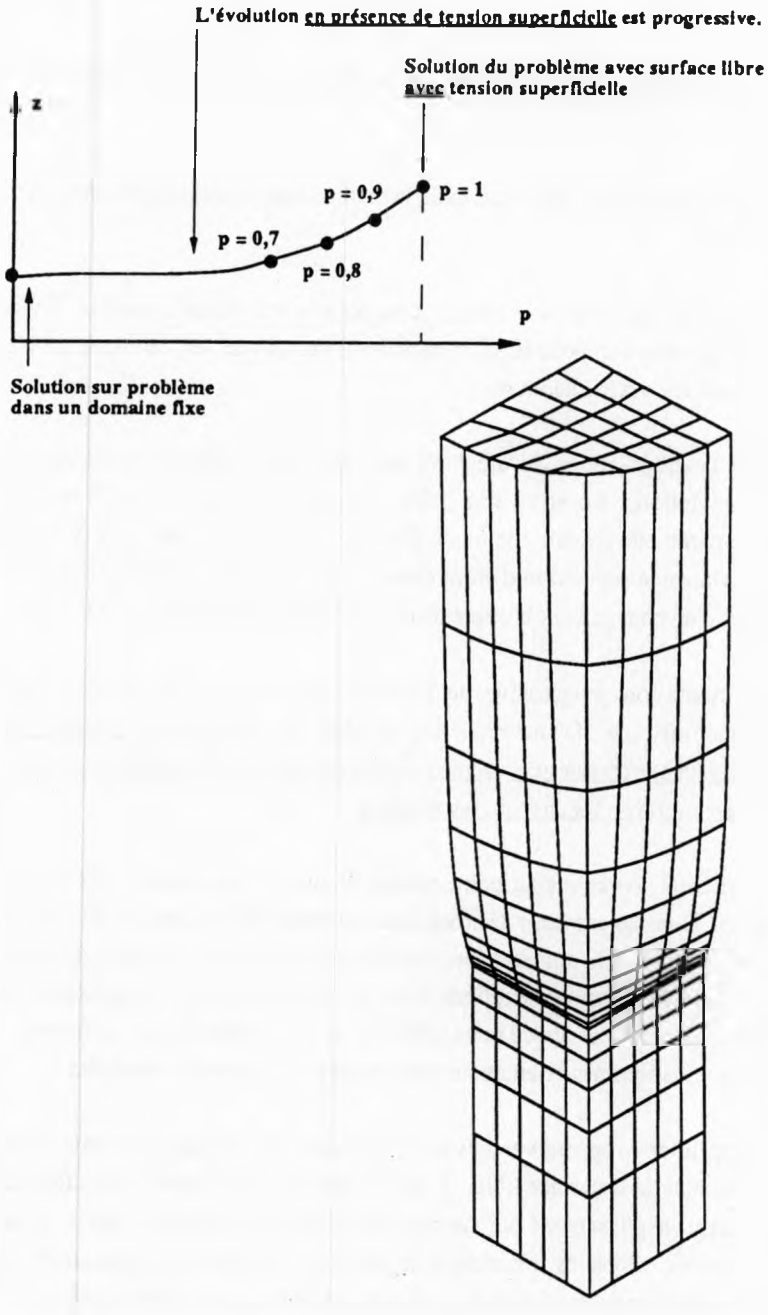


Fig. 3.3 Extrusion d'une filière carrée en présence de tension superficielle
Solution obtenue par une évolution progressive de la condition cinématique.

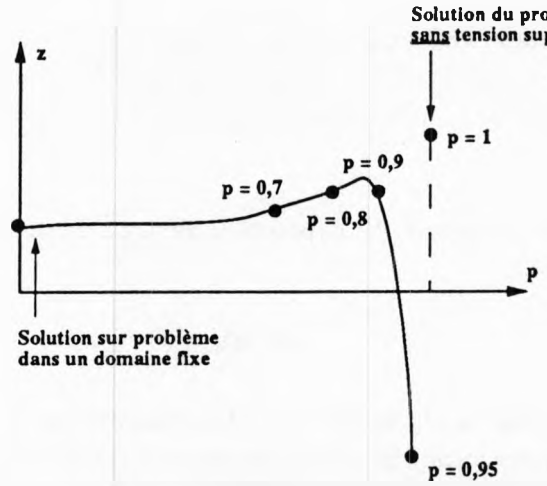
- supprimer progressivement un terme supplémentaire qui réduit le déplacement de la surface libre. L'avantage de cette dernière procédure est sa généralité : il n'est pas nécessaire de connaître une solution initiale précise, n'importe quelle configuration initiale peut convenir.

Comment générer ce terme supplémentaire ? Une possibilité consiste à remplacer la condition cinématique par l'équation :

$$(1 - p)\, h + p\, \mathbf{v}.\mathbf{n} = 0, \qquad \text{sur } \partial\Omega_{Free}.$$

Cette équation se réduit à l'exigence déplacement nul de la surface libre lorsque le paramètre p vaut zéro. Par contre, une valeur unitaire du paramètre nous fait retrouver la condition cinématique. Ainsi une évolution progressive de p devrait permettre de déformer progressivement le réseau initial jusqu'à la solution finale tout en restant dans le rayon de convergence de la méthode de Newton-Raphson.

Afin d'illustrer les performances de cette technique, considérons la prédiction de la forme de l'extrudat sortant d'une filière en présence d'une importante tension superficielle (Fig. 3.3). Sous l'effet de cette dernière, la forme de la section de l'extrudat tend vers une forme circulaire et la difficulté du problème réside en cette transition d'une section carrée à une section circulaire. Un raffinement de la discrétisation accroît la difficulté pour faire converger un schéma itératif au départ d'un maillage parallélipédique. C'est pourquoi nous observons la divergence d'une résolution directe en particulier sur des maillages fins. L'utilisation de la technique de continuation proposée a cependant permis d'obtenir une solution convergée après une dizaine de macro-itérations reprenant chacune quatre ou cinq sous-itérations frontales. Il faut toutefois préciser qu'il est possible de relacher partiellement le critère de convergence pour les résolutions aux valeurs intermédiaires de p (typiquement 10^{-2}). Une valeur plus sévère (typiquement 10^{-12}) n'est prise en considération que pour la résolution finale à la valeur $p = 1$. Par ailleurs, il est possible de faire évoluer en parallèle plusieurs non-linéarités : inertie et surface libre par exemple.



L'evolution en absence de tension superficielle ne se réalise pas de manière progressive.

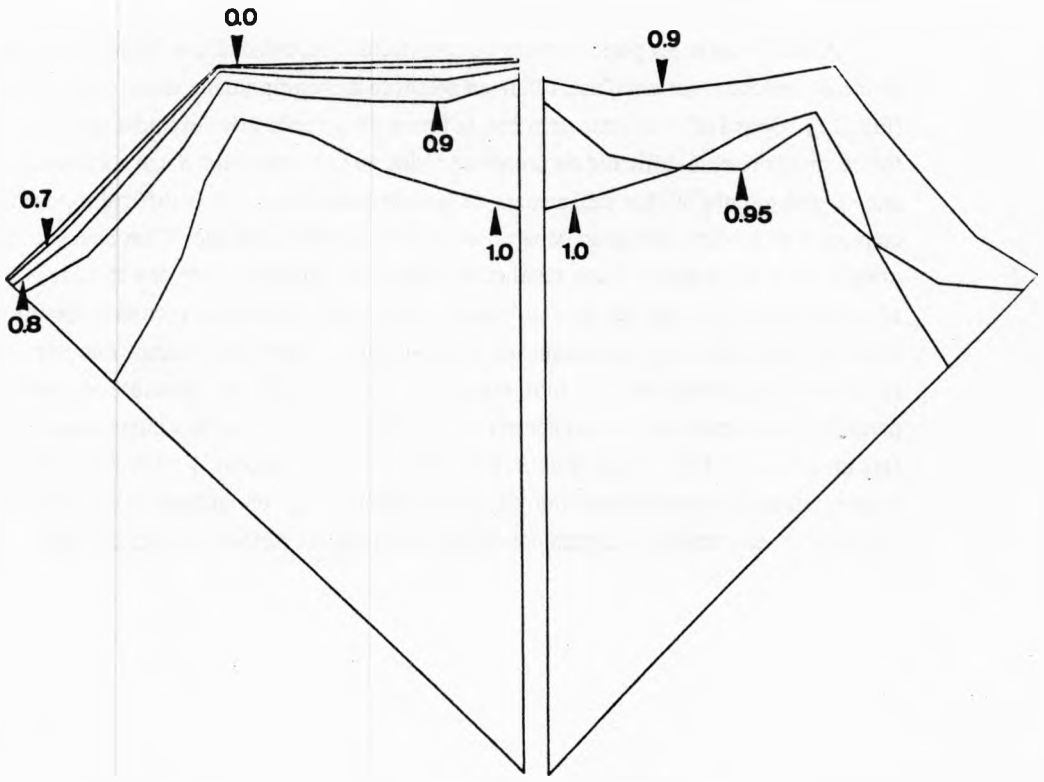


Fig. 3.4 Prédiction inverse d'une filière pour obtenir un extrudat octogonal
Evolution de la section inconnue sans tension superficielle en fonction de p.

Afin de vérifier la robustesse de la procédure, nous avons également tenté de résoudre par son biais un problème où il est possible de trouver une solution sans technique de continuation. Il s'agit de la prédiction inverse de la filière en vue de l'obtention d'un extrudat octogonal (Fig. 3.4). Tout d'abord, nous avons incrémenté de manière progressive p par pas successif de 0,1. Ce premier test semble accréditer l'hypothèse d'une variation continue des solutions, mais l'écart important entre les formes obtenues pour p = 0,9 et p =1 nous a poussé à affiner nos investigations. Par ailleurs, alors que résoudre le problème sans technique de continuation se fait en cinq itérations frontales, le calcul de la solution intermédaire à p = 0,9 nécessite une dizaine d'itérations frontales. C'est pourquoi nous avons calculé la solution pour p = 0,95. Le résultat nous a fortement surpris : la forme obtenue est ausssi éloignée du maillage convergée à p = 1 que du maillage initial. Ensuite, nous n'avons pas réussi à faire obtenir une solution à la valeur intermédiaire de p = 0,99. Il apparaît donc que la technique de continuation engendre ici des difficultés nouvelles dans un problème relativement aisé.

En conclusion, il nous est apparu que la technique de continuation proposée est un outil fiable pour des simulations en présence de tension superficielle. Par contre en l'absence de tension superficielle, la méthode n'est pas efficace. Un changement brutal de la solution est observé et peut être expliqué par un changement de type de l'équation modifiée. Le terme ajouté correspond de manière discrète à un terme de nature elliptique et la condition cinématique en l'absence de capillarité est une équation hyperbolique.

3.2. Simulation d'écoulements tridimensionnels à surfaces libres.

Nous présentons la méthode implicite que nous avons élaborée pour la prédiction numérique du gonflement de jet à la sortie de filière. Nos objectifs ont été clairement atteints. La généralité de la méthode permet de considérer des géométries complexes tandis que la convergence quadratique de la méthode de Newton nous permet d'obtenir les simulations présentées sur une station de travail puissante en quelques minutes.

Une vue synthétique des résultats est reprise dans la publication suivante tirée du *International Journal of Numerical Methods in Fluids*

INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, VOL 14, 609-625 (1992)

PREDICTION OF THREE-DIMENSIONAL GENERAL SHAPE EXTRUDATES BY AN IMPLICIT ITERATIVE SCHEME

Vincent LEGAT

APPLIED MECHANICS
UNIVERSITE CATHOLIQUE DE LOUVAIN
Place du Levant, 2
B-1348 LOUVAIN-LA-NEUVE, BELGIUM.

and

Jean-Marie MARCHAL

POLYFLOW S.A.
Place de l'Université, 16
B-1348 LOUVAIN-LA-NEUVE, BELGIUM.

Key words

3-D extrusion, moving boundaries, kinematic condition, remeshing, finite elements, free surfaces.

Summary

This paper presents a numerical technique for solving three-dimensional free surface problems in extrusion applications. The method is fully implicit in the sense that a Newton-Raphson scheme is applied on all variables, and geometrically general. In particular, the die section shape may be complex and contains multiple corners; very few restrictions apply on the mesh generation because the method does not require the nodes to be located on straight lines (spines). A clear distinction is introduced between the directions associated with the kinematic condition and the remeshing rules. As a difference with respect to earlier publications, these concepts are handled as separate. Only Stokes problem are solved in this paper and we have not introduced surface tension. Therefore corners in the die section propagate discontinuities in the extrudate shape, and a method for relocating corners without losing the quadratic convergence of the scheme is presented. Data structures used for the implementation are briefly discussed.

We present results on the extrusion of various profiles, including a rectangular die (a benchmark problem), and various complex sections containing multiple corners.

INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, VOL 14, 609-625 (1992)

1 Introduction

Several numerical techniques have been proposed over the last few years to solve three-dimensional free surface problems. These methods are based either on boundary elements methods [1] [2] or on finite element formulations. [3] [4] The goal of the present paper is to present a numerical technique based on finite elements which extends to complex three-dimensional geometries implicit techniques used to calculate two-dimensional free surfaces.[5] The iterative technique is called implicit when it couples the velocity-pressure unknowns to the position variables. In implicit techniques a Newton-Raphson scheme can be used to solve the system in order to avoid an outer iteration on the free surface position above the flow solver itself.

However most two-dimensional techniques used for simulating free surface flows cannot be extended as such to three dimensions. In particular, the presence of corners in the die section will introduce a new difficulty linked to the presence of discontinuities in the extrudate. This difficulty has been recognized by Karagiannis et al. [3] [4] In Reference [4], a technique based on pathlines has been introduced to relocate corners. This method has been successfully used to solve non-isothermal free surface problems where large deformations are introduced by the temperature effects. However, the pathline method as described in Reference [4] requires explicit relocalizations of the free surface before Newton-Raphson iterations. Our technique avoids those explicit iterations.

We introduce discontinuities of the normal direction in the formulation of the free surface problem itself. A finite element formulation is then consistently derived in section 3. A model with multiple normals and multiple kinematic conditions is introduced. The technique is validated on the examples of section 5.

In order to preserve the geometrical generality of our method (we want to calculate complex dies), we introduce in section 4 a remeshing technique based on the distance between interior and boundary nodes. Its major advantage over "spines" techniques is that the constraint of locating nodes on straight lines is dropped.

A full Newton-Raphson scheme is used to solve the system, in order to avoid an outer iteration on the free surface position above the flow solver itself. The number of additional variables and the increase in frontal width of the method with respect to a fixed geometry calculation is only marginal. Therefore, solving a moving boundary problem, does not require much more CPU time that the fixed boundary problem provided the flow non-linearities are solved by means of a Newton-Raphson scheme. The method is advantageous in terms of CPU time (not in memory) with respect to most decoupled techniques. For example, the CPU time of a single iteration with the current method is

5%-10% higher than the CPU time for a fixed domain iteration. Our scheme converges in four or five iterations (10^{-5}), whereas a explicit technique typically requires 10-20 fixed domain iterations to converge.

The last section presents three examples, each involving one or several corners. Selection of position interpolation versus velocity / pressure interpolation is briefly discussed. In all cases, convergence of the results with mesh refinement has been checked.

2. Basic Equations

Let us consider the isothermal flow a Newtonian fluid in a three-dimensional geometry. All results presented in this paper have been obtained with a Newtonian fluid, although extending the method to Generalized Newtonian fluids or non-isothermal flows is straightforward.

Let Ω be the flow domain, of boundary $\partial\Omega$. $\partial\Omega$ is partitioned into :

i. $\partial\Omega_D$: the boundary part on which Dirichlet boundary conditions apply;
ii. $\partial\Omega_N$: the boundary part on which Neumann boundary conditions apply; for the sake of simplicity all Neumann boundary conditions will be supposed homogeneous;
iii. $\partial\Omega_F$: the free surface itself.

Let $\mathbf{v}$ and p respectively denote the velocity and pressure fields defined on Ω, and let h denote a scalar kinematic degree of freedom defined on $\partial\Omega_F$, which describes the motion of the free surface. In the absence of inertia and body forces, the free surface problem is formulated as :

- Find $(\mathbf{v}, p, h) \in V \times P \times H$ such that :

$$\nabla.(\eta\bar{\nabla}\mathbf{v}) - \nabla p = 0, \quad \text{on } \Omega, \tag{1}$$

$$\nabla.\mathbf{v} = 0, \quad \text{on } \Omega, \tag{2}$$

$$\mathbf{v}.\mathbf{n} = 0, \quad \text{on } \partial\Omega_F, \tag{3}$$

together with :

$$\mathbf{v} = \hat{\mathbf{v}}, \quad \text{on } \partial\Omega_D, \tag{4}$$

$$(\eta\bar{\nabla}\mathbf{v} - p\mathbf{I}).\mathbf{n} = 0, \quad \text{on } \partial\Omega_N \cup \partial\Omega_F, \tag{5}$$

where $\bar{\nabla}\mathbf{v}$ denotes the symetric part of the gradient of $\mathbf{v}$, η is the fluid viscosity, and $\mathbf{n}$ is the unit normal vector pointing out of the domain Ω. The symbols V and P denote

appropriate velocity and pressure function spaces defined on Ω; H is a function space for the displacement of the free surface defined on $\partial\Omega_F$.

Let us consider the boundary condition on $\partial\Omega_F$ in more details. Assigning the force on a part of the boundary is a valid boundary condition for a Stokes problem in a fixed geometry [6]; equation (3) can also regarded as a Dirichlet datum in the normal direction. For a Stokes problem on a *fixed* domain, imposing (3) *together* with (5) on $\partial\Omega_F$ would define an ill-posed problem. Defining the flow boundary conditions in terms of (3) and (5) simultaneously on $\partial\Omega_F$ requires the introduction of a kinematic degree of freedom h, which describes the motion of the free surface in a given direction. However, the direction of motion of free surface can be selected *a priori* (it does not change during the iteration process) as long as the free surface does not become tangent to this direction of displacement. If this happens, all data in the normal direction (force *and* velocity) can no longer be satisfied. Therefore the direction of the geometrical degree of freedom h is a *non-tangent* direction. It must be noted that the non-linearity introduced by the dependence of Ω upon h, is a serious difficulty for proving existence and uniqueness theorems for problem (1 to 5).

As stated before, the direction **d** for the displacement of the free surface is defined *a priori* and is *fixed* during the iterative process, h being the amplitude of the displacement in this direction (see Fig. 1). However, the direction **d** is allowed to vary from node to node. *Physical* considerations allow us to select directions **d** in such a way that there is no possibility for the free surface to become tangent to **d** during the iterative process.

As in earlier publications on 2D or 3D free surface problems [3] [4] [5], the selection of *directions* **d** for each point of the free surface is the first step in our solution technique; here **d** will be selected as the normal direction at a node in the initial (first-iteration) mesh (in a discrete sense). However, the **d**-direction does not influence the remeshing of the interior nodes, unlike the case of the spine techniques where projections on the line of direction **d** are used to evaluate weights.

Most extrusion dies sections contain sharp corners, as in Fig. 1, and in the absence of surface tension the ability of properly handling corners is an essential ingredient of the simulation. The discontinuity of the slope in the cross section propagates along the free surface itself, and creates additional difficulties related to the definition of the normal, which have been recently recognized by Karagiannis et al. [4].

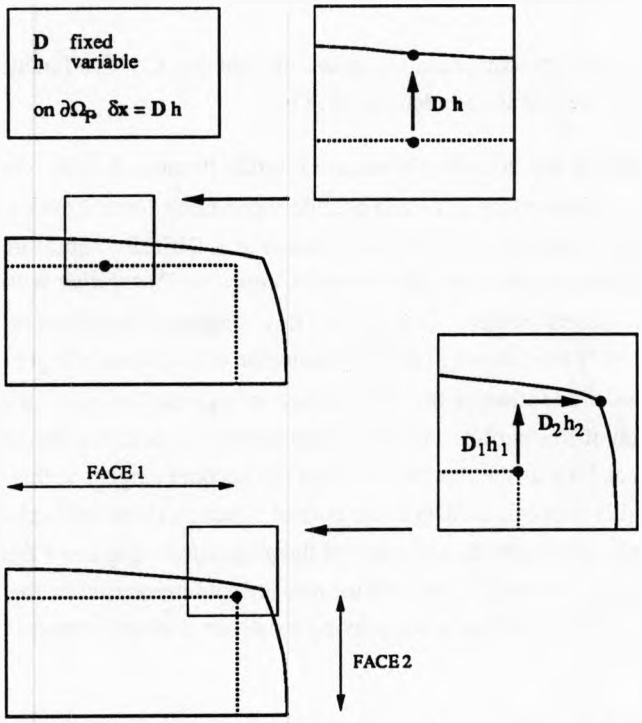


Fig. 1 The geometrical degree of freedom h, the direction of displacement d and the corner strategy.

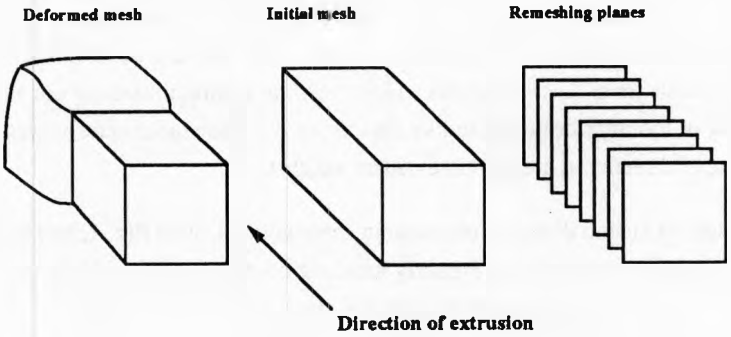


Fig. 2 "Slicing" of the computational domain in the direction of extrusion.

Our method relies on multiple normal definitions at singular points. Let us consider corner A in the die cross-section of Fig. 1. Two normals are defined along the particle trajectory starting at point A in the lip section; one corresponds to face F_1, and the other to face F_2. If we consider a free surface $\partial\Omega_F$ consisting of N_F "faces" on which the normal is continuous, equation (3) will be written as :

$$\mathbf{v}.\mathbf{n}_i = 0, \qquad \text{on } \partial\Omega_{Fi}, \qquad 1 \le i \le N_F. \tag{6}$$

Along lines of discontinuity of the normal, Eq.(6) implies that $\mathbf{v}.\mathbf{n}$ vanishes on both faces. It must be pointed out that the presence of two kinematic conditions along some lines of the free surface is not generic to problem (1 to 5), in the sense that a single kinematic condition is the rule for all points on the free surface, *except* for those points located along lines of discontinuity of the normal direction. The kinematic condition is a first order transport equation for the free surface location, (the position of the die lip being the initial condition), and discontinuities *can be transported* along characteristics. A problem in the formulation is expected only when the normal direction is discontinuous at *all points* on the free surface; this is obviously not the case in extrusion applications. Introducing discontinuities of the normal direction before finite element discretization showns that a discontinuity of $\mathbf{n}$ is compatible with the analytical formulation of the problem (no surface tension is included) and it will naturally come into the finite element formulation. The double definition of normals along lines of discontinuity obviously has an influence on the selection of the geometrical degrees of freedom h and the directions $\mathbf{d}$. If one requires uniqueness of the normal direction on free surfaces, h and $\mathbf{d}$ will now be partitioned as :

$$\begin{aligned} &h_i \in H_i, && i \le 1 \le N_F, \\ &\mathbf{d}_i \in D_i, && i \le 1 \le N_F, \end{aligned}$$

where H_i and D_i are spaces of continuous functions defined on $\partial\Omega_{Fi}$.

The problem (1 to 5) will be reformulated as

- Find $(\mathbf{v},p,h_i) \in V \times P \times \{H_i \ , \ 1 \le i \le N_F\}$ such that :

$$\nabla.(\eta\bar{\nabla}\mathbf{v}) - \nabla p = 0, \quad \text{on } \Omega, \tag{7}$$

$$\nabla.\mathbf{v} = 0, \quad \text{on } \Omega, \tag{8}$$

$$\mathbf{v}.\mathbf{n}_i = 0, \quad \text{on } \partial\Omega_{Fi}, \quad 1 \le i \le N_F, \tag{9}$$

together with :

$$\mathbf{v} = \hat{\mathbf{v}}, \quad \text{on } \partial\Omega_D, \tag{10}$$

$$(\eta\bar{\nabla}\mathbf{v} - pI).\mathbf{n} = 0, \quad \text{on } \partial\Omega_N \cup \partial\Omega_F. \tag{11}$$

3. Finite element discretization

The system (2.7 to 11) has been discretized by means of a standard finite element technique. Approximation spaces V^h, P^h, and H_i^h, ($1 \le i \le N_F$) have been selected for the velocity, the pressure and the kinematic degree of freedom on each face.

On the basis of the Galerkin procedure, the system (7 to 11) leads to the following discrete problem :

$$\begin{aligned}
&\text{-Find } (v^h, p^h, h_i^h) \in V^h \times P^h \times \{H_i^h,\ 1 \le i \le N_F\} \text{ such that :} \\
&\quad < \eta \bar{\nabla} v - pI ; \bar{\nabla} w > = 0, \qquad \forall\, w \in V^h, \\
&\quad < \nabla v ; q > = 0, \qquad \forall\, q \in P^h, \\
&\quad < v.n_i ; k_i > = 0, \qquad \forall\, k_i \in H_i^h, \quad 1 \le i \le N_F. \qquad (12)
\end{aligned}$$

The symbol $< >$ represents the L_2 scalar product on Ω or $\partial\Omega_F$; the space V^h takes the Dirichlet boundary conditions (2.4) into account and a zero displacement h_i is prescribed at the lip of the extrusion die.

Triquadratic and trilinear functions on "brick" elements have respectively been used for the velocity and pressure fields. For the geometrical degree of freedom h_i, we have used both biquadratic and bilinear shape functions. We have observed occasional divergences of the iterative scheme when a bi-quadratic representation is used for problems with sharp corners. However, for relatively simple geometries (the rectangular section, for example) both quadratic and linear interpolation work. A comparison between bilinear and biquadratic free surface descriptions will be discussed in section 5.

System (12) is a non-linear system of equations in (v^h, p^h, h_i^h). All derivatives with respect to the velocity, pressure and position variables are calculated within a Newton-Raphson scheme. Since the system degenerates at the first iteration when the initial velocity field vanishes, the iterative scheme starts with a solution of the Stokes problem in a fixed geometry (generally a "stick-slip" problem).

At this stage, we have described a scheme for updating the boundary nodes; however, limiting the motion of the nodes to the sole free surface without updating the interior of the domain would lead to large element deformations in the vicinity of the free surface, which cannot be accepted in most simulations. There is a need for a *remeshing rule* which propagates the motion of the free surface in the domain interior. A major difference with respect to previous publications on free surface calculations [5] for 2D problems [5] or 3D problems [3] [4] is that *the remeshing rule has been kept totally*

independent from the motion of the nodes on the free surface. In particular, we have not used a system of spines for relocating the interior nodes as in Reference [3] .

It must be noted that serious difficulties have been encountered in Reference [4] in a geometry involving sharp corners and that an outer iteration (above the Newton Raphson iteration itself) was introduced for handling the remeshing problem at the corner; this leads to a loss of quadratic convergence of the iterative scheme.

4. Remeshing

In problems where the boundary nodes are relocated a rule must be selected for moving the interior nodes as a function of the boundary node positions with a view to an acceptable mesh deformation. Remeshing is naturally formulated as a boundary value problem, and it is not surprising that most efficient techniques which map a parent geometry to a deformed one are based on PDEs of the elliptic type [7]. However, the problem has usually not be formulated as such in publications on three-dimensional free surfaces.

Saito and Scriven [5] presented an implicit technique for computing two-dimensional free surfaces.The direction of extrusion is priviledged; the domain is sliced in one-dimensional meshes on which a linear remeshing proportionality rule is applied. In a recent publication [3] a similar one-dimensional spine technique is used for calculating *three-dimensional* free surfaces; in three dimensions such a method requires *to privilege two directions* for relocating the nodes on straight lines in place of one. This puts a severe constraint on the mesh generation, with additional difficulties at corners where the direction of displacement cannot be *a priori* imposed [3], [4].

Using PDE's as a remeshing rule is attractive; it would, however, considerably increase the cost of the calculation (and 3D Navier-Stokes simulations are CPU-intensive), because all nodal positions in the domain would be treated as independent variables. If we want to limit the number of geometrical variables to the elements of H_i^h, and still be able to derive a full Newton-Raphson scheme, we must select a rule where interior positions can be *a priori* computed as a *linear* function of the displacement on the boundary. All branching conditions must be excluded and corners strategies can generally not be used.

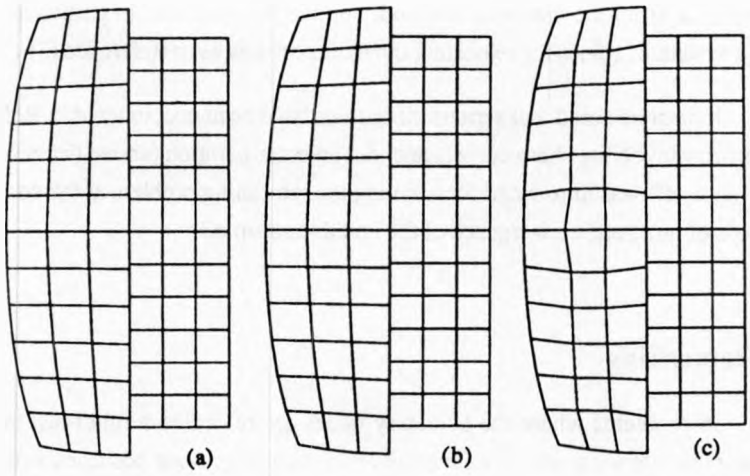


Fig. 3 Remeshing of a rectangular die by :
(a) a Thompson transformation,
(a) a Laplace transformation,
(a) an Euclidian distance rule.

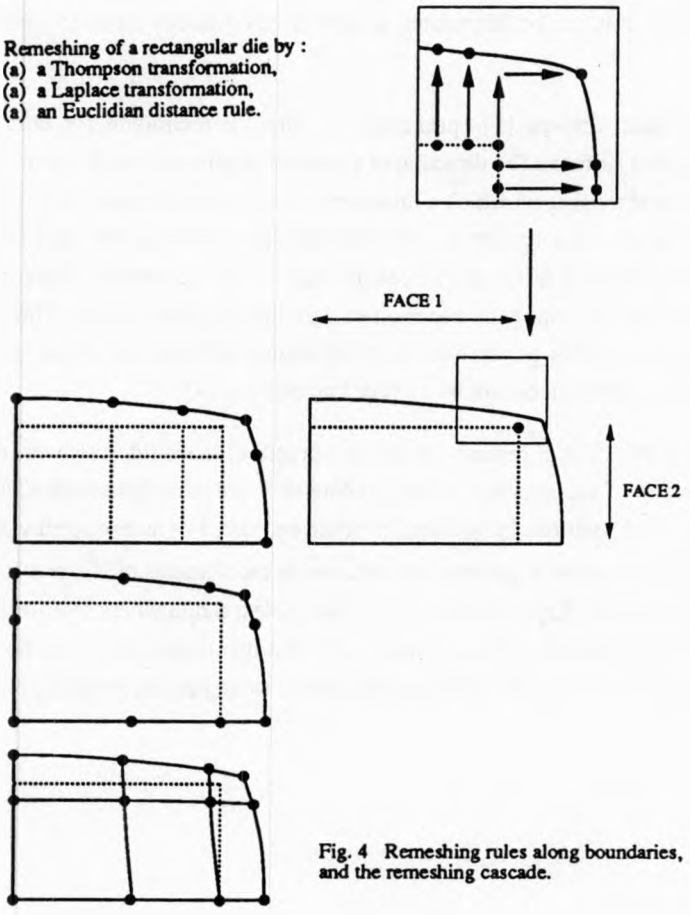


Fig. 4 Remeshing rules along boundaries, and the remeshing cascade.

For extrusions problems, we can privilege the direction of extrusion without loss of generality. Therefore, we have introduced a "slicing" of the domain after the exit of the die. "Slicing" means that we introduce a system of planes normal to the direction of extrusion, every node belonging to one and only one plane (see Fig. 2). The remeshing rule operates in these planes, and is *two-dimensional*. Slicing the domain lowers the geometrical dimension of the remeshing rule and reduces the dependence of the Newton-Raphson matrices at a given node to the h_i's belonging to the section of this node only. A truly three-dimensional remeshing rule taking the whole boundary of the three-dimensional domain into account would increase the cost of the computation significantly because all geometrical variables would remain active throughout assembly of the system in a frontal solver.

For selecting a two-dimensional remeshing rule, three methods have been examined : a Thompson transformation [7], an elliptic transformation based on a Laplace equation for which an elementary solution can be obtained (in two dimensions) by means of Green's functions, and an algebraic rule based on the Euclidian distance between the interior nodes and the boundary nodes.

4.1. Thompson transformation

The Thompson transformation maps a "parent" geometry described by co-ordinates $\mathbf{X}$, in a "deformed" geometry described by co-ordinates $\mathbf{x}$ through the solution of the following problem :

$$\begin{aligned} &\Delta_{\mathbf{x}}\, \mathbf{X} = 0, && \text{on } \Omega_R, \\ &\mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}}, && \text{on } \partial\Omega_R. \end{aligned} \qquad (13)$$

Ω_R stands for the domain of each cross section. $\Delta_{\mathbf{x}}$ stands for the Laplace operator with respect to the co-ordinates $\mathbf{x}$; the position $\hat{\mathbf{x}}$ is prescribed on the domain boundary $\partial\Omega_R$. The fact that $\Delta_{\mathbf{x}}$ operates on the deformed geometry makes the problem non-linear. The system (13) can be transformed into a set of non linear PDEs in the co-ordinate system of the parent $\mathbf{X}$-geometry [7].

The Thompson transformation has been tested on several two-dimensional sections and usually produces smooth grids (see Fig 3(a)). A major disadvantage is the non linearity of system (13) written in the parent domain, for which an elementary solution cannot be found. All nodal positions must be treated as independent variables, while the number of variables is significantly increased with respect to a method involving (v^h, p^h

and h^h) only. The method has been successfully tested in complex geometries; but we present only the results for the example described in the section 5.1.

4.2. Laplacian transformation

In regular domains and for small mesh deformations, the operator Δ_x can be replaced by Δ_X, i.e. the Laplacian with respect to the co-ordinates in the *parent* domain. The system (13) then becomes :

$$\begin{aligned} &\Delta_X\, x = 0, && \text{on } \Omega_R, \\ &x = \hat{x}, && \text{on } \partial\Omega_R. \end{aligned} \qquad (14)$$

The elementary solution of (14) is a set functions w defined on $\Omega_R \times \partial\Omega_R$, such that :

$$x = \int_{\partial\Omega_R} w_{,n}(x,\hat{x})\, d\hat{x} \qquad \forall\, x \in \Omega_R.$$

The Green functions w evaluate the influence in the domain Ω_R of a Dirichlet data on the domain boundary $\partial\Omega_R$.

Evaluating Green functions a priori requires a large amount of computations; for two-dimensional domains Ω_R, (cross sections) of sufficient regularity the Green functions can easily be evaluated by means of a conformal transformation [8]. It is not the objective of this paper to describe such a method in detail; let us say, however, that in its finite element discretization only two numerical solutions of a scalar Laplace problem on Ω_R are required to calculate the influence of every boundary node on any interior node. These computations are typically performed before starting the iterative process.

Once the Green functions have been evaluated, all interior positions in a section can be eliminated as a function of the geometrical degrees of freedom h_i^h of the section (see Fig. 3(b) as an exemple of a deformed mesh based on a Laplace transformation). An important restriction is that the orginal mesh boundary must be C^1 continuous for evaluating correctly the Green function by the means of a conformal transformation. With grids containing sharp corners, this usually leads to numerical error and to artificially distorded meshes. The requirement on the continuity of the boundary is a major drawback of this remeshing technique, although this technique can successfully used in domains with a smooth boundary.

4.3 Euclidian distance remeshing

The concept at the origin at the method is that the closer an interior node becomes to a boundary node, the closer its displacement is related to the displacement of this boundary node. More precisely, the position of an interior node x_i is written as:

$$x_i^{new} = x_i^0 + \Sigma_{j=1,N} w_{ij} (x_j^{new} - x_j^0) \quad , \tag{15}$$

where j is an index describing the N nodes of $\partial\Omega_R$, and w_{ij} is a function of the euclidian distance between node i and node j:

$$w_{ij} = \frac{\Sigma_{k=1,N} \| x_i^0 - x_k^0 \|_2}{N \cdot \| x_i^0 - x_j^0 \|_2} \quad .$$

An example of sections remeshed by the Euclidian distance rule is given in Fig 3(c). It has been observed that the Euclidian distance rule generally produces very good results in extrusion problems; the method has been selected for all applications described in Section 5. It must be pointed out that w_{ij} could have been evaluated differently. For example, using Green functions (elementary solutions of a Laplace equation) for evaluating w_{ij} also produces very good results. In this case, the Laplace equation is used to evaluate variations of position, while rule 4.2 prescribes the position itself.

In order to smoothly deform sections, without relocating nodes out of the planes of symmetry of the section, we have introduced a hierarchy in the geometrical dimension of the rules that we are using. This is the object of Section 4.4.

4.4. The remeshing cascade

Using (15) requires the knowledge of the motions of all nodes on $\partial\Omega_R$. This is usually not the case when some parts of the extrudate section boundary lie on planes of symmetry. In addition, there is also a need for a remeshing rule on the boundary $\partial\Omega_R$ itself, because the motion of the free surface $\partial\Omega_{R\,(\text{Face 1})}$ introduces deformations in the tangential direction on $\partial\Omega_{R\,(\text{Face 2})}$ (see Fig. 4). Therefore, one-dimensional remeshing rules have been introduced on boundary segments of $\partial\Omega_R$: such that points are relocated tangentially as a linear function of the motion of the extremities of the segment. This naturally introduces a hierachy between 1D, 2D and 3D remeshing rules, where 1D positions on the boundary segments dictated by displacements of segments extremities act as boundary conditions for the 2D Euclidian distance rule, which are in turn data for relocating mid-side nodes located *between* the sections for tri-linear coordinate fields.

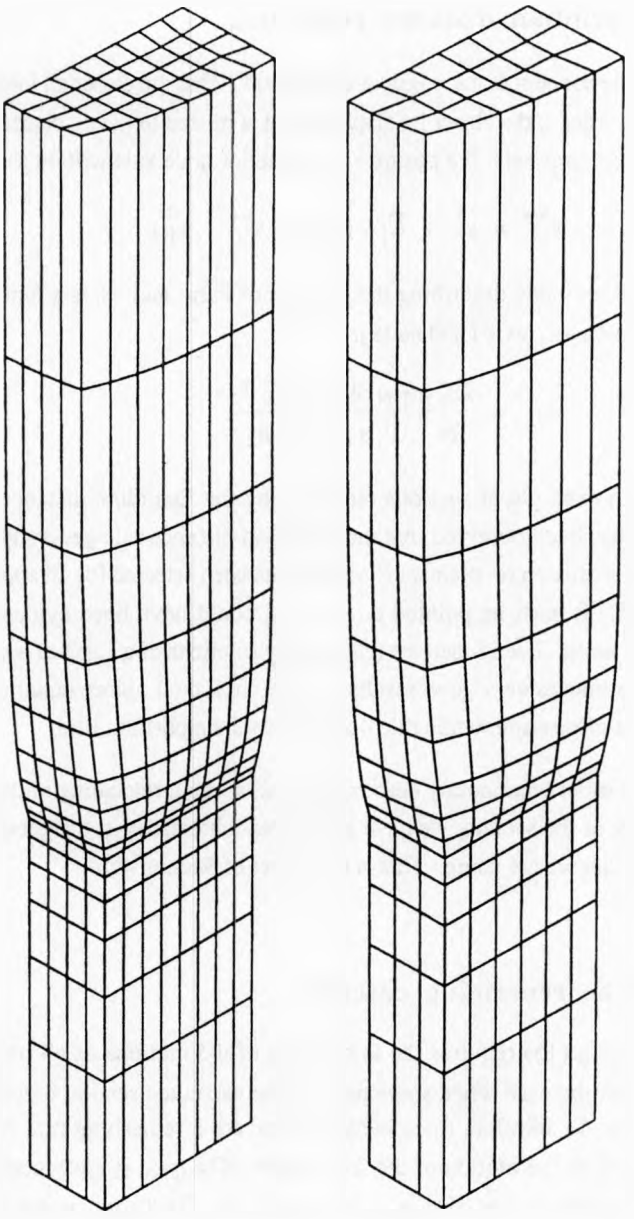


Fig. 5 Perspective plot of the deformed meshes for the rectangular die.

Hierarchy does not mean that the rules are applied sequentially but that constraints between coordinates and geometrical variables coming from a 1-D (2-D) rule are *preferred* to those coming from a 2-D (3-D) rule. Consequently, constraints of high priority are substituted in subsequent rules.

From a practical point of view, constraints between variables are manipulated symbolically and substitution occurs automatically once the hierarchy between constraints has been defined This means that we execute linear combination on the lines and the columns for each constrained variable during solution of the linear system. The code has been organized as follow :

- At the level of the local matrices, all nodal positions $\mathbf{x}^h$ are *variables*, this means that we do not substitute the geometrical variable h_i^h as a primal unknows in the element matrices.
- Linear relationships between internal and boundary node displacements are expressed as constraints; once a variable has been constrained , it *disappears* from list of the variables of the problem and a duality technique reports all derivatives with respect to the constrained variable on the variables which are constraining it.
- On the free surfaces, the displacement of the nodes is a function of the geometrical variable h_i^h and the (known) direction of displacement $\mathbf{d}_i$.
- Finally, the kinematic condition is a scalar PDE for the h_i^h.

This organization has a great flexibility, in the sense that changing from one remeshing rule to another never requires to modify the local finite element matrices. Writting the finite element matrices with position derivatives is the most tedious task in deriving a full Newton-Raphson scheme for problems with moving boundaries. Moreover, symbolic manipulations on the constraints is essential to the modularity of the program.

5. Examples

The code has first been validated on three-dimensonal flat and circular dies for which a two-dimensional solution is easily calculated. We do not report these results here because they are essentially identical to well known two-dimensional results. Furthermore, in order to verify the convergence of our method and to compare our

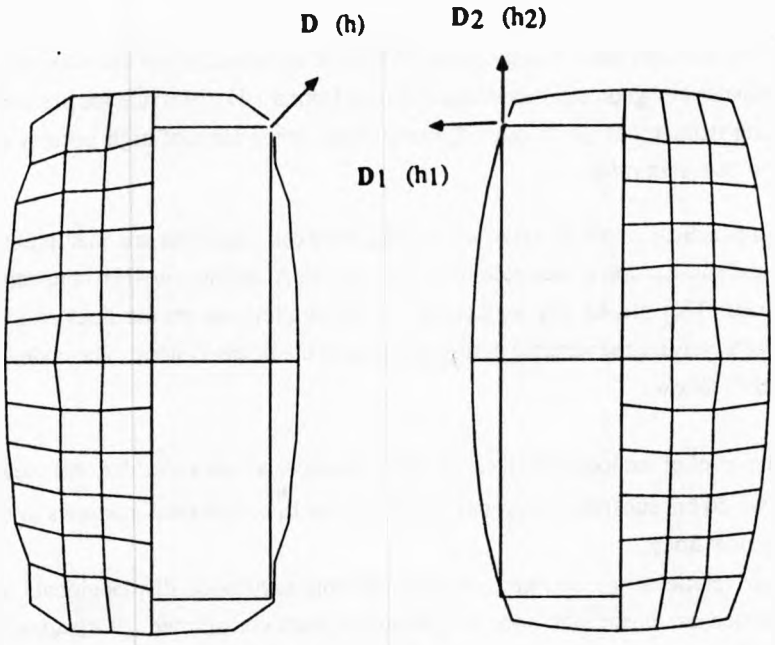


Fig. 6 Profiles obtained by :
(a) single normal model,
(b) multiple normals model.

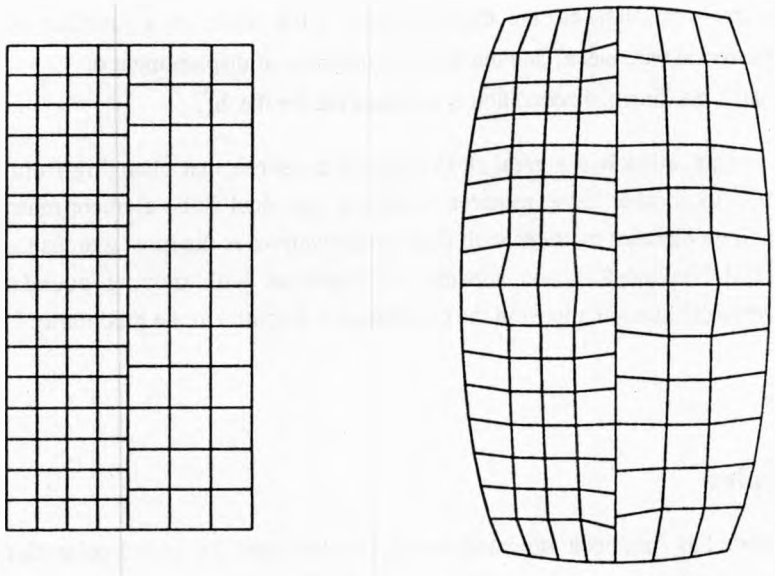


Fig. 7 Rectangular die : mesh refinement analysis.

results, we have considered the square die problem. We report in Table I the swelling ratio Sw_m in planes of symmety.

Table I. Sw_m for the square die

Authors	Unknowns	Sw_m
Karagiannis et al.[3]	16500	18.4
Crochet and Wambersie [9]	6917	18.5
Present work	13616	18.5

5.1. Rectangular die

Extrusion of a Newtonian fluid through a rectangular die is a test problem for three-dimensional extrusion. The geometry is show at figure 5; symmetry of the problem with respect to the x=0 and y=0 planes has been used.

The rectangular die has been used as a test problem to validate the introduction of multiple normals at corners and to evaluate bilinear and biquadratic shape functions for the free surface position. In Fig. 6, we have used a single normal at corner A, whose direction is computed by means of a least square formulation. The direction of displacement of nodes located at the corners is then prescribed. Since this direction does not in general correspond to the displacement of physical corner, the method will have a tendency to create a shape discontinuity at the another place. Wiggles appears in the solution, as shown at Fig. 6, or the Newton-Raphson scheme does not even converge. Solutions converged with mesh refinement could not be obtained with a single normal model.

When singular points are allowed to move in two directions, the problem disappears, and a solution confirmed with mesh refinement is shown at figures 7 and 5. These solutions were obtained with bilinear geometrical variables; they converge at a relative precision of 10^{-6} in 5 to 6 iterations. Biquadratic shape functions have also been used for the geometrical variables.

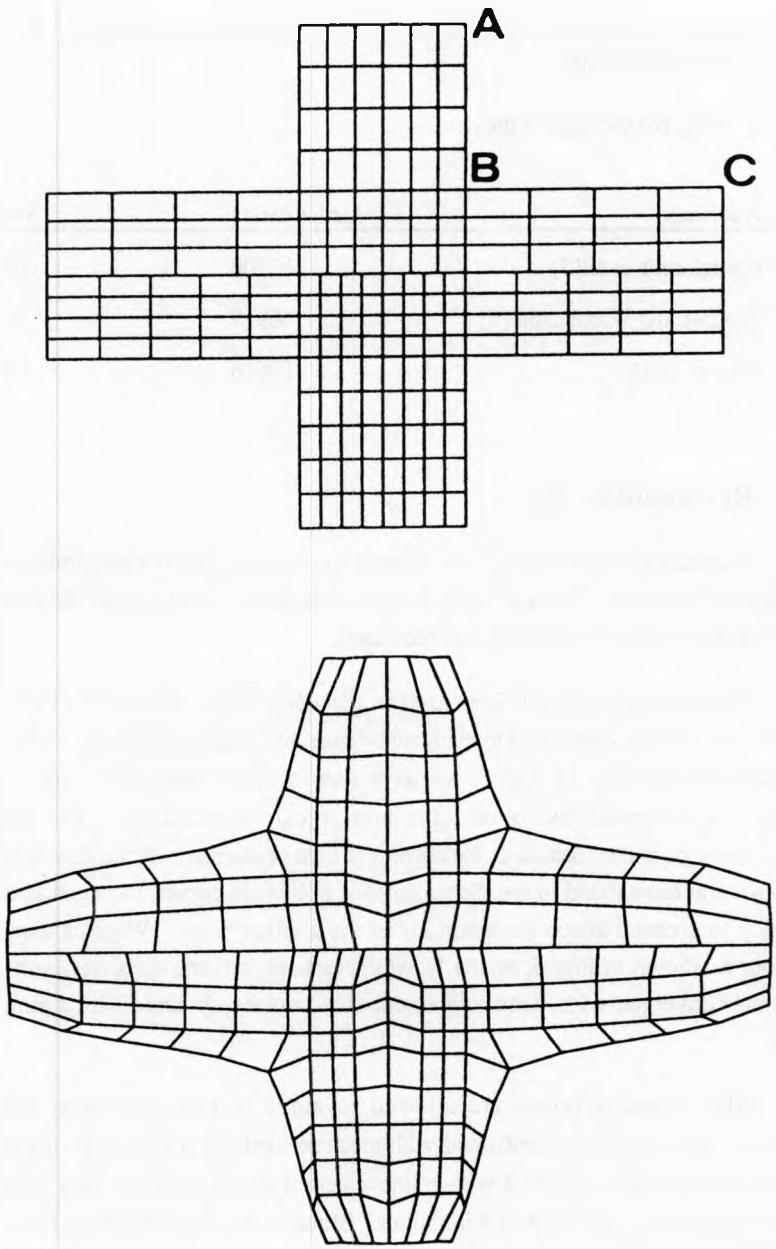


Fig. 8 Cross-like die : mesh refinement analysis.

5.2. Cross-like die

Extrusion of a cross-like profile involving 12 corners is considered, as described in Fig. 8. We have used the symmetry of the problem with respect to the x=0 and y=0 planes, and we have introduced a discontinuity of the normal direction along corners A, B and C in Fig. 8.

Bilinear shape functions have been used for H_i^h, and quadratic convergence of the iteration scheme has been observed. We have also simulated the same cross die problem with biquadratic shape functions for H_i^h and with die discontinuity of the normals at corners. Although convergence of the algorithm would be obtained on some meshes, wiggles were observed in the extrudate shapes. These wiggles were not observed with bilinear shape functions. On some refined meshes; divergence of the iterative scheme has been observed. In those cases, the bilinear h_i^h, however, converged towards a smooth solution which was coherent with results obtained with a coarse mesh. For this reason, biquadratic H_i^h-fields have been abandoned in all subsequent simulations.

Two mesh refinements have been considered. Fig. 8 presents cross sections of these meshes at the die exit. A remeshing rule based on the Euclidian distance has been used in both cases. Quadratic convergence of the iteration scheme has been observed. Fig. 9 presents perspective plots of the mesh boundaries, and Fig. 8 shows a comparison between the coarse and the fine mesh. The agreement between these two solutions is excellent. A comparison between the fully developped extrudate profile and the die section is presented in Fig. 10. Fig. 11 presents contour lines of the fully developed normalized velocity profile.

Rearrangement of the velocity field causes large deformations in the extrudate, especially around the re-entrant corner B. Interestingly, these deformations are not caused by shear-thickening effects or by elasticity, as one could argue on the basis of two-dimensional extrusion simulations. As a reminder, the swelling ratio for a Newtonian fluid is 1.19 for a planar die and 1.13 for a axisymmetric die.

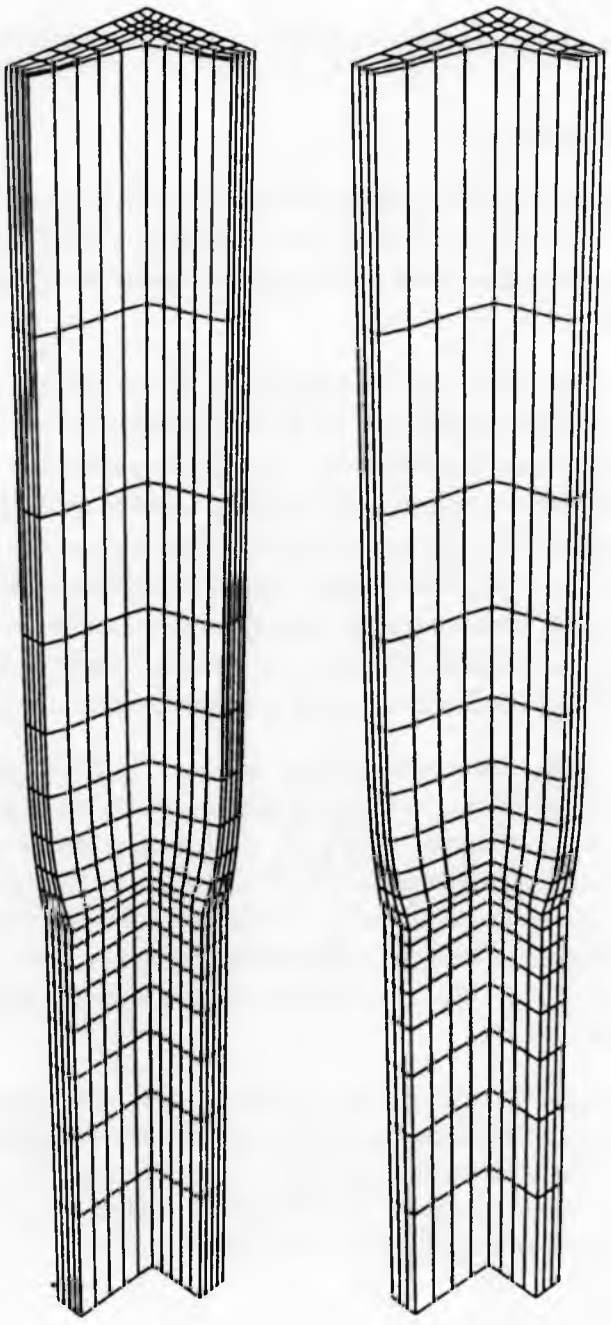


Fig. 9 Perspective plot of the deformed meshes for the cross-like die.

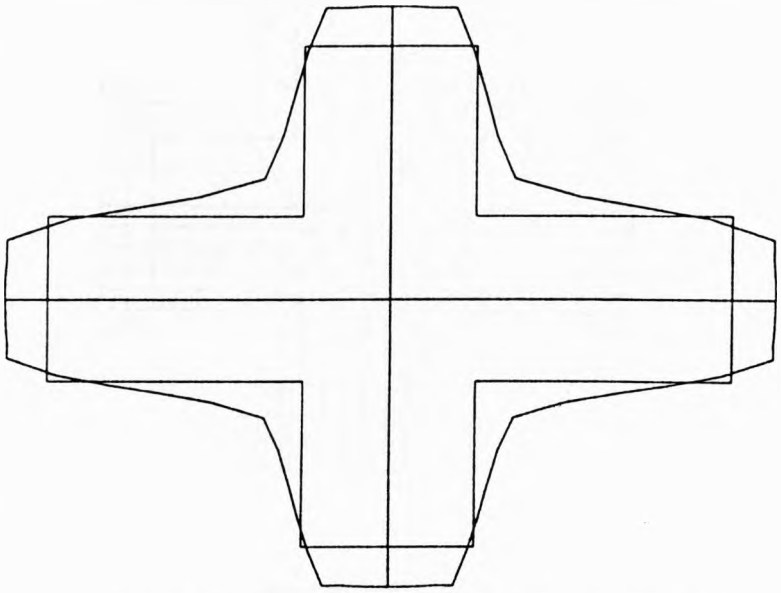


Fig. 10 Comparison of the cross-like die section and extrudatre profile.

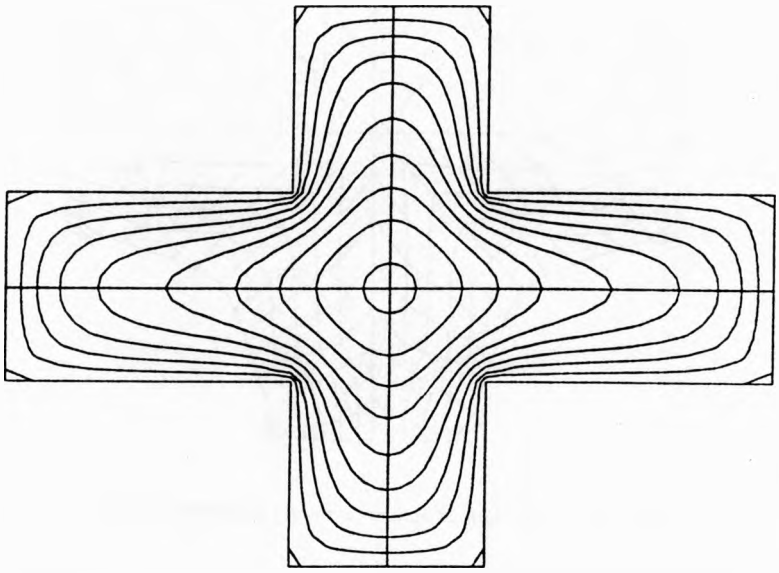


Fig. 11 Velocity profile in the cross-like die.

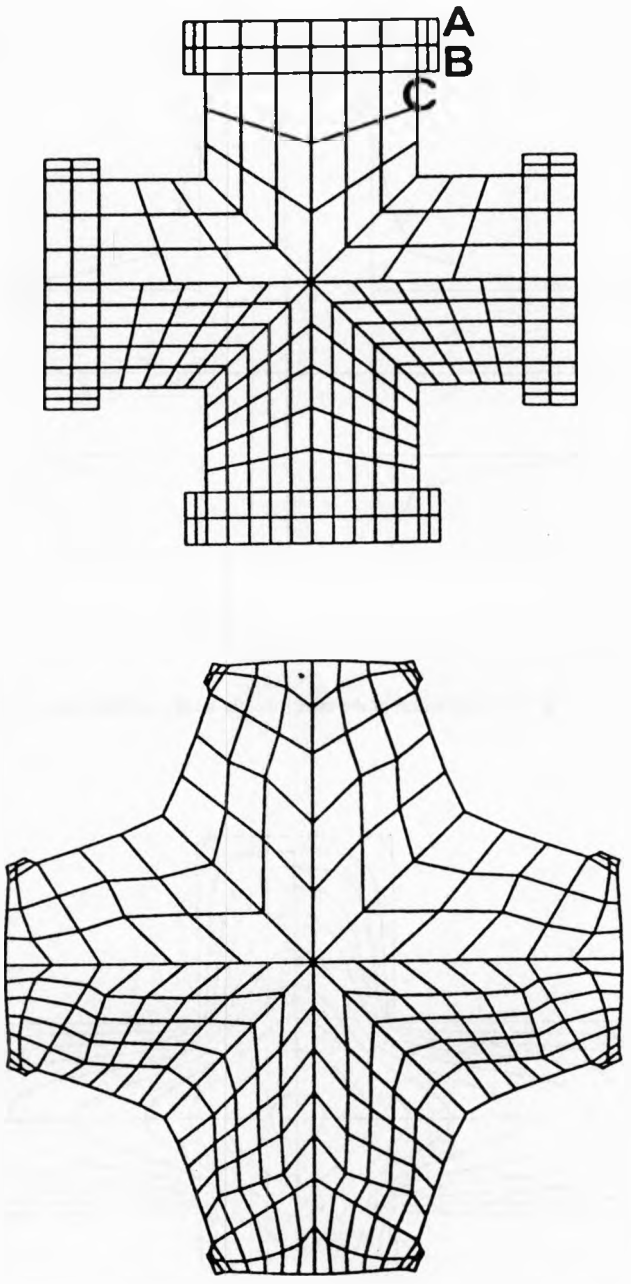


Fig. 12 Profile with 28 corners : mesh refinement analysis.

5.3. Profile with 28 corners

Let us consider the die section described in Fig. 12, which has 4 planes of symmetry. The use of normal-tangential boundary conditions allows us to reduce the computational domain to one-eight of the section. The intersection between the mesh and the die exit plane is displayed at Fig. 12. Discontinuity of the normal has been used for corners A,B and C, and an remeshing rule based on the Euclidian distance has been used. As in previous examples, convergence of the iteration scheme has been obtained in five iterations. A comparison between the die section and the fully developped extrudate is shown at Fig. 13. The deformed mesh is displayed on the left, and the domain boundaries are compared on the right. A perspective plot of the domain boundary is presented in Fig. 14 (one-eight of the domain). A comparison between two mesh refinements is shown at Fig. 12.

The effect of the rearranging of the velocity profile are even more pronounced than in the previous example. The angle of corner B has significantly increased. It must be noted that this region corresponds to important axial velocities in the die itself, as shown in Fig. 15 which presents contour lines of the fully developed normalized velocity profile.

6 Conclusions

We have introduced a velocity-pressure-position finite element technique to solve free surface flows in three-dimensional geometries. Discontinuity of the normal direction along corners has been used and a geometrically general remeshing technique based on the Euclidian distance has been introduced. A full Newton-Raphson scheme has been derived which allows us to complete the flow of a Newtonian fluid in a complex geometry in five iterations. For the problem of the extrusion out of a rectangular die, we have observed that no solution convergent with mesh refinement can be obtained if a single normal direction and a single kinematic condition are used for all nodes on the free surface.

Extrusion of profiles involving several corners has then been considered. We have computed the extrudate shapes out of a cross-like die and we have shown that important deformations occur around re-entrant corners. These deformations are caused by a rearrangement of the non-uniform velocity profile in the die channel. Convergnece of the solution with mesh refinement has been verified and the agreement on the extrudate shape was excellent.

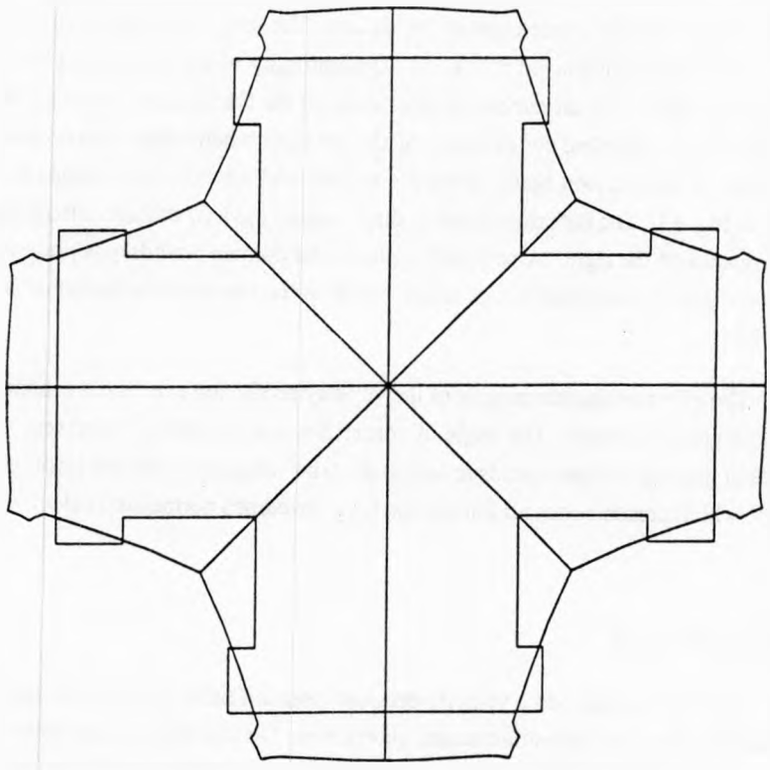


Fig. 13 Comparison of the die with 28 corners and extrudate profiles.

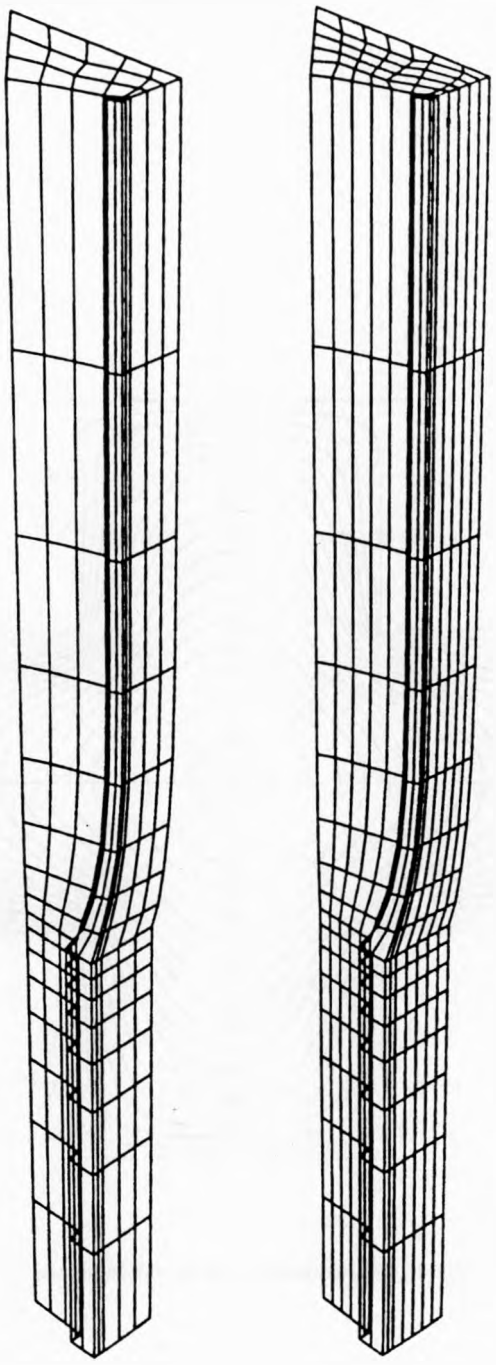


Fig. 14 Perspective plot of the deformed meshes for the profile with 28 corners.

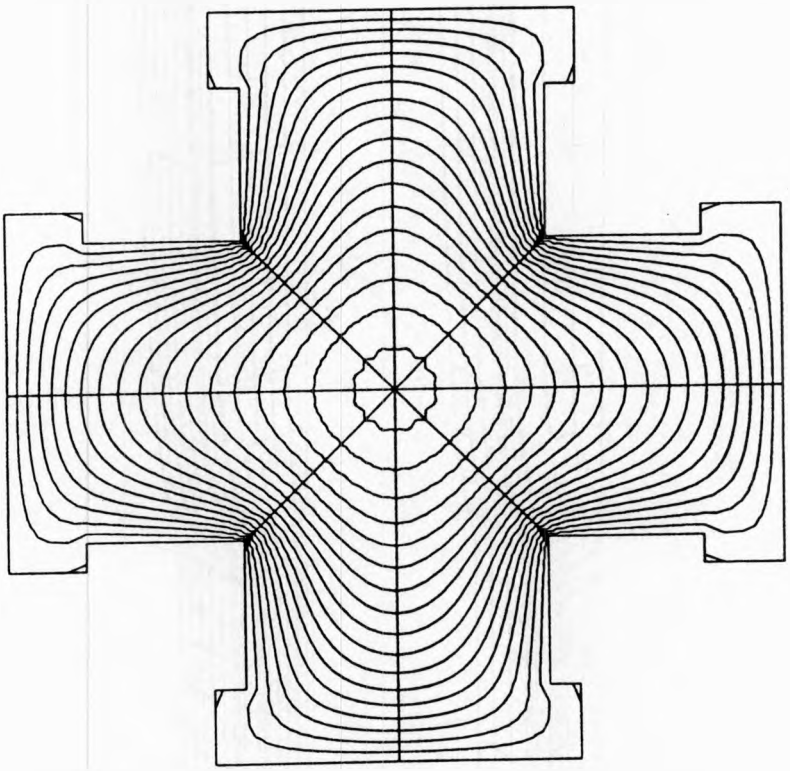


Fig. 15 Velocity profile in the die with 28 corners.

Our last example is an extrudate profile involving 28 corners. As in previous simulations, the scheme converges quadratically to the solution, and our remeshing algorithm is able to maintain the element deformation at an acceptable level. The extrudate shape exhibits large deformations in the vicinity of all re-entrant corners, which could not be predicted on the basis of two-dimensional planar or axisymmetric simulations.

It is our intention to extend our technique to multifluid flows[10] in the near future. In this case, distinct remeshing techniques in each fluid domain will be used. Early results show that the prediction of coupled interface and free surface positions is very promising.

Acknowldgements

V. Legat wishes to acknowledge a scholarship from the Belgian *Fonds National de la Recherche Scientifique*.

References

[1] M.B. Bush, N. Phan-Thien,
Three-Dimensional Viscous Flows with Free Surface : Flow out of long square die
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 18, 211-218 (1985).

[2] T. Tran-Cong, N. Phan-Thien,
Three-Dimensional Extrusion proces by Boundary Element Method II :
Extrusion of a viscoelastic fluid,
Rheol. Acta, 27, 639-648 (1988).

[3] A. Karagiannis, A.N. Hrymak and J. Vlachopoulos,
Three-Dimensional Extrudate Swell of Creeping Newtonian Jets,
A.I.Ch.E. J. 34, 2088-2094 (1988).

[4] A. Karagiannis, A.N. Hrymak and J. Vlachopoulos,
Three-Dimensional Non-Isothermal Extrusion Flows,
Rheol. Acta, 28, 121-133 (1989).

[5] H. Saito and L.E. Scriven,
Study of Coating Flow by the Finite Element Method,
J. Comp. Phys., 42, 53 (1981).

[6] O.A. Ladyzhenskaya,
The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow,
Gordon and Breach Science Publishers, New York-London-Paris (1969).

[7] J.F. Thompson, Z.U.A. Warsi, C.W. Mastin,
Numerical Grid Generation.
Elsevier, New York (1985).

[8] P. Henrici,
Applied and Computational Complex Analysis.
Vol III discrete Fourier analysis, Cauchy integrals, construction of conformal maps,

univalent functions, Pure and Applied Mathematics. John Wiley & Sons, New York-London-Sidney-Toronto (1986)

[9] O. Wambersie, M.J. Crochet,
Transient Finite Element Method for calculating Steady State Three-Dimensional Free Surfaces,
Int. J. Numerical Methods in Fluids, 14, 343-360 (1992).

[10] A. Karagiannis, A.N. Hrymak and J. Vlachopoulos,
Three-Dimensional Studies on Bicomponent Extrusion,
Rheol. Acta, 29, 71-87 (1990).

Chapitre 4

Multiplicateurs de Lagrange et contraintes.

Les multiplicateurs de Lagrange et les contraintes sont les principaux outils à la base des méthodes d'éléments finis mixtes. Nous détaillons ces deux concepts. En outre, nous introduisons plusieurs extensions de notre méthode numérique implicite pour les écoulements à surfaces libres.

Les contraintes linéaires permettent de réduire les espaces d'approximation afin d'inclure les conditions essentielles, tandis que l'introduction d'un multiplicateur permet d'insérer une condition dans la forme faible. Elle est ainsi traitée de manière naturelle. Dans certains cas, son imposition en condition essentielle est également possible, mais ce traitement est plus rigide. En jouant sur le degré de discrétisation des multiplicateurs, le choix des fonctions-test et le raffinement du maillage, la condition peut être imposée plus ou moins fortement. Par ailleurs, le multiplicateur fournit un résultat auxiliaire qui peut se révéler très utile. Nous présentons ensuite une série d'applications basées sur un usage systématique de la technique des éléments finis contraints et des multiplicateurs de Lagrange. Ceci couvre un très large domaine : éléments hiérarchiques, problèmes inverses et conditions aux limites particulières.

En particulier, le problème inverse revêt un grand intérêt pratique. En effet, déterminer la forme ou la géométrie d'une filière afin d'obtenir un extrudat donné est le défi quotidien du concepteur sur le site industriel. Actuellement, on procède principalement sur une base expérimentale d'essais successifs coûteux. L'altenative de la simulation numérique permet donc d'obtenir un grand nombre de données pour un coût modeste. Nous montrons que la résolution efficace du problème inverse est permise grâce au concept de multiplicateur.

4.1. Eléments finis contraints.

Afin d'imposer les conditions aux limites essentielles, il est courant d'introduire des contraintes sur la matrice du système discret. Nous généralisons ce concept en définissant une contrainte comme une relation algébrique linéaire liant une valeur nodale à d'autres inconnues sous la forme suivante :

$$Z_i = b_i + \sum_{j=1,N} a_{ij} . Z_j,$$

où les variables Z_j sont supposées ne pas être contraintes elles-même. Cette limitation n'est guère gênante. Elle nécessite uniquement l'élimination symbolique des variables déjà contraintes qui apparaissent dans le membre de droite d'une nouvelle contrainte. Lors de la définition de celle-ci, il s'agit dès lors de substituer ces variables par les contraintes qui y sont associées.

Le traitement judicieux de contraintes se fait via une opération ligne et une opération colonne sur la matrice discrète. A titre d'illustration, nous justifions ces opérations dans un cadre simplifié. Nous considérons donc l'équation de Poisson soumise aux conditions aux limites suivantes :

- Trouver $z \in H^2(\Omega)$ tel que :

$$\begin{aligned} \Delta z &= 0, && \text{sur } \Omega, \\ z &= f, && \text{sur } \partial\Omega_{Dirichlet}, \\ z_{,n} &= g, && \text{sur } \partial\Omega_{Neumann}. \end{aligned}$$

Nous cherchons la fonction z au sein de l'espace de Sobolev $H^2(\Omega)$. Dans un premier temps, nous supposons que f et g sont des données du problème. Le symbole $_{,n}$ représente la dérivée normale de z.

Introduisons la fonctionnnelle suivante :

$$J(z) = 1/2 < (\nabla z)^2 > - << g \ z >>.$$

Le problème différentiel à résoudre et cette fonctionnelle J sont liés par une propriété remarquable. La solution exacte z minimise J dans l'espace $H_0^2(\Omega)$. Ceci se démontre facilement en considérant la variation première de J et en y appliquant le théorème de Green. Une seconde formulation du problème s'écrit ainsi sous la forme d'un principe de minimum :

- Trouver $z \in H_0^2(\Omega)$ qui minimise la fonctionnelle :

$$J(z) = 1/2 < (\nabla z)^2 > - << g \ z >>,$$

où < > et << >> représentent successivement les intégrales sur Ω et $\partial\Omega_{Neumann}$. Pour les candidats à la minimisation, nous nous restreignons au sous-espace $H_0^2(\Omega)$ qui se compose des fonctions respectant les conditions essentielles du problème. L'absence de dérivées secondes suggère un élargissement des fonctions admissibles z à $H_0^1(\Omega)$, sous-espace de $H^1(\Omega)$. Il est clair que la fonctionnelle reste bornée pour de telles fonctions. De plus, on peut démontrer que cet élargissement ne risque pas d'abaisser la valeur du minimum de la fonctionnelle. Cette propriété est cependant essentielle dans le contexte des méthodes classiques d'approximation de Ritz ou de Galerkin.

Nous pouvons dès lors poser le problème de la recherche d'une solution approximative. Nous considérons une approximation z^h qui s'écrit sous la forme:

$$z^h = \sum_{i=1,N} \Phi_i \, . \, Z_i,$$

où N est le nombre de noeuds et où Φ_i représentent les fonctions de forme globale appartenant à $H^1(\Omega)$. En remplacant z par z^h dans l'expression de la fonctionnelle, nous obtenons :

$$J(z^h) = 1/2 < (\nabla \Phi_i \, Z_i)^2 > - << g \, \Phi_i \, Z_i >>.$$

Introduisons la matrice de raideur A_{ij} et le vecteur des forces généralisés B_i :

$$A_{ij} = < \nabla \Phi_i \, . \, \nabla \Phi_j >,$$
$$B_i = << g \, \Phi_i >>,$$

$$J(z^h) = 1/2 \, A_{ij} \, Z_j \, Z_i - B_i \, Z_i.$$

Dès lors si nous négligeons les conditions essentielles, la recherche d'une solution approximative consiste à déterminer N valeurs nodales Z_i qui minimisent la fonctionnelle. Ceci nous conduit naturellement à annuler les dérivées partielles correspondantes :

$$A_{ij} Z_j - B_i = 0.$$

Nous écrivons ces relations en substituant les matrices et les vecteurs par leur définition.

$$< \nabla \Phi_i . \nabla \Phi_j Z_j > - << \Phi_i \ g >> = 0.$$

Nous retrouvons ainsi le système d'équations qu'on obtiendrait par la discrétisation de la forme faible de l'équation de Poisson. On remarque ainsi que les deux grandes méthodes d'approximation Ritz et Galerkin sont équivalentes pour l'exemple discuté. Mais d'un point de vue mathématique, l'existence d'un principe de minimum inhérent à la méthode de Ritz est capitale. La réponse aux questions fondamentales d'existence, d'unicité, de preuves de convergence et de stabilité découle directement du caractère symétrique et défini-positif de la matrice engendrée par la fonctionnelle quadratique. Toutefois, la méthode de Galerkin est bien plus générale car elle n'est pas tributaire d'un principe de minimum. Elle ne requiert que la construction d'une forme faible.

Il est utile d'envisager à présent les conditions aux limites essentielles. Par souci de simplicité, supposons que le réseau d'éléments finis contienne toujours N valeurs nodales dont une est contrainte et N-1 sont libres. Dans un souci inverse, généralisons notre contrainte en considérant que f est une fonction linéaire f(z) définie de Ω vers $\partial\Omega_{Dirichlet}$. Des conditions de périodicité ou d'anti-symétrie sont des exemples typiques de ce type plus général de contraintes. Finalement, par souci de méthodologie, nous envisageons une contrainte générique simple mais reprenant l'ensemble des caractéristiques d'une approche plus générale :

$$Z_N = b + a \ Z_1.$$

Les coefficients a et b sont une donnée du problème, tandis que la valeur contrainte Z_N est inconnue. Elle sera déduite des N -1 autres valeurs libres sur base de l'expression de la contrainte. L'approximation devient :

$$z^h = (\sum_{i=1,N-1} \Phi_i . Z_i) + (\Phi_N . (b + a Z_1)).$$

Lorsqu'on introduit cette équation dans la fonctionnelle, on obtient facilement :

$$J(z^h) = 1/2\, A_{ij} Z_j Z_i - B_i Z_i + A_{iN} Z_i (b + a Z_1) + 1/2\, A_{NN} (b + a Z_1)(b + a Z_1) - B_N (b + a Z_1), \qquad i,j = 1...N-1.$$

Le minimum de J s'obtient cette fois en écrivant :

$$A_{1j} Z_j - B_1 + (A_{Nj} Z_j + A_{NN} (b + a Z_1) - B_N) a = 0, \qquad j = 1...N-1,$$
$$A_{ij} Z_j - B_i + A_{iN} (b + a Z_1) = 0, \qquad i = 2...N-1, j = 1...N-1.$$

Ces équations peuvent être mises sous la forme compacte :

$$C_{ij} Z_j - D_i = 0, \qquad i,j = 1...N-1,$$

où C_{ij} et D_i sont respectivement une matrice de raideur modifiée et un vecteur modifié de forces. La résolution de ces équations nous fournit les N-1 valeurs nodales libres, tandis que la dernière valeur nodale nous est fournie via la contrainte qui y est associée. Nous constatons de plus que les équations découlant d'une "formulation variationnelle avec contrainte" peuvent être obtenues par un moyen très simple à partir des équations non contraintes. Considérons en effet la matrice de raideur et les forces nodales connues. Pour intégrer la contrainte et obtenir la matrice et le vecteur modifiés, on procédera comme suit (Fig. 4.1) :

- On multiplie par a la N-ième ligne de la matrice de raideur et on l'ajoute à la première ligne de la matrice de raideur. De même le N-ième terme du vecteur des forces est multiplié par a et est additionné au premier terme de ce vecteur. C'est l'opération ligne.

- On considère la N-ième colonne de la matrice de raideur. D'une part, on la multiplie par b et on la soustrait au vecteur des forces généralisées. D'autre part, cette même colonne multipliée par a est ajoutée à la première colonne de la matrice de raideur. C'est l'opération colonne.

- On ne considère désormais que les N-1 lignes et colonnes des variables libres dans la matrice de raideur et dans le vecteur des forces. Il nous reste N-1 équations faisant intervenir uniquement les N-1 variables libres. Sur base de l'expression de la contrainte et des valeurs libres, il est possible d'obtenir la dernière valeur nodale.

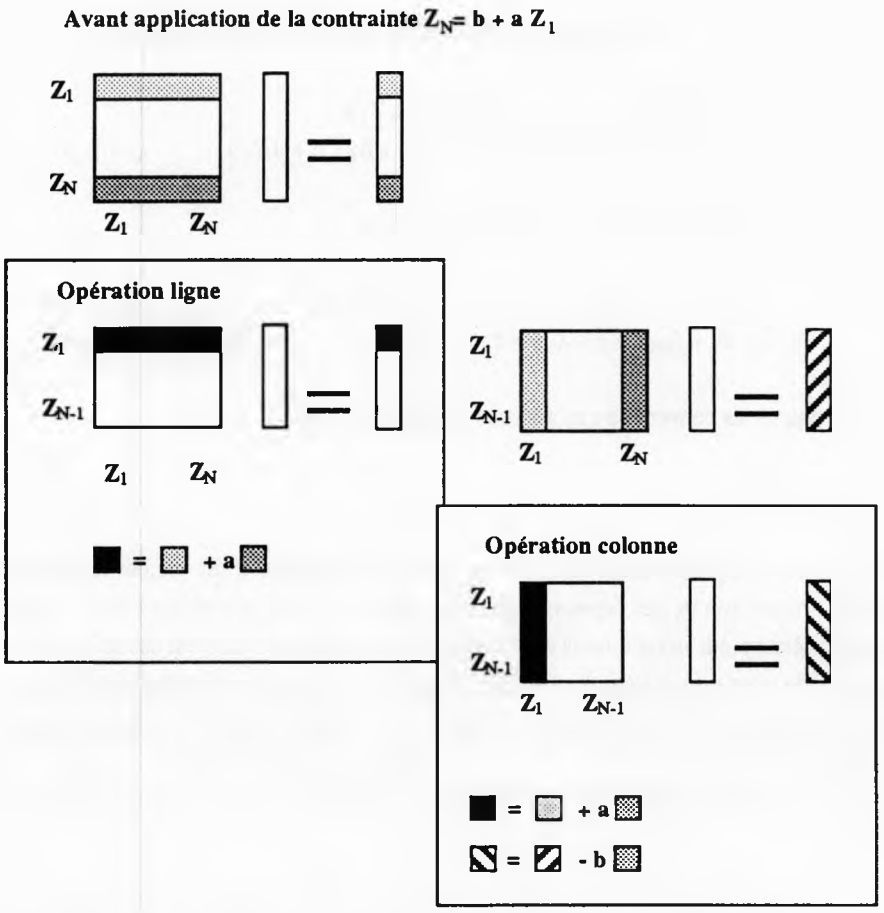


Fig. 4.1 Illustration des opérations lignes et colonnes de la technique des éléments finis contraints.

Une telle démarche se généralise aisément à toute contrainte linéaire. Une telle procédure a l'avantage d'être simple à implanter dans un programme de calcul et de conserver le caractère symétrique et défini-positif de la matrice de raideur. Nous conservons ainsi toutes les bonnes propriétés associées au principe de minimum. Ainsi, la non-exécution de l'opération ligne nous ferait perdre la symétrie de la matrice de raideur associée à l'équation de Poisson. Il est aisé de noter une autre incohérence qui découlerait de la non-observance de l'opération ligne : imposer $Z_N = Z_1$ ou $Z_1 = Z_N$ ne provoquerait pas la génération du même système d'équations. Dans un cas, on négligerait l'équation associée à Z_N, dans l'autre celle associée à Z_1. Par contre l'opération ligne engendre dans les deux cas une équation semblable obtenue comme la somme des équations associées à Z_N et Z_1.

Dans les applications où ni principe variationnel, ni matrice symétrique ne sont présentes, nous appliquons pourtant cette même technique justifiée sur base d'une approche variationnelle. Nous espérons ainsi nous prémunir d'une éventuelle dégradation des propriétés du système et conserver une procédure cohérente et structurée.

4.2. Eléments finis et multiplicateurs de Lagrange.

Une alternative à la démarche qui précède est le recours à des multiplicateurs de Lagrange. Nous reprenons notre exemple de l'équation de Poisson soumise à des conditions de Dirichlet et de Neumann :

- Trouver $z \in H^2(\Omega)$ tel que :

$$\begin{aligned} \Delta z &= 0 && \text{on } \Omega, \\ z &= f(z) && \text{on } \partial\Omega_{\text{Dirichlet}}, \\ z_{,n} &= g && \text{on } \partial\Omega_{\text{Neumann}}, \end{aligned}$$

où on lève l'hypothèse de linéarité de la fonction f(z). Ainsi, la technique des multiplicateur de Lagrange peut apparaître comme une technique plus générale.

Nous introduisons une fonctionnelle I, et le principe qui y est associé :

- Trouver $(z,\lambda) \in H^1(\Omega) \times H^0(\partial\Omega_{Dirichlet})$ tels que :

$$I(z,\mu) \leq I(z,\lambda) \leq I(y,\lambda) \qquad \forall\, (y,\mu) \in H^1(\Omega) \times H^0(\partial\Omega_{Dirichlet})$$

avec $I(z,\lambda) = 1/2 < (\nabla z)^2 > - << g\ z >> - <<< \lambda\ (z - f(z)) >>>$,

où $< >$, $<< >>$ et $<<< >>>$ représentent successivement les intégrales sur Ω, $\partial\Omega_{Neumann}$ et $\partial\Omega_{Dirichlet}$. La fonction λ est une variable auxiliaire définie sur $\partial\Omega_{Dirichlet}$. On la baptise classiquement du nom de multiplicateur de Lagrange. L'intérêt d'une telle variable a fait l'objet de plusieurs études dans le cadre général de la théorie des extréma liés (Babuska 73). A nouveau, l'annulation de la variation première de I et l'usage du théorème de Green permettent de démontrer l'équivalence entre la résolution du problème aux dérivées partielles et la principe variationnel. La démonstration nous apprendra par ailleurs que le multiplicateur de Lagrange est relié à la dérivée normale de l'inconnue z par la relation :

$$z_{,n} = \lambda(1 - f'(z)), \qquad \text{on } \partial\Omega_{Dirichlet}.$$

Dans le cas particulier où f est une donnée indépendante de z, le multiplicateur est simplement le flux ou la force à travers la paroi. D'un point de vue physique, la méthode peut s'interpréter comme suit. Nous recherchons le flux à imposer le long de la portion de la frontière $\partial\Omega_{Dirichlet}$ afin que la condition de Dirichlet soit respectée. Le multiplicateur est le moyen pour obtenir la condition de Dirichlet qui est notre objectif. En d'autres termes, le multiplicateur est la variable et la condition de Dirichlet est l'équation qui y est associée.

Considérons ensuite le problème de la recherche des approximations z^h et λ^h:

$$z^h = \sum_{i=1,N} \Phi_i \,.\, Z_i,$$
$$\lambda^h = \sum_{k=1,M} \tau_k \,.\, \Lambda_k,$$

où N et M sont les nombres de valeurs nodales de z^h et λ^h. Les fonctions de forme globales Φ_i appartiennent à $H^1(\Omega)$, tandis que les fonctions de forme τ_i ont leur support inclus dans l'espace $\partial\Omega_{Dirichlet}$ et sont des éléments de $H^0(\partial\Omega_{Dirichlet})$. Précisons dès à présent qu'il n'est pas nécessaire d'avoir le même type d'interpolation pour z et λ. Mais, ce choix n'est pas entièrement libre, il faut tenir compte de contraintes de stabilité et de précision.

On substitue z et λ par z^h et λ^h dans l'expression de la fonctionnelle,

$$I(z^h,\lambda^h) = 1/2 < (\nabla \Phi_i Z_j)^2 > - << g \Phi_i Z_i >> - <<< \tau_k \Lambda_k (\Phi_i Z_i - f(\Phi_l Z_l)) >>>.$$

La recherche d'une solution approximative consiste à déterminer les N valeurs Z_i et les M valeurs Λ_k qui rendent stationnaire la fonctionnelle. L'annulation des dérivées partielles par rapport aux valeurs nodales fournit les relations:

$$< \nabla \Phi_i . \nabla \Phi_j Z_j > - << \Phi_i g >> - <<< \Phi_i \tau_k \Lambda_k (1 - f'(\Phi_l Z_l)) >>> = 0,$$
$$<<< \tau_k (\Phi_j Z_j - f(\Phi_l Z_l) >>> = 0.$$

Il y a lieu ici de formuler une remarque. La fonctionnelle I est stationnaire mais n'est plus minimale. Elle ne correspond plus à une forme définie positive. Mathématiquement, il s'agit d'un problème de point de selle.

Pour intégrer une condition de Dirichlet, nous avons donc deux techniques en concurrence. Les éléments finis contraints réduisent l'espace d'approximation, tandis que l'introduction d'un multiplicateur de Lagrange modifie la fonctionnelle considérée. Les qualités respectives des deux méthodes apparaissent comme suit :

- L'insertion de contraintes réduit le nombre des inconnues, tandis que l'introduction du multiplicateur l'augmente. Il faut cependant préciser que cette variable n'est définie en général que sur une portion de frontière. Le nombre M est donc petit par rapport à N.

- La condition de Neumann intervient dans les deux cas de manière faible. Elle correspond à une condition naturelle que la solution ne vérifie qu'en moyenne.

- Par contre, c'est le traitement de la condition de Dirichlet qui différencie les deux approches. Le multiplicateur de Lagrange revient à une imposition faible de la condition. Ainsi en jouant sur le degré de discrétisation du multiplicateur, la condition de Dirichlet peut en effet être imposée de manière plus ou moins rigide. La qualité de la solution faible peut en dépendre (Babuska 73). Par contre, dans les éléments finis contraints, l'imposition d'une telle condition se fait de manière essentielle : l'espace d'approximation est réduits aux seuls approximants qui satisfont la condition de Dirichlet. La condition sera imposée d'une manière rigide qui ne pourra être modulée.

- Seules des conditions de Dirichlet faisant intervenir des relations linéaires entre valeurs nodales peuvent être intégrées par le biais de contraintes. L'approche variationnelle apparaît ainsi plus générale.

- Enfin, le multiplicateur de Lagrange fournit un résultat auxiliaire : une estimation du flux normal de z sur la portion de la frontière où justement cette quantité n'est pas imposée.

4.2.1. Choix d'un interpolant pour un multiplicateur de Lagrange.

L'insertion du multiplicateur de Lagrange nous fait mettre en oeuvre une méthode d'approximation mixte. Une méthode mixte se caractérise par l'usage d'approximations indépendantes pour des grandeurs distinctes.

L'exemple le plus classique est le problème de Stokes qui a fait l'objet de nombreuses études antérieures (Ladyzhenskaya 62)(Brezzi 74)(Fortin 82):

- Trouver $(v, p) \in V \times P$ tels que :

$$\nabla.(\eta \bar{\nabla} v) - \nabla p = 0, \qquad \text{on } \Omega,$$
$$\nabla.v = 0, \qquad \text{on } \Omega.$$

Introduisons les trois espaces fonctionnels suivants :

$$V = \{ v \in (H_0^1(\Omega))^{\dim(\Omega)} \},$$
$$W = \{ v \in (H_0^1(\Omega))^{\dim(\Omega)} \text{ tels que } \nabla.v = 0 \},$$
$$P = \{ p \in H^0(\Omega) \}.$$

Considérons deux possibilités de formulations variationnelles. La première approche consiste à intégrer la contrainte en réduisant l'espace des vitesses de V à W (Ciarlet 78) :

- Trouver $(v) \in W$ qui minimise :

$$J(v,p) = 1/2\, \eta < (\bar{\nabla} v)^2 >.$$

Cette formulation est difficile à généraliser en pratique, en raison de la difficulté de générer un espace d'approximation valable pour W. Générer une telle interpolation nécessite ici l'utilisation d'éléments à base de divergence nulle (Fortin 1972). Cependant, les fonctions de forme à divergence nulle sont peu utilisées en pratique et on leur préfère les méthodes mixtes.

Une seconde approche repose sur l'insertion d'un multiplicateur pour intégrer la contrainte d'incompressiblité:

- Trouver $(\mathbf{v}, p) \in V \times P$ tels que :

$$I(\mathbf{v},q) \leq I(\mathbf{v},p) \leq I(\mathbf{u},p) , \qquad \forall (\mathbf{u},q) \in V \times P ,$$

$$\text{avec } I(\mathbf{v},p) = 1/2\, \eta < (\bar{\nabla}\mathbf{v})^2 > - < (\nabla \cdot \mathbf{v})\, p > .$$

Cette seconde fonctionnelle fait intervenir la vitesse comme variable primale **v**, tandis que p apparaît comme un multiplicateur de Lagrange. Cette formulation est à la base des méthodes d'éléments finis mixtes classiques vitesses-pressions.

La différence entre les deux approches est cependant capitale. Nous devons ici résoudre un problème de point de selle en lieu et place d'un problème de minimisation. Afin de présenter brièvement les outils mathématiques disponibles pour un tel problème de point de selle, introduisons les notations suivantes,

$$a(\mathbf{v},\mathbf{u}) = 1/2\, \eta < (\bar{\nabla}\mathbf{u})\,(\bar{\nabla}\mathbf{v}) >,$$
$$b(p,\mathbf{v}) = < (\nabla \cdot \mathbf{v})\, p >.$$

Notre problème de point de selle s'écrit sous la forme plus abstraite :

- Trouver $(\mathbf{v}, p) \in V \times P$ tels que :

$$a(\mathbf{v},\mathbf{u}) - b(p,\mathbf{u}) = 0 , \qquad \forall\, \mathbf{u} \in V,$$
$$b(q,\mathbf{v}) = 0 , \qquad \forall\, q \in P.$$

Il a été montré que ce problème de point de selle est bien posé si et seulement si :

(i) a et b sont continues,

(ii) a est coercive sur le noyau de b,

(iii) $\exists\, \alpha > 0$ tel que $\alpha \leq \inf_{p \in P} \sup_{v \in V} \dfrac{b(p,v)}{\|v\|_V \|p\|_P}$.

La seconde condition est souvent dénommée K-ellipticité de l'opérateur a tandis que la troisième condition est connue sous le nom de condition inf-sup ou LLB (Brezzi 74). Ces deux conditions assurent la stabilité du problème par rapport aux données. Il est important de noter qu'il ne s'agira pas seulement de tester le respect de ces conditions pour le problème non-discrétisé. Mais il sera nécessaire de les vérifier pour chaque choix d'approximants discrets de v et p. En effet, ni la K-ellipticité, ni la condition LBB ne peuvent être déduites pour le problème discret sur base du problème exact.

Cette incursion mathématique nous permet d'expliquer partiellement les stratégies utilisées dans les techniques d'éléments finis :

- C'est pour obtenir le respect de la condition (iii) que l'interpolant de pression doit être inférieur d'un ordre à celui des vitesses. Ceci est donc une justification mathématique possible du célèbre choix des vitesses quadratiques et pressions linéaires pour les équations de Navier-Stokes. L'utilisation de pressions linéaires discontinues apparaît comme un choix plus fin où on se risque à la limite de la condition de LLB afin d'obtenir le meilleur respect de l'incompressibilité. On voit donc que la condition LLB fixe une limite à la discrétisation du multiplicateur de Lagrange et donc au respect de la contrainte qui y est associée.

- Nous avons la K-ellipticité pour la formulation forte du problème de Stokes. Le problème est de nature elliptique et l'application d'une technique de Galerkin conserve cette propriété. Il n'en sera plus de même pour les équations où un terme hyperbolique intervient.

4.2.2. Multiplicateurs générés au sein d'une méthode de Galerkin.

Nous arrivons dès lors au point central de nos investigations : les fluides visqueux incompressibles en présence de surfaces libres. Pour poursuivre dans la philosophie qui précède, il faudrait proposer une fonctionnelle qui soit stationnaire à la solution. Malheureusement, une telle fonctionnelle nous fait défaut. Il est établi qu'il n'existe de principe variationnel ni pour les équations de Navier-Stokes sans surfaces libres, ni pour le problème de Stokes en présence de surfaces libres (Finlayson 82). A fortiori, pour les équations de Navier-Stokes en présence de surfaces libres, il nous faut constater l'absence d'un principe variationnel ainsi que des théorèmes qui y sont associés.

Il y a donc lieu de recourir à une méthode plus générale : la technique de Galerkin qui consiste à annuler les résidus engendrés par la forme faible. Reprenons notre exemple de l'équation de Poisson soumis à une condition de Dirichlet sur sa frontière.

- Trouver $z \in H^2(\Omega)$ tel que :

$$\Delta z = 0, \qquad \text{on } \Omega,$$
$$z = f(z), \qquad \text{on } \partial\Omega.$$

La définition d'une méthode numérique mixte sur base de la technique de Galerkin peut se présenter comme suit :

- On définit deux variables distinctes z et λ dont le support coïncide avec le domaine des équations aux dérivées partielles Ω et $\partial\Omega$ respectivement. Le sens de z est immédiat, il s'agit de l'inconnue du problème. La signification de λ est plus délicate à spécifier. On part d'une interprétation arbitraire de la physique du problème. Il s'agit de le définir afin qu'il soit un moyen permettant de satisfaire l'équation associée. Par analogie au multiplicateur généré dans l'approche variationnelle qui s'interprétait également comme un moyen pour satisfaire la contrainte, nous continuons de l'appeller multiplicateur de Lagrange. Ceci peut apparaître comme un abus de langage. La signification de λ est un résultat de l'approche variationnelle, tandis que dans la technique de Galerkin, elle est le produit d'une définition arbitraire faite à priori.

- On exige l'orthogonalité des fonctions de forme de approximations de ces variables aux résidus des équations correspondantes.

Si une approche variationnelle existe, l'application de la méthode de Galerkin mixte conduit aux mêmes équations discrètes uniquement si la définition à priori du multiplicateur correspond à l'interprétation fournie par la méthode variationnelle. Ainsi la physique de notre exemple pourrait nous faire définir le multiplicateur comme la force normale à la frontière. Cette force introduit le degré de liberté supplémentaire pour satisfaire la condition de Dirichlet.

Une telle définition pourrait également nous être suggérée par la nécessité de connaître la force à la frontière car nous désirons appliquer le théorème de Green pour réduire le degré de différentiabilité requis pour z. Considérons Z^h et L^h les sous-espaces adéquats pour les approximations. Ecrivons successivement la forme faible discrète des équations et le système algébrique correspondant :

- Trouver $(z^h,\lambda^h) \in Z^h \times L^h$ tels que :

$$< \nabla w ; \nabla z^h > - << w \lambda >> = 0 \qquad \forall w \in Z^h,$$
$$<< \mu ; z^h - f(z^h) >> = 0 \qquad \forall \mu \in L^h.$$

- Trouver (Z_j, Λ_k) tels que :

$$< \nabla \Phi_i . \nabla \Phi_j Z_j > - << \Phi_i \ \tau_k \Lambda_k >> = 0,$$
$$<< \tau_k \ (\Phi_j Z_j - f(\Phi_i Z_i) >> = 0,$$

où < > et << >> représentent les intégrales sur Ω et $\partial\Omega$. Nous constatons que ces équations coincident avec celles fournies par le principe variationnel uniquement si f ne dépend pas de z. Dans le cas où f dépend de z, nous aurions cette concordance seulement si nous définissons le multiplicateur dans la méthode de Galerkin par :

$$z_{,n} = \lambda(1-f'(z)), \qquad \text{sur } \partial\Omega_{\text{Dirichlet}}.$$

La démarche de Galerkin apparaît beaucoup plus générale mais est aussi plus aléatoire. Elle demande de définir à priori les variables auxiliaires et ne possède ni les propriétés mathématiques ni le caractère systématique d'un principe variationnel. Ceci explique l'attrait d'une formulation variationnelle par rapport à une méthode de Galerkin alternative. Malheureusement, il faut insister sur le fait que pour un grand nombre de problèmes, une telle formulation variationnelle fait défaut.

4.3. Multiplicateurs, contraintes et problèmes aux frontières libres.

Il est dès lors possible de considérer le problème à surfaces libres défini dans le premier chapitre. En l'absence de forces à distance, la formulation d'Euler-Lagrange du problème stationnaire isotherme à surfaces libres d'un fluide newtonien s'exprimait aisément. Par souci de simplicité les conditions de Neumann sont supposées homogènes.

- Trouver $(\mathbf{v}, \mathbf{x}, p, h) \in V \times X \times P \times H$ tels que :

$$\begin{aligned} &\nabla.(\eta \bar{\nabla}\mathbf{v}) - \nabla p = 0, && \text{sur } \Omega, \\ &\mathbf{x} = \mathbf{r}(h), && \text{sur } \Omega, \\ &\nabla.\mathbf{v} = 0, && \text{sur } \Omega, \\ &\mathbf{v}.\mathbf{n} = 0, && \text{sur } \partial\Omega_{Free}, \end{aligned}$$

avec les contraintes :

$$\begin{aligned} &\mathbf{v} = \hat{\mathbf{v}}, && \text{sur } \partial\Omega_{Dirichlet}, \\ &(\eta \bar{\nabla}\mathbf{v} - p\mathbf{I}).\mathbf{n} = 0, && \text{sur } \partial\Omega_{Neumann}, \\ &h = 0, && \text{sur } C_{Lip}. \end{aligned}$$

où la relation $\mathbf{r}(h)$ reprend les équations d'une des techniques de contrôle de réseau que nous avons présentées dans la seconde section de cette thèse. Les variables primales de cette formulation sont les vitesses et les coordonnées. Deux multiplicateurs sont introduits : la pression p et l'inconnue géométrique h. Ces multiplicateurs sont associés respectivement à la condition d'incompressibilité et à la condition cinématique. Il est utile de justifier le statut de variable primale que nous accordons aux coordonnées. Considérons successivement les cas d'une technique de contrôle différentielle et algébrique :

- La fonction $\mathbf{r}$ est linéaire, ce type de relation peut être traité par le biais de la technique des éléments finis contraints. La variable $\mathbf{x}$ disparait des inconnues du sytème. Les coordonnées sont obtenues directement sur base du multiplicateur h.

- La fonction $\mathbf{r}$ cache une relation différentielle. Il faut obtenir le respect de ces équations via une formulation faible et donc la variable $\mathbf{x}$ reste une inconnue du sytème. Cependant cette relation n'est pas une contrainte, mais une équation d'état. En d'autres termes, la variable $\mathbf{x}$ n'a pas été introduite pour satisfaire une contrainte

sur une autre variable. Elle joue un rôle semblable que celle de la température associée à l'équation de conservation d'énergie pour un problème non-isotherme.

En contraste, la pression et l'inconnue géométrique sont des multiplicateurs ajoutés afin de satisfaire simultanément l'équation de conservation du mouvement avec la condition d'incompressiblité et la condition cinématique. Le mécanisme de ces multiplicateurs peut s'interpréter de la manière suivante. La pression est un moyen de modifier les vitesses afin d'avoir le respect de l'incompressiblité. L'inconnue géométrique est un moyen de modifier les coordonnées et les vitesses afin d'obtenir le respect de la condition cinématique. Les autres contraintes sur les vitesses sont intégrées soit par l'application du théorème de Green sur l'équation du mouvement (conditions de Neumann), soit par la technique des éléments finis contraints (conditions de Dirichlet).

Dans le cas où **r** est un opérateur différentiel, la forme faible discrète générée par la technique de Galerkin s'écrit comme suit :

- Trouver $(v^h, x^h, p^h, h^h) \in V^h \times X^h \times P^h \times H^h$ tels que :

$$
\begin{aligned}
&< \eta \bar{\nabla} v^h - p^h I ; \bar{\nabla} w > = 0, && \forall\, w \in V^h,\\
&< x^h - r(h^h) ; y > = 0, && \forall\, y \in X^h,\\
&< \nabla . v^h ; q > = 0, && \forall\, q \in P^h,\\
&<< v^h . n ; l >> = 0, && \forall\, l \in L^h,
\end{aligned}
$$

où < > et << >> représentent les intégrales sur le domaine et la frontière libre. Les espaces d'approximations V^h et H^h sont définis de manière à ce que leurs éléments respectent les conditions essentielles. La condition de Neumann apparaît naturellement par l'application du théorème de Green sur les équations du mouvement.

Dans le second cas où les coordonnées sont contraintes par rapport à h, la formulation faible discrète devient :

- Trouver $(v^h, p^h, h^h) \in V^h \times P^h \times H^h$ tels que :

$$
\begin{aligned}
&< \eta \bar{\nabla} v^h - p^h I ; \bar{\nabla} w > = 0, && \forall\, w \in V^h,\\
&< \nabla . v^h ; q >= 0, && \forall\, q \in P^h,\\
&<< v^h . n ; l >>= 0, && \forall\, l \in L^h.
\end{aligned}
$$

Les contraintes sur les coordonnées sont incluses dans les espaces d'approximations V^h, P^h et H^h qui sont liés à la définition du domaine. A cet égard, il est opportun de détailler l'influence du mécanisme des contraintes. Toutes les équations du problème dans la formulation non-contrainte dépendent des coordonnées par le biais des intégrales, des opérateurs différentiels et de la normale à la frontière. Les opérations lignes effectuées lors de l'imposition des coordonnées transforme automatiquement cette dépendance par rapport aux coordonnées, en dépendance par rapport aux variables géométriques. Bien que la variable géométrique n'apparaisse pas directement dans les équations du système, elle intervient de manière indirecte via l'application des contraintes.

Nous sommes forcés de constater la pauvreté de l'arsenal mathématique pour notre problème en raison de l'absence de principe variationnel. Cependant, nous avons une formulation conforme dans le sens où la solution exacte respecte les équations de la forme faible. Ensuite, pour construire notre forme faible, nous nous sommes largement inspirés des méthodes de Galerkin mises en oeuvre pour des problèmes munis d'un principe variationnel. C'est pourquoi notre démarche peut apparaître comme une extension plus ou moins heureuse d'un principe variationnel. Ce dernier point nous permet seulement de conjecturer la présence de conditions proches de celles valables pour un problème de point de selle. L'expérience numérique confirme en partie ces conjectures :

- Pour les problèmes à surfaces libres et une interpolation donnée de vitesses, nos expériences numériques font apparaître que le choix de l'interpolation de h est limité. Nous constatons qu'une interpolation d'un degré moindre pour l'inconnue géométrique est préférable. Par exemple, une interpolation v / h du type P^2-C^0 / P^1-C^0 pose moins de difficulté de convergence qu'un choix P^2-C^0 / P^2-C^0. La convergence en réseaux est également améliorée par le choix d'un multiplicateur linéaire, malgré l'attrait d'une interpolation quadratique pour des frontières courbes. De l'expérience, il apparaît qu'une condition "du type LLB" existe pour le choix de l'interpolant de l'inconnue géométrique.

- Le choix de l'interpolant de pression est guidé par la condition LLB du problème de Stokes (et peut-être inappropriée dans le cas de problèmes à surfaces libres). En pratique, l'utilisation de vitesses quadratiques et pression linéaires semble une bon choix. Il apparaît ainsi qu'il existe une condition "du type LBB" pour la pression d'un problème à surfaces libres et que cette condition s'apparente à celle du problème de Stokes.

Une grande prudence s'impose sur les constatations effectuées sur base de l'expérience numérique. Ainsi l'interpolation vitesses-pressions du type P^1-C^0 / P^0-C^{-1} viole la condition LLB pour le problème de Stokes. Cependant, cet élément à vitesse linéaire et pression constante, qui donne des résultats satisfaisants dans de nombreux cas, est attrayant en raison de son coût modeste. Il s'agit donc d'éviter de valider hâtivement un choix sur base d'un nombre forcément limité d'expériences numériques. Il faut également éviter de condamner sans appel un choix qui paraît incorrect pour le mathématicien mais qui peut se révéler très pratique dans un grand nombre de situations. C'est l'analyse de convergence en réseaux qui devrait nous fournir une aide objective. Malheureusement, son coût pour des problèmes tridimensionnels ne permet de l'effectuer que de manière très parcellaire.

Est-ce que la formulation faible proposée est la seule envisageable ? Non, elle résulte d'un choix parmi d'autres possiblités. A titre d'illustration, nous souhaitons citer une formulation faible alternative due à Berghezan et Dupret (Berghezan 90,91):

- Trouver $(v^h, p^h, \lambda^h, \alpha^h) \in V^h \times P^h \times L^h \times A^h$ tels que :

$$
\begin{aligned}
&< \eta \bar{\nabla} v^h - p^h I ; \bar{\nabla} w > - << \lambda^h n ; w >> = 0, && \\
& && \forall w \in V^h, \\
&< \nabla . v^h ; q > = 0, && \forall q \in P^h, \\
&<< v^h . n ; \mu >> = 0, && \forall \mu \in L^h, \\
&<< \lambda^h ; \gamma >> = 0, && \forall \gamma \in A^h,
\end{aligned}
$$

où trois multiplicateurs ont été introduits. La pression p est associé à la contrainte d'incompressiblité. Deux multiplicateurs λ et α définis sur la surface libre sont associés respectivement à la condition cinématique et à la condition dynamique. Le multiplicateur λ est défini comme la force normale à la surface libre tandis que le multiplicateur α est défini comme le déplacement normal de la surface libre. La forme faible ainsi construite ressemble à la méthode de Ruschak. Cependant, certaines différences méritent d'être mentionnées. Tout d'abord, la présence systématique de multiplicateurs permet de moduler davantage le degré d'imposition des contraintes associées par des discrétisations appropriées. Ensuite, le multiplicateur α qui est le pendant de l'inconnue géométrique h sert ici à équilibrer les forces normales plutôt qu'à annuler les vitesses normales. Ce dernier rôle est dévolu au multiplicateur supplémentaire λ. L'inconvénient de cette technique est un nombre plus élevé de multiplicateurs qui conduisent à une apparition fréquente de pivots nuls lors de la résolution du système. Bien que ce genre d'inconvénient puisse être levé par des techniques particulières de résolution (Berghezan 91), nous sommes restés fidèles à la formulation de Ruschak pour nos simulations.

La formulation de Ruschak est-elle judicieuse ? Ici, deux facteurs interviennent de manière critique. D'une part, les lieux géométriques associés aux inconnues géométriques conditionnent notre formulation. En effet, si le lieu géométrique devient tangent à la surface libre, notre système dégénère. D'autre part, nous verrons qu'une modification des fonctions-tests pour la condition cinématique permet d'améliorer les propriétés de stabilité et de convergence de la forme faible.

4.4. Multiplicateurs, contraintes et éléments finis hiérarchiques.

L'introduction d'éléments hiérarchiques est réalisée par le biais d'éléments mortiers. Nous qualifions de mortier les éléments de dimension inférieure où une formulation variationnelle de raccord non-conforme entre deux domaines distincts requiert une équation supplémentaire. Bien qu'il soit possible d'écrire les contraintes équivalentes, nous avons apprécié la souplesse d'une formulation variationnelle. L'intérêt des éléments hiérarchiques est évident pour une simple raison d'économie dans le coût calcul d'une simulation tridimensionnelle. L'usage d'éléments hiérarchiques permet en effet une transition rapide entre zones raffinées et grossières du réseau.

Considérons un domaine Ω divisé en deux régions complémentaires Ω_1 et Ω_2. Sur ce domaine nous nous intéressons à nouveau à notre équation de Poisson.

- Trouver $z \in H_0^2(\Omega)$ tel que :

$$\Delta z = 0, \qquad \text{on } \Omega.$$

Une formulation alternative peut être définie en considérant chacune des deux régions et s'écrit sous la forme :

- Trouver $(x,y,\lambda) \in H_0^2(\Omega_1) \times H_0^2(\Omega_2) \times H^0(\Omega_1 \cap \Omega_2)$ tels que :

$$\begin{aligned} \Delta x &= 0, && \text{on } \Omega_1, \\ \Delta y &= 0, && \text{on } \Omega_2, \\ x - y &= 0, && \text{on } \Omega_1 \cap \Omega_2. \end{aligned}$$

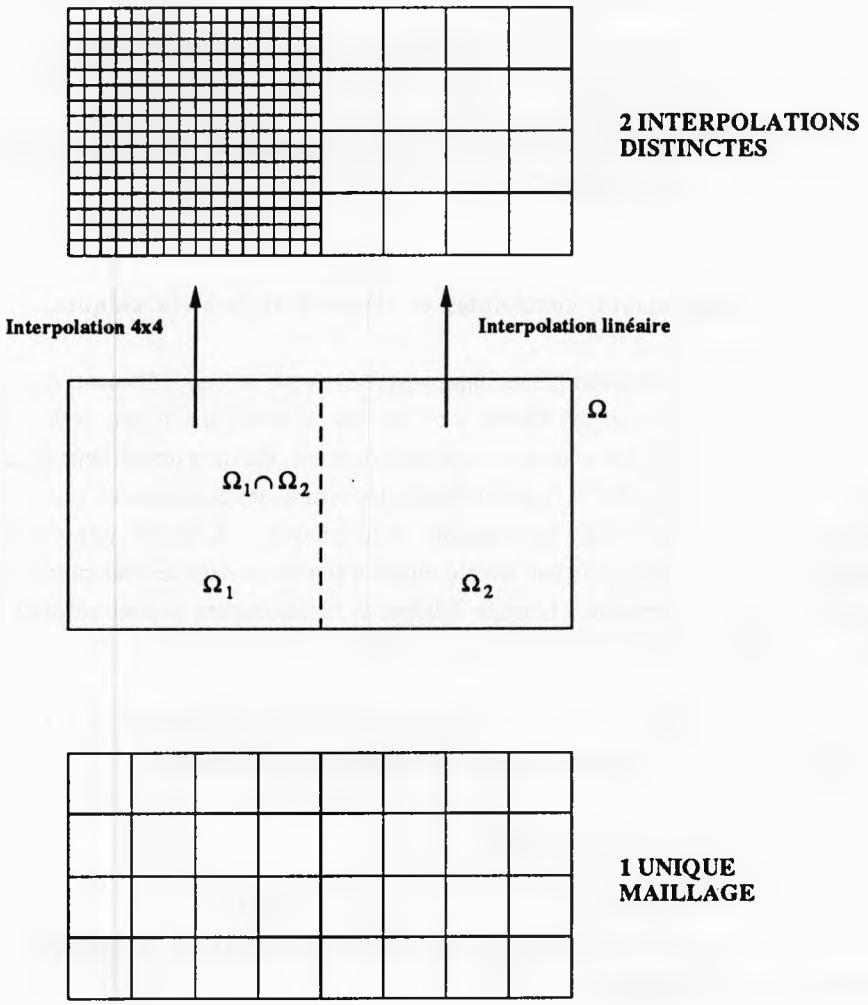


Fig. 4.2 Principe des éléments hiérarchiques

Introduisons une fonctionnelle I et un principe variationnel pour résoudre ce problème :

- Trouver $(x,y,\lambda) \in H^1(\Omega_1) \times H^1(\Omega_1) \times H^0(\Omega_1 \cap \Omega_2)$ tels que :

$$I(x,y,\mu) \leq I(x,y,\lambda) \leq I(a,b,\lambda)$$
$$\forall\ (a,b,\mu) \in H^1(\Omega_1) \times H^1(\Omega_1) \times H^0(\Omega_1 \cap \Omega_2),$$

$$\text{avec } I(x,y,\lambda) = 1/2 < (\nabla x)^2 > + 1/2 << (\nabla y)^2 >> - <<< \lambda\ (x - y) >>>,$$

où $< >$, $<< >>$ et $<<< >>>$ représentent l'intégration sur Ω_1, Ω_2 et $\Omega_1 \cap \Omega_2$.

Un tel formalisme n'a d'intérêt que si nous souhaitons définir deux interpolations distinctes pour x et y dans les régions Ω_1 et Ω_2. Nous pouvons ainsi utiliser une interpolation plus raffinée dans les zones de haut gradient et une interpolation moindre ailleurs (Fig. 4.2). Il est évidemment possible par une dilatation progressive des éléments d'effectuer un raffinement distinct. Cependant, la nécessité de conserver des éléments bien conformés exige en pratique une transition très progressive, transition beaucoup plus lente que l'évolution des gradients qui peuvent passer brutalement d'une zone délicate à une partie beaucoup plus calme. Le résultat est le gaspillage de degrés de liberté par un raffinement excessif dans des zones de transition. Les éléments hiérarchiques sont donc un outil important pour la simulation tridimensionnelle.

Il reste la délicate question : comment obtenir le réseau optimal que ce soit avec ou sans éléments hiérarchiques ? Cette discussion fait l'objet de plusieurs travaux récents afin d'imaginer un raffinement successif et automatique par exemple sur base de l'erreur discrète (Rao 91). Les techniques multi-grilles relèvent en partie de la même philosophie. Dans le présent travail, nous nous sommes cependant limités à des critères de bon sens physique pour dessiner nos maillages.

Considérons les trois approximations de x, y et λ :

$$x^h = \sum_{i=1,N} \Phi_i \, . \, X_i,$$
$$y^h = \sum_{i=1,M} \Psi_i \, . \, Y_i,$$
$$\lambda^h = \sum_{i=1,L} \tau_i \, . \, \Lambda_i,$$

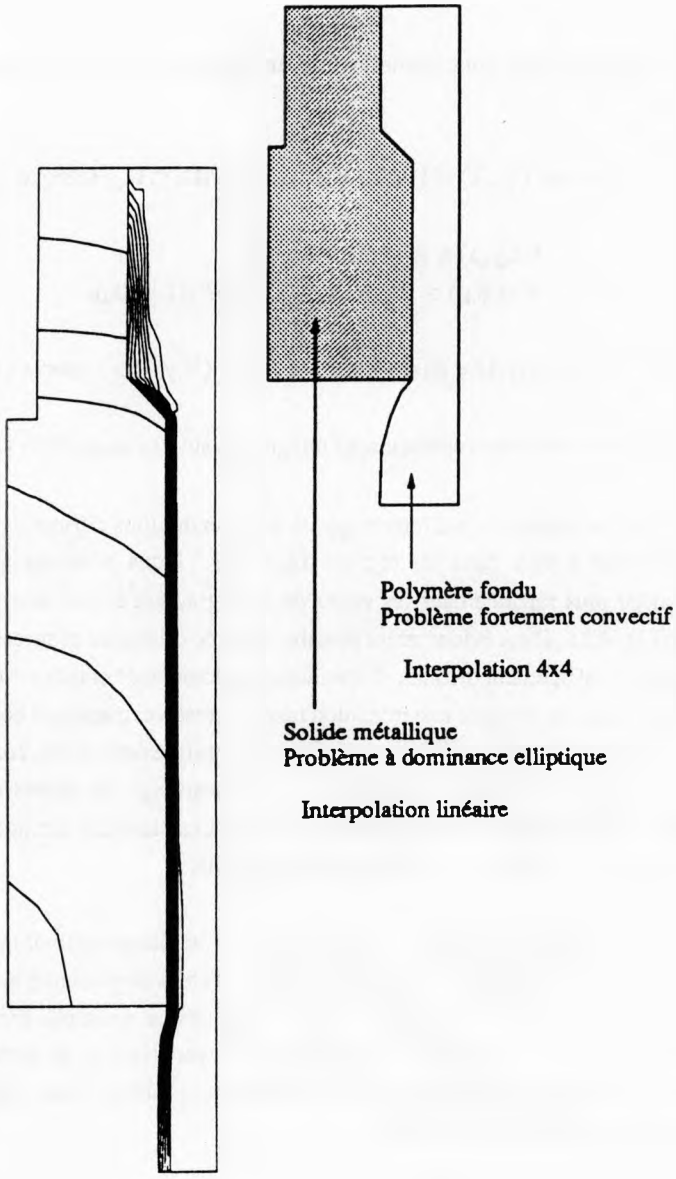


Fig. 4.3 Température au sein d'une extrudeuse et du polymère fondu.

où Φ_i, Ψ_i et τ_i sont les fonctions de forme globale qui appartiennent respectivement à $H_0^1(\Omega_1)$, à $H_0^1(\Omega_2)$ et à $H^0(\Omega_1 \cap \Omega_2)$. Remplacons x, y et λ par x^h, y^h et λ^h dans l'expression de la fonctionnelle et annulons en les variations premières :

$$< \nabla \Phi_i \, . \, \nabla \Phi_j \, X_j > - <<< \Phi_i \; \tau_k \, \Lambda_k >>> = 0,$$
$$<< \nabla \Psi_i \, . \, \nabla \Psi_j \, Y_j >> + <<< \Psi_i \; \tau_k \, \Lambda_k >>> = 0,$$
$$<<< \tau_k \; (\Phi_j \, X_j - \Psi_l \, Y_l) >>> = 0.$$

Nous constatons que le multiplicateur associé à la condition d'interface est la force de contact exercée par une des régions sur l'autre. Une telle manière d'agir reprend évidemment un des atouts des multiplicateurs : la possibilité de moduler le respect de cette condition d'interface par le degré d'interpolation du multiplicateur.

Une autre approche consiste à imposer la condition d'interface par le biais des éléments finis contraints. Dans ce cas, la condition d'interface discrète est imposée de manière essentielle. Si nous supposons que l'interpolation de x est plus raffinée que celle de y, la condition d'interface est intégrée sous la forme des contraintes suivantes :

$$X_j = a_j \, Y_j,$$

où a_j est la valeur des fonctions de forme Ψ_j au noeud i.

Une telle démarche peut à nouveau être généralisée en l'absence de principe variationnel. Cependant, cette procédure n'est bien adaptée en pratique que pour des équations elliptiques (Fig. 4.3). Son application à des équations hyperboliques est limitée en raison des conditions aux limites que l'on peut imposer à une telle équation. En effet, lorsque les caractéristiques de l'équation croisent l'interface en venant de la région d'interpolation de degré moindre, il a été observé que la méthode fonctionne parfaitement, tandis que l'inverse produit des résultats catastrophiques. Cette observation s'explique aisément : le problème devient mal posé pour la région d'interpolation élevée.

4.5. Multiplicateurs, contraintes et problèmes inverses.

Nous présentons un emploi combiné des contraintes et des multiplicateurs de Lagrange dans le cas de problèmes inverses. Nous appellons problème inverse, une formulation où la donnée et le résultat sont inversés par rapport à une formulation classique. Pour expliciter cette définition, nous considérons un exemple simple où un gradient de température est engendré autour d'une résistance chauffante :

- Prédire le champ de température autour d'une résistance chauffante de puissance fixée peut être qualifié de problème direct. C'est ce problème que les numériciens résolvent habituellement.

- Prédire la puissance de cette résistance afin qu'un point soit à température fixée est appellé problème inverse. Dans la pratique, c'est souvent de cette manière que les données sont fournies au numéricien chargé de simuler un processus industriel où la puissance d'un système de chauffage est régulée par le biais d'un thermocouple en un point. La température du thermocouple est connue et la puissance de la résistance est à déterminer.

Une démarche simple consiste à effectuer une série de simulations pour une large gamme de puissances et de sélectionner la valeur qui fournit une température adéquate à l'endroit du thermocouple. Une telle démarche est répétitive et requiert un double schéma itératif en cascade. Si le coût d'une simple simulation est déjà élevé, une telle campagne de simulations est prohibitive. Ce coût global directement proportionnel au nombre d'itérations extérieures requises peut devenir très élevé si la relation entre puissance et thermocouple est délicate.

L'introduction d'un multiplicateur permet de résoudre le problème inverse quasiment pour le coût du problème direct. Nous donnons à la puissance de la résistance le statut de multiplicateur de Lagrange afin d'obtenir la température en un point. Il apparaît ainsi une nouvelle inconnue qu'on associe à une nouvelle équation qui impose l'égalité de la température en un point. Cette technique permet de résoudre directement le problème complet et évite les itérations extérieures du type "essai erreur" présentes dans la plupart des méthodes classiques.

Dans le cas des simulations d'écoulements à surfaces libres, nous baptisons problème direct. la prédiction de la forme d'un extrudat sortant d'une filière. Jusqu'à présent, nous avions construit une méthode numérique qui permettait de résoudre ce problème direct. Cependant, le problème du concepteur de filière est le problème inverse correspondant : dessiner l'outil de l'extrudeuse pour obtenir un extrudat donné. Dans l'article qui suit et qui est soumis à publication dans *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, nous proposons une méthode originale pour résoudre le problème inverse. Des résultats complémentaires seront publiés dans les *Proceedings of XIth International Congress of Rheology*.

INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, in press (1992)

DIE DESIGN : AN IMPLICIT FORMULATION FOR THE INVERSE PROBLEM

by

Vincent LEGAT

APPLIED MECHANICS
UNIVERSITE CATHOLIQUE DE LOUVAIN
Place du Levant, 2
B-1348 LOUVAIN-LA-NEUVE, BELGIUM.

Jean-Marie MARCHAL

POLYFLOW S.A.
Place de l'Université, 16
B-1348 LOUVAIN-LA-NEUVE, BELGIUM.

Keywords

3-D extrusion, moving boundaries, die design, remeshing, finite elements, free surfaces.

Summary

Let us call a Direct Extrusion Problem (DEP) the problem of finding the shape of the extrudate coming out of a die of prescribed shape. An implicit finite element formulation of the DEP which is geometrically general and for which a Newton-Raphson technique can be implemented has recently be proposed by Legat and Marchal [1]. However, the problem posed to the die designer is frequently the Inverse Extrusion Problem (IEP), i.e. finding the die shape which produces extrudate of prescribed shape. This paper presents an extension of our original method for solving the IEP which avoids the "trial and error" iteration on the die geometry itself.

The advantage of the formulation consists in its capability to handle complex geometries, and in its low cost because the CPU time and the memory required to solve the IEP are almost identical to those of the DEP. We present benchmark results on squares and rectangles, and new results obtained in geometries involving multiple corners. For an octagonal shape, we also consider the case of a power-law fluid.
For all results presented in this paper surface tension has not been included.

1. Introduction

Let us consider a free surface flow problem in a three-dimensional geometry. For the sake of simplicity, the flow is assumed to be isothermal and the fluid is Newtonian. Let us assume that an algorithm is available to solve the Direct Extrusion Problem. If the extrudate shape does not correspond to the desired profile, the die designer will naturally adapt the geometry of the die in order to correct the extrudate shape. An outer iteration (above the solution of the DEP) will be introduced and the die geometry will be modified according to the designer's intuition or on the basis of an interpolation between the prescribed shape and the simulation result.

This Inverse Extrusion Problem is so important from a technical point of view that many authors who presented numerical solutions for the DEP ([2], [3], [4], [5]) also considered the IEP. In [3], an outer iteration on the die geometry above the solution of the DEP has been introduced . In References [2], [4] and [5], the use of an outer iteration on the free surface position itself (streamline integration) allows for an inverse tracking of the characteristics (v for the DEP, -v for the IEP). For this backward tracking, the prescribed extrudate shape becomes a boundary condition of the problem. However, difficulties occur near the die lip, where the fluid velocity is imposed to be zero. In an implicit technique based on a Galerkin (or on a Streamline Upwind/Petrov Galerkin) formulation of the kinematic condition, removing the initial data of the kinematic condition at the die lip makes the tangent matrix singular and prevents the use of the method.

In order to formulate the IEP correctly in terms of velocity, pressure and displacement, we replace the initial data on the free surface at the die lip by the constraint that the shape of the extrudate is prescribed at the end of the free surface. The method is inspired from a technique frequently used in the field of numerical solutions of ODE's. To illustrate our method, let us consider a second order ODE written as :

- Find f(x) such that :

$$\ddot{f}(x) = A(f(x)), \qquad \forall\, x \in [0,1]. \tag{1}$$

Equation (1) is subject to two boundary conditions, which can be given at both ends of the interval, or at one end only. Let us assume that we want to solve numerically (1) subject to the conditions :

$$f(0) = f_0\,, \tag{2}$$

$$f(1) = f_1\,, \tag{3}$$

and that we use a numerical technique which requires f and $\dot{f}$ in x = 0. This case occurs for example with most methods of the Runge Kutta family which have the advantage of not requiring to solve a linear system. A classical way to solve (1) subject to (2) and (3) is then to estimate the value of $\dot{f}(0)$, and to use a shooting method in order to satisfy (3) at convergence of algorithm. An alternative is to introduce the value of $\dot{f}(0)$ as a variable of the problem (in the previous formulation $\dot{f}(0)$ is a data), and to write the constraint (3) as an equation for $\dot{f}(0)$. In this method, the new variable which replaces the data $\dot{f}(0)$ is a multiplier; this numerical technique is cost effective with respect to the shooting method, because the additional variable can be eliminated algebrically.

Our method is inspired from the scheme described above, provided one replaces the data $\dot{f}(0)$ by the initial position of the free surface at the die lip, and provided one introduces a smooth variation of the die shape in the direction of extrusion, in order to look for a solution of the IEP in a class of technically acceptable dies. This method is certainly cost effective for the IEP formulated in terms of velocity, pressure and displacements, because the number of velocity and pressure variables is superior to the number of position variables, which is in turn superior to the number of multipliers required to describe the die section.

Strictly speaking, the new variable is not a Lagrange multiplier because we do not solve a constrained optimization problem. But it is impossible for the free surface problems to create an optimization formulation in the Lagrangian sense [6].

However, in the extended sense of the term, we consider the new variable as a multiplier which has been introduced in order to impose weakly the boundary condition at the exit. A similar approach has previously be used in free surfaces problems in order to impose weakly kinematic and dynamic conditions (see [7][8]. In view of the impossibility to have an optimization formulation for the Navier-Stokes equations with free surfaces, we consider only an extension based on Galerkin formulation. But, the definition of the multipliers is inspired by the general optimization approach.

Section 2 formulates the IEP and introduces a finite element representation, whereas section 3 presents the remeshing techniques used in order to minimize mesh deformations. In section 4 and 5, we describe benchmark results on square and rectangular geometries. Then we demonstate the robustness of the method for several geometries involving abrupt corners.

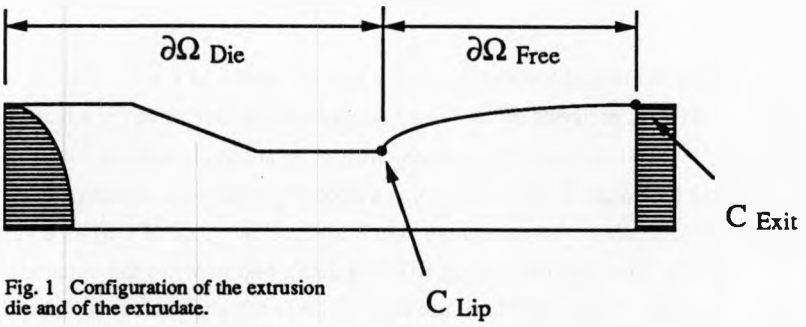


Fig. 1 Configuration of the extrusion die and of the extrudate.

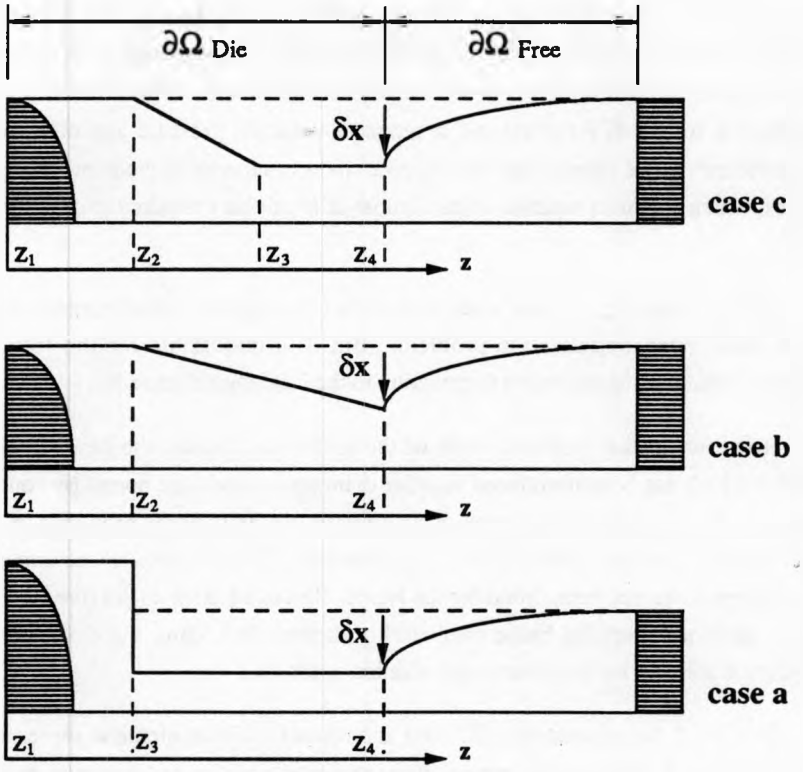


Fig. 2 Die design functions for the adaptative die section.

2. Formulation of the Inverse Extrusion Problem

We simulate steady three-dimensional isothermal free surface flows of a Newtonian fluid (or a Generalized Newtonian fluid). Let Ω be the flow domain, of boundary $\partial\Omega$. The geometry of the problem is schematically defined in Fig. 1, which is two-dimensional for the sake of clarity although all problems presented in this paper are three-dimensional.

Let (v,p) be respectively the velocity and the pressure of the problem, elements of the function space VxP defined on the flow domain Ω. Let h be the amplitude of the displacement of the free surface $\partial\Omega_{Free}$ along the **d** direction, so that the displacement $\delta\mathbf{x}$ of a point of the free surface is given by :

$$\delta\mathbf{x} = h\ \mathbf{d}, \qquad \text{on } \partial\Omega_{Free}. \qquad (4)$$

The direction **d** can vary from point to point in order to describe the displacement allowed to the free surface, but **d** is given a priori and is not a variable of the problem. In practice, **d** is calculated as the normal to the initial guess of the free surface. Functions h belong to a function space H. Along lines of discontinuities of the normal, two directions d_i and two amplitudes h_i are defined in order to handle correctly the motion of corners. The double definition allows corners to move freely in planes orthogonal to the direction of extrusion. More precisely, we are not consider one field h but a series of fields h_i belonging to a series of function spaces H_i limited to "faces" of the free surface as explained in [1]. Let $\partial\Omega_{Die}$ be the die boundary itself, on which a zero velocity is prescribed, and let C_{Lip} be the curve representing the die lip. Let C_{Exit} be the curve located at the intersection between the free surface and the outlet section. We introduce a generalized Lagrange multiplier g belonging to G, which is a space of functions defined over C_{Exit}. The function g defines the shape of the die, and is adapted in order to satisfy the constraint on the extrudate shape on C_{Exit} at the end of the free surface. If C_{Exit} and C_{Lip} are topologically identical, the deformation of the die shape can be naturally defined as :

$$\delta\mathbf{x} = f(z)\ g\ \mathbf{d}, \qquad \text{on } \partial\Omega_{Die}. \qquad (5)$$

In (5), z represents the direction of extrusion, and we have introduced the hypothesis of proportional adaptation in the z direction. The die design function f(z) is of course a data of the problem and describes the transition between the prescribed inlet section and the die lip. To illustrate (5), let us consider cases "a", "b" and "c" in Fig. 2.

The function f(z) is defined as :

$$f(z) = 0, \qquad \text{on } [z_1,z_2],$$

$$f(z) = \frac{z-z_2}{z_3-z_2}, \qquad \text{on } [z_2,z_3],$$

$$f(z) = 1, \qquad \text{on } [z_3,z_4],$$

$$\text{with } z_1 \le z_2 \le z_3 \le z_4. \qquad (6)$$

The constants z_2, z_3 and z_4 are different for case "a". For case "b" $z_3 = z_4$, and for case "c" $z_2 = z_3$. It must be noted that z_1 cannot be equal to z_2, if we want to have compatibility between the die modification and the imposed inlet velocity profile. It is clear the the die functions can be more complex in order to consider more sophisticated real dies. It is only one limitation in the mesh topology : the number of nodes on C_{Exit} and C_{Lip} must be equal.

If the flow domain boundary $\partial\Omega$ is partitioned into $\partial\Omega_{Dirichlet}$ (the boundary part on which Dirichlet boundary conditions apply) and $\partial\Omega_{Neumann}$ (the boundary part on which homogeneous Neumann boundary conditions apply), the DEP and IEP are respectively formulated as :

- Find $(v, p, h) \in V \times P \times H$ such that :

$$\nabla.(\eta\bar{\nabla}v) - \nabla p = 0, \qquad \text{on } \Omega, \qquad (7)$$

$$\nabla.v = 0, \qquad \text{on } \Omega, \qquad (8)$$

$$v.n = 0, \qquad \text{on } \partial\Omega_{Free}, \qquad (9)$$

together with :

$$h = 0, \qquad \text{on } C_{Lip}, \qquad (10)$$

$$v = \hat{v}, \qquad \text{on } \partial\Omega_{Dirichlet}, \qquad (11)$$

$$(\eta\bar{\nabla}v - pI).n = 0, \qquad \text{on } \partial\Omega_{Neumann}. \qquad (12)$$

- Find $(v, p, h, g) \in V \times P \times H \times G$ such that :

$$\nabla.(\eta\bar{\nabla}v) - \nabla p = 0, \qquad \text{on } \Omega, \qquad (13)$$

$$\nabla.v = 0, \qquad \text{on } \Omega, \qquad (14)$$

$$v.n = 0, \qquad \text{on } \partial\Omega_{Free}, \qquad (15)$$

$$h = 0, \qquad \text{on } C_{Exit}, \qquad (16)$$

together with :

$$h = g, \qquad \text{on } C_{Lip}, \qquad (17)$$

$$v = \hat{v}, \qquad \text{on } \partial\Omega_{Dirichlet}, \qquad (18)$$

$$(\eta\bar{\nabla}v - pI).n = 0, \qquad \text{on } \partial\Omega_{Neumann}. \qquad (19)$$

where $\bar{\nabla}\mathbf{v}$ denotes the symmetric part of the velocity gradient, η is the fluid viscosity, and $\mathbf{n}$ is the unit normal vector pointing out of the domain Ω.

In the IEP, equation (16) guarantees that the extrudate shape matches the prescribed shape which is given as initial guess, *and is the equation for* g. Equation (17) replaces the data at the die lip, *and is written as a constraint for* h. It must be noted that equation (17) is a valid boundary condition only if C_{Lip} and C_{Exit} are topologically identical. In addition, standard Neumann and Dirichlet boundary conditions apply in the entry section where a fully developed velocity profile is imposed, on planes of symmetry and on the die wall where the velocity vector is imposed to zero.

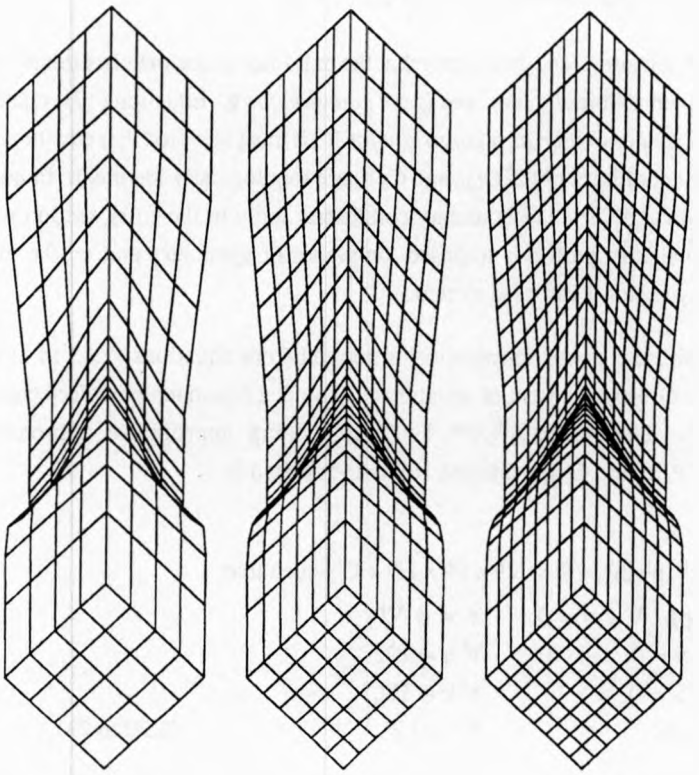
The IEP finite element formulation is derived from equations (2.13 to 19), after integration by the Green's theorem of equation (13), so that Neumann boundary conditions appear naturally. The spaces V^h, P^h, H^h and G^h being appropriate approximation subspaces for V, P, H and G, the discrete IEP is formulated as :

- Find $(v^h, p^h, h^h, g^h) \in V^h \times P^h \times H^h \times G^h$ such that :

$$
\begin{aligned}
&< \eta\bar{\nabla}\mathbf{v} - p\mathbf{I} ; \bar{\nabla}\mathbf{w} > = 0, \qquad \forall\, \mathbf{w} \in V^h,\\
&< \nabla\mathbf{v} ; q > = 0, \qquad \forall\, q \in P^h,\\
&< \mathbf{v}.\mathbf{n} ; k > = 0, \qquad \forall\, k \in H^h,\\
&< h ; l > = 0, \qquad \forall\, l \in G^h. \qquad \text{(2.20 to 23)}
\end{aligned}
$$

In equations (2.20 to 23), $< >$ stands for the L_2 scalar product on Ω, on $\partial\Omega_{Free}$ or on C_{Exit}.; the space V^h takes the Dirichlet boundary conditions (18) into account and the displacement h is constrained by g at the lip of the extrusion die.

As in any saddle-point problem, the selection of interpolation subspaces V^h, P^h, H^h and G^h is critical. Interpolation of multipliers must be choised in order to satisfy so-called Ladyxzhenskaya-Brezzi-Babuska. Indeed, those discrete LBB conditions can be seen as a critical requirement in the stability of mixed finite element methods. For V^h and P^h, we have selected the Q2-C0 / Q1-C0 element (or the Q1-C0 / Q0-C-1 element). The selection of shape functions for H^h is somewhat more difficult, as no theoretical results are available for this non-linear problem. In the absence of surface tension, we have observed that the linear approximation for H^h works better than the quadratic one, in the sense that wiggles in the free surface and divergence of the iterative scheme have sometimes been observed with quadratic shape functions. However all results of sections 4 and 5 have been obtained with both bi-linear and bi-quadratic position shape functions.



mesh I mesh II mesh III

Fig. 3 Finite element meshes I to III
used for testing the accuracy of method (square extrudate).

Functions in G^h are equal to the restriction on the die exit C_{Exit} of functions of H^h, i.e. those functions are either piecewise linear or piecewise quadratic. The approximation subspaces H^h and G^h are finally divided into N_F faces, generating H_i^h and G_i^h, for taking into account the presence of corners. This procedure is explained in [1].

3. Remeshing

The position of the boundary comes into (2.20 to 23) by means of the relation (4) on the free surface $\partial\Omega_{Free}$ and (5) on the die boundary $\partial\Omega_{Die}$. In order to have acceptable mesh deformations, it is necessary to adapt the position of the interior nodes as a function of the boundary nodes. If we use a linear relationship between the displacement of the interior and boundary nodes, the remeshing of the interior nodes can be coupled to the system, and a full Newton-Raphson technique can be derived.

In all examples, we have used the remeshing rule developed in [1], which is based on the Euclidian distance between the boundary nodes and the interior nodes. This remeshing rule is applied in the whole flow domain Ω, and is implemented as follows.

First, we divide Ω into a series of "planes", logically orthogonal to the direction of extrusion. Interior nodes belong to one and only one planar section Ω_R, and the traces in each plane of the three-dimensional mesh are topologically identical.

Secondly, a one-dimensional remeshing rule is used on boundary segments $\partial\Omega_R$ of each plane Ω_R, such that the points are moved tangentially as a linear function of the displacement of the extremities of the segment.

Finally, an Euclidian distance rule relates the interior displacements to the boundary displacements in each remeshing section Ω_R. Formally the position of an interior node x_i is written as :

$$x_i^{new} = x_i^o + \sum_{j=1,N} w_{ij} (x_j^{new} - x_j^o), \qquad (24)$$

where j is an index describing the 2 segment extremities (for a one-dimensional rule on $\partial\Omega_R$) or all nodes located on $\partial\Omega_R$ (for a two-dimensional rule on Ω_R). The weight w_{ij} is a function of the Euclidian distance between node i and node j:

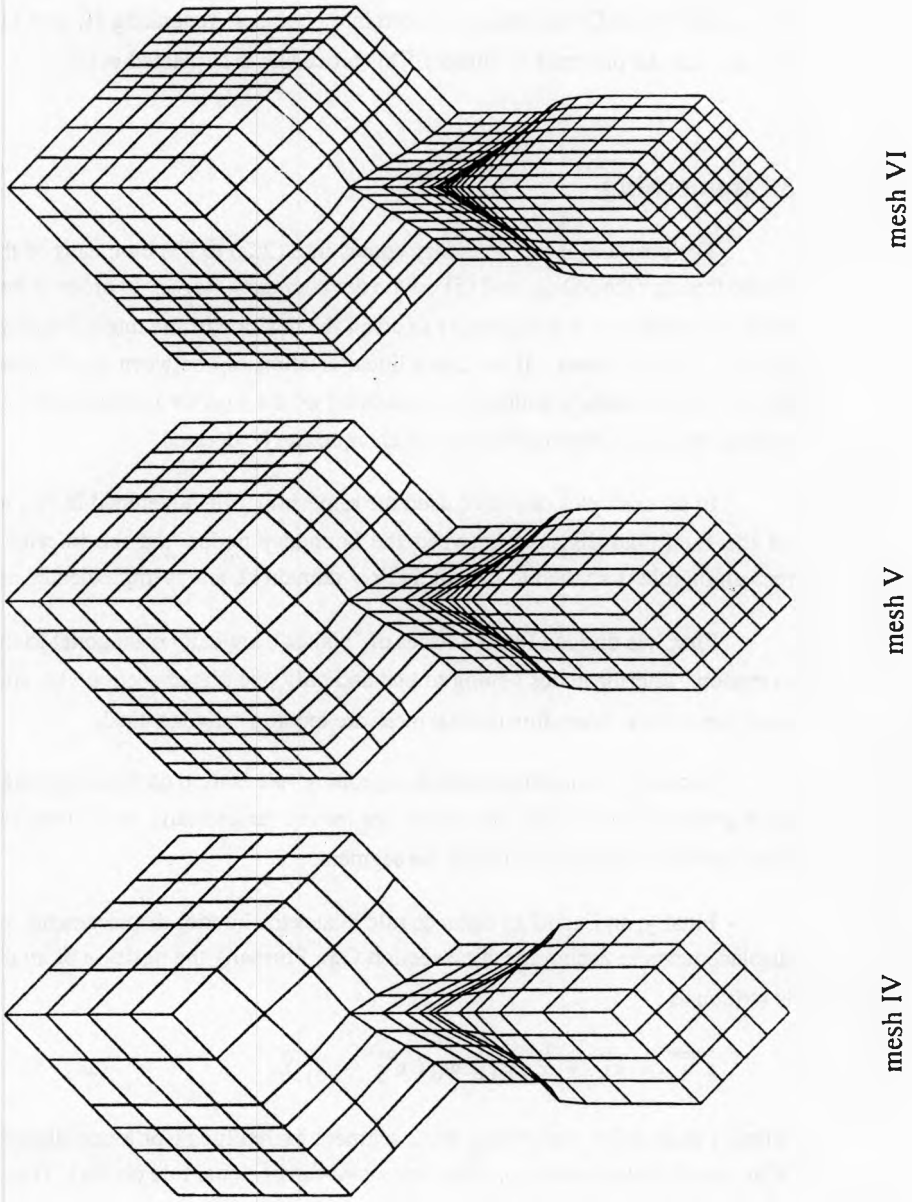


Fig. 4 Finite element meshes IV to VI
used for testing the accuracy of method (square extrudate)

$$w_{ij} = \frac{\sum_{k=1,N} | x_i^o - x_k^o |_2}{N \cdot | x_i^o - x_j^o |_2} \quad . \qquad (25)$$

This rule has the advantage of not requiring any particular logical organization of the mesh into each remeshing section Ω_R. In addition, the Euclidan distance remeshing rule associated with the priority rule allows to deform the mesh smoothly. Those rules are described in [1].

4. A benchmark problem : the square section

Computing the die geometry which produces a square profile is a benchmark problem which has been considered by Tran-Cong and Phan-Thien [2], Yokoi and Scriven [4], Wambersie and Crochet [3]. We have tested our technique on this problem with meshes I to III, for which the die design function is described by :

$$z_1 = 0, \qquad z_2 = 2, \qquad z_3 = 6, \qquad z_4 = 8.$$

In order to evaluate the effect of the upstream geometry upon the extrudate shape, we have also generated meshes IV to VI which correspond to the following die design function :

$$z_1 = 0, \qquad z_2 = z_3 = 4, \qquad z_4 = 6.$$

The die length is equal to 8 for meshes I to III and is equal to 6 for meshes IV to VI. The extrudate length is 4 for all meshes. The square section (final product) has a side length equal to 2. Inflow geometry of meshes IV to VI has a side length equal to 4 and is also identical to the geometry used by Wambersie and Crochet [3]. Fig. 3 and Fig. 4 show the meshes while Fig. 5 shows the die lip section and the final extrudate section for the meshes I to III.

In order to evaluate quantitatively the swelling effect, we introduce the swelling ratio along the plane of symmetry Sw_m and the diagonal swelling ratio Sw_d . Referring to Fig. 6, let 2M and 2D be respectively the side and the diagonal of the square extrudate profile. We define the length of the die in the planes of symmetry at the die lip by 2m, whereas the diagonal of the die is defined by 2d. The swelling ratios are defined as :

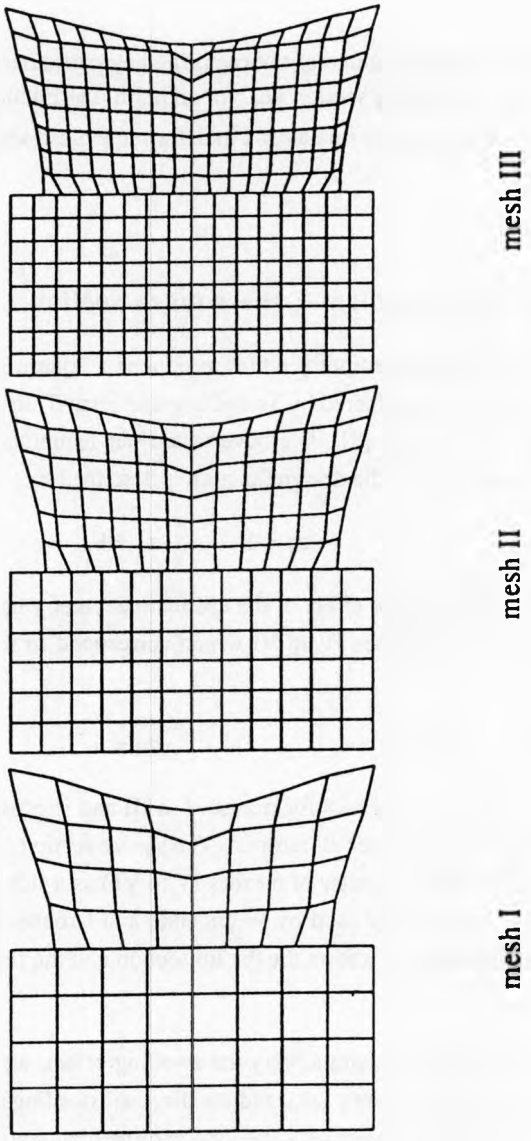


Fig. 5 Comparison between the die lip and the extrudate section for meshes I to III.

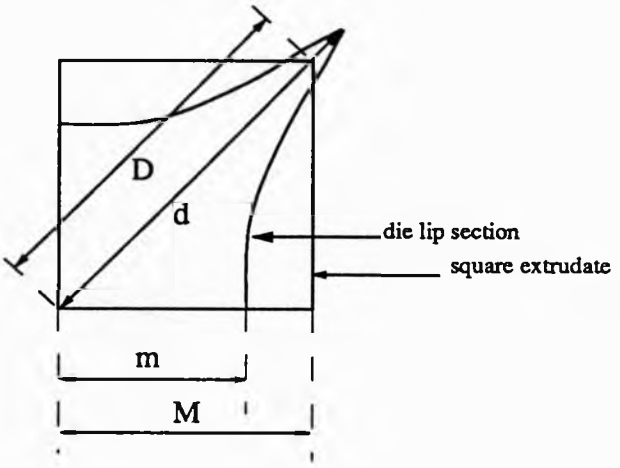


Fig. 6 Typical dimensions for the square extrudate.

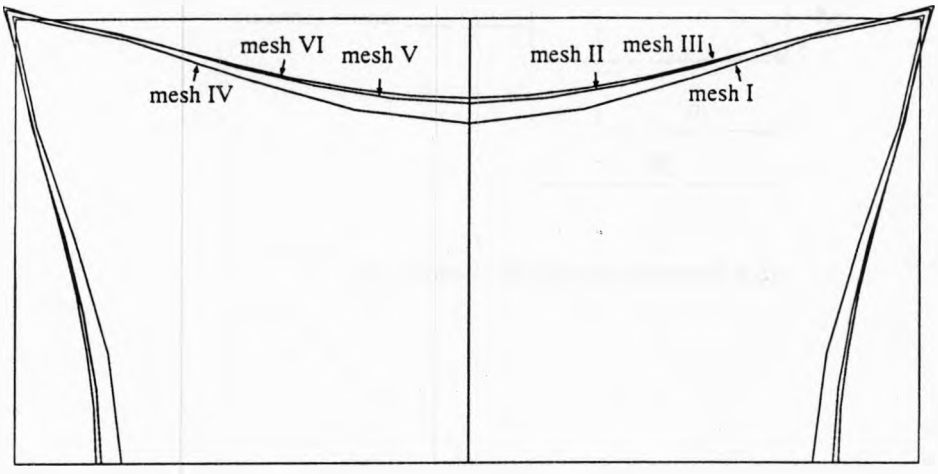


Fig. 7 Mesh refinement analysis for the square extrudate.

$Sw_m = (M - m) / M,$

$Sw_d = (D - d) / D.$

Table I reports the total number of variables in the problem and swelling ratios. It appears from Table I and Fig. 7, that convergence with mesh refinement is excellent between meshes II and III. The meshes I and IV are coarse, but their results are qualitatively good. The results of meshes IV, V, VI exactly agree with the results of meshes I, II, III although the die function is different in the latter cases. This can be explained because the length of the constant shape section $z_4 - z_3$ is equal to 2 for both meshes, and that the upstream section has very little influence upon the extrudate shape as long as $z_4 - z_3$ is bigger than a typical dimension of the section. We have found that a length of 2 is perfectly adequate in order to avoid dependencies of the extrudate shape upon the upstream geometry.

Table I Characteristic dimensions of finite element meshes and swelling ratios

Mesh	Nodes	Elements	Degrees of freedom	Sw_m	Sw_d
I	425	256	1041	0.236	-0.004
II	1078	756	3110	0.190	-0.017
III	2187	1664	6851	0.179	-0.021
VI	2304	1750	7058	0.179	-0.021
V	1237	873	3455	0.190	-0.017
IV	495	304	1113	0.237	-0.004

Results of Tran-Cong and Phan-Thien [2], have not been included in Table I, because they have used die functions for which $z_4 - z_3 = 0$ (i.e. a linear variation up to the die lip), and in that case the shape of the upstream section has a strong influence upon the swelling. Yokoi and Scriven [4], Wambersie and Crochet [3] do not mention numerical values, but their shapes graphically agree with ours.

Those solutions converge quadratically up to a relative precision of 10^{-6} in 5 to 6 iterations.

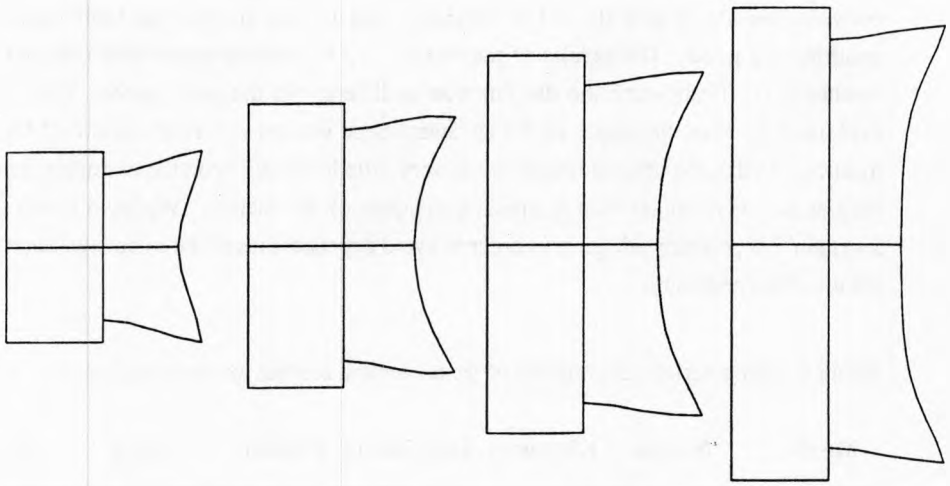


Fig. 8 Cross-section of dies (right) for generating rectangular extrudates (left).

5. Numerical results with complex geometries

5.1. Rectangular profiles.

For a Newtonian fluid, we report die sections which produce rectangular extrudates for different aspect ratios. As a difference with the square section, an appropriate definition of two geometrical degrees of freedom around the corner is essential since one does not know a priori in which direction the corner will move.

In all cases, die functions have been choosen as :

$z_1 = 0, \qquad z_2 = 2, \qquad z_3 = 6, \qquad z_4 = 8.$

A comparison between the extrudate shape (left) and the die section shape (right) is given in Fig. 8. Quadratic convergence of the iteration scheme has been observed.

5.2. Octagonal profile.

Most polymers present a shear-thinning behaviour, which can be described by a dependency of the viscosity η upon the shear rate $\dot{\gamma}$ of the power-law type :

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_0 \dot{\gamma}^{m-1}.$$

This is valid as long as memory effects are not dominant. For a Newtonian fluid, the power-law index is equal to 1, whereas for many polymers it lies between 0.5 and 0.2. We know that in the presence of a low power-law index, the velocity distribution will be relatively flat across the die section, a large velocity gradient existing near the wall of the die where the velocity vanishes. This velocity distribution will reduce swelling effects. We have analyzed the shape of the die section which produces an octagonal extrudate for m = 1, m = 0.8, m = 0.6, m = 0.4 and m = 0.2. Let us also emphasize that the no-slip boundary condition has been used at the die wall, and that this hypothesis is probably not verified in many extrusion applications.

The octogon side being equal to 1, we have used the following die function :

$z_1 = 0, \qquad z_2 = 2, \qquad z_3 = 6, \qquad z_4 = 8.$

The total die length is equal to 8, the extrudate length being equal to 4. The mesh used for those simulations is shown in Fig. 9. We have used symmetry with respect to the planes x = 0 and x = y, and discontinuity of the direction **d** has been used for the corner.

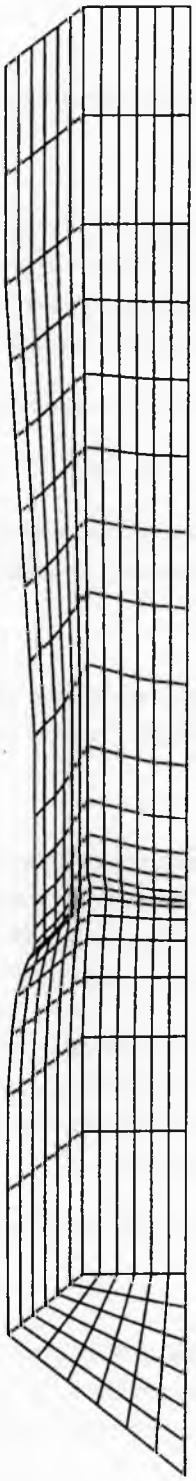


Fig. 9 Finite element meshes used for a octogonal extrudate.

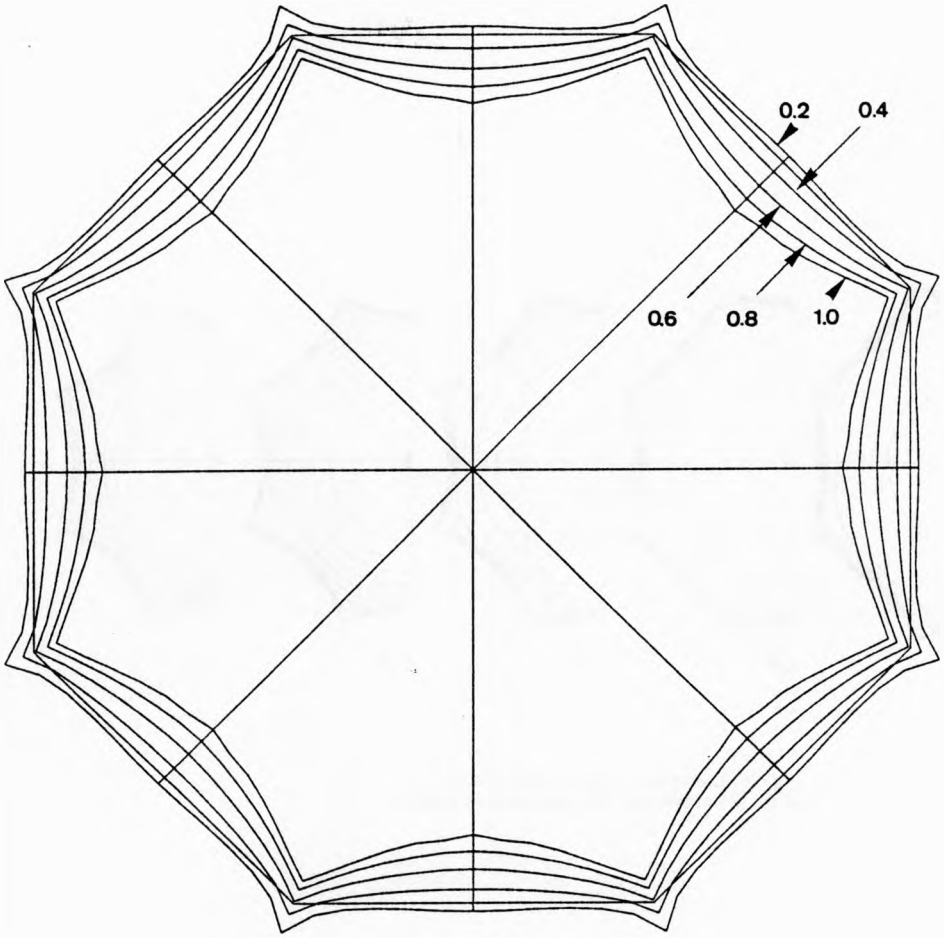


Fig. 10 Die cross-sections as a function of the power law index for a octogonal extrudate.

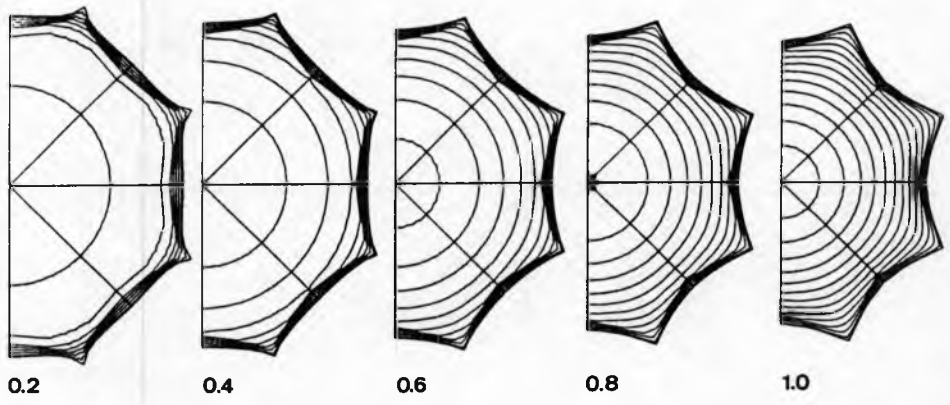


Fig. 11 Die velocity profile as a function of the power law index for a octogonal extrudate.

Die section shapes are reported in Fig. 10 for the different values of the power law index. It can be observed that the shear-thinning behaviour indeed reduces the swelling, but that the effect of the corner remains important even for low values of the power law index. For very low values of the power-law index (0.3 and lower), sharp velocity boundary layers require meshes finer than the mesh shown in Fig. 9, and a Picard iteration scheme on $\eta(\dot{\gamma})$ must be used to obtain results at m = 0.2. But a full Newton-Raphson scheme can be used for the indices between 1.0 and 0.4, and a quadratic convergence is then observed.

To understand the effect of the uniformity of the velocity distribution upon the swelling, contour lines of the normal velocity are shown in Fig. 11 for different power-law indices.

5.3. Star-like profile.

For a Newtonian fluid, the die section which produces a "star-like" extrudate is shown in Fig. 12. Shrinkage effects are large near the reentrant corner A, where two geometrical degrees of freedom are defined as in the previous example. Results has also been obtained in 5 to 6 iterations. For angles α smaller than 90° and for a Newtonian fluid, we have observed difficulties in obtaining solutions to the IEP.

5.4. Cross-like profile.

The method presented in this paper has the capability to handle profiles with multiple corners. We have therefore computed the IEP for an extrudate section which has the shape of a cross, and involves 12 corners. We have also used symmetry with respect to the planes x = 0 and x = y, and discontinuity of the direction **d** at the corner A. The fluid is Newtonian.

In all previous Newtonian cases, we have started the Newton-Raphson scheme from a solution obtained on the fixed geometry, the normal velocity boundary condition being dropped on the free surface. In the present case, divergence of the iterative scheme has been observed, and we had to find an initial solution by solving 3 explicit iterations on the free surface position. The Newton-Raphson scheme can then be initiated, and quadratic convergence is observed. The total number of iterations in order to reach a relative precision of 10^{-6}, is equal to 8 (3 explicit iterations and 5 implicit iterations). A comparison between the die and extrudate shape can be found in Fig. 13. For large aspect ratios, we have not been able to find a solution to the IEP with a Newtonian fluid.

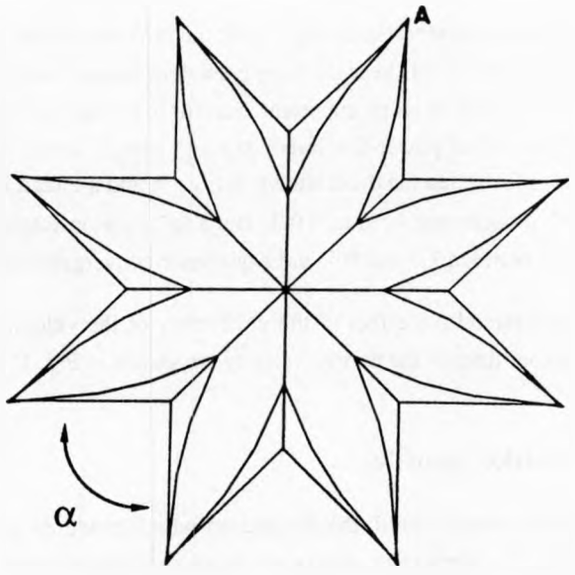


Fig. 12 Die cross-section for a star-like extrudate (Newtonian fluid).

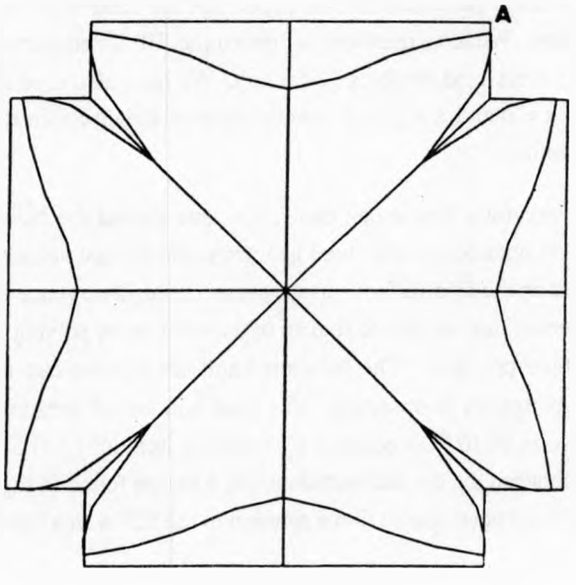


Fig. 13 Die cross-section for a cross-like extrudate (Newtonian fluid).

6. Conclusion

We have presented a numerical scheme to solve the Inverse Extrusion Problem by means of an implicit Newton-Raphson iterative technique. Discontinuity of the direction of displacement, as well as a remeshing technique based on the Euclidian distance have been used in the extrudate section. The same remeshing technique has been used in the adaptive section of the die.

The method based on an implicit formulation avoids the "trial and error" iterations classically used to solve the IEP. Therefore, the cost of the IEP is (almost) identical to the cost of the DEP, the number of additional variables being only marginal.

Several profile shapes have been presented. The results show that for a Newtonian fluid with a no-slip boundary condition at the die wall, the die section strongly differs from the extrudate section. The effect of shear thinning has also been analyzed for an octagonal extrudate. Although less swelling is expected for a shear thinning fluid, results show that the die section shape still differs from the section of the extrudate, especially in the vicinity of corners.

The method can be directly extended to non-isothermal problems and slipping at the wall can easily be introduced provided that the relationship between the shear stress and the tangential velocity is known.

7. Acknowledgements

V. Legat wishes to acknowledge a scholarship from the Belgian "Fonds National de la Recherche Scientifique". The results presented in this paper have been obtained within the framework of Interuniversity Attraction poles initiated by the belgian State, Prime Minister's office, Scince Policy Programming.

8. References

[1] V. Legat, J.M. Marchal "Prediction of Three-Dimensional General Shape Extrudates by an Implicit Iterative Scheme", Int. J. Numerical Methods in Fluids., 14, 609-625 (1992).

[2] T. Tran-Cong, N. Phan-Thien "Die Design by a boundary element method", J. Non-Newtonian Fluid Mech., 30, 37-48 (1988).

[3] O. Wambersie, M.J. Crochet "Transient Finite Element Method for calculating Steady State Three-Dimensional Free Surfaces", Int. J. Numerical Methods in Fluids., 14, 343-360 (1992).

[4] T. Yokoi, L.E. Scriven "Profile Extrusion and Die Shape Designed by Galerkin's Method with Streamline-Adapted Basis Functions", J. Non-Newtonian Fluid Mech. (submitted)

[5] K.R.J. Ellwood, T.C. Papanastasiou, J.O. Wilkes "Three-Dimensional Streamlined Finite Elements : Design of Extrusions Dies", Int. J. Numerical Methods in Fluids, 14, 13-24 (1992)

[6] B.A. Finlayson,
Existence of Variational Principles for Navier-Stokes Equations,
Phys. Fluids, 15, 963 (1982).

[7] I. Babuska,
The Finite Element Method with Lagrangian Multipliers,
Numer. Math., 20, 179-192 (1973).

[8] D. Berghezan, F. Dupret,
Numerical Solution of Stratified Coating Flow by a Variational Method,
J. Comp. Physic, (in press) (1992).

PROCEEDINGS OF THE XIth INTERNATIONAL CONGRESS ON RHEOLOGY, BRUSSELS (1992)

THREE-DIMENSIONAL EXTRUSION : AN IMPLICIT FORMULATION FOR GENERALIZED NEWTONIAN FLUIDS

Vincent LEGAT

APPLIED MECHANICS
UNIVERSITE CATHOLIQUE DE LOUVAIN
Place du Levant, 2
B-1348 LOUVAIN-LA-NEUVE, BELGIUM.

and

Jean-Marie MARCHAL

POLYFLOW S.A.
Place de l'Université, 16
B-1348 LOUVAIN-LA-NEUVE, BELGIUM.

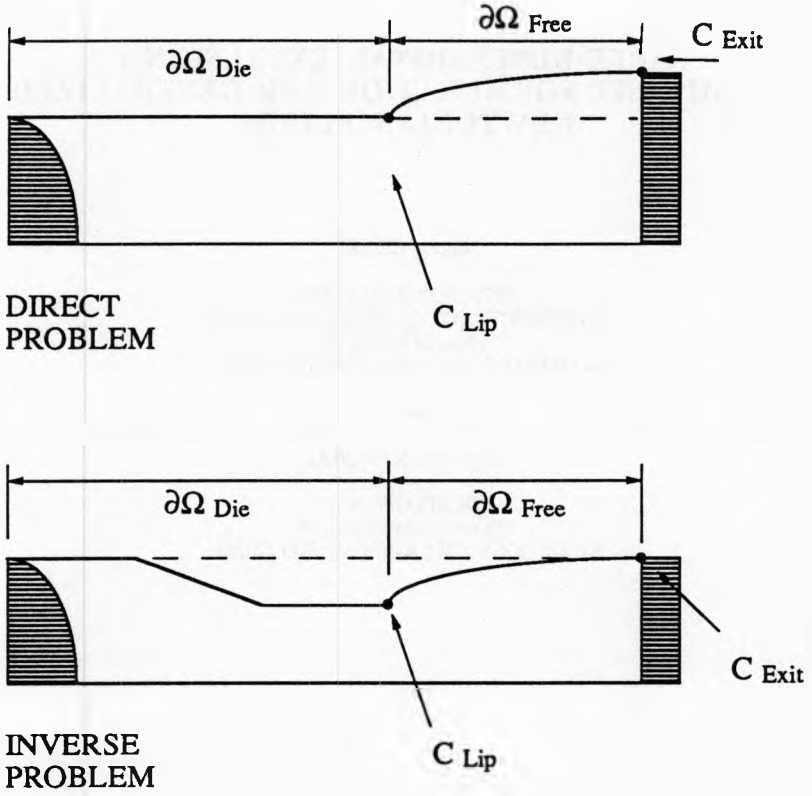


Fig. 1 Direct and Inverse Problems.

1. Introduction

Implicit Finite Element techniques for solving three-dimensional free surface problems in complex geometries have recently been proposed by Legat and Marchal. A first publication [1] addresses the Direct Extrusion Problem in the absence of surface tension. A method is proposed to calculate the shape of the extrudate on the basis of a known die geometry.

A second paper [2] is relative to the Inverse Problem which consists of finding the die geometry that produces an extrudate of prescribed shape. We have developed an original method which is able to solve the Inverse Extrusion Problem while avoiding "trial and error" iterations on the die geometry. The method is geometrically general. In particular, the die section shapes may be complex, while very few topological restrictions apply on the mesh. The remeshing of the interior nodes is well adapted to a large class of extrusion problems. In ref. [2], the method is fully implicit and does not include surface tension, the iterative scheme being of Newton-Raphson's type. Power law as well as Newtonian fluids have been considered.

In this paper, we use the method presented in ref. [2] to solve Inverse Extrusion Problems for power law fluids. Two geometries are considered, each of those including abrupt corners. Surface tension has been introduced in order to analyze its effect upon the extrudate shape for the Direct and Inverse Problems. In particular, the effect of surface tension upon the presence of corners is considered.

2. Direct and Inverse problems

Let us consider the numerical techniques presented in ref. [1] [2] for the Direct and Inverse Problems respectively. We refer to Fig. 1. for a schematic two-dimensional description of the free surface problem.

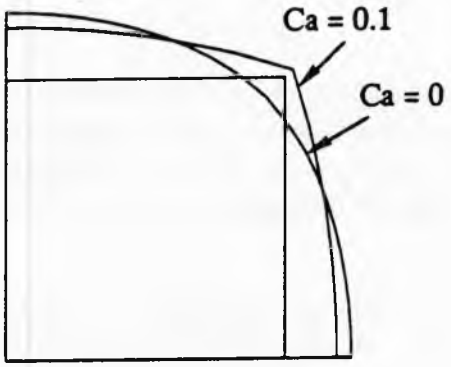


Fig. 2 Extrudate shape for a square die.

Fig. 3 Mesh used for the Direct Problem.

We solve the (Generalized) Navier-Stokes equations together with kinematic conditions on free surfaces. Two geometrial degrees of freedom as well as two kinematic conditions have been introduced along corners, in order to handle their displacement in planes othognal to the direction of extrusion. For the Direct Problem a vanishing displacement at the die lip C_{LIP} is imposed as a boundary condition for the kinematic condition. For the Inverse Problem, this vanishing displacement can no longer be introduced along the line C_{LIP}. We introduce an additional variable, which stands for the displacement of the die lip. Due to the introduction of this Lagrange multiplier, one is allowed to impose a zero displacement at the end C_{EXIT} of the extrudate where the shape is prescribed.

We look for solutions of the Inverse Extrusion Problem within a peculiar class of dies. The shape of the die cross section is continuously adapted from a constant inlet section to the unknown die lip section (which is result of the simulation). In all sections where the positions of the boundary nodes are updated, we remesh the interior nodes according to an Euclidian distance rule which is described in ref. [1]. A full Newton-Raphson scheme is implemented in order to allow for quadratic convergence rate.

3. Surface Tension

The classical Euler-Lagrange formulation of surface tension correlates normal force on the free surface f_N to the mean radius of the curvature R of the surface :

$$f_N = \sigma R^{-1}, \qquad (1)$$

where σ is the surface tension coefficient.

However form (1) of the surface tension force cannot be used as such in a Finite Element formulation in view of the presence of second order derivative of the nodal positions, and in view of absence of boundary conditions. A variational formulation of (1) can however be introduced on the basis of Green's theorem applied on Rieman's surfaces [3]. The "angle" conditions along the boundary of the free surface are automatically introduced. Solutions are presented as a function of the capillary number Ca defined as :

$$Ca = \sigma (\eta V)^{-1}, \qquad (2)$$

where η is the fluid viscosity and V is a typical velocity.

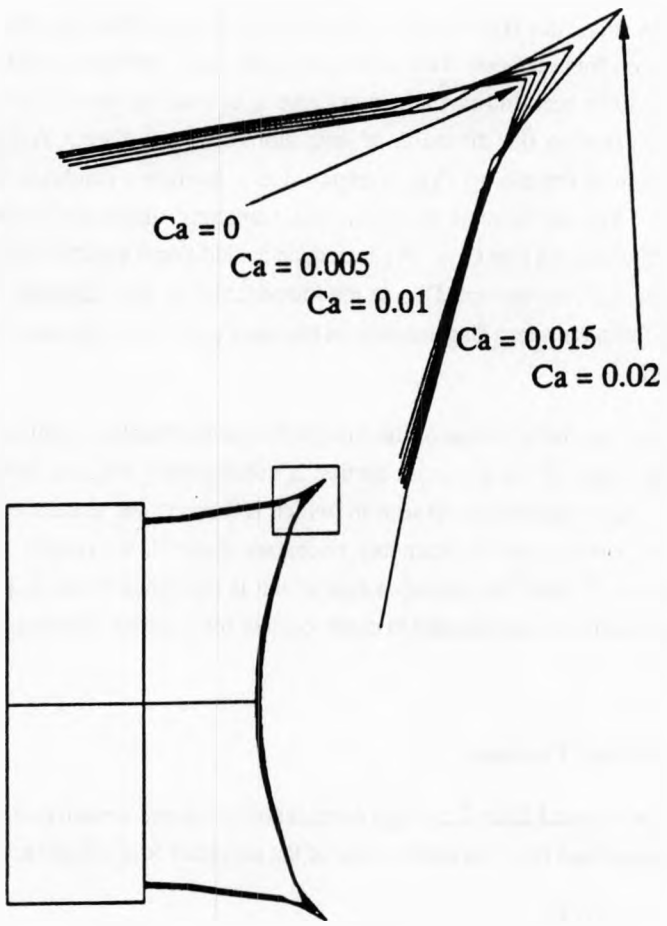


Fig. 4 Die sections as function of Ca in order to produce rectangular extrudate.

4. Results

Let us first consider the Direct Problem with a square die. In Fig. 2, we analyze the extrudate shape of a Newtonian fluid as a function of Ca. Fig. 3. shows a perpective view of the converged mesh at Ca = 0.1. The final shape of the extrudate becomes circular in view of the capillary tensions.

In order to validate our method for the Inverse Problem, we have also calculated the die geometry which produces a square profile in the case of a Newtonian fluid. This benchmark problem has been considered by Trang-Cong Phan-Thien [4], Wambersie and Crochet [5], Yokoi and Scriven [6]. Our solutions agree with those results. Quadratic convergence of the iterative scheme and convergence with mesh refinement have been observed.

In this paper, we have calculated the die section for a Generalized Newtonian fluid. Most polymers present a shear-thinning behaviour, which within a range of shear rates can be described by a dependency of the viscosity upon the shear rate $\dot{\gamma}$ of the power law type :

$$\eta(\dot{\gamma}) = K \eta \dot{\gamma}^{m-1}. \qquad (3)$$

The power law index lies for many polymers between 0.6 and 0.2. The velocity distribution in the die for a power law fluid will in general reduce swelling effects.

Let us consider the rectangular die section for a fluid with a power law index equal to 0.6. Solutions of the Inverse Problem are presented in Fig. 4. For different values of Ca, we present die sections that produce rectangular extrudates. It must be noted that due to the presence of surface tension, the length of the extrudate modifies solution. For the rectangular die of dimensions 1 / 1.5, we have used a extrudate length equal to 4. For an infinitely long product and an isothermal model, all dies produce a circular extrudate in the presence of surface tension.

As a final example, we have considered a star-like extrudate. The final extrudate is presented as a function of Ca, in Fig. 5. The presence of surface tension increases the difficulty of the problem. It is impossible to converge for a value of Ca greater than 0.01, in view of the deformation of the meshes.

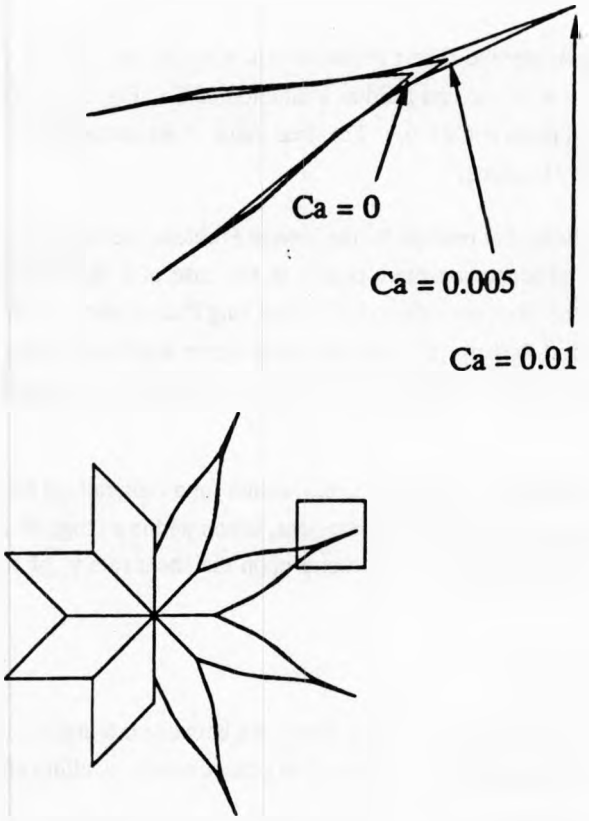


Fig. 5 Die sections as function of Ca in order to produce star-like extrudate.

5. Conclusions

We have considered the combined effects of shear thinning and surface tension upon extrudate swelling. Both the direct and inverse problem have been addressed for rectangular and star-like sections. In all cases, a shear thinning behaviour reduces the swelling and modifies the deformation, whereas surface tension tends to smooth all angles and therefore has a strong influence upon shape predictions.

For the inverse problem with surface tension, angles in the die section might become so accute that no solution exists for long extrudates or large values of the capilary number. However viscous effects are generally the most important for polymers. As all extrudates become circular in the presence of surface tension for infinitely long free surfaces, other effects such as cooling and freezing of the polymer must be considered if one wishes to simulate long output sections.

References

[1] V. Legat, J.M. Marchal,
Prediction of Three-Dimensional General Shape Extrudates by an Implicit Iterative Scheme,
Int. J. Numerical Methods in Fluids. 14, 609-625 (1992).

[2] V. Legat, J.M. Marchal,
Die Design : an Implicit Formulation Based on Lagrange Multipliers,
Int. J. Numerical Methods in Fluids. submitted for publication (1992).

[3] K.J. Ruschak,
A Three-Dimensional Linear Stability Analysis for Two-Dimensional Free Boundary Flows by Finite Element Method,
Comp. Fluids., 11, 391-401 (1983).

[4] T. Tran-Cong, N. Phan-Thien,
Die Design by a boundary element method,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 30, 37-48 (1988).

[5] O. Wambersie, M.J. Crochet,
Transient Finite Element Method for calculating Steady State Three-Dimensional Free Surfaces,
Int. J. Numerical Methods in Fluids, 14, 343-360 (1992).

[6] T. Yokoi, L.E. Scriven,
Profile Extrusion and Die Shape Designed by Galerkin's Method with Streamline-Adapted Basis Functions,
J. Non-Newtonian Fluid Mech. soumis à publication (1991).

4.6. Multiplicateur, contraintes et conditions aux limites.

Dans un certain nombre de cas délicats, l'imposition des conditions aux limites entraîne une dégénérescence du système. Un traitement efficace est proposé sur base des éléments finis contraints. Une telle manière de procéder permet de moduler les équations par un biais original.

Rappellons que l'opération ligne des éléments finis contraints tels que nous les avons présentés implique que :

- Imposer une condition essentielle constante ($Z_i = b$) provoque la suppression de l'équation locale i du système non contraint.

- Imposer une condition essentielle non-constante ($Z_i = b + a Z_j$), provoque la multiplication par a et la superposition de l'équation locale i du système non contraint sur l'équation j.

Or dans les cas limites où le système dégénère, nous souhaitons pouvoir utiliser l'équation perdue d'une condition essentielle constante pour rétablir l'équilibre. L'opération ligne des contraintes nous suggère une technique pour récupérer cette équation qui existait avant l'imposition des conditions essentielles. Notre procédure consiste en l'ajout d'une variable auxiliaire Z_j dans le membre de droite de la contrainte associée à la ligne i. Par l'opération ligne, l'équation i n'est plus supprimée mais est superposée sur la ligne j. Par ailleurs, il y a lieu d'exiger l'annulation de la variable auxiliaire Z_j afin que la modification de la contrainte n'altère pas le résultat. Par l'insertion d'une unique variable auxiliaire, nous avons généré deux nouvelles équations : l'équation i et la relation $Z_j = 0$. Ceci permet de rétablir l'équilibre entre le nombre d'équations et le nombre d'inconnues.

Nous détaillons cette procédure pour le traitement des points de détachement.

4.6.1 Points de détachement en présence de capillarité.

Il est connu que l'imposition d'une condition essentielle en vitesse le long d'une paroi immobile entraîne la dégénérescence de la condition cinématique au point de détachement et une lacune dans le système discret (Dheur 87,88)(Berghezan 90,91). Dans un grand nombre de cas, ce point de détachement se confond avec un coin saillant et la condition cinématique est remplacée classiquement par une condition essentielle de déplacement nul (en l'occurence h=0). Bien qu'une telle façon de faire puisse prêter le flanc à une discussion sur sa validité physique, elle nous paraît très pratique pour la simulation numérique puisqu'elle fixe la lacune excédentaire au système.

Cependant, ceci ne peut pas être une réponse générale. Si nous considérons tout d'abord un minimum de tension superficielle, la physique et la mathématique nous enseignent que :

- D'une part, lorsqu'il n'y a pas de coin saillant, il n'est pas possible de fixer à priori la position du point de détachement. Cette position est une réelle inconnue du problème. Par contre, l'angle de contact est une donnée physique qu'il est possible d'intégrer naturellement dans les équations du mouvement (Gibbs 1906). Malheureusement, ces équations sont perdues par l'imposition de la vitesse à la paroi dans une formulation classique. Il n'est plus possible d'imposer naturellement l'angle de contact.

- D'autre part, même en présence d'un coin saillant, rien ne nous assure à priori que le point de détachement est sur ce coin. Il est donc possible d'imaginer qu'on impose uniquement un angle de contact et que le point de détachement puisse se déplacer et ne plus coincider avec le coin. Une telle démarche est plus rigoureuse et peut s'imposer dans certains problèmes où la position du point de détachement est précisément le paramètre essentiel que doit fournir la simulation. L'imposer à l'avance devient alors discutable. Cependant, dans la majorité des simulations d'extrusion, imposer la coincidence du point de détachement et du coin saillant reste une approximation tout à fait raisonnable.

- En présence de capillarité, la nature mathématique de l'équation engendrée par le terme de tension superficielle nous demande de connaître soit la position, soit l'angle de contact sur l'ensemble de la frontière.

Nous constatons ainsi que la difficulté majeure pour un point de détachement sur une paroi immobile consiste en la perte de l'équation locale du mouvement et en la disparition locale de la condition cinématique. Dans les deux cas, le fauteur de troubles est la condition essentielle de vitesses. Pour pallier cet inconvénient, il est d'usage d'imposer l'angle de contact apparent de manière essentielle. Cette manière de procéder introduit une incohérence, car cette condition devrait être levée lorsque les forces capillaires sont trop faibles. Dans ce cas, l'angle de contact n'influence plus la solution mathématique exacte que dans une zone sensiblement inférieure à la maille locale du réseau et l'imposition brutale de l'angle de contact est inappropriée. A la différence d'une condition naturelle, cette procédure ne permet pas d'obtenir une solution numérique à tension superficielle nulle comme limite de solutions à tension décroissant vers zéro.

La manière adéquate de traiter ce problème est de pouvoir prendre en compte la dualité entre fixation de l'extrémité et l'imposition de l'angle de contact. C'est dans ce problème particulier que Dupret et Berghezan (Berghezan 90,91) justifient en partie leur formulation où la condition cinématique est associée au multiplicateur de force et la condition dynamique est associée au multiplicateur de déplacement. Dans ce type de formulation, l'angle de contact est imposé naturellement sur l'équation de condition dynamique partout exception faite des endroits où l'on impose le déplacement. La possibilité de pouvoir imposer naturellement l'angle de contact est certainement un des avantages de ce type de formulation.

Pour une formulation classique de Ruschak, un autre remède a été proposé par Kistler et Scriven (Kistler 83). Il consiste à maintenir une composante des équations du mouvement au point de détachement, en dépit de l'annulation des vitesses. L'équation sacrifiée correspond à la contrainte cinématique d'interface à l'extrémité. Nous proposons une présentation originale de la solution préconisée par Kistler et Scriven. Considérons, avant imposition des conditions frontières essentielles, les équations discrètes d'une formulation de Ruschak au point de détachement A.

$$
\begin{aligned}
V_A \quad &: \quad < \eta \tilde{\nabla} v^h - p^h I \, ; \, \tilde{\nabla} \Psi_A > \\
&\quad - << - \gamma \, tr \, (\nabla^* n) . n \, ; \, \Psi_A >> + [\, \gamma \, m \, \Psi_A \,]_A = 0, \\
P_A \quad &: \quad < \nabla . v^h \, ; \, \Pi_A > = 0, \\
H_A \quad &: \quad << v^h . n \, ; \, \Theta_A >> = 0,
\end{aligned}
$$

où < > et << >> sont respectivement les intégrales sur le domaine et sur la surface libre. Le terme $[\, \gamma \, m \, \Psi_A \,]_A$ est généré pour imposer naturellement l'angle de contact à la paroi. La condition dynamique y est imposée naturellement dans cette équation par l'absence de termes de force de contact exercée sur le fluide. Au lieu d'imposer brutalement la condition

essentielle $V_A = 0$ et de supprimer les équations locales du mouvement, nous proposons une démarche alternative pour imposer la vitesse nulle à la paroi. Si nous définissons n_A comme un vecteur normal à la frontière libre au point de détachement, notre technique consiste en trois points :

- Nous introduisons une nouvelle variable Λ_A sur le point de détachement.
- Pour définir cette variable, nous introduisons une <u>équation</u> : $a\,(\Lambda_A - H_A) = 0$.
- Nous écrivons la <u>contrainte</u> : $V_A = b\,(\Lambda_A - H_A)\,.\,n_A$.

Les équations discrètes après intégration de la contrainte deviendront par le biais de la technique des éléments finis contraints :

$$
\begin{aligned}
P_A \quad &: \quad <\nabla.v^h\,;\,\Pi_A> = 0, \\
H_A \quad &: \quad <<\,v^h.n\,;\,\Theta_A\,>> - (<\eta\,\bar{\nabla}v^h - p^h\,I\,;\,\bar{\nabla}\Psi_A> \\
&\quad - <<\,-\gamma\,tr\,(\nabla^* n)\,.n\,;\,\Psi_A>> + [\,\gamma\,m\,\Psi_A\,]_A)\,.\,n_A = 0, \\
\Lambda_A \quad &: \quad (\Lambda_A - H_A)\,a + (<\eta\,\bar{\nabla}v^h - p^h\,I\,;\,\bar{\nabla}\Psi_A> \\
&\quad - <<\,-\gamma\,tr\,(\nabla^* n)\,.n\,;\,\Psi_A>> + [\,\gamma\,m\,\Psi_A\,]_A)\,.\,n_A = 0,
\end{aligned}
$$

avec la contrainte : $V_A = (\Lambda_A - H_A)\,.\,n_A$.

Que signifient ces équations discrètes ? Tout d'abord, la projection des équations dans la direction normale à l'interface au point de contact est superposée sur les équations associées à l'inconnue géométrique et à notre nouvelle variable. Cette projection peut s'interpréter comme l'équation de l'équilibre dynamique sur la surface libre au point de détachement. La condition d'angle y est par ailleurs imposée naturellement. Les deux nouvelles équations discrètes et la contrainte sur les vitesses peuvent s'interpréter comme suit :

- L'équation associée à H_A devient une combinaison linaire des conditions cinématique et dynamique. En réalité, pour un petit élément, la condition cinématique tend à disparaître et la relation se réduit à la seule condition dynamique.

- L'équation associée à Λ_A devient une combinaison linéaire de la condition dynamique et de la différence des deux variables Λ_A et H_A. Comme nous pouvons déduire que la condition dynamique s'annule par l'équation de H_A, cette équation impose l'égalité des deux variables.

- Comme les variables Λ_A et H_A sont égales, la contrainte que nous avons écrite est équivalente à imposer que la vitesse soit nulle.

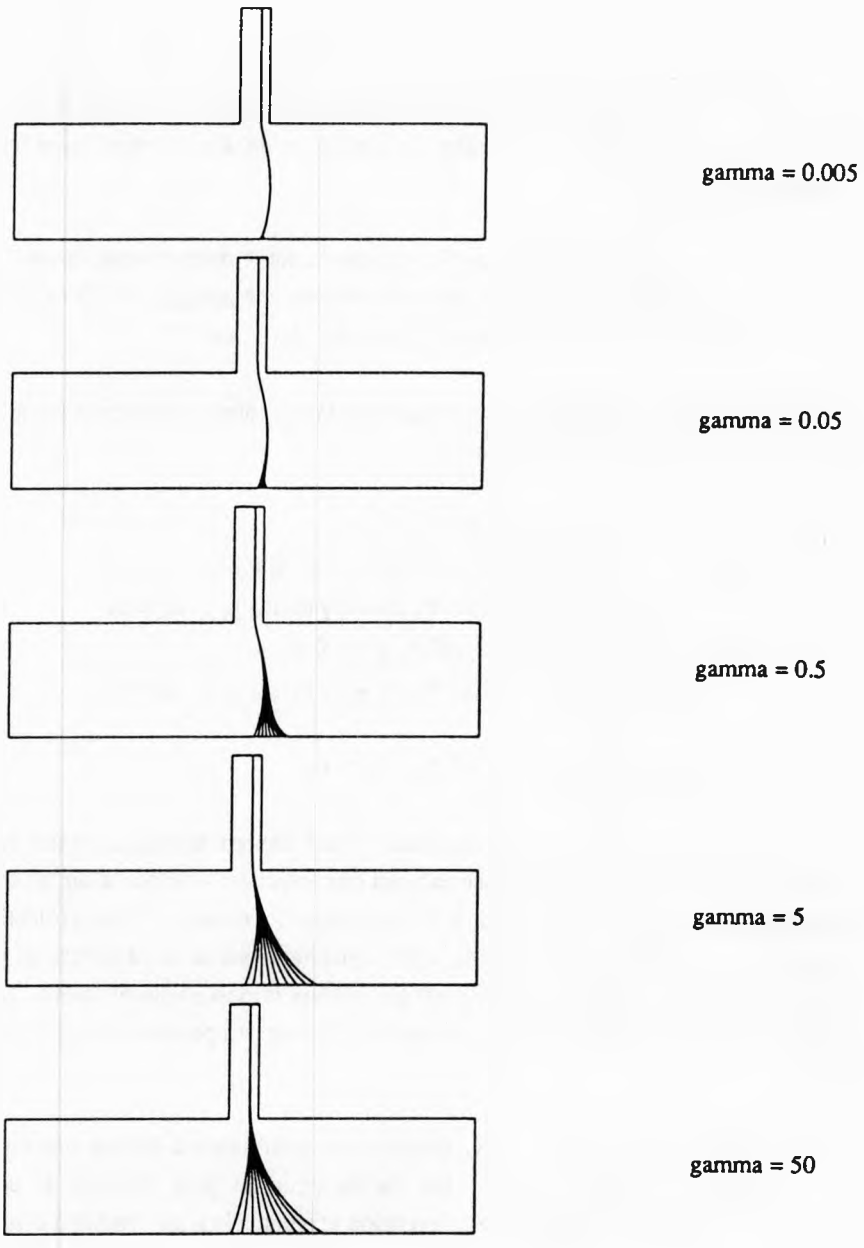


Fig. 4.4 Points de détachement avec capillarité dans une géométrie en T
Simulations pour diverses valeurs (70,80,90,100,110,120,130,140,150) de l'angle de contact.
Cette valeur est imposée de manière naturelle par le biais d'une variable supplémentaire.

Pour illustrer cette procédure, nous considérons une géométrie en T (Fig. 4.4.). Deux fluides de viscosités distinctes sont en contact l'un avec l'autre. Nous souhaitons analyser l'influence du coefficient de tension superficielle et de l'angle de contact au point de détachement. Il est clair que l'influence de ce dernier est directement proportionnel au coefficient de tension superficielle.

Notre manière d'agir pour ce type de simulations correspond bien à la stratégie suggérée par Kistler et Scriven. Cependant, par le biais des coefficients a et b, nous pouvons moduler l'imposition des trois conditions entre elles : vitesse nulle, conditions cinématique et dynamique. Une petite valeur de b implique un relachement de la condition dynamique au profit des deux autres, tandis qu'en diminuant a, on prend une certaine liberté avec l'exigence de vitesse nulle à la paroi. Ceci permet de moduler l'imposition des conditions.

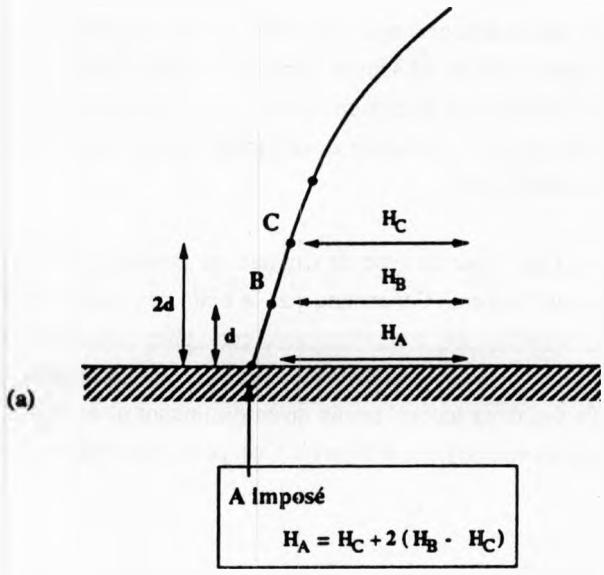
4.6.2 Points de détachement en absence de capillarité.

Lorsqu'une surface libre non soumise à une tension capillaire aboutit à une paroi immobile, de véritables catastrophes numériques peuvent surgir. Si la position de l'interface peut être fixée et si cette hypothèse est compatible avec les exigences des mathématiques et de la physique, les écueils sont évités. Malheureusement, la condition cinématique est une relation hyperbolique qui n'admet des conditions aux limites que sur une partie du pourtour de l'interface. En outre, s'il est relativement aisé de supposer qu'on accroche l'interface à un coin, le problème reste entier pour une paroi régulière.

Une première manière de résoudre la difficulté a été proposée par Crochet et Dheur. Elle consiste à fixer la position de l'interface à la paroi sur base d'une extrapolation des positions voisines. Une telle procédure consiste à contraindre en réalité la position du point de détachement A sur base du déplacement de deux points voisins B,C de l'interface. Dans le cas où les trois points sont équidistants, la contrainte générée peut s'écrire (Fig. 4.5) :

$$H_A = H_C + 2 (H_B - H_C).$$

On réduit ainsi le nombre de degrés de liberté et on rétablit l'équilibre du système. Par contre, si la condition cinématique est toujours trivialement respectée au point de détachement, nous n'avons pas l'équilibre des forces requises par la condition dynamique. Il apparaît ainsi que les équations ont été modifiées localement par rapport à la formulation forte. Une telle manière d'agir modifie donc localement la solution. Cependant l'erreur



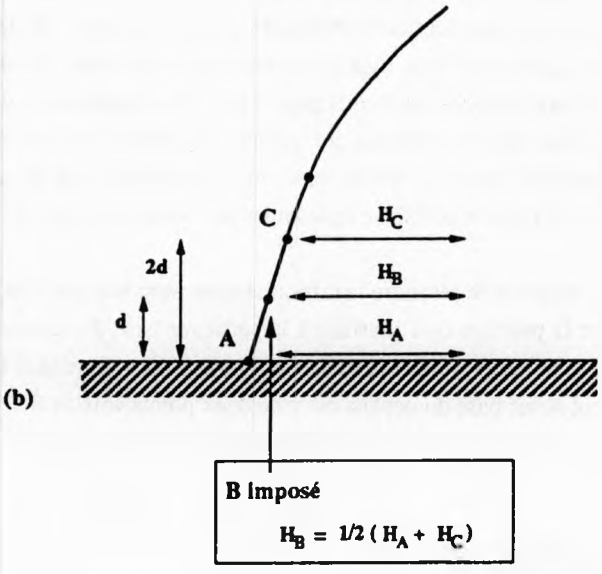


Fig. 4.5 Imposition du point de contact par extrapolation
(a) le point de contact est extrapolé sur base de ses deux voisins,
(b) le dernier segment d'une interpolation quadratique est linéaire.

ainsi générée est directement fonction de la taille du dernier élément du réseau et tend donc a priori à diminuer rapidement lors d'un raffinement du maillage.

Une solution équivalente pour la formulation de Ruschak est suggérée par Berghezan. Elle consisterait à réduire d'une unité l'interpolation de la variable géométrique sur le dernier élément. Il préconise l'usage d'une interpolation quadratique pour les vitesses et les coordonnées géométriques avec une exception pour le segment de l'interface voisin de la paroi. Sur ce dernier segment, une discrétisation linaire de l'inconnue géométrique impose que l'interface soit rectiligne sur l'arête aboutissant à la paroi et parabolique ailleurs. Une telle technique nous apparaît tout à fait semblable à celle de Dheur et Crochet (Fig. 4.5). En effet, si les points A, B et C sont équidistants entre eux, nous pouvons dire que rendre le segment ABC linéaire revient à écrire la contrainte suivante :

$$H_B = 1/2 (H_C + H_A).$$

Par quelques manipulations algébriques élémentaires, nous voyons que cette contrainte est exactement identique à celle proposée par Crochet et Dheur. Il s'agit dans les deux cas de l'ajout de la condition frontière qui nous fait défaut. Le dernier point fixé par une extrapolation linéaire de ses voisins implique également que le dernier segment soit rectiligne.

Dans leur formulation alternative, Dupret et Berghezan préconisent toujours l'emploi d'une discrétisation linéaire sur la première arête et quadratique sur les autres pour le multiplicateur λ associé à la condition cinématique. C'est le même principe mais une autre interprétation. En effet, le multiplicateur représente dans ce cas la force normale à l'interface et la condition ajoutée est donc une condition de force. La force normale à l'interface est fixée comme une extrapolation linéaire de la force normale de ses voisins.

Une dernière méthode a été proposée par Scanlan et Scriven (Scanlan.90) Ils utilisent une condition d'égalité des pressions au point de détachement. Cette propriété n'est cependant valide que si la courbure de l'interface et la pression restent bornées au point de contact. Cette dernière hypothèse n'est pas établie. En effet, les simulations numériques récentes de Dupret-Berghezan-Levieux révèlent que la pression peut varier fortement au voisinage du point de détachement . Cette condition d'égalité des pressions pourrait apparaître comme une simple fermeture arbitraire du système d'équations.

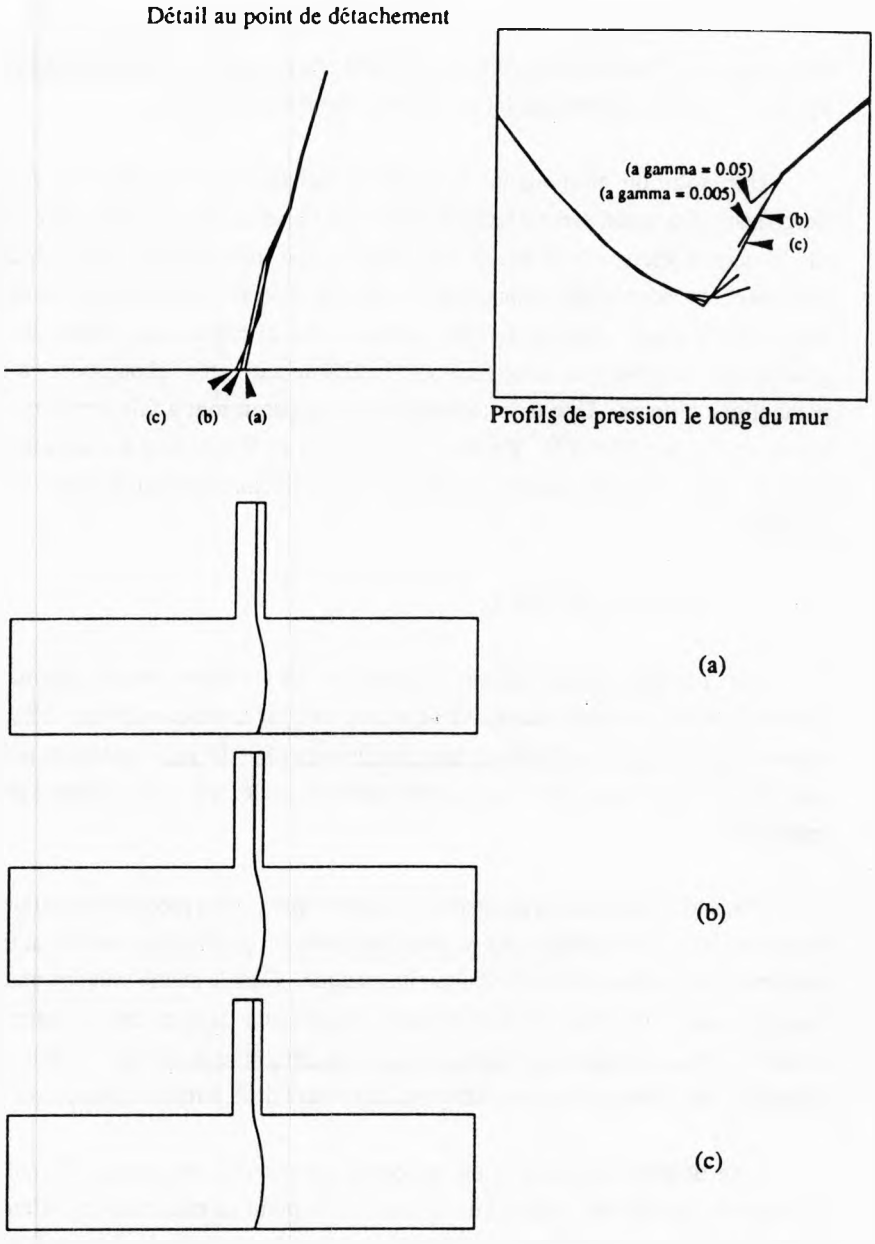


Fig. 4.6 Points de détachement en l'absence de apillarité dans une géométrie en T
Illustration de trois stratégies concurrentes :
(a) Utilisation de la tension superficielle comme artifice numérique,
(b) Extrapolation du noeud milieu du dernier segment,
(c) Imposition de l'égalité des pressions.

Notre approche présentée au paragraphe précédent s'est heurtée aux mêmes difficultés lorsqu'on supprime la tension superficielle. En particulier, un raffinement en réseau près du point de détachement provoque l'apparition d'oscillations. L'imposition en sus de l'égalité des pressions apporte parfois une amélioration à la solution, mais la validité d'une telle démarche est discutable.

Cependant, il n'est pas surprenant que la forme d'un interface sans capillarité est vulnérable au développement d'oscillations. Cette propriété est évidente par analogie physique. D'une part, la position est mathématiquement presque indéterminée par l'absence de conditions d'extrémité et la quasi-stagnation du liquide près du point de détachement. Les conditions cinématiques et dynamiques deviennent très mal conditionnées. La plupart des tentatives énoncées nous apparaissent comme un ajout d'une condition frontière plus ou moins arbitraire afin de refermer un système incomplet. La question essentielle consiste peut-être dès lors à remettre en question la validité physique d'un modèle sans aucune tension superficielle pour certains problèmes.

Notre stratégie consiste dès lors à utiliser la tension superficielle comme technique numérique. Certes, on ignore la valeur de l'angle de contact dans les phénomènes où la capillarité est négligeable. Il faut préciser que la condition d'angle imposée faiblement n'a qu'une influence locale pour un nombre capillaire modeste. Il nous semble tout aussi justifé d'appliquer un angle de contact arbitraire que d'imposer une extrapolation au point de détachement. Mais une telle procédure apporte deux avantages majeurs. D'une part, la tension superficielle facilite la résolution des équations. D'autre part, il est possible de relacher progressivement l'artifice de la tension superficielle. Une extrapolation permet finalement d'obtenir la solution sans capillarité comme la limite des solutions à capillarité décroissante. A nouveau, on constate que la solution sans tension superficielle doit s'interpréter uniquement comme la limite des solutions à capillarité décroissante.

Une analyse comparative de ces techniques est évidemment délicate. Cependant nous avons considéré les trois alternatives pour le traitement du point de détachement sans capillarité dans la géométrie en T. Nous constatons ainsi que l'utilisation d'une faible tension superficielle comme artifice numérique ou l'usage d'une technique d'extrapolation donnent des résultats proches. En particulier, nous notons la discontinuité des pressions le long de la paroi. L'imposition de l'égalité des pressions nous permet également d'obtenir un résultat relativement proche. Sans discuter de la validité physique d'une telle condition, nous constatons toutefois que le saut de pression au point de détachement décroît avec le coefficient de tension superficielle. Une telle observation est confirmée par une analyse en réseaux, tandis que la chute de pression observée le long de l'interface se révèle une donnée beaucoup plus sensible.

Chapitre 5.

Simulation d'écoulements viscoélastiques.

Si une première approche des matériaux polymériques peut être réalisée en considérant des modèles de fluides newtoniens généralisés, la prise en compte des effets de mémoire et de tensions normales est indispensable pour la compréhension de l'extrusion. C'est pourquoi nous nous sommes tournés naturellement vers la simulation de fluides viscoélastiques.

Cependant, l'obtention d'une solution numérique viscoélastique précise se heurte à de grandes difficultés. Elles sont souvent connues sous l'appellation de "problème du haut nombre de Weissenberg". D'une part, on constate la non-existence de solution qui peut être associée à une bifurcation ou à un point limite (Ioss 80)(Joseph 85). D'autre part, les méthodes numériques habituelles apparaissaient inadéquates et provoquaient l'apparition de points limites uniquement liés à la discrétisation (van Schaftingen 85)(Debbaut 86)(Marchal 87). Plus récemment, de nouvelles voies dans les méthodes numériques ont été proposées pour la simulation bidimensionnelle d'écoulements viscoélastiques (Marchal 87)(Rajagopalan 90)(King 88)(Beris 85).

La difficulté numérique provient du caractère mixte des équations qui ne sont ni hyperboliques, ni elliptiques et du caractère mixte de la discrétisation tensions-vitesses-pressions. Par ailleurs, la taille des systèmes discrets engendrés pour des simulations bidimensionnelles n'est pas propice à une analyse sereine et détaillée des phénomènes en présence. Nous nous sommes donc intéressés à la réalisation d'un modèle simple caractérisé par les mêmes difficultés. Les simulations d'envergure peuvent ensuite être entamées sur des bases plus rigoureuses.

5.1. Equations hyperboliques.

Tout d'abord, nous présentons brièvement les méthodes numériques utilisées pour des problèmes hyperboliques, en nous inspirant directement des travaux de Johnson (s 87). Considérons un sous-espace Ω de R^n et définissons le problème classique d'advection-diffusion :

- Trouver $z \in Z$ tel que :

$$\begin{aligned} -a\,\Delta z + \mathbf{b}.\nabla z + z &= 0 && \text{sur } \Omega, \\ z &= f && \text{sur } \partial\Omega. \end{aligned}$$

où le vecteur **b** est un élément de R^n. Cette équation aux dérivées partielles se compose de termes elliptiques et hyperboliques. En fonction de tailles relatives de a et de **b**, nous pouvons distinguer les cas suivants :

- si a = 0, le problème est purement hyperbolique,
- si a est petit par rapport à **b**, le problème est à dominance hyperbolique,
- si **b** est petit par rapport à a, le problème est à dominance elliptique,
- si **b** = 0, le problème est purement elliptique.

Considérons tout d'abord le cas limite de problème purement hyperbolique afin d'introduire la notion de caractéristique. Les courbes caractéristiques **x**(s) sont définies par l'équation :

$$\frac{d(\mathbf{x}(s))}{ds} = \mathbf{b}.$$

Ces courbes correspondent aux lignes de courant associées au champ de vitesse donné par **b**. Si la fonction **b**(x) est continue et lipschitzienne, il existe une caractéristique passant par tout point du domaine. Par ailleurs, les caractéristiques présentent la remarquable propriété que l'équation aux dérivées partielles s'y ramène à une équation différentielle ordinaire. En effet, sur chaque caractéristique, il est possible d'écrire :

$$\frac{d(z(\mathbf{x}(s)))}{ds} = \frac{d(\mathbf{x}(s))}{ds}.\nabla z = \mathbf{b}.\nabla z,$$

d'où nous déduisons finalement :

$$\frac{d(z(s))}{ds} + z(s) = 0 , \qquad \text{sur } \mathbf{x}(s).$$

Cette dernière équation permet d'obtenir z sur l'entièreté d'une caractéristique si une valeur de z est donnée en un point. Ceci nous amène à diviser la frontière $\partial\Omega$ en deux parties distinctes :

- $\partial\Omega_{in} = \{ \mathbf{x} \in \partial\Omega$ tel que $\mathbf{n}(\mathbf{x}).\mathbf{b}(\mathbf{x}) < 0 \}$,
- $\partial\Omega_{out} = \{ \mathbf{x} \in \partial\Omega$ tel que $\mathbf{n}(\mathbf{x}).\mathbf{b}(\mathbf{x}) > 0 \}$,

où n(x) est la normale sortante à $\partial\Omega$ en un point **x** de $\partial\Omega$. Comme la solution se propage le long des caractéristiques, le problème est bien posé lorsque z est spécifié uniquement sur $\partial\Omega_{in}$. Par ailleurs, il y a propagation des discontinuités de z présentes sur $\partial\Omega_{in}$ le long des caractéristiques. La manière idéale de résoudre une équation purement hyperbolique est de calculer ses caractéristiques et d'effectuer l'intégration le long de ces dernières (Fig. 5.1).

Par contre dans l'hypothèse d'une valeur positive de a, une discontinuité à la frontière ne rend pas la solution discontinue dans Ω mais induit une variation brutale du gradient de z dans la direction normale à la caractérisitique. Le saut s'effectue dans une bande limite (Fig. 5.1). Par ailleurs, il est nécessaire dans ce cas d'imposer une condition sur l'ensemble de $\partial\Omega$ pour obtenir un problème bien posé. Si la valeur de z imposée en $\partial\Omega_{out}$ ne correspond pas à la valeur qu'on obtiendrait pour le problème d'advection, il y a apparition d'une couche limite (Fig. 5.1) le long de $\partial\Omega_{out}$.

5.1.1. Méthode de Galerkin.

Nous pouvons dès lors poser le problème de la recherche d'une solution approximative. Nous considérons une approximation z^h qui s'écrit sous la forme:

$$z^h = \sum_{i=1,N} \Phi_i \, . \, Z_i$$

où N est le nombre de noeuds et Φ_i les fonctions de forme globale qui appartiennent à $H^k(\Omega)$. La valeur de l'indice h est la taille typique d'un élément du maillage.

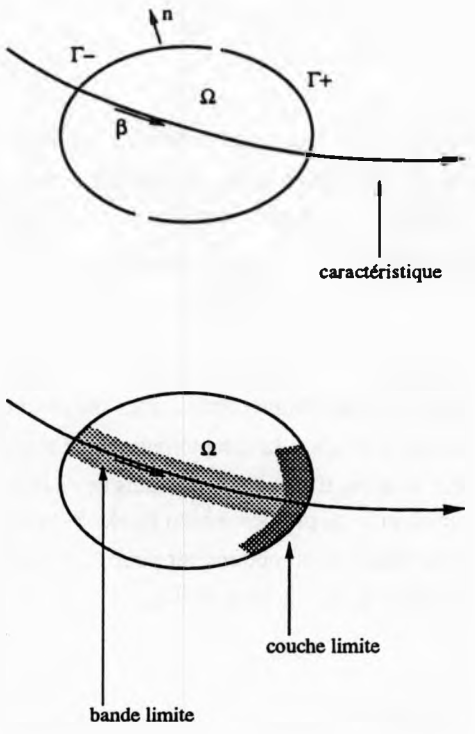


Fig. 5.1 Caractéristiques d'un problème hyperbolique et solution du problème de convection-diffusion avec couches limites.

Le méthode de Galerkin fournit le problème discret suivant :

- Trouver $z^h \in Z^h$ tel que :

$$< \nabla w ; a \nabla z^h > + < w ; b . \nabla z^h + z^h > = 0 \qquad \forall w \in Z^h.$$

Une telle formulation est conforme. car la formulation du problème original et du problème approché sont identiques. La discrétisation est consistante au sens où toute solution de l'équation originale est solution du problème discret. L'intérêt d'une méthode consistante est la possibilité d'user de la théorie de l'approximation pour fixer des bornes à la précision de la méthode numérique.

$$a > 0 \qquad \| z - z^h \|_{H^0} \leq C h^k \| z \|_{H^{k+1}},$$

$$a = 0 \qquad \| z - z^h \|_{H^0} \leq D h^{k+1} \| z \|_{H^{k+1}}.$$

Si z est suffisamment régulier pour que la norme de z dans l'espace de Sobolev $H^{k+1}(\Omega)$ soit finie, la première inégalité signifie que l'erreur sur un maillage caractérisé par h est de l'ordre de $O(h^{k+1})$ pour une équation elliptique. La seconde inégalité implique que l'adjonction d'un terme hyperbolique fait croître l'erreur à $O(h^k)$.

Cependant une méthode numérique ne doit pas seulement fournir une approximation précise, mais elle doit également être stable. Ce second critère est essentiel pour le choix d'une formulation discrète. Une méthode instable provoque l'apparition d'oscillations qui provoquent la divergence des schémas itératifs utilisés pour la résolution du problème discret. La stabilité d'une méthode numérique peut se définir comme l'exigence d'une dépendance continue de la solution discrète à l'égard des données du problème. Ceci peut s'illustrer schématiquement par une inégalité du type :

$$\| z - z^h \|_{H^0} \leq C \| \text{données} - \text{données}^h \|_{H^0}.$$

De manière générale, cette propriété dépend du caractère coercif de l'opérateur discret. L'opérateur d'une équation elliptique discrétisé par la méthode de Galerkin est toujours stable. L'opérateur d'une équation hyperbolique discrétisé par la méthode de Galerkin n'est coercif qu'à la condition où $a \geq h$. Ceci s'interprète aisément : la méthode de Galerkin n'est stable qu'au prix d'un raffinement considérable du maillage en particulier dans les couches limites de manière à ce que la diffusion élément stable de l'équation reste dominante au niveau de chaque élément. Si le raffinement est insuffisant, les solutions

discrètes présentent des oscillations ou ne peuvent plus être obtenues en raison de la divergence du schéma itératif.

D'une manière lapidaire, la méthode de Galerkin est optimale pour un problème elliptique : la méthode est stable et fournit la meilleure approximation. L'adjonction d'un terme hyperbolique à notre problème elliptique diminue les performances de la technique de Galerkin : la méthode perd une partie de sa précision et sa stabilité n'est assurée qu'au prix d'un raffinement du réseau. Pour une équation purement hyperbolique, la stabilité de la méthode n'est plus garantie.

5.1.2. Méthodes d'intégration en amont.

Le défaut majeur de la méthode de Galerkin est la perte de stabilité lorsque le terme d'advection devient prédominant. Une série de possibilités sont offertes au numéricien pour accroître la stabilité de la formulation discrète.

L'idée la plus simple consiste à augmenter artificiellement la diffusion à une valeur h Δ z. Cet accroissement de la diffusion rend stable la formulation discrète mais génère un amoindrissement des gradients de z en particulier dans les couches limites. Le gain en stabilité se fait au prix d'une perte considérable de précision. La méthode n'est plus consistante et l'erreur est au mieux de O(h).

Afin d'obtenir une formulation discrète consistante qu'on espère donc plus précise, une autre idée consiste à modifier les fonctions tests w qui sont remplacées par w_{amont} définies comme suit :

$$w_{amont} = w + kh\ \mathbf{b}.\nabla w,$$

où la valeur de k est choisie sur base de savantes conjectures. L'interprétation physique est une plus grande pondération des données "amont" par rapport aux données "aval" et un accroissement de la diffusion uniquement le long des caractéristiques. Intuitivement, la méthode est inspirée par l'idée d'intégrer le long des caractéristiques. Cette méthode est appellée technique de Streamline-Upwinding Petrov-Galerkin (SUPG) et donne lieu à la formulation discrète suivante :

- Trouver $z^h \in Z^h$ tel que :

$$< \nabla w ; a\nabla z^h > + < kh\, \mathbf{b}.\nabla w ; a\Delta z^h >$$
$$+ < w + kh\, \mathbf{b}.\nabla w ; \mathbf{b}.\nabla z^h + z^h > = 0$$
$$\forall\, w \in Z^h.$$

Une telle méthode n'est pas conforme car il n'est pas possible de déduire la formulation discrète à partir de la formulation variationnelle du problème original. Par contre, elle est consistante, car la solution du problème original vérifie la formulation discrète. Grâce à la consistance, il est possible d'obtenir la borne d'erreur suivante :

$$|||\, z-z^h \,|||_{H^0} \leq C\, h^{k+1/2}\, \| z \|_{H^{k+1}},$$

avec $|||\, w \,|||_{H^0} = \left(h \| \mathbf{b}.\nabla w \|^2_{H^0} + \| w \|^2_{H^0} + \sqrt{a}\, \frac{1+h}{2} \| \nabla w \|^2_{H^0} \right)^{1/2}$.

Ce résultat est acquis dans une norme particulière qui exige un surcroît de précision dans la direction de la caractéristique. Ce surcroît de précision dans la direction de propagation de l'information permet d'espérer un accroissement de la précision et de la stabilité. D'autre part, cette estimation de l'erreur implique l'inégalité :

$$\| z-z^h \|_{H^0} \leq C\, h^{k+1/2}\, \| z \|_{H^{k+1}} .$$

On constate que la méthode de Petrov-Galerkin est plus précise que Galerkin pour un problème hyperbolique, tandis que le résultat est inverse pour un problème elliptique. Rappellons encore que de tels résultats impliquent que la solution z soit suffisamment régulière afin que sa norme reste finie.

Mais l'avantage majeur d'une formulation Petrov-Galerkin est l'ajout d'un terme de diffusion le long des lignes de courant :

$$< kh\, \mathbf{b}.\nabla w ; \mathbf{b}.\nabla z^h > .$$

En effet, ce terme elliptique devrait augmenter fortement la stabilité de la méthode. Mais il y a deux autres termes générés afin de conserver la consistance de la méthode :

$$< kh\, \mathbf{b}.\nabla w ; a\Delta z^h > ,$$
$$< kh\, \mathbf{b}.\nabla w ; \mathbf{b}.\, z^h > .$$

Ces termes sont nécessaires pour la précision, mais nuisent malheureusement à la stabilité de la méthode. En particulier, le traitement consistant du terme de diffusion nuit à la stabilité et requiert de limiter les valeurs admissible de k pour conserver la stabilité.

Il apparaît tentant de n'ajouter que le premier terme et de négliger d'ajouter les deux derniers dans une formulation alternative. Cette manière de faire est appellée méthode de Streamline Upwinding (SU) et donne lieu à la formulation discrète :

- Trouver $z^h \in Z^h$ tel que :

$$< \nabla w ; a \nabla z^h > + < w + kh\, b.\nabla w ; b.\nabla z^h > + < w ; z^h > = 0 \qquad \forall w \in Z^h .$$

La méthode est toujours stable, mais elle n'est plus consistante. La précision d'un résultat ne sera qu'au mieux de l'ordre de O(h). Dans ce cas-ci, il ne faut pas limiter k pour conserver la stabilité, mais pour limiter l'imprécision générée par l'inconsistance.

5.1.3. Méthodes de substitution.

Considérons des équations hyperboliques pures d'un type particulier.

- Trouver $z \in Z$ tel que :

$$b.\nabla z = 0 \qquad \text{sur } \Omega,$$
$$z = f \qquad \text{sur } \partial\Omega_{in} .$$

Ce type d'équation nous intéresse particulièrement, car la condition cinématique de nos problèmes à surfaces libres en est un exemple typique.

La technique idéale pour obtenir des solutions discrètes d'une équation hyperbolique consisterait à calculer les caractéristiques et à intégrer une équation différentielle ordinaire le long de ces dernières. En pratique, une telle démarche n'est pas toujours aisée au sein d'un maillage bidimensionnel ou tridimensionnel et se limite parfois au cas unidimensionnel où la caractéristique est évidente.

Une première manière de contourner la difficulté consiste à se tourner vers une formulation de Petrov-Galerkin :

- Trouver $z^h \in Z^h$ tel que :

$$< w + kh\, \mathbf{b}.\nabla w \,;\, \mathbf{b}.\nabla z^h > = 0 \qquad \forall\, w \in Z^h,$$

Cependant il existe une démarche alternative qui consiste à modifier l'équation afin de passer d'un problème hyperbolique à un problème elliptique. Il s'agit de remplacer l'équation originale par :

$$\mathbf{b}.\nabla\, (\mathbf{b}.\nabla\, z) = 0\,,$$

et de dériver une formulation discrète pour l'équation modifiée. Il s'agit d'une formulation consistante, car les solutions de l'équation originale sont solutions de l'équation modifiée.

Si nous appliquons une méthode de Galerkin à cette équation modifiée, nous obtenons la formulation discrète alternative :

- Trouver $z^h \in Z^h$ tel que :

$$< \mathbf{b}.\nabla w \,;\, \mathbf{b}.\nabla z^h > = << w \,;\, (\mathbf{b}.\nabla z^h)\mathbf{n} >> \qquad \forall\, w \in Z^h,$$

où << >> représente l'intégrale sur $\partial\Omega_{out}$. Mais nous savons que ce terme de bord doit être nul en vertu de l'équation originale de notre problème. La formulation discrète alternative se réduit finalement :

- Trouver $z^h \in Z^h$ tel que :

$$< \mathbf{b}.\nabla w \,;\, \mathbf{b}.\nabla z^h > = 0 \qquad \forall\, w \in Z^h\,.$$

Nous sommes maintenant en présence d'un problème elliptique en lieu et place d'une équation hyperbolique. Précisions toutefois que la généralisation de ce type de démarche n'est guère triviale, car les conditions aux limites à imposer sur $\partial\Omega_{out}$ ne sont pas toujours aisées à trouver.

Lorsque cela est possible, une telle démarche cumule toutes les qualités : précision et stabilité grâce à la présence sous-jacente d'un principe de minimum. L'interprétation

physique d'une telle formulation apparait comme une formulation"amont totale" où le paramètre k de la méthode de Petrov-Galerkin tendrait vers une valeur infinie.

5.2. Une méthode numérique pour les fluides viscoélastiques.

Historiquement, de grands efforts de recherche pour la simulation de fluides viscoélastiques ont été entamés depuis 1977. Cette tentative s'est rapidement avérée être nettement plus difficile que prévu. Dans le domaine de fluides viscoélastiques différentiels, de sérieuses difficultés ont limité les performances de la première méthode mixte "extra-tension-vitesses-pression". Les performances relativement médiocres de cette méthode MIX1 sont dues principalement aux causes suivantes :

- le caractère mixte de l'interpolation des variables d'extra-tensions, de vitesses et de pressions,
- le caractère mixte du type des équations et l'apparition de phénomènes de changement de type.

La présence de singularités ou de couches limites dans la plupart des problèmes d'intérêt pratique met en lumière les instabilités d'une méthode numérique mal construite. Considérons par exemple un écoulement de Stokes pour lequel Fortin et Pierre ont déduit une condition du type LLB pour le choix des interpolations d'extra-tensions et de vitesses (Fortin 89). La méthode MIX1, bien que violant cette condition, permet d'excellentes prédictions pour des écoulements à taux de déformations modérées. Par contre, l'instabilité théorique de la méthode est mise en évidence dans un problème avec une singularité. Cependant, il faut mentionner la possibilité de remettre en cause la présence de ces singularités si raides dans la réalité des écoulements : les tensions non-intégrables prédites par le modèle mathématique apparaissent incompatibles avec des valeurs physiquement réalistes. Ceci suggère la construction d'équations de constitution de fermeture près de la singularité.

La présence d'une condition LBB pour les extra-tensions avait été suggérée par Marchal et Crochet (Marchal 87). Sur base d'un écoulement de Stokes avec une singularité ("stick-slip"), ils montrent l'impossibilité pour la méthode mixte MIX1 de reproduire les résultats fournis par une méthode classique vitesses-pressions. Ils introduisent un nouveau type d'interpolation pour les extra-tensions : fonctions de formes bilinaires définies sur des sous-éléments générés par une division en NxN de chaque élément du maillage. On peut espérer qu'en accroissant progressivement la valeur de N, la condition de stabilité LBB sera respectée. Marchal et Crochet montrent que le choix d'une

interpolation de type 4x4 est suffisant pour obtenir une solution stable. Fortin et Pierre établissent ensuite la stabilité théorique de ce type d'interpolation 4x4 (Fortin 89).

Cependant en raison de la non-linéarité du problème viscoélastique, l'analyse mathématique d'une condition LBB se révèle très difficile : aucun résultat théorique n'étant disponible, il nous reste plus qu'à utiliser l'interpolation choisie pour les problèmes de Stokes. Mais, pour un nombre de Weissemberg élevé, la méthode numérique 4x4 Galerkin construite sur base d'une interpolation 4x4 pour les extra-tensions et l'application du principe de Galerkin se révèle instable. L'introduction d'une intégration amont consistante dans la méthode 4x4 Streamline Upwinding Petrov Galerkin (4x4 SUPG) sur l'équation de constitution améliore stabilité et précision uniquement dans le cadre réduit de problèmes réguliers. Par contre, l'introduction d'une intégration amont inconsistante dans la méthode 4x4 Streamline Upwinding (4x4 SU) accroît fortement la stabilité mais au prix d'une perte de la précision. Précisons toutefois que la diffusion artificielle inconsistante ainsi apportée demeure liée à la taille d'un sous-élément et au nombre de Weissemberg. Pour des maillages extrêmement raffinés et des nombres de Weissemberger raisonnables. cette diffusion reste acceptable.

Une méthode alternative appellée Explicit Elliptic Momentum Equation (EEME) a été proposée sur base d'une formulation de Renardy (Renardy 85)(King 88). Pour un fluide de Maxwell, cette formulation consiste à appliquer l'opérateur de divergence à l'équation de constitution, à y injecter l'équation du mouvement et à remplacer l'équation originale du mouvement par le résultat obtenu. L'avantage majeur de cette formulation est le caractère elliptique de la nouvelle équation associée aux vitesses. Par ailleurs, cette formulation se ramène à la formulation classique vitesses-pressions pour un problème de Stokes. Une telle méthode allie stabilité et précision. Le défaut d'une telle technique de substitution apparaît lors de l'imposition des conditions en termes de forces de contact qui y est particulièrement difficile, si pas impossible.

Modifier les équations se révèle une voie prolifique. Ainsi, la méthode appellée Elastic Viscous Stress Spliting (EVSS) est basée sur une autre modification des équations (Rajagopalan 90). On y a introduit un changement de variable et on a ajouté une interpolation distincte pour les taux de déformation. Il s'agit donc d'une méthode mixte "extra-tensions modifiées-taux de déformations-vitesses-pressions". Ce changement de variable a de nouveau pour mission de modifier l'équation associée aux vitesses afin de la rendre à dominance elliptique. L'introduction de variables supplémentaires de taux de déformations se révèle nécessaire, peut-être en raison d'une condition de type LLB sous-jacente mais inconnue. Les conditions aux limites à imposer dans cette formulation se déduisent aisément contrairement à la méthode EEME. La méthode EVSS est consistante.

Une dernière classe de méthodes se base sur une discrétisation spectrale où les inconnues sont approximées par des polynômes de Legendre, par des polynômes de Chebyshev ou des séries de Fourier. Ces méthodes sont attirantes pour deux raisons. D'une part, elles possèdent une convergence exponentielle de ces méthodes pour une solution indéfiniment dérivable. D'autre part, la stabilité est un peu affectée par le type des équations. Ces méthodes sont donc précises et stables. Mais elles ont un défaut de taille : la taille du système discret, car le support des fonctions d'approximation recouvre tout le domaine, à l'inverse du principe de localité des éléments finis. Une première manière de contourner la difficulté consiste à coupler une discrétisation spectrale dans une direction et une discrétisation obéissant à un principe de localité dans les autres directions (Beris 85). Une autre stratégie est le préconditionnement du système discret généré par une méthode spectrale. Si une telle façon d'agir s'est révélée performante pour les écoulements newtoniens, elle apparaît beaucoup plus délicate dans le cadre d'écoulements viscoélastiques.

5.2.1. A la recherche d'équations modèles simples.

Une des difficultés majeures des simulations viscoélastiques est le coût calcul élevé. A titre d'exemple, l'ordre de grandeur d'une simulation viscoélastique bidmensionnelle est proche de celui-ci d'une simulation tridimensionelle pour un fluide newtonien. L'ampleur des calculs rend une analyse en maillages d'un coût prohibitif.

C'est pourquoi nous croyons qu'il est judicieux de vouloir reproduire en partie les difficultés rencontrées dans les simulations viscoélastiques par un modèle unidimensionnel simple. L'objectif est l'analyse de la précision et de la stabilité des méthodes numériques utilisées pour la simulation des écoulements de fluides viscoélastiques différentiels. Une synthèse de cette analyse est reprise dans le *Journal of Rheology* .

JOURNAL OF RHEOLOGY, in press (1992)

ON THE STABILITY AND ACCURACY OF FULLY-COUPLED FINITE ELEMENT TECHNIQUES USED TO SIMULATE THE FLOW OF DIFFERENTIAL VISCOELASTIC FLUIDS : A ONE-DIMENSIONAL MODEL

Vincent LEGAT

APPLIED MECHANICS
UNIVERSITE CATHOLIQUE DE LOUVAIN
Place du Levant, 2
B-1348 LOUVAIN-LA-NEUVE, BELGIUM.

and

Jean-Marie MARCHAL

POLYFLOW S.A.
Place de l'Université, 16
B-1348 LOUVAIN-LA-NEUVE, BELGIUM.

Key words

Viscoelastic Fluids, Mixed Methods, Finite Element, Stability, Accuracy, Upwinding, Streamline Integration.

Summary

Mixed stress-velocity-pressure finite element techniques are frequently used to solve differential viscoelastic flow problems of the Maxwell (Oldroyd-B) type. In the present paper, simplified models are introduced to analyse the stability and the accuracy of a class of methods used to solve differential viscoelastic problems. In particular, a one-dimensional equation is presented which exhibits most of the difficulties of the coupled Maxwell flow problem but requires only a fraction of the CPU time. The performance of some formulations (EEME, EVSS, 4x4, 4x4 SU, 4X4 SUPG, MIX 1, ...) are analyzed on the basis of this equation.

New numerical techniques which enhance both the stability and the accuracy of those mixed formulations are also presented. Those techniques are based on a combination of two streamline integration techniques, in such a way as to maintain the elliptic character to the coupled system.

1. Introduction

Stability and accuracy of many numerical methods used to simulate the flow of differential viscoelastic fluids remains a controversial issue. On the one hand, techniques based on Streamline-Upwinding and sub-elements for the stress interpolation [1] have demonstrated a good stability whereas a convergence analysis based on the integration of the (linear) constitutive equation shows that the method is O(h) for the stress field in the direction of the characteristic. On the other hand, substitution techniques originally introduced for viscoelastic flows by Renardy [2], and implemented as a numerical technique at MIT [3] under the name EEME has shown good convergence properties, but can be used only for smooth problems with the upper-convected Maxwell model. However the use of a modified Maxwell model has recently been allowed to calculate axisymmetric contractions with the EEME formulation [4]. A third technique is the so-called EVSS formulation ([5], [6]), which is based on a change of variable.

Several methods based on an "oriented" integration of the (hyperbolic) constitutive equation have been published in the literature. Those methods include the "4x4 SUPG" technique, based on sub-elements for the stress interpolation and a consistent Streamline-Upwinding / Petrov - Galerkin integration of the constitutive equation [7], a technique based on the integral form of the constitutive equation [8] and a technique introduced by Luo and Tanner [9]. The numerical method used to integrate the constitutive equation differs in each case, but the discrete formulation of the momentum / mass conservation remains the same : it is based on a Galerkin formulation. The success of those methods strongly depends upon the regularity of the geometry and upon the fluid model.

We believe that in view of the variety of techniques available and because of the difficulty to introduce a rigorous theoretical analysis of the problem (which is non-linear), a complete understanding of the advantages and disadvantages of those techniques might be achieved by means of a simplified model. In order to avoid excessive CPU time to perform the convergence analysis and in order to be able to implement most methods within a limited effort, we have selected a one-dimensional model which contains inherently all the difficulties of the Maxwell flow problem. It will be shown that the behavior of most (if not all) methods can be reproduced with this one-dimensional model. In addition, a clear understanding of the model and of its characteristics has allowed us to introduce a new numerical technique, whose *stability and accuracy* are by far better than for those of former methods. However the two-dimensional (three-dimensional) generalization of this technique is not completely straighforward.

2. A one-dimensional model of the Maxwell flow problem

Let us consider a Maxwell flow problem, η being the viscosity of the fluid and λ the relaxation time. We might conclude from a survey of the literature [10], [11] and from our own experience that there is no need to further investigate the numerical integration of the "uncoupled" viscoelastic problem. Indeed, theoretical and experimental results are available for the numerical integration of a linear hyperbolic equation. We use the word "uncoupled" as a reference to the approximation in the sense that velocities will be a variable in the coupled problem, whereas they are a datum for the uncoupled one. However, coupled problems can be solved by means of a Picard iteration or by means of a Newton-Raphson iteration on all variables. In our case, we have only used the Newton-Raphson iteration. Indeed, results obtained with the fully-coupled scheme can be directly applicable to a decoupled iterative scheme.

The central point is the *coupling* between the constitutive equation and the momentum / mass conservation equations, and how the hyperbolic nature of the constitutive equation influences the stress-velocity-pressure formulation of the problem (the linear Stokes problem being subject to classical LBB conditions [12]). We consider that the momentum equation has the nature of a constraint on the constitutive equation, the mass conservation equation being itself a constraint on the velocity field (solenoidal velocity vectors). In other words, solutions have to be found for the constitutive equations, taking into account the constraint that the velocity field be solenoidal and that the stress satisfy the momentum balance. As demonstrated in [13], this coupling between the constitutive and momentum equations reduces the number of boundary data which one is allowed to impose for the stresses. For example in the case of a 2-D planar Maxwell flow problem, the user is allowed to give two stress data along the inlet, although the problem is formulated in terms of three stress components, together with elliptic data for the velocity field on the whole domain boundary. This reduction of the number of boundary data that one is allowed to impose for the coupled problem is an essential character of the system, which is integrated in our one-dimensional model. We also believe that it is impossible to incorporate the incompressibility constraint in a one-dimensional model; it is only important through the source term that the pressure gradient introduces in the momentum equation. Therefore the incompressibility equation has been dropped, while a source term (which will be considered to be a given function on the domain) is explicitely introduced in the momentum equation. The smoothness of this function (distribution) is a priori selected in order to introduce a singularity in the model.

Taking those considerations into account, we propose the following one-dimensional problem :

- Find $(T(x),v(x)) \in \mathbf{T} \times \mathbf{U}$ such that :

$$T + \lambda (v\, T' - T\, v') = \eta\, v', \qquad \text{on } \Omega, \qquad (1)$$

$$T' + f = 0, \qquad \text{on } \Omega. \qquad (2)$$

The domain Ω is the segment [-1,1] and $\mathbf{T}$ and $\mathbf{U}$ are appropriate function spaces defined over Ω. The variable v will always be strictly positive, so that the boundary x = -1 will also be the inlet. Problem (1 - 2) is subject to the boundary data :

$$v(-1) = v_A, \qquad (3)$$

$$v(+1) = v_B. \qquad (4)$$

The constants λ and η are positive numbers standing respectively for a relaxation time and for a viscosity. A prime denotes the derivative with respect to variable x, which belongs to the segment [-1,1]. The source term f must be understood in terms of the distribution theory.

System (1 - 2) is a set of two scalar first-order equations. Therefore, two scalar boundary data are required. In our one-dimensional problme, we call ellliptic equation a second-order ODE posed in terms of data given at both sides of the interval. A one-dimensional hyperbolic equation is in our case a first-order ODE posed in terms of a single upstream datum. This is a natural extension of the multidimensional case. However, the boundary conditions that we have selected ((3) and (4)) are somewhat unusual, since they act on the velocity field and are adapted to an elliptic equation, whereas the "momentum" equation (2) is not explicitely elliptic in terms of v. The two data (3) and (4) also prevent introduction of T(-1) as a data for the "constitutive" equation (1). Let us mention that this would normally be the case if equation (1) was integrated separately on the basis of a *known* velocity field v, assuming that v is strictly positive over Ω so that the characteristic of equation (1) is oriented from left to right. The nature of problem (1 - 2) is identical to a Maxwell flow problem: one data that would appear for the decoupled constitutive equation, i.e. T(-1), disappears from the coupled system once elliptic boundary conditions are imposed for v. The boundary conditions imposed for the momentum equation (which is a constraint on the constitutive equation because the velocity does not explicitely appear in the momentum equation) prevent introduction of all boundary data that would normally appear along the inlet section if the constitutive equation was decoupled from the momentum equation. We believe that from a numerical point of view this feature is

essential, not especially at the inlet (in most cases a long fully developed entry is selected so that imposing all stress components in the inflow section has very little influence), but for the selection of the numerical technique itself. It is the sign of a particular mechanism of the transfer of information between equations (1) and (2).

Let us also mention that if a purely viscous term is included (η_2 being the additional viscosity), the momentum equation (2) becomes :

$$T' + \eta_2 v'' + f = 0, \qquad \text{on } \Omega, \qquad (5)$$

and the number of data required to solve the problem is different from case (1 - 2). In this case, T(-1) must also be imposed. From a numerical point of view, the Oldroyd system can be regarded as a singular perturbation of the Maxwell problem; it has been proved experimentally that if an additional purely viscous term regularizes the problem, it does not solve all difficulties especially around singularities. For this reason and in order to allow for a simple formulation of all techniques (including EEME and EVSS), we will concentrate on the Maxwell case only.

3. Discretization

The system (1 - 2) and boundary conditions (3 - 4) define the Euler-Lagrange formulation of the problem. For numerical calculations, we consider only *weak formulations* of the problem. Following [1], [3], let us define alternate formulations of (1 - 2) and their finite element counterparts :

Mixed Finite Element Formulation

Let $\mathbf{T}^h$ and $\mathbf{U}^h$ be approximate function spaces for T and v. We only consider the conforming Finite Element case, where $\mathbf{T}^h \subset \mathbf{T}$ and $\mathbf{U}^h \subset \mathbf{U}$. Essential conditions are applied on the whole boundary, while we assume that all functions of $\mathbf{U}^h$ satisfy those conditions. Equation (2.2) is integrated by parts;.the approximate mixed formulation is defined as :

- Find $(T,v) \in \mathbf{T}^h \times \mathbf{U}^h$ such that :

$$< T + \lambda (v\, T' - T\, v') - \eta\, v' ; s > = 0, \qquad \forall\, s \in \mathbf{T}^h, \qquad (6)$$

$$< T ; w' > - < f ; w > = 0, \qquad \forall\, w \in \mathbf{U}^h. \qquad (7)$$

In (6) and (7), < ; > stands for L^2 scalar product on Ω. The velocity field v is a Lagrange multiplier which restricts the stresses over the domain to those satisfying the

momentum equation. This formulation is directly inspired from the 2-D planar Maxwell problem.

EEME Finite Element Formulation

An alternate formulation has been proposed by Renardy [2] for slow steady flows of viscoelastic fluids. A similar EEME formulation can be derived for our one-dimensional model. We differentiate equation (1) with respect to the spatial variable and we take advantage of equation (2). The explicitely elliptic momentum equation has been integrated by parts, in order to eliminate second order derivatives :

- Find $(T,v) \in Q^h \times U^h$ such that :

$$< T + \lambda (v T' - T v') - \eta v' ; s > = 0, \qquad \forall s \in Q^h, \qquad (8)$$

$$< v'(\eta + \lambda T) ; w' > + < \lambda v T' - f - \lambda v f' ; w > = 0, \qquad \forall w \in U^h. \qquad (9)$$

The elliptic nature of the velocity field clearly appears in (3.4), provided that the sign of $(\eta + \lambda T)$ is constant over the whole domain (this condition will always satisfied true in our numerical examples).

Solutions of the original problem (6 - 7) are also solutions of the problem in the EEME formulation (8 - 9). It must be noted that as stated in Reference [2], the contrary is a priory not true if the boundary data are arbitrary. Indeed, differentiation of the constitutive equation and substitution in the momentum equation has introduced one additional boundary condition. If one counts the number of boundary data required for (8 - 9), one comes to the conclusion that in addition of v(-1) and v(1), T(-1) must also be imposed. Solution of (8 - 9) will be solution of (6 - 7) provided that T(-1) is not arbitrary, but selected in order to be compatible with the solution of (6 - 7). In our simulations, as T(-1) can be determined at the machine precision by solving (6 - 7), this constraint has been imposed as a boundary condition when the EEME formulation is used.

The EEME substitution also introduces a term containing the derivative of f in (9), i.e. $< \lambda v f' ; w >$, whereas the source term in the mixed formulation is $< f ; w >$. Therefore, the requirement on the regularity of f is stronger for EEME than for the original mixed formulation. Indeed, the term $< \lambda v f' ; w >$ must have a meaning in the sense of distribution. As an example, we have not been able to formulate EEME when f is a Dirac distribution.

EVSS Finite Element Formulation

A third formulation has been developed by Mendelson and al [5]. It has been recently redesigned with a different mixed formulation in [6]. This formulation has been named EVSS for Elastic-Viscous Split Stress.

Let us describe the method applied to our one-dimensional model. It has been proved that the presence of the diffusive term $\eta_2 v''$ into the momentum equation positively modifies the behaviour of numerical methods. The idea of the method is then to reintroduce systematically the velocities in the momentum equation under the form of a diffusive term. For doing this, let us define two new unknowns S and D :

$$S = T - \eta D,$$

$$D = v'.$$

If we use the same notations as in previous formulations, while $\mathbf{S}^h$, $\mathbf{D}^h$ and $\mathbf{U}^h$ denote the corresponding discrete function spaces, the EVSS problem is formulated as follows :

- Find $(S,D,v) \in \mathbf{S}^h \times \mathbf{D}^h \times \mathbf{U}^h$ such that :

$$< S + \lambda (v S' - S v') + \lambda (v D' - D v') \ ; s > = 0, \qquad \forall s \in \mathbf{S}^h, \qquad (10)$$

$$< D - v' \ ; d > = 0, \qquad \forall d \in \mathbf{D}^h, \qquad (11)$$

$$< S + \eta v' \ ; w' > - < f \ ; w > = 0, \qquad \forall w \in \mathbf{U}^h. \qquad (12)$$

The EVSS formulation does not require differentiation of f; it reintroduces a second order term for the velocities in the momentum equation.

We do not apply upwinding in this one-dimensional counterpart of the EVSS and EEME formulations. In fact, we have tested the EVSS and EEME techniques with Galerkin and SUPG integration of the constitutive equation. As little difference in the solution accuracy has been observed between those two cases, we decided to present Galerkin results only. Indeed, our present interest for those formulations is in the *substitution* that they integrate in their finite element counterparts.

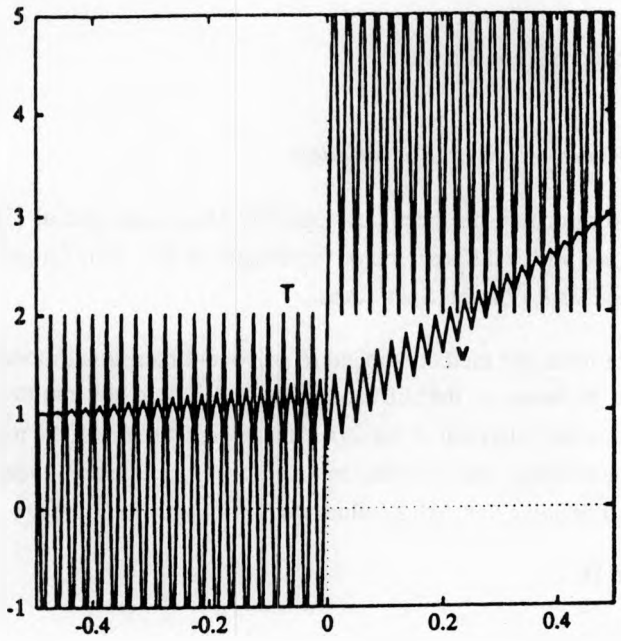


Fig. 1 Linear problem (λ=0) : T and v profiles with MIX 1.

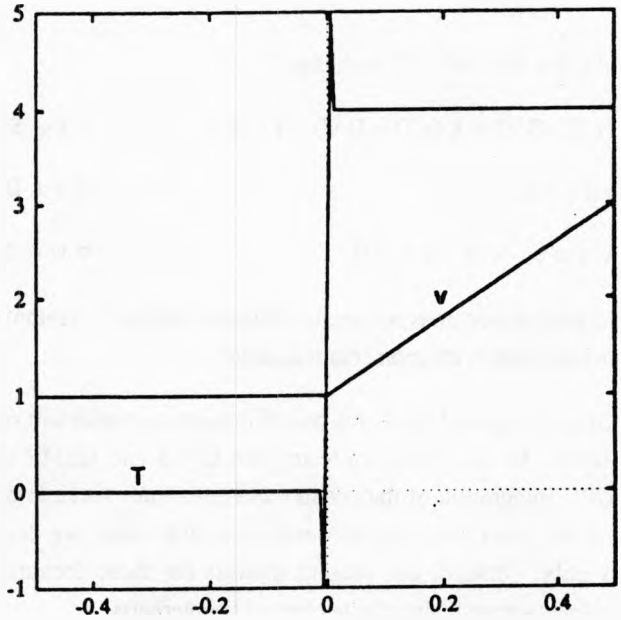


Fig. 2 Linear problem (λ=0) : T and v profiles with 4x4 GAL.

4. Linear problem : $\lambda = 0$

Mix1

Let f be a Dirac distribution. Let us call Mix1 a mixed formulation in which the same finite element discretization has been selected for T^h and U^h. In Figure 1, we present results obtained with linear shape functions (the use of quadratic functions produces similar results). Large wiggles appear in the solution, which do not disappear when the mesh is refined; this confirmes the theoretical results of Fortin and Pierre [14].

4x4 Galerkin

The one-dimensional counterpart of the technique introduced by Marchal and Crochet [1] has been implemented as follows : linear shape functions have been selected for the velocity field, whereas the stress field is also linear on a sub-mesh which has twice the number of elements. Although the implementation is one-dimensional and based on linear shape functions, the technique is named 4x4 GAL after the two-dimensional method. In 1-D, the solution obtained with this method is almost exact, as one observes in Figure 2. Let us mention that the primal formulation of the problem (in terms of v only; this formulation can be derived because $\lambda = 0$) gives an exact solution with linear shape functions provided that the Dirac distribution is located on a node. This is also the case for the EEME and EVSS formulations.

4x4 SUPG

When $\lambda=0$, a consistent Streamline Upwinding / Petrov-Galerkin technique should never be applied to the constitutive equation because it is no longer hyperbolic. However since in the standard SUPG formulation the upwinding factor is not a function of λ, we have examined the limit of 4x4 SUPG discrete formulation when λ tends to zero, while the upwinding coefficient does not vanish. In other words, all continuous functions have been evaluated at $\lambda=0$ whereas discontinuous functions have been evaluated at $\lambda=0^+$. We have called this formulation the Discrete Oriented Stokes Problem. The solution obtained when f is Dirac distribution is shown in Figure 3. It shows that the use in the mass matrix $< T ; s >$ of an upwinded test function has a dramatic effect on the stability and the accuracy of the solution. This conclusion is also true in 2-D: let us considerer the so-called stick-slip flow problem for a purely viscous fluid. We solve this problem by a mixed stress-velocity-pressure finite element method with sub-elements. In Figure 4, we compare the stress profile along the wall, for a Galerkin formulation (left) and for a SUPG formulation (right). It is clear that the stability and the accuracy are decreased by consistent upwinding. In particular, the theoretical results of Fortin and Pierre [14] are not available for this case.

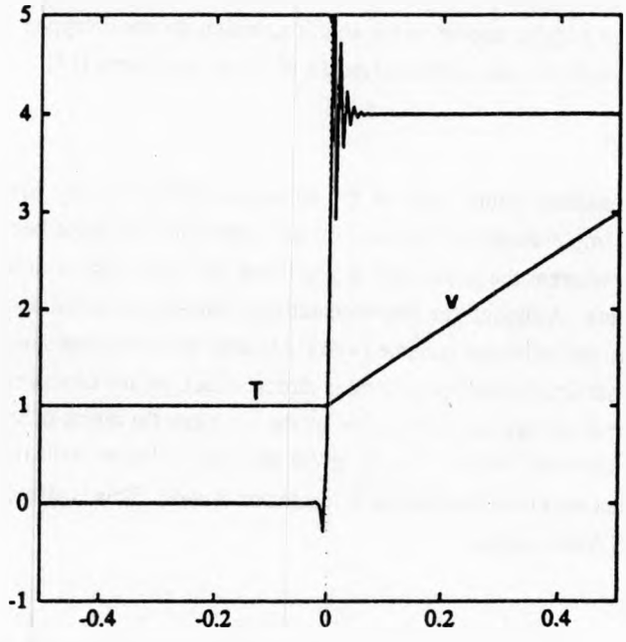


Fig. 3 Linear problem (λ=0) : T and v profiles with 4x4 SUPG.

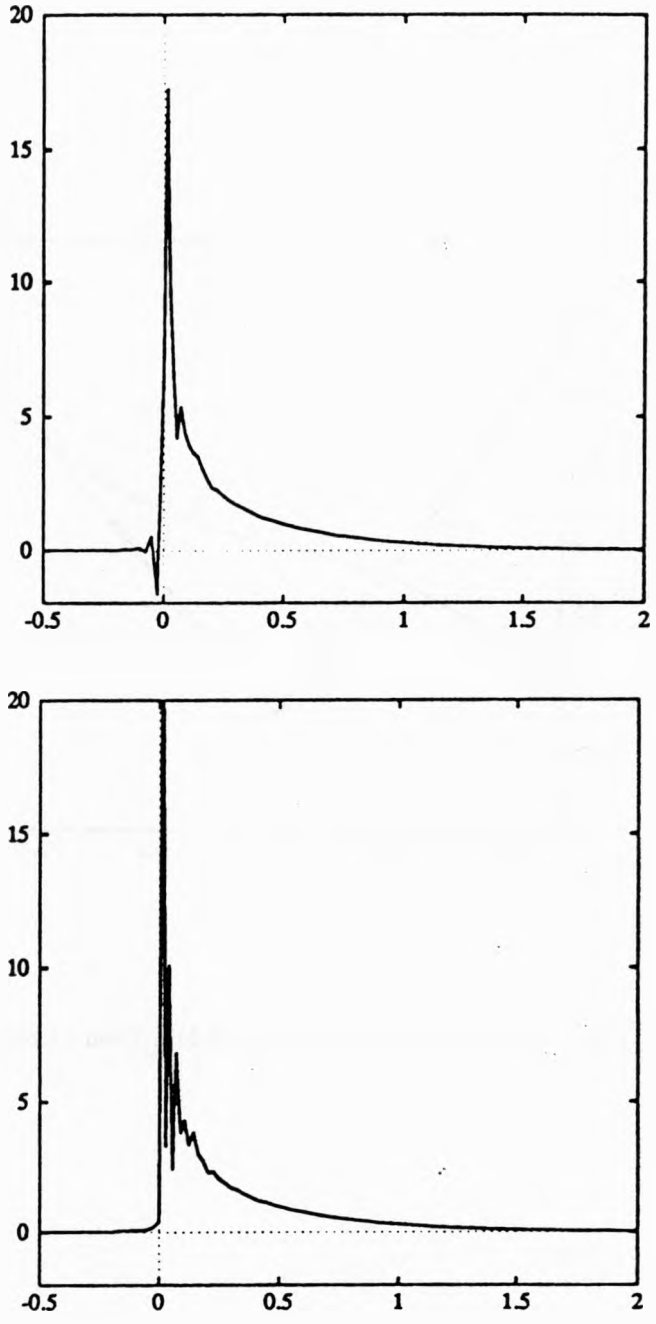


Fig. 4 2-D Stick-slip problem of a Newtonian fluid (λ=0) :
Stress profiles along the wall with 4x4 GAL (top) and 4x4 SUPG (bottom).

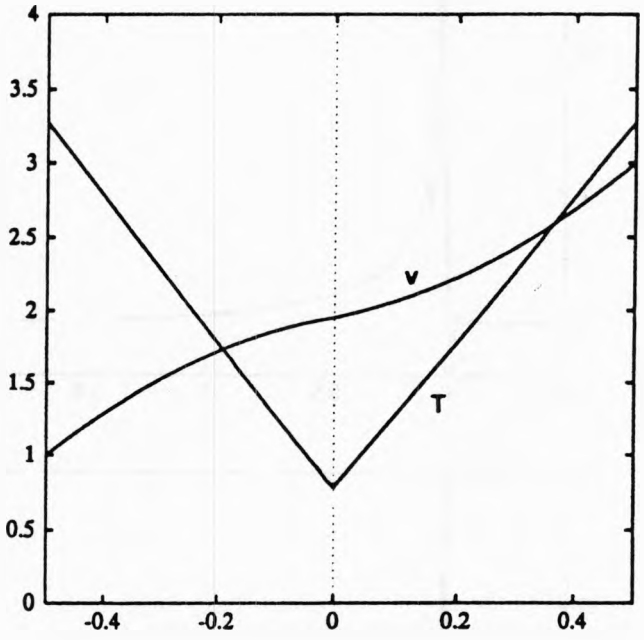


Fig. 5 Smooth non linear problem (λ=0.01) : T and v reference profiles.

5. Smooth non-linear problem : $\lambda > 0$

Let f be a step function centered at x=0 (which has the value of -2.5 for x<0, and 2.5 for x≥0) and let λ=0.01. A solution of the problem, confirmed at the machine accuracy by several numerical techniques including a Runge-Kutta method is shown in Figure 5. Six numerical techniques have been tested for this problem, on a regular mesh of 80 elements.

4x4 GAL	Figure 6.
4x4 SU	Figure 7.
4x4 SUPG	Figure 8.
4x4 HYP	Figure 9.
EEME	Figure 10.
EVSS	Figure 11.

In the SU technique, effect of artificial diffusion is visible on the stress profile : the angle at x=0 has been modified. In 4x4 SUPG, a consistent SUPG formulation has been applied on the constitutive equations. Some small wiggles appear on the left for the stress profile. The so-called 4x4 HYP technique is based on the mixed finite element formulation, an upstream integration being used for the equation (3.1). In this case we select a test function s_i relative to node i which is constant over the upstream element (between node i and node i-1) and vanishes elsewhere.

Convergence of those methods has been analyzed by mesh refinement for the velocity in Figure 12 and for the stress in Figure 13. We have considered meshes having respectively 80, 160, 320 and 640 elements. The error is defined as the maximum square of the difference between numerical results and reference results obtained by a Runge-Kutta method. For some methods, the machine accuracy limits the convergence analysis. In Figures 12 and 13, the O(h) and $O(h^2)$ convergence rates have been noted with dotted lines in order to evaluate the performances of the methods. EEME is obviously the most accurate technique, but several other methods also exhibit a high convergence rate. As expected, 4x4 SU exhibits almost a linear convergence rate for the stress field. EVSS presents a good rate of convergence for the velocity field, but not for the stress field. It can be explained by the fact that T is not an explicit variable in this formulation, and that a primal method is in general less accurate than a mixed method for the derivative of the primal variable [15]. See section 7 for discussion of the BI HYP technique.

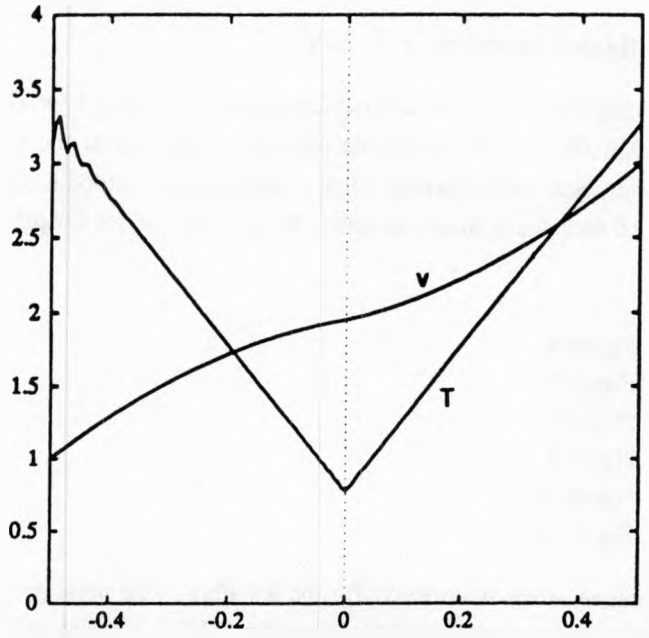


Fig. 6 Smooth non linear problem (λ=0.01) : T and v profiles with 4x4 GAL.

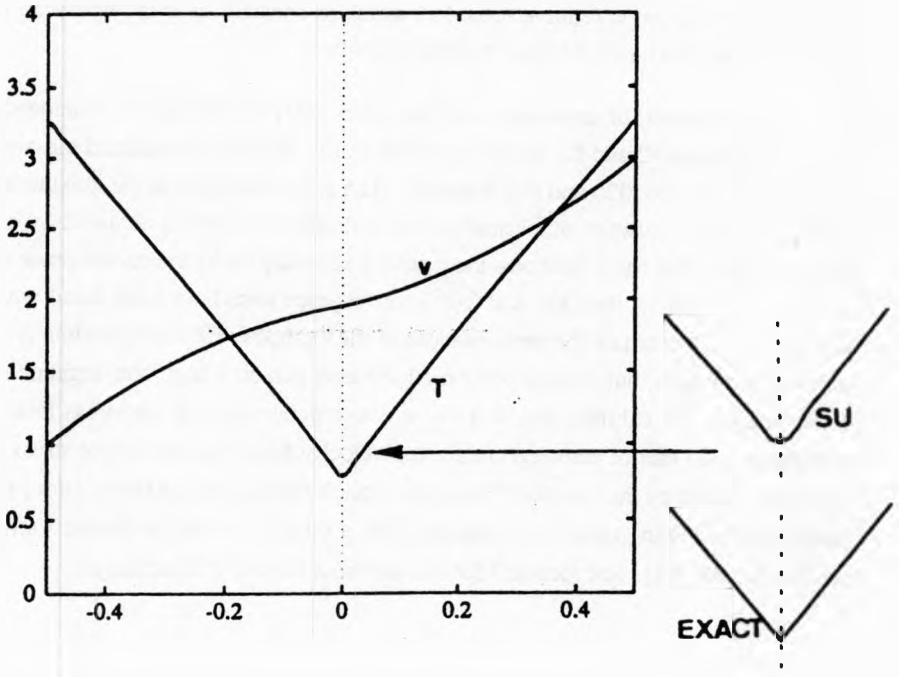


Fig. 7 Smooth non linear problem (λ=0.01) : T and v profiles with 4x4 SU.

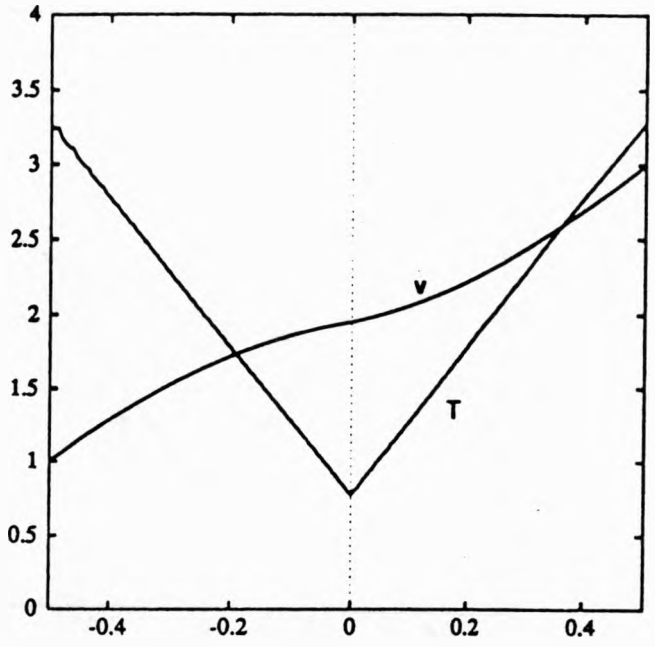


Fig. 8 Smooth non linear problem (λ=0.01) : T and v profiles with 4x4 SUPG.

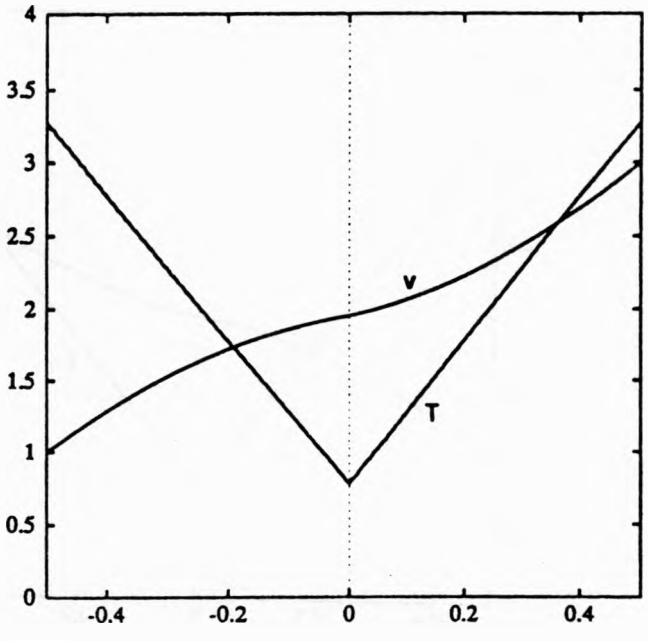


Fig. 9 Smooth non linear problem (λ=0.01) : T and v profiles with 4x4 HYP.

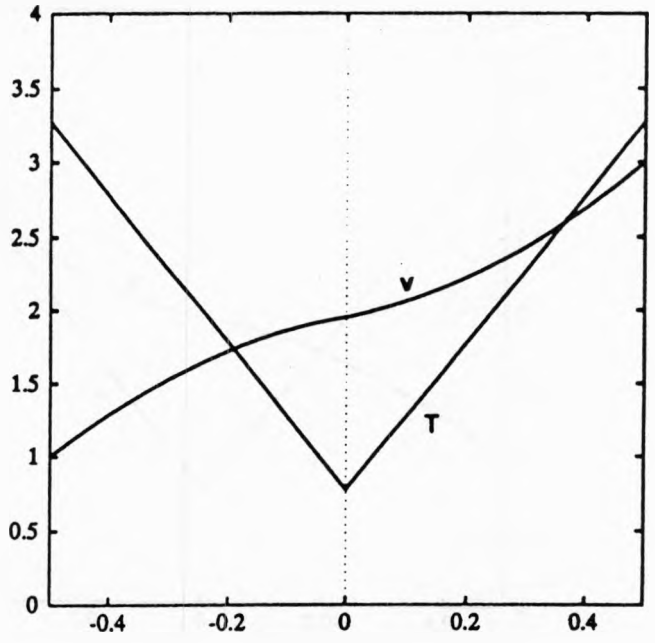


Fig. 10 Smooth non linear problem (λ=0.01) : T and v profiles with EEME.

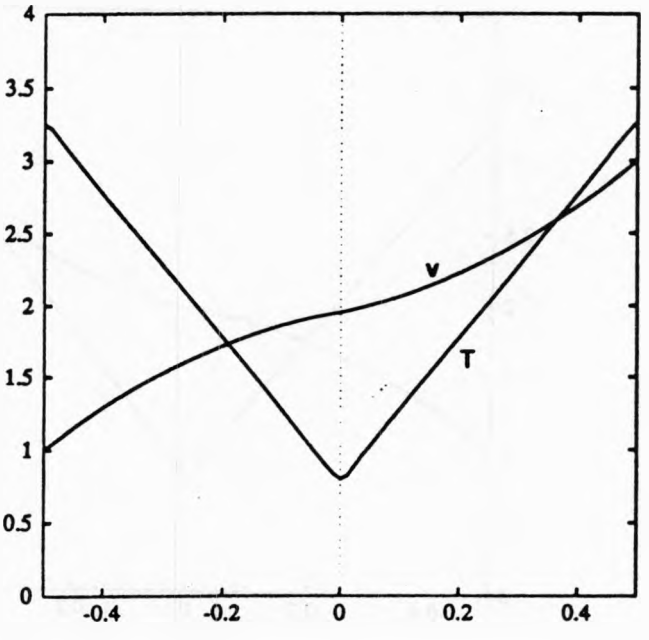


Fig. 11 Smooth non linear problem (λ=0.01) : T and v profiles with EVSS.

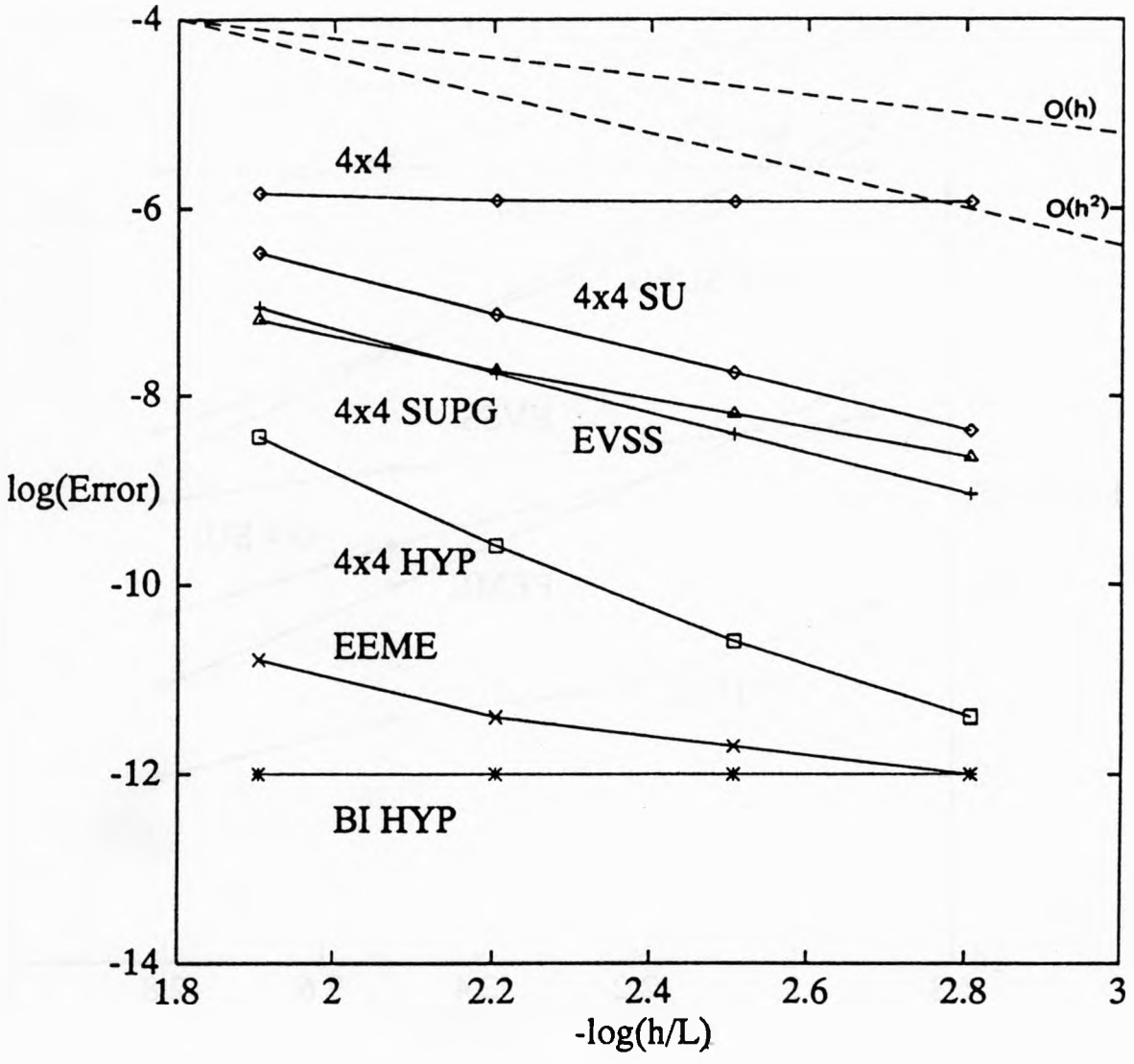


Fig. 12 Smooth non linear problem (λ=0.01) : mesh refinement analysis for v.

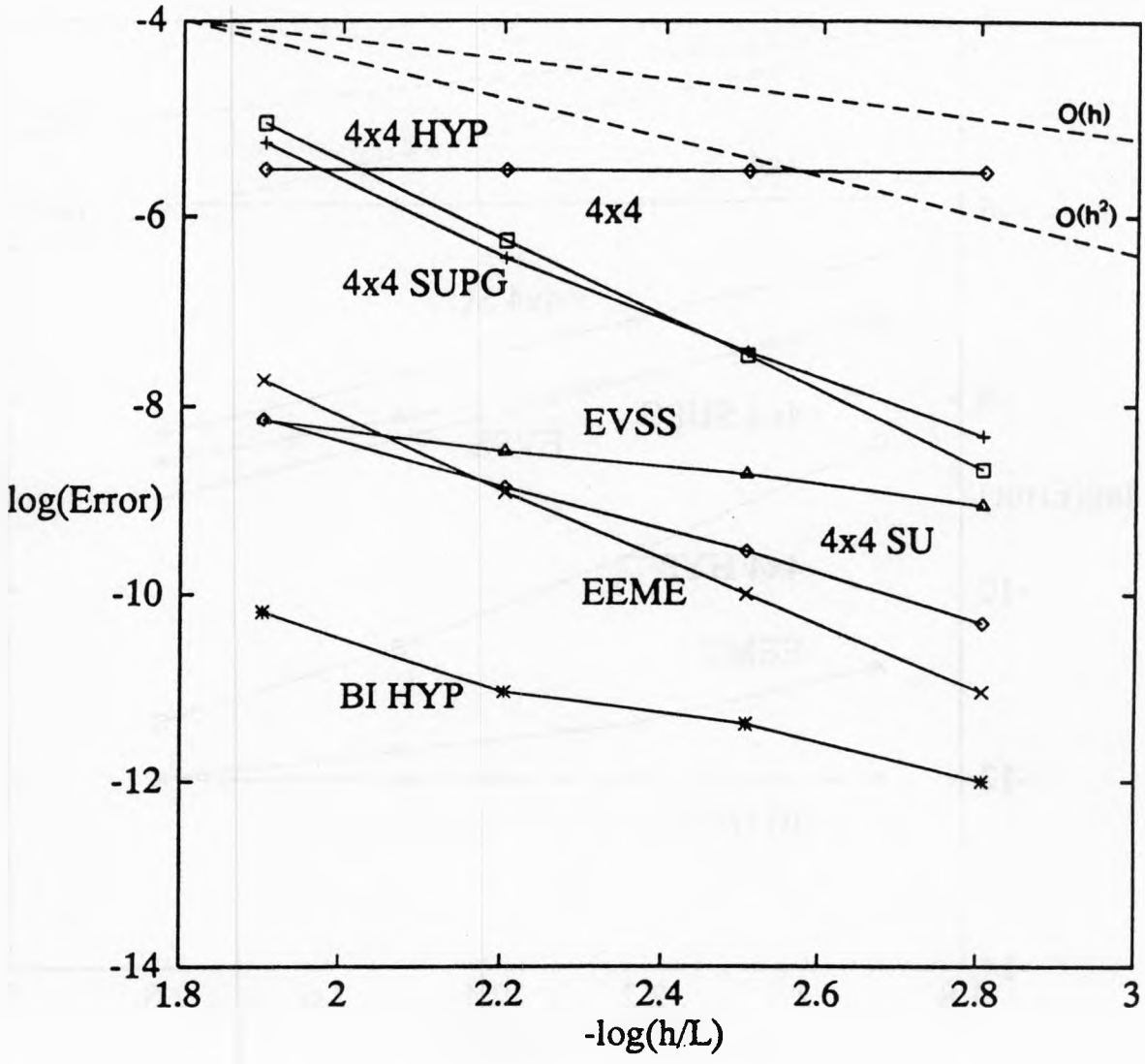


Fig. 13 Smooth non linear problem (λ=0.01) : mesh refinement analysis for T.

6. Non-linear problem with a Dirac source : $\lambda > 0$

Let the source term f be a Dirac distribution centered at x=0 (amplitude =4, λ = 0.05). In this case, we have already observed that the EEME could not be used, because of the presence of the term $< \lambda v f' ; w >$. The reference solution is shown at Figure 14. It has been obtained by extrapolation of the BI HYP technique on highly refined meshes.

4x4 SU	Figure 15.
4x4 SUPG	Figure 16.
EVSS	Figure 17.

The solution obtained with the consistent SUPG method on a subdivised mesh for the stresses presents large oscillations around the singularity. Similar results have been obtained with 4x4 GAL and 4x4 HYP. They are not presented here. The profiles of T and v obtained with 4x4 SU and with EVSS methods have been obtained with the same mesh. However, we have not used sub-elements for the stress interpolation in the EVSS technique (as D is now explicitly interpolated, so that the cost is similar to 4x4 techniques).

Convergence of the 4x4 SU and EVSS techniques for the velocity and stress fields are analyzed in Figures 18 and 19. Although the convergence rate of the 4x4 SU technique appears to be very slow for this singular problem, it must be noted that the slope is still negative.

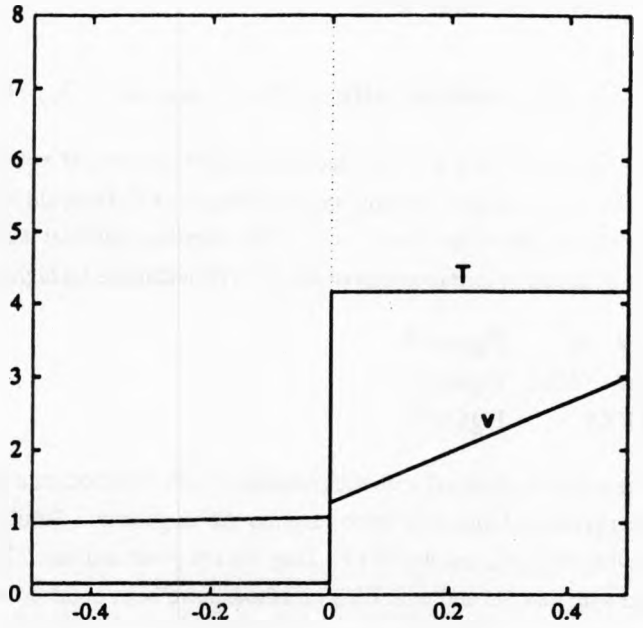


Fig. 14 Non linear problem with a Dirac source (λ=0.05) : T and v reference profiles.

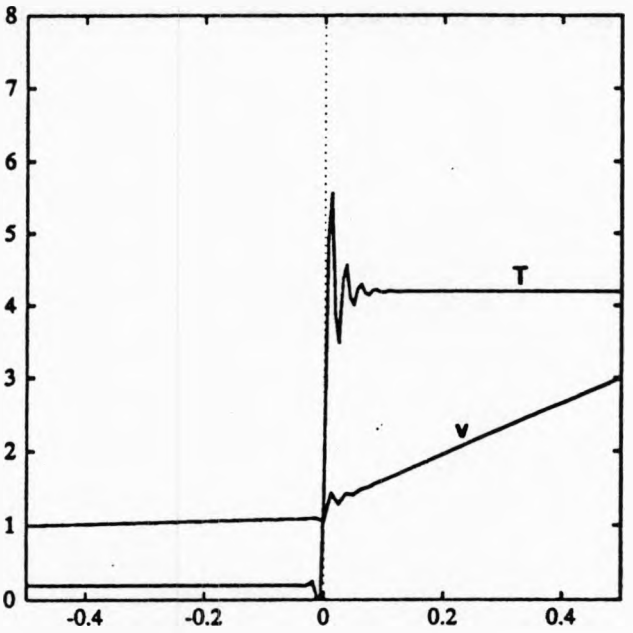


Fig. 15 : Non linear problem with a Dirac source (λ=0.05) : T and v profiles with 4x4 SU.

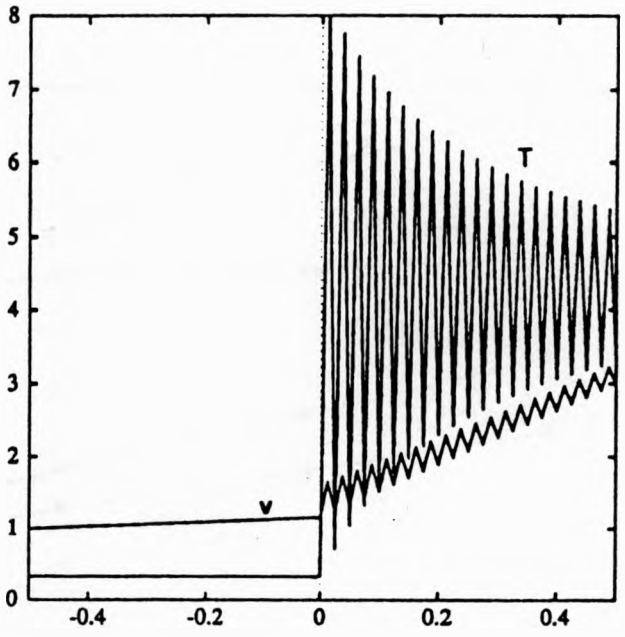


Fig. 16 Non linear problem with a Dirac source (λ=0.05) : T and v profiles with 4x4 SUPG.

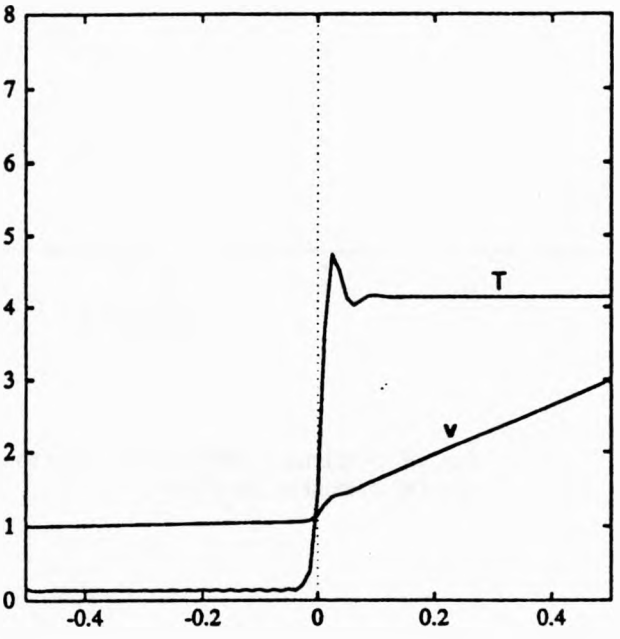


Fig. 17 Non linear problem with a Dirac source (λ=0.05) : T and v profiles with EVSS.

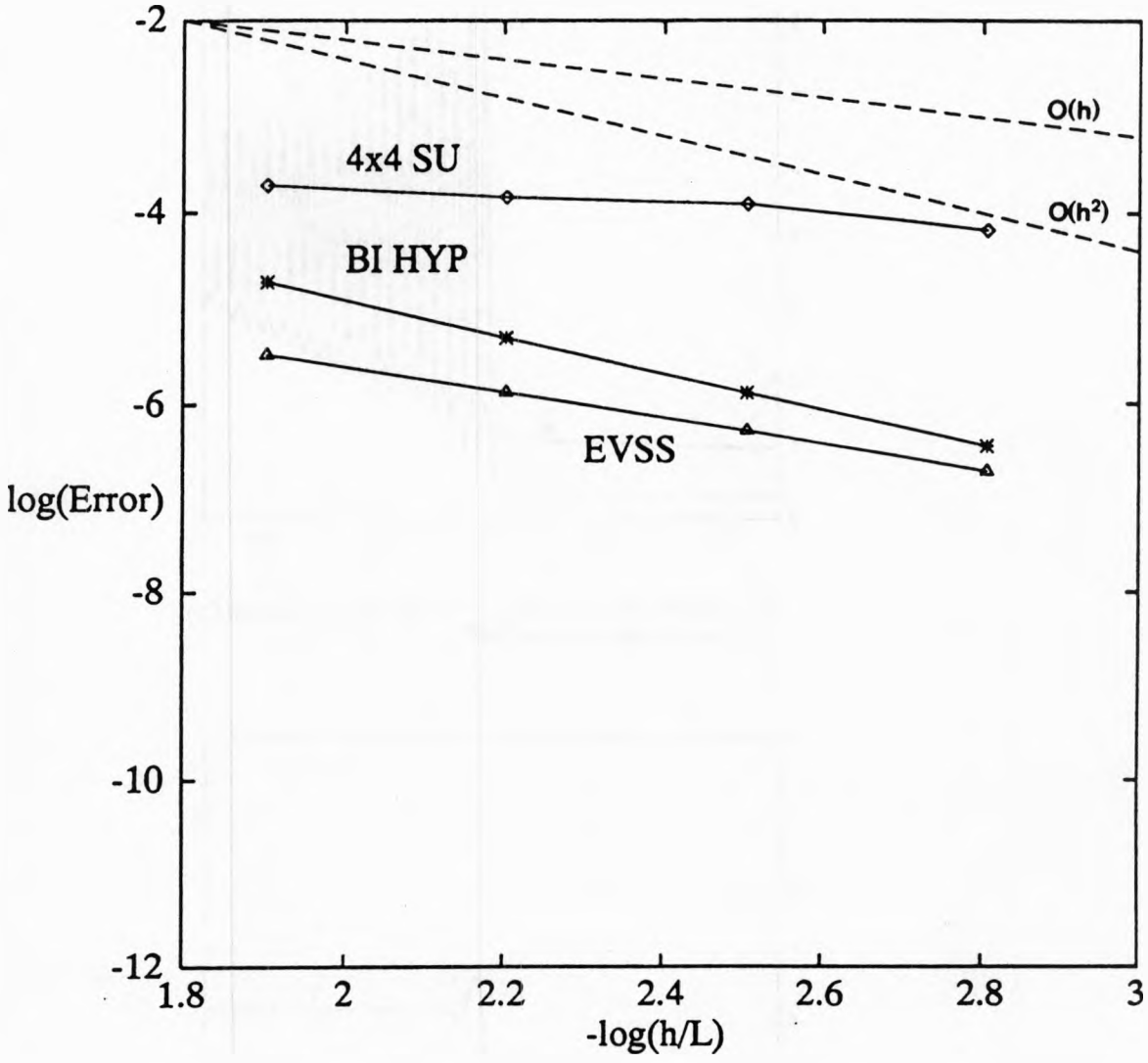


Fig. 18 Non linear problem with a Dirac source (λ=0.05) : mesh refinement analysis for v.

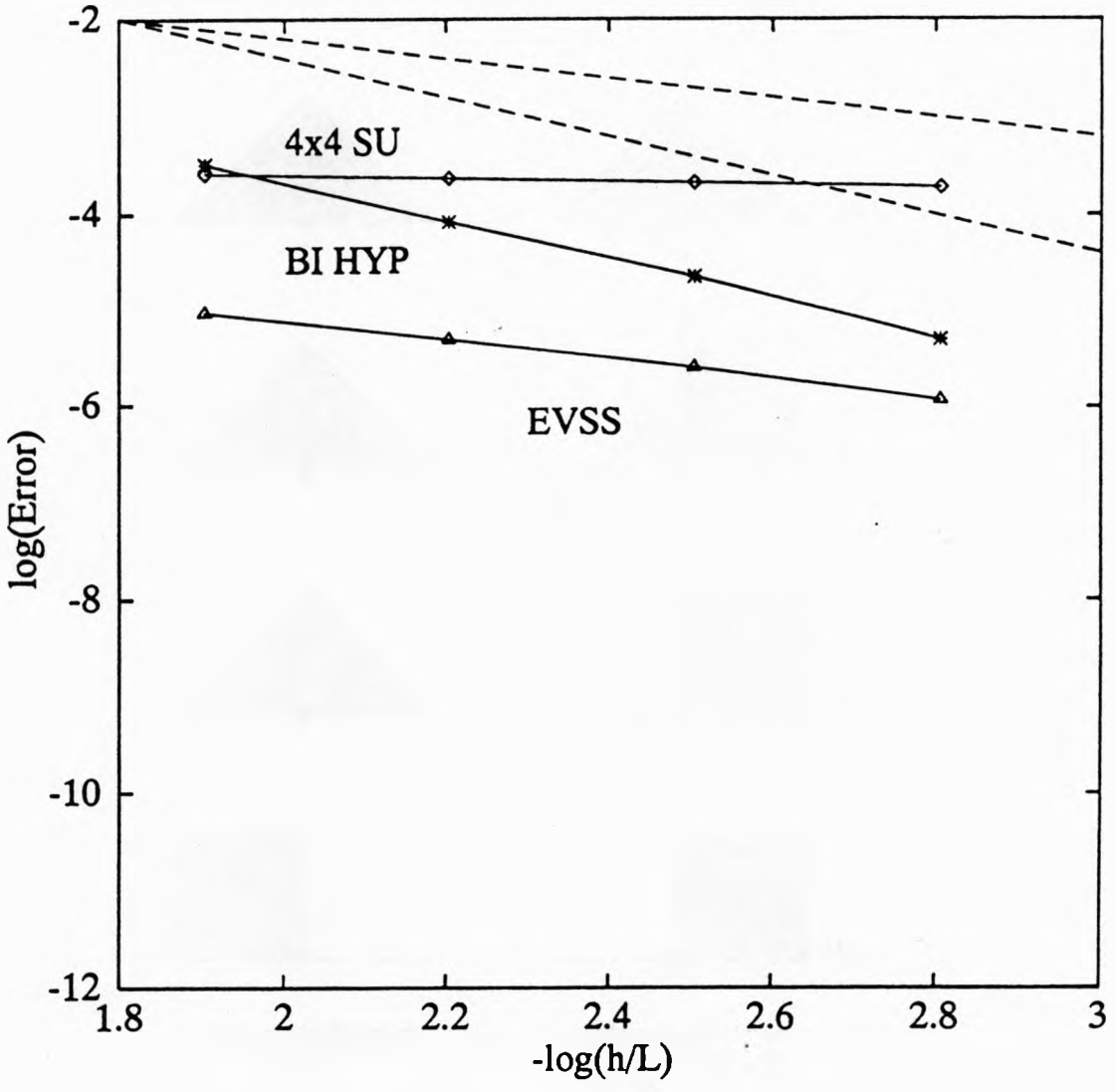


Fig. 19 Non linear problem with a Dirac source (λ=0.05) : mesh refinement analysis for T.

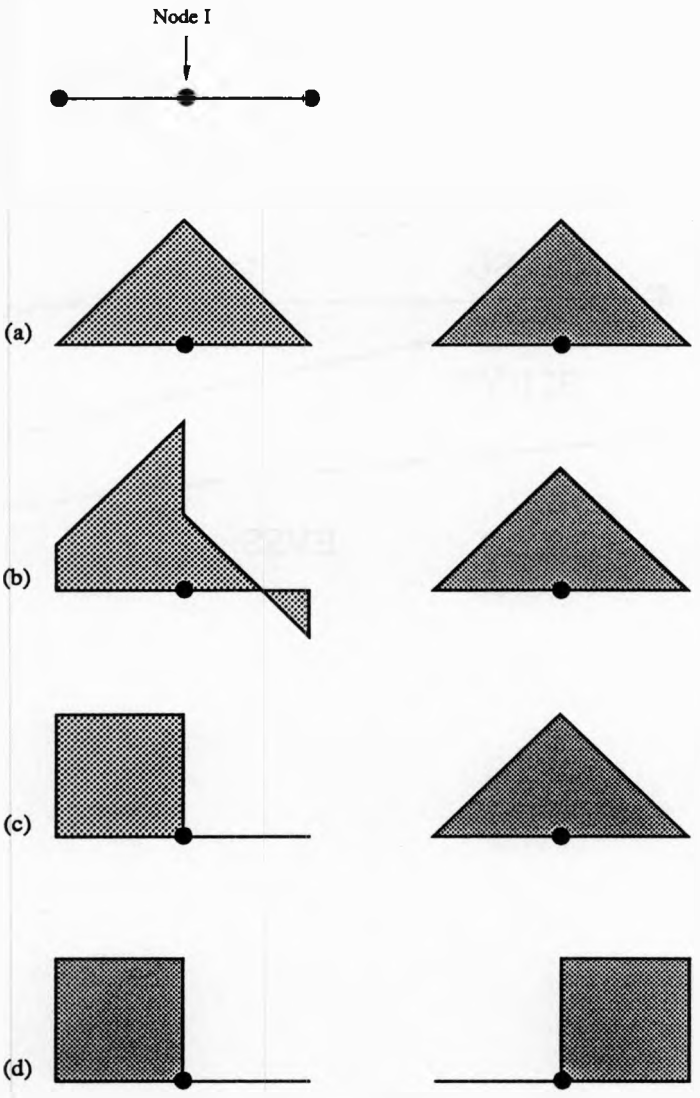


Fig. 20 Weight functions :
(a) Galerkin formulation,
(b) SUPG formulation,
(c) hyperbolic formulation,
(d) bi-directional hyperbolic formulation.

7. Bi-directional hyperbolic method

We know that if we separately integrate the constitutive equation on the basis of a known velocity field, a forward travelling characteristic controls the transfer of information. In this case, the stress must be imposed at the inlet; the SUPG or the hyperbolic formulations give stable and accurate results. On the contrary the coupling of constitutive / momentum equations introduces forward and backward characteristics in stress and velocity perturbations. Our objective is to propose a numerical method adapted to this type of problem.

The bi-directional hyperbolic method is based on the mixed finite element formulation with the following test functions. The weighting function s_i for the constitutive equation relative to node i is constant on the previous element, and vanishes elsewhere. The weighting function w_i for the momentum equation relative to node i is constant on the next element, and vanishes elsewhere. The shape functions for the velocity and the stress are P^1-C^0; sub-elements have not been used. Figure 20 present a summary of the different weight functions presented in this paper.

The idea of introducing the bi-directional hyperbolic method is the following. Information is transported from left to right due to the hyperbolic character of the constitutive equation. However when this equation is coupled to the momentum equation and when boundary conditions are supplied on both sides, the coupling to the momentum equation introduces a transfer of information in the other direction. When the global system is considered, the boundary conditions are of elliptic nature (v(-1) and v(1)) and the transfer of information is of the elliptic type without requiring the EEME substitution.

Results of the technique for the step source and for the Dirac source are respectively shown in Figure 21 and Figure 22. Accuracy as well as stability of those results are obviously much better than those of all other techniques for *both cases*. In particular, oscillations shown around x=0 by EVSS and SU method have completely disappeared.

Convergence analysis of the method with mesh refinement is shown in Figures 12, 13, 18 and 19, where this technique is denoted BI-HYP. Interestingly for the Dirac case, convergence on the stress field is clearly observed.

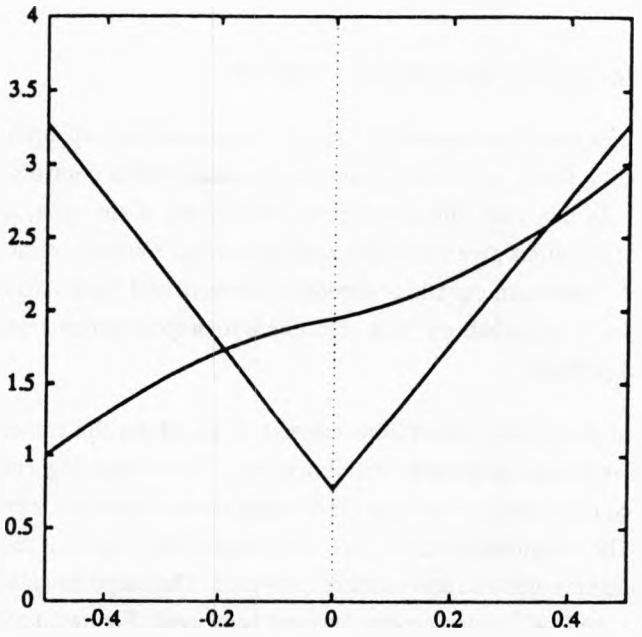


Fig. 21 Smooth non linear problem (λ=0.01) : T and v profiles with BI HYP.

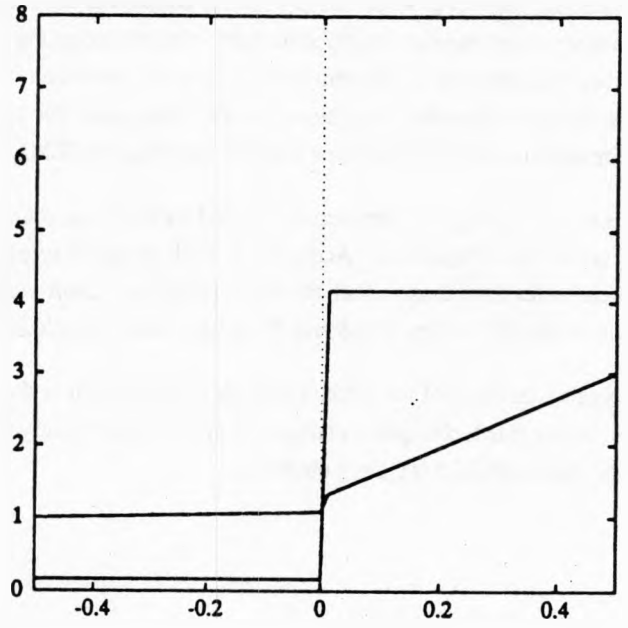


Fig. 22 Non linear problem with a Dirac source (λ=0.05) : T and v profiles with BI HYP.

8. Conclusions

The conclusion of our one-dimensional analysis can be summarized as follows. The 4x4 SU method is stable for smooth and non-smooth problems. However, it only exhibits a slow rate of convergence for the stress field. The 4x4 GAL, 4x4 SUPG and 4x4 HYP formulations are stable only for smooth problems. The EEME formulation is accurate for smooth problems but cannot be used when a Dirac source is included. The EVSS formulation is stable and accurate for smooth and non-smooth problems. However, the behaviour of the method in the vicinity of the singularity is not especially good.

A new method has been proposed for the one-dimensional model. The method is based on a forward/backward integration of the equations. It takes the particular transfer of information of the coupled formulation into account. This method works for smooth and non-smooth problems and exhibits a very high convergence rate. The behaviour in the vicinity of the singularity is also very good. The two-dimensional generalization is not straighforward, but it may be a very promising approach.

Acknowldgements

The results presented in this paper have been obtained within the framework of Interuniversity Attraction Poles initiated by the Belgian State, Prime Minister's Office, Science Policy Programming. V. Legat wishes to acknowledge a scholarship from the *Fonds National de la Recherche Scientifique*.

References

[1] J.M. Marchal, M.J. Crochet "A New Mixed Finite Element for Calculating Viscoelastic Fluid", J. Non-Newtonian Fluid Mech..,26, 77-114 (1987)

[2] M. Renardy "Existence of Slow Steady Flows of Viscoelastic Fluids with Differential Constitutive Equations", Z. angew. Math. Mech., 65, 449-451 (1985).

[3] R.C. King, M.R. Apelian, R.C. Amstrong, R.A. Brown "Numerically Stable Finite Element Techniques for Viscoelastic Calculations in Smooth and Singular Geometries", J. Non-Newtonian Fluid Mech., 29, 147-216 (1988).

[4] P.J. Coates, R.C. Amstrong, R.A. Brown "Calculation of Steady-State Viscoelastic Flow though Axisymmetric Contractions with the EEME Formulation", J. Non-Newtonian Fluid Mech., (submitted) (1991).

[5] M.A. Mendelson, P.W. Yeh, R.A. Brown, R.C. Amstrong "Approximation Error in Finite Element Calculation of Viscoelastic Fluid Flows", J. Non-Newtonian Fluid Mech., 10, 31-54 (1982).

[6] D. Rajagopalan, R.A. Brown, R.C. Amstrong "Finite Element Methods for Calculation of Steady Viscoelastic Flow Using Constitutive Equations with a Newtonian Viscosity", J. Non-Newtonian Fluid Mech., 36, 159-192 (1990).

[7] M.J. Crochet, V. Legat "The Consistent Streamline-Upwind/Petrov-Galerkin Method for Viscoelastic Flow Revisited", J. Non-Newtonian Fluid Mech., in press (1991)

[8] J. Rosenberg,R. Keunings, "Numerical Integration of Differential Viscoelastic Models", J. Non-Newtonian Fluid Mech., 39, 269-290 (1991)

[9] X.L. Luo, R.I. Tanner, "A decoupled Finite Element Streamline-Upwind Scheme for Viscoelastic Flow Problems", J. Non-Newtonian Fluid Mech., 31, 143-162 (1989)

[10] C. Johnson, "Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method", Cambridge University Press, Cambridge, (1987).

[11] A.N. Brooks, T.J.R. Hughues, "Streamline-upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations", Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 32, 199-252 (1982).

[12] F. Brezzi, "On the Existence, Uniqueness and Approximation of Saddle Point Problems Arising from Lagrange Multipliers", RAIRO Num. Anal., 8, 129-151, (1974).

[13] M. Renardy, "Inflow Boundary Conditions for Steady Flows of Viscoelastic Fluids with Differential Constitutive Laws", Technical Summary Report 2916 University of Wisconsin Madison, Math. Res. Cent (1986).

[14] M. Fortin, R. Pierre, "On the Convergence of the Mixed Method of Crochet and Marchal for Viscoelastic Flows", .Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 73, 341-350 (1989).

[15] P.G. Ciarlet, "The Finite Element Method for Elliptic Problems", North Holland, Amsterdam (1978).

5.2.2. A la recherche d'une méthode stable et précise.

La seconde étape de notre périple au sein des fluides viscoélastiques est un retour à la méthode 4x4 SUPG. Quoique la stabilité d'une telle méthode face à une singularité est médiocre, nous confirmons la précision théorique d'une approche consistante lorsqu'elle est mise en oeuvre dans le cadre de géométries régulières.

Cette méthode n'a donc qu'un intérêt limité en pratique. Elle doit être considérée comme une méthode de référence ou de transition : celle-ci a permis de mettre en lumière le compromis délicat qu'il s'agit de faire entre stabilité et précision. Le traitement consistant de l'upwinding permet donc d'accroître la précision mais au prix d'une perte de la stabilité de la méthode.

Par ailleurs, le traitement inconstant de l'upwinding préconisé par Marchal et Crochet dans la méthode 4x4 SU accroît de manière spectaculaire la stabilité numérique de la formulation discrète, mais la précision diminue. Pour la plupart des problèmes d'intérêt pratique possédant des singularités, la méthode 4x4 SU se révèle ainsi être la seule apte de fournir des résultats à haut nombre de Weissenberg. Une publication dans le *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* reprend une analyse de la précision des deux méthodes appliquées à des géométries régulières.

JOURNAL OF NON-NEWTONIAN FLUID MECHANICS, in press (1992)

THE CONSISTENT STREAMLINE-UPWIND/PETROV-GALERKIN METHOD FOR VISCOELASTIC FLOW REVISITED

M.J. CROCHET and V. LEGAT

APPLIED MECHANICS
UNIVERSITE CATHOLIQUE DE LOUVAIN
Place du Levant, 2
B-1348 LOUVAIN-LA-NEUVE, BELGIUM.

Summary

In an earlier paper [1], Marchal and Crochet introduced two mixed finite element methods for calculating viscoelastic flow. The first one, based on a consistent streamline-upwind/Petrov-Galerkin integration of the constitutive equations, was disregarded because it produced wiggles in the numerical calculation of the stick-slip flow of a Maxwell fluid. The second method, based on a non-consistent streamline-upwind integration, was found to be stable at high values of the Weissenberg number ; however, it introduces artificial diffusivity of the order of the element size h which decreases with mesh refinement.

In the present paper, we reexamine the first method. We show that it is both stable and accurate for solving flows of a Maxwell fluid in smooth geometries. The test problems are the flow around a sphere in a tube and the flow through a corrugated tube. The results coincide with those of other accurate methods for solving the same problems.

Finally, we show that the results obtained with the second method converge towards the most accurate results when the element size decreases. In particular, we show that the velocity field is little affected by numerical diffusion in the stress constitutive equations.

1. Introduction

The present paper presents a further effort toward the construction of accurate and stable finite element methods for the numerical solution of viscoelastic flows.

In an earlier paper, Marchal and Crochet [1] introduced new mixed finite element methods for solving the flow of viscoelastic fluids of the differential type. The methods addressed two issues : i. the interpolation must satisfy the Brezzi-Babuska conditions of convergence [2,3]; ii. the integration must take into account the hyperbolic character of the constitutive equations. The first issue was solved by introducing bilinear sub-elements for the stress representation; it was shown that 16 quadrilateral sub-elements is an optimal choice. For the second issue, the authors in [1] first considered the so-called streamline-upwind/Petrov-Galerkin (SUPG) method [4] for discretizing the constitutive equations. As a test problem, they selected the stick-slip flow which is characterized by a stress singularity at the transition between no-slip and slip sections of the boundary. The SUPG method applied to that problem generated wiggles in the stress and velocity fields and was thus disregarded. The authors then turned to the so-called non-consistent streamline-upwind (SU) method, where the modified weighting function only applies to the convective term in the constitutive equations. The SU method is highly stable; results have been obtained at large values of the Weissenberg number for various flows [5-8]. The disadvantage of SU is that it introduces an artificial diffusivity of order h in the discrete form of the constitutive equations; its effect disappears when the mesh is refined, but the rate of convergence may be slow.

It is unfortunate that, in [1], Marchal and Crochet selected the stick-slip flow as a test problem, which led them to forsake any further testing of the consistent SUPG4x4 method. In particular, they overlooked the solution of flow problems in smooth geometries, such as the flow through a corrugated tube, the fall of a sphere in a Maxwell fluid or the journal bearing flow. In the present paper, we revisit the SUPG4x4 method first explained in [1]. We apply it to the flow of an upper-convected Maxwell fluid (without any additional viscosity) through the corrugated tube and around a sphere. We show that the method is accurate and stable. The results show excellent agreement with spectral methods [9] for the corrugated tube and with the EEME method developed at MIT [10] for the flow around a sphere [11].

Our converged results based on the consistent SUPG4x4 method allow us to examine the convergence of the non-consistent SU4x4 method. Such an exercise had already been done in [13] for the corrugated tube. It is repeated for the sphere problem, characterized by a complex flow domain and elements of unequal size. As in [13], we find

that convergence is slower with SU4x4 but that the results are accurate at the asymptotic limit where the element size vanishes.

The SUPG4x4 method is briefly reviewed in section 2. It is applied to the flow of a Maxwell fluid around a sphere in section 3 and to its flow through a corrugated tube in section 4. The behavior of the SU4x4 method for the sphere problem is examined in section 5, and we draw conclusions in section 6.

2. The Petrov-Galerkin integration of the constitutive equations

Although all our developments apply as well to more realistic constitutive equations of the differential type (see e.g. [5]), we limit ourselves in the present paper to the numerical calculation of the flow of a Maxwell fluid. The stress constitutive equation is given as follows,

$$\underline{T} + \lambda \overset{\nabla}{\underline{T}} - 2\eta \underline{d} = \underline{0} \tag{1}$$

where $\underline{T}$ is the extra-stress tensor, $\underline{d}$ the rate-of-deformation tensor, λ the relaxation time and η the (constant) shear viscosity. The upper triangle denotes the upper-convected derivative. The momentum equation and the conservation of mass are expressed as follows,

$$-\nabla p + \nabla \cdot \underline{T} + \mathbf{f} = \rho \mathbf{a}\,, \tag{2}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0\,, \tag{3}$$

where p is the pressure, **f** the body force, ρ the density, **a** the acceleration and **v** the velocity.

We use a finite element formulation for calculating the fields $\underline{T}$, **v** and p over the flow domain Ω. Let S, V and P denote the spaces of the extra-stress tensor, of the velocity field and of the pressure, and let S^h, V^h and P^h denote the corresponding approximating subspaces. The flow domain Ω is discretized by means of quadrilateral elements, the union of which forms the domain Ω^h. For the velocity field we use biquadratic (P^2-C^0) shape functions. For the pressure, we use either a continuous P^1-C^0 or a discontinuous P^1-C^{-1} representation. For the stresses, we use a representation introduced in [1] which satisfies the Brezzi-Babuska condition of convergence [12]. The quadrilateral element is subdivided into 4x4 bilinear quadrilateral sub-elements for the stresses.

The *Galerkin* formulation of the steady-state problem characterized by (1-3) is given as follows :

Find $\underline{\underline{T}} \in S^h$, $v \in V^h$, $p \in P^h$ such that

$$<(\underline{\underline{T}} + \lambda \overset{\nabla}{\underline{\underline{T}}} - 2\eta \underline{\underline{d}}) \times \underline{\underline{\psi}} > = 0 , \qquad \forall \underline{\underline{\psi}} \in S^h, \qquad (4)$$

$$<(-p \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{T}}) \times \nabla\phi > + < \rho a \cdot \phi > = < f \cdot \phi > + << t \cdot \phi >> , \qquad \forall \phi \in V^h \qquad (5)$$

$$< (\nabla \cdot v)\pi > = 0 , \qquad \forall \pi \in P^h . \qquad (6)$$

In these equations, simple brackets denote the L^2 scalar product over Ω^h, while double brackets represent the integration over the boundary $\partial \Omega^h$. The notation $\underline{\underline{A}} \times \underline{\underline{B}}$ means $\mathrm{tr}(\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{B}}^T)$.

We have shown in [1] that the weighted residual formulation (4-6) together with the stress discretization described above is able to provide numerical results at relatively low values of the Weissenberg number. The Galerkin formulation fails for higher values, as one expects in general for convection dominated problems. In [1], Marchal and Crochet introduced the streamline-upwind/Petrov-Galerkin (SUPG) method [4] instead of (4) for solving the discretized constitutive equations. Instead of (4), they write

$$<(\underline{\underline{T}} + \lambda \overset{\nabla}{\underline{\underline{T}}} - 2\eta \underline{\underline{d}}) \times \hat{\underline{\underline{\psi}}} > = 0 , \qquad (7)$$

where

$$\hat{\underline{\underline{\psi}}} = \underline{\underline{\psi}} + k\, v \cdot \nabla \underline{\underline{\psi}} . \qquad (8)$$

The reader is referred to [1] for a precise definition of k in (8). The model problem in [1] was the stick-slip flow which is characterized by a stress singularity at the transition between the slip and no-slip boundary conditions. It was found that, for the model problem, the stress contourlines were fraught with gross oscillations when SUPG is being used.

It is unfortunate that, in [1], the SUPG method was dismissed on the basis of a single example endowed with a strong stress singularity. We will show in the next two sections that SUPG is successful on two model problems for viscoelastic flow calculations.

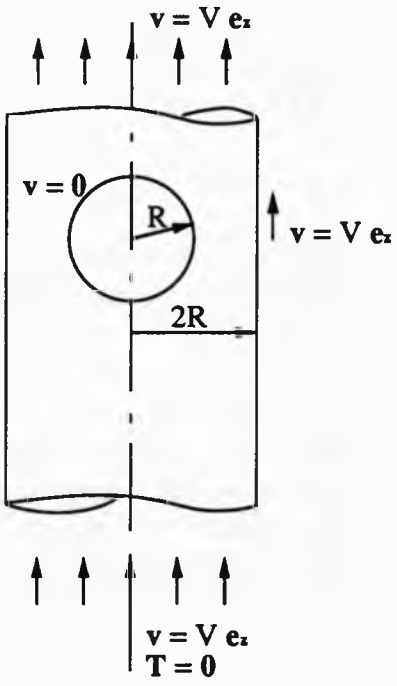


Fig. 1 Geometry of the problem and boundary conditions.

3. The flow of a Maxwell fluid around a sphere in a tube

As a first test problem for the SUPG method, let us consider the flow of Maxwell fluid around a sphere falling along the axis of a long tube. The radius of the sphere is R, while the tube radius is twice as large. The flow boundary conditions are indicated on Fig.1. A uniform velocity V oriented along the axis of symmetry is imposed in the entry and in the exit sections and along the cylindrical wall; vanishing extra-stresses are also imposed in the entry section. The velocity field vanishes on the sphere. Such a selection of boundary conditions requires long entry and exit channels; for our calculations, the flow domain extends from -15R down to 30R, while the sphere is centered at the origin.

In order to verify the accuracy of our calculations, we have selected three finite element meshes based on the same topology. Let h denote a typical element size for the coarse mesh I; mesh II and mesh III are then characterized by element sizes h/2 and h/3, respectively. The central part of the meshes near the sphere is shown in Fig.2. For the 4x4 element described in section 2, characteristic values of the meshes are given in Table 1. To obtain an accurate solution, it is essential to introduce thin layers of elements on the spherical surface in view of the stress boundary layers proper to viscoelastic problems.

Table I Characteristic dimensions of finite element meshes for the sphere problem

Mesh	Elements	Velocity nodes	Degrees of freedom
I	207	925	16126
II	510	2175	38644
III	1009	4213	75512

The main quantity of interest is the drag exerted by the viscoelastic fluid on the sphere. For creeping Newtonian flow with a viscosity η in an infinite space, the drag D^0 is given by

$$D^0 = 6\pi \eta \, VR \, . \qquad (9)$$

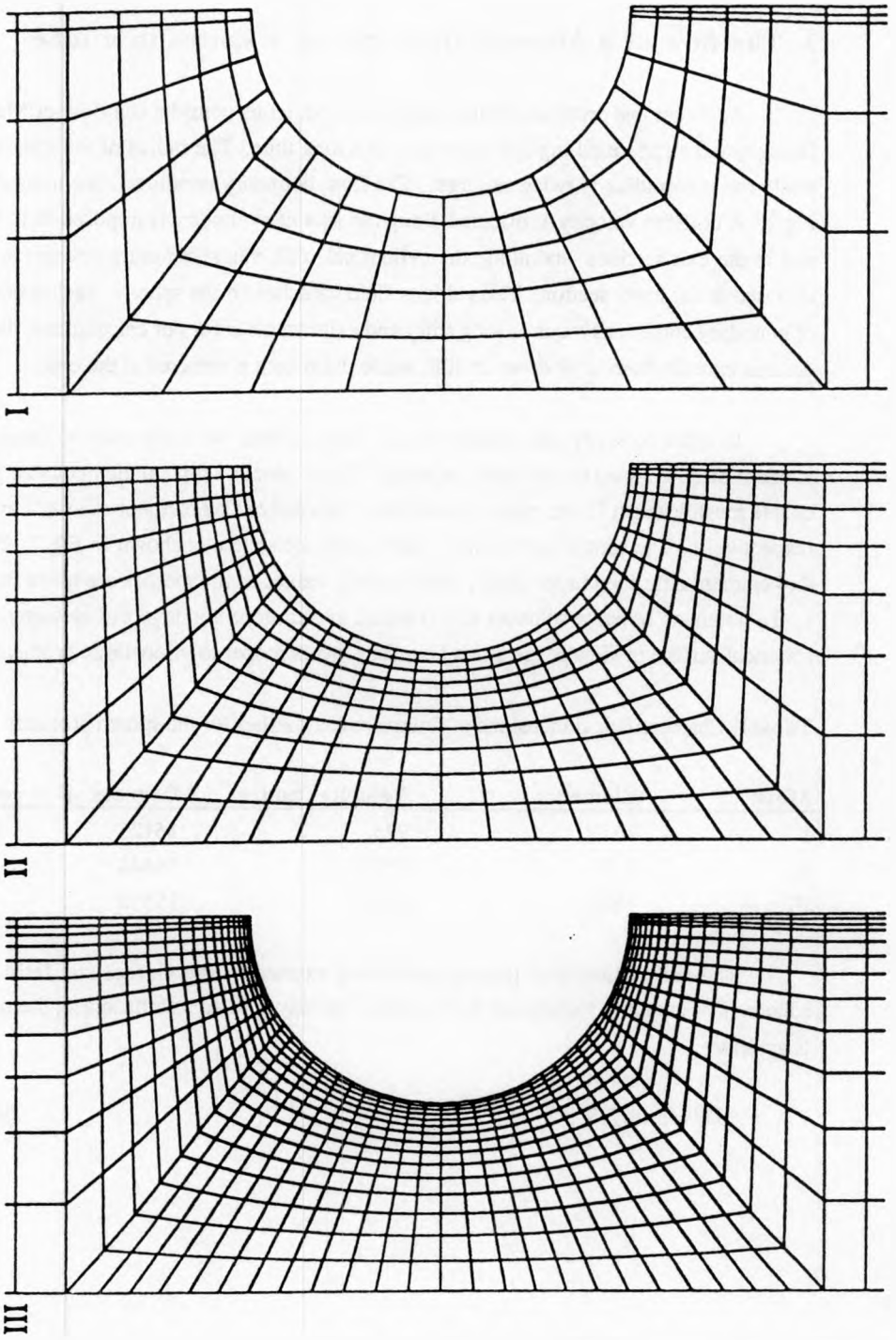


Fig. 2 Central portion of finite element meshes used for solving the sphere problem.

For the flow in a tube and for fluids other than Newtonian, the drag correction factor is defined as

$$\chi = D/D^0 , \qquad (10)$$

where D is the calculated drag. For a finite element solution, the drag D is obtained by means of the right-hand side of (5) which is calculated over the spherical surface. Table II summarizes the results obtained for the drag correction factor at various values of χ up to a Weissenberg number of 1.5, the latter being defined as

$$We = \lambda V/R . \qquad (11)$$

We have also indicated in Table II values of the drag correction factor obtained for the same problem by Lunsmann et al [11]. All these values are reported in Fig.3.

Table II. Drag correction factor for the flow of a Maxwell fluid around a sphere in a tube; SUPG 4x4 method.

We	Mesh I	Mesh II	Mesh III	Ref [11]
0.	5.9486	5.9476	5.9475	5.9465
0.1	5.8638	5.8620	5.8621	
0.2	5.6624	5.6598	5.6597	5.6583
0.3	5.4235	5.4197	5.4195	
0.4	5.1920	5.1872	5.1868	5.1845
0.5	4.9867	4.9801	4.9795	4.9766
0.6	4.8125	4.8031	4.8021	
0.7	4.6697	4.6548	4.6533	
0.8	4.5593	4.5320	4.5299	
0.9	Diverges	4.4314	4.4244	
1.0		4.3502	4.3405	4.3364
1.1		4.2862	4.2697	
1.2		Diverges	4.2159	
1.3			4.1712	
1.4			4.1352	
1.5			4.1089	4.1072
			Diverges	Diverges

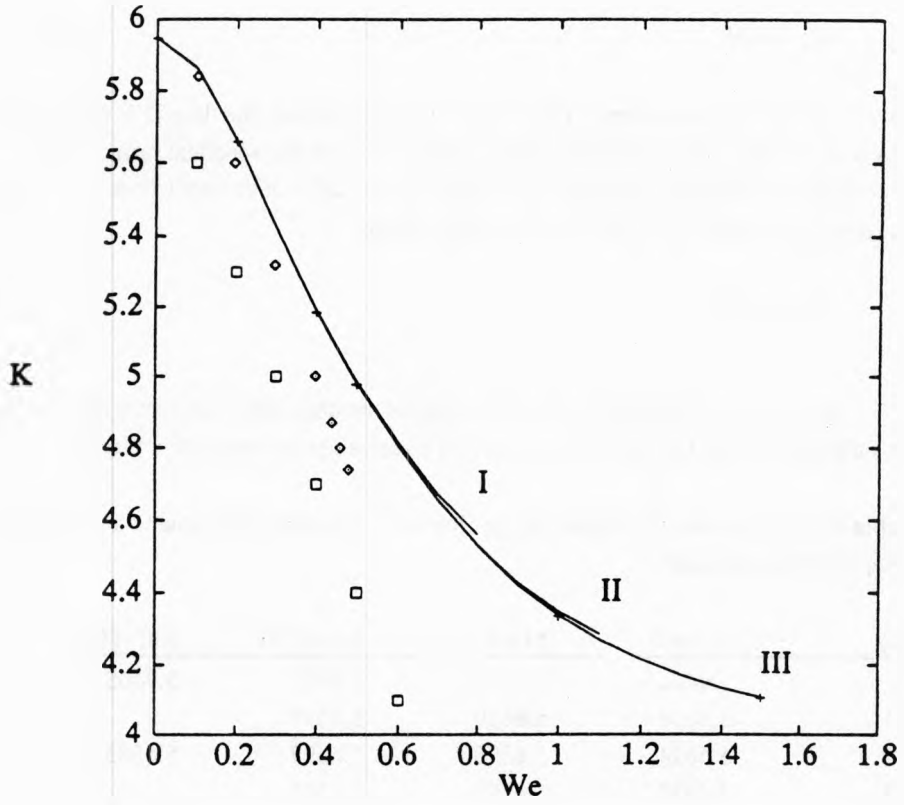


Fig. 3 Drag correction factor for the flow around a sphere in a tube filled with a Maxwell fluid; plain lines : SUPG4x4; crosses :EEME [11]; losanges : Zheng et al [14]; squares : Sugeng and Tanner [13].

First, we note that an increased mesh refinement allows us to obtain converged solutions at higher values of We. In view of the large number of variables mentioned in Table I, we have not attempted to reach higher values. Secondly, we note in Table II that mesh refinement exhibits good convergence properties. The relative discretization error between Mesh II and Mesh III is of the order of 10^{-4} up to We=0.8; beyond that value, the results obtained with Mesh II start shifting upward and prevent a comparison with Mesh III.

We find that, up to We=1, the relative difference between our results and those obtained by Lunsmann et al [11], with the EEME method, shown in Fig.3, is less than 10^{-3}. It is important to note that the SUPG 4x4 and the EEME method give essentially the same results for this test problem. We have also indicated in Fig.3 the boundary element results of Sugeng and Tanner [14] and of Zheng, Phan-Thien and Tanner [15] which exhibit a definitely lower value of the drag correction factor. It is worth mentioning that earlier results by Crochet [16], sometimes compared in the literature with those for a Maxwell fluid [15,17], referred *explicitely* to an Oldroyd-B fluid with a non-vanishing retardation time and should not be compared with the present results.

In order to simultaneously demonstrate the good convergence properties of SUPG 4x4 and the complexity of the present problem, we have selected typical features proper to the velocity and the extra-stress fields near the sphere. Fig.4a shows the profile of the axial velocity component in the plane z=0 at We=0.7 obtained for the three meshes, while Fig.4b shows the axial velocity profile along the axis r=0. The value We=0.7 has been selected because, at that value, we have obtained converged solutions for all three meshes; however, the results with Mesh I lose their accuracy since we approach the limit of convergence which occurs just behind We=0.8. In the plane z=0, Fig.4a shows that the axial velocity profiles are essentially superposed for Mesh II and Mesh III. The same is true along the axis of symmetry in Fig.4b, where we find that the velocity field with the coarse Mesh I exhibits oscillations at the element level which anticipate loss of convergence.

Fig.5a shows that the stresses in the equatorial plane are characterized by a thin boundary layer. They exhibit an oscillation along the boundary of the sphere, with a wavelength equal to the element size, which is not propagated to the flow domain ; in Fig.5a, we have indicated *at r=1* the mean value of the stress component T_{zz}. The magnitude of the stress component T_{zz} is lower along the axis of symmetry, as shown in Fig.5b, but it is characterized by a steep slope near the downstream stagnation point. Mesh I is clearly too coarse for accurate results, but the results with Meshes II and III are the same.

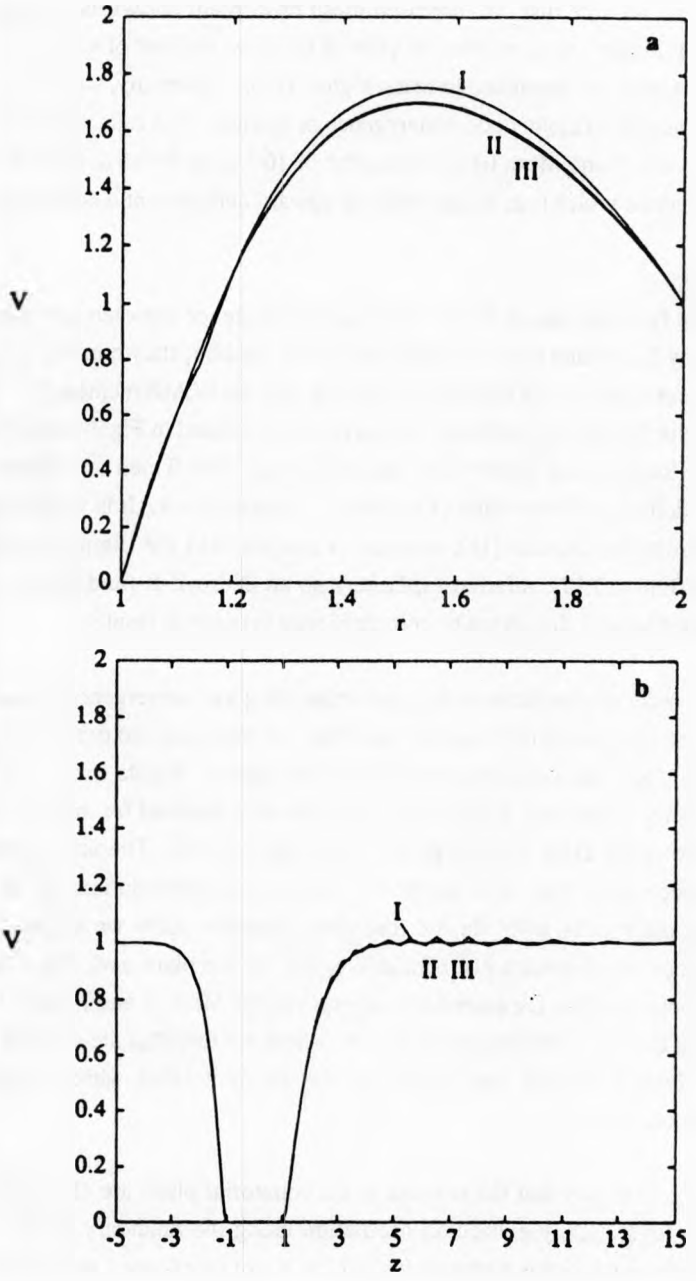


Fig. 4 Axial velocity profile in the equatorial plane (a) and along the axis of symmetry (b) obtained with the SUPG 4x4 method for Meshes I, II and III.

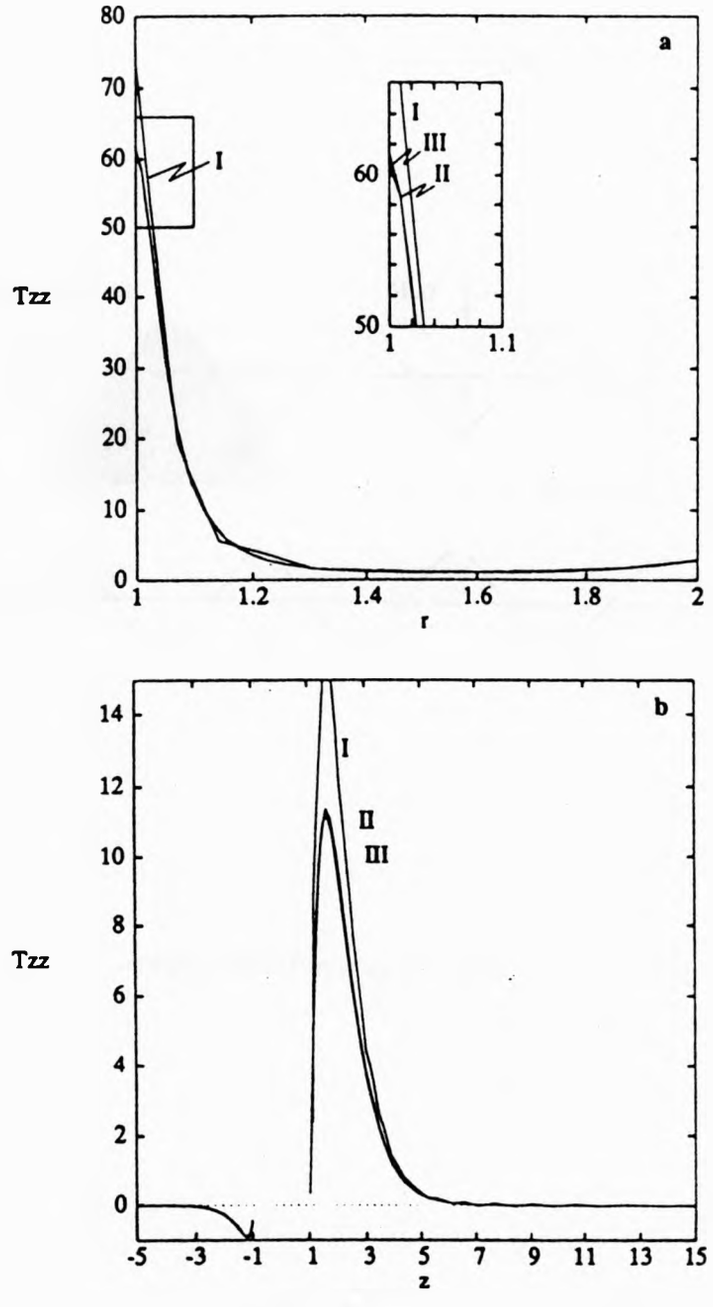


Fig. 5 Extra-stress component T_{zz} in the equatorial plane (a) and along the axis of symmetry (b) obtained with the SUPG4x4 method for Meshes I, II and III.

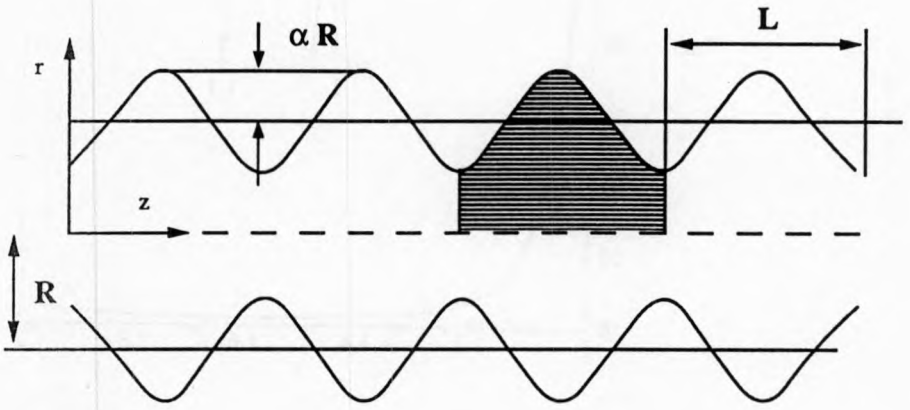


Fig. 6 Flow geometry of the undulating tube.

4. The flow of a Maxwell fluid through an undulating tube

Our second smooth problem is the flow of a Maxwell fluid through an undulating tube which had been investigated by Pilitsis and Beris [9] and was also used by the present authors [13] for proving the convergence of the SU4x4 method by means of a Richardson's extrapolation .

The geometry of the problem is recalled in Fig.6. The radius of the undulating tube along the z-axis is given by

$$r_w = R\,[1 - \alpha \cos(2\pi z/L)]\,; \tag{12}$$

the significance of the constants is shown in Fig.6. As in [13], we limit ourselves to the values $\alpha = 0.1$ and the ratio R/L=.16. The quantity of interest is the flow resistance fRe defined as follows,

$$fRe = 2\pi\,\delta P\,R^4/L\eta Q\,, \tag{13}$$

where δP is the pressure drop per wavelength and Q the flow rate, as a function of the Weissenberg number

$$We = \lambda Q/R^3\,. \tag{14}$$

We have designed four finite element meshes for solving the present problem. By contrast with the sphere problem considered in section 3, we preserve the same transverse discretization of 11 elements, with a mesh refinement in the boundary layer near the wavy wall. In the flow direction, however, we have successively selected 8, 16, 32 and 64 elements over a wavelength. The meshes are shown in Fig.7, where we have doubled the scales in the y direction for a better visibility of the mesh in the transverse direction.

The results for fRe as a function of the Weissenberg number We are given in Table III and summarized in Fig.8. First, we observe that our limit of convergence depends upon mesh refinement in the flow direction; the finer the mesh, the higher the limit of convergence in We. Secondly, we observe that, for a given mesh, the error in fRe starts increasing at a Weissenberg number lower than the limit of convergence. This is apparent in Fig.8, where we find for example that the curves corresponding to Mesh III and Mesh IV separate at We=7. Below that value, the relative difference of fRe between Mesh III

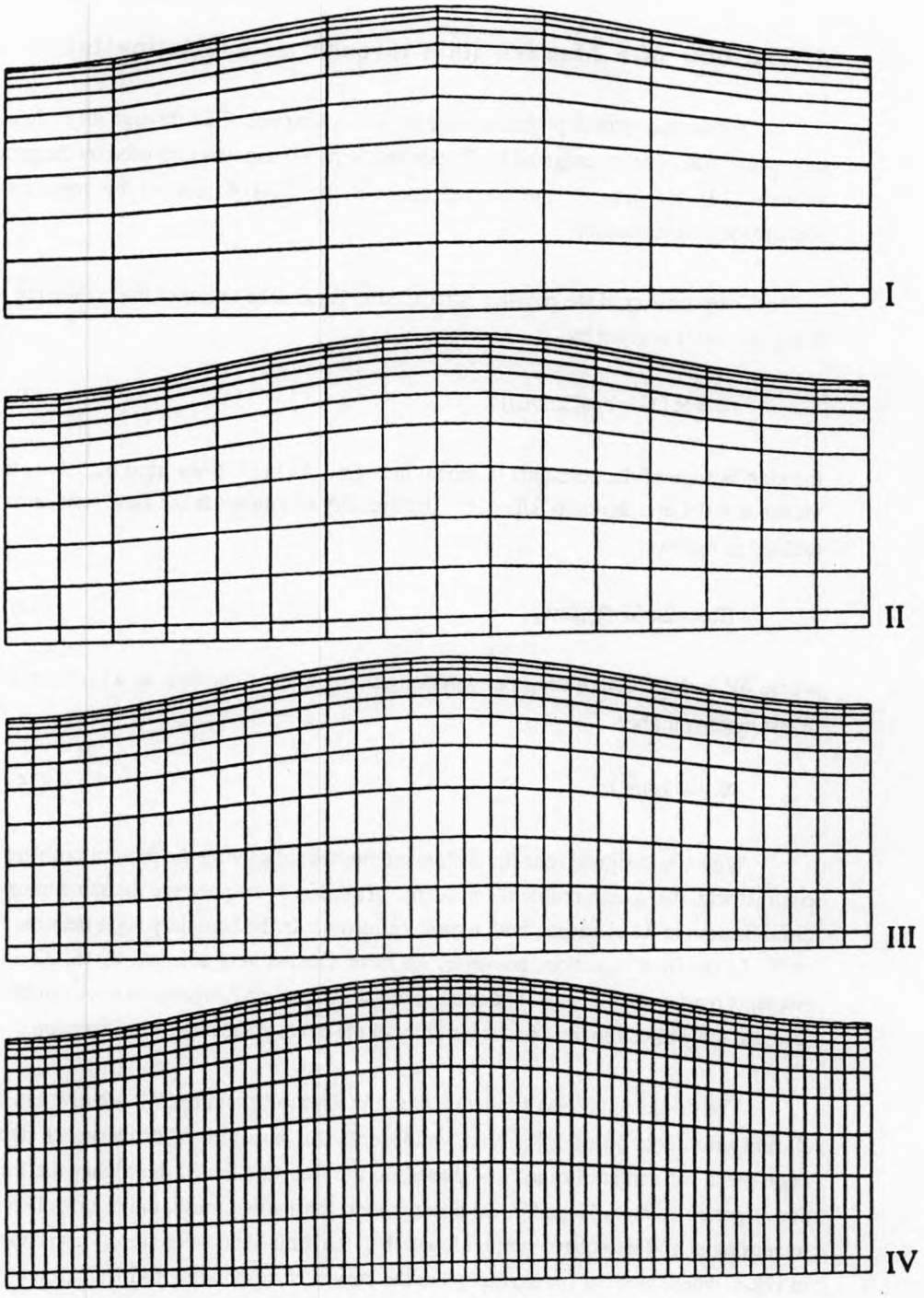


Fig. 7 Finite element meshes I to IV for the undulating tube. Transverse dimensions have been multiplied by 2.

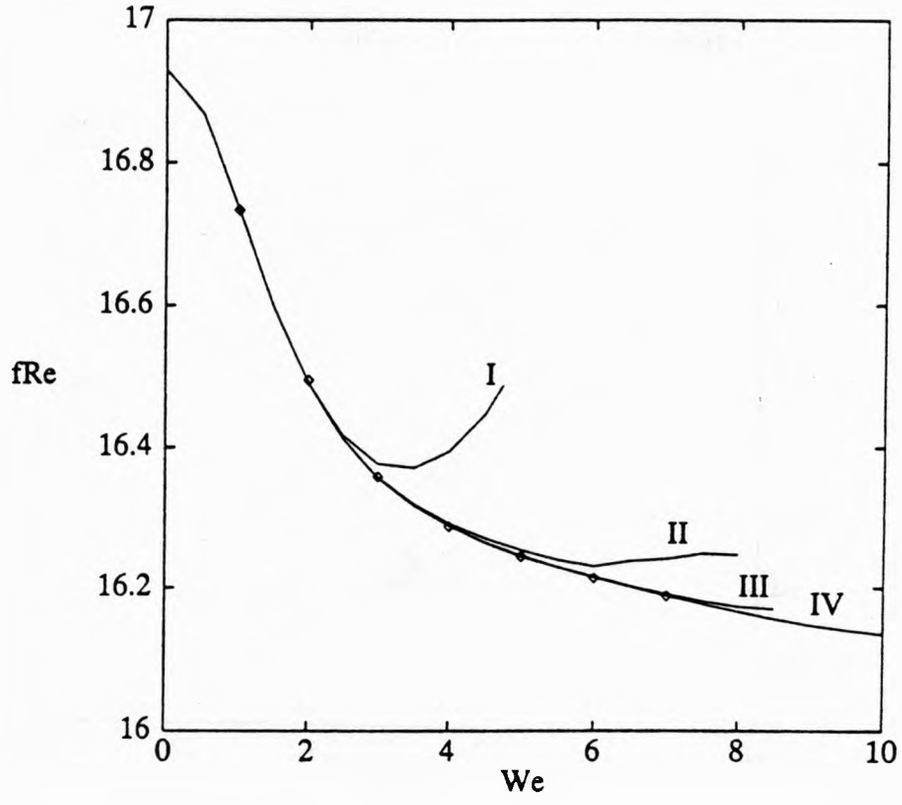


Fig. 8 Flow resistance fRe as a function of the Weissenberg number We with meshes I to IV shown in Fig.7, together with the results of [9], indicated by the symbol .

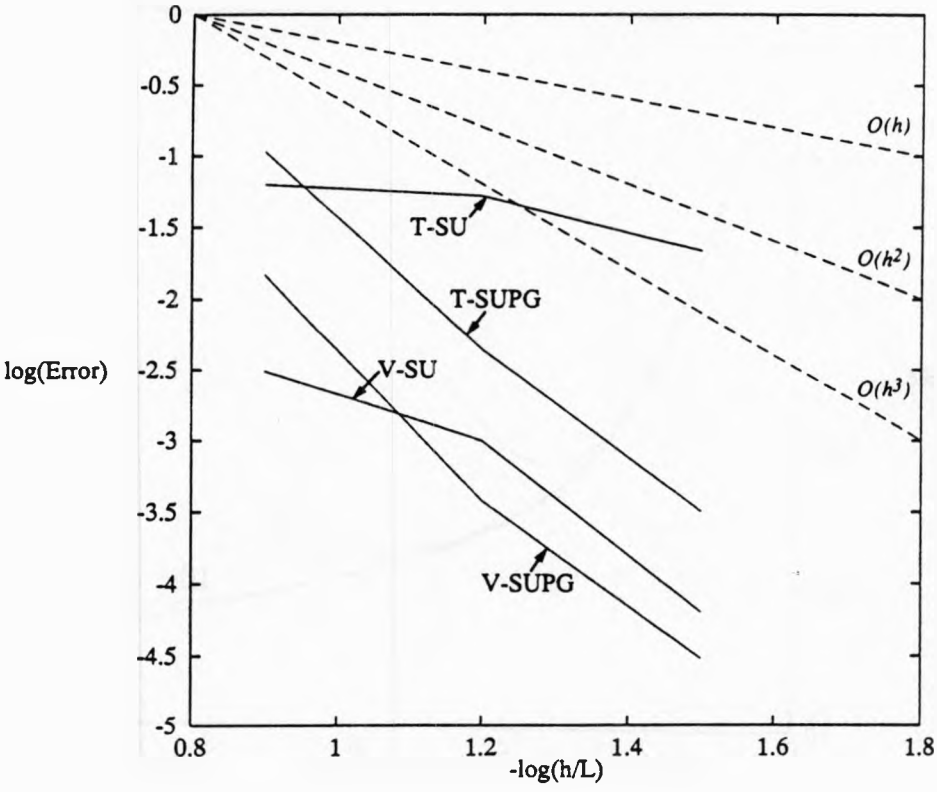


Fig 9 Relative error of the stress T_{zz} and of the axial velocity at one point as a function of the grid size.

and Mesh IV is less than 10^{-4}. Finally, we observe a remarkable agreement between our results and those of Pilitsis and Beris [9].

Table III. Flow resistance fRe as a function of the Weissenberg number for the flow of a Maxwell fluid through an undulating tube.

We	SUPG4x4 Mesh I	SUPG4x4 Mesh II	SUPG4x4 Mesh III	SUPG4x4 Mesh IV	SU4x4 Ref[12]	Spectral Ref[9]
0,0	16,930	16,930	16,930	16,930		
0,5	16,868	16,869	16,869	16,869		
1,0	16,734	16,735	16,735	16,735	16,735	16,734
1,5	16,597	16,598	16,598	16,598		
2,0	16,489	16,490	16,490	16,490	16,490	16,494
2,5	16,412	16,412	16,412	16,412		
3,0	16,378	16,358	16,357	16,357	16,358	16,359
3,5	16,372	16,320	16,318	16,317		
4,0	16,395	16,292	16,288	16,288	16,288	16,287
4,5	16,447	16,271	16,265	16,264		
5,0	Diverges	16,537	16,246	16,244	16,246	16,245
5,5		16,398	16,230	16,229		
6,0		16,310	16,216	16,215	16,215	16,214
6,5		16,239	16,203	16,202		
7,0		16,242	16,192	16,189	16,190	16,189
7,5		16,249	16,182	16,178		
8,0		16,247	16,174	16,167		
8,5		Diverges	16,172	16,158		
9,0			Diverges	16,149		
9,5				16,142		
10,0				16,136		

The SUPG 4x4 method is obviously highly accurate. It is not our purpose in the present paper to generate values of fRe with more than four significant digits; such a study would require a simultaneous refinement in the transverse direction. It is however interesting to plot the error as a function of mesh refinement obtained with the present SUPG method and with SU in [13]. Taking the results with the mesh L/64 as a reference, we have plotted in Fig. 9 the relative error for the extra stress component τ_{zz} at $r = 0.9\ r_w$ and $z = 0$, and for the axial velocity at $r = z = 0$ for $We = 4$. With this limited set of points, we observe that, for the present problem and without any claim of generality, the error for

the stress components behaves like h for SU and like h^3 for SUPG. The error for the velocity components behaves like h3 for both methods.

5. The streamline-upwind (non-consistent) integration

The presence of stress singularities in the examples presented in [1] prevented the use of the SUPG4x4 method and led the authors to the simultaneous development of the SU4x4 method which was found to be stable at large values of the Weissenberg number, even for problems with stress singularities. Let us recall that the upper-convected derivative of the extra-stress tensor $\underline{\underline{T}}$ is written as follows,

$$\overset{\nabla}{\underline{\underline{T}}} = \dot{\underline{\underline{T}}} - \underline{\underline{L}}\,\underline{\underline{T}} - \underline{\underline{T}}\,\underline{\underline{L}}^T, \tag{15}$$

where a dot denotes the material derivative while $\underline{\underline{L}}$ is the velocity gradient tensor. For the SU4x4 method we write, instead of (7),

$$< (\underline{\underline{T}} - \lambda \underline{\underline{L}}\,\underline{\underline{T}} - \lambda \underline{\underline{T}}\,\underline{\underline{L}}^T - 2\eta\, \underline{\underline{d}}) \times \underline{\underline{w}} > + < \lambda \dot{\underline{\underline{T}}} \times \hat{\underline{\underline{w}}} > = 0 . \tag{16}$$

The resulting scheme has led to the numerical solution of a number of flow problems at high values of We. However, as shown in [1], the non-consistent SU method implies an artificial diffusivity of order h in the stress-constitutive equations, where h is a typical element size.

It has been shown in [13] that, for the flow through a corrugated tube, the solutions obtained with Meshes I to IV in section 4 converge toward the correct solution. This was shown in particular by means of a Richardson extrapolation of available results to a vanishing value of h in the flow direction. As a reminder, we have included in Table III these extrapolated results.

In order to pursue our argument on the convergence of the SU4x4 method, let us now examine the results obtained with that method for the flow around a sphere described in section 3. Fig.9 shows the drag correction factor obtained for the meshes of Fig.2, together with the values obtained for Mesh III with SUPG4x4. We find that all three meshes give accurate results up to We=0.4. Beyond that value, Mesh I is too coarse, while Mesh II and Mesh III progressively deviate from the converged results. It is interesting to note that, with both meshes, we are still obtaining results at We=1.8. In order to show the good convergence properties of the SU4x4 method, let us now extrapolate linearly the drag results obtained with MESH II and MESH III. The

extrapolated results fall precisely on the converged curve obained with SUPG4x4. Moreover, we can even obtain an additional point beyond the We limit of SUPG4x4 with Mesh III. The actual values of the drag correction factor are given in Table IV.

Table IV. Drag correction factor for the flow of a Maxwell fluid around a sphere in a tube; SU4x4 method.

We	Mesh I	Mesh II	Mesh III	Extrapolation
0,00	5,949	5,948	5,948	5,948
0,20	5,648	5,652	5,654	5,658
0,30	5,415	5,414	5,415	5,417
0,45	5,096	5,084	5,081	5,075
0,65	4,792	4,750	4,740	4,720
0,85	4,625	4,534	4,513	4,471
1,05	4,592	4,406	4,371	4,301
1,25	4,633	4,344	4,292	4,188
1,45	4,761	4,331	4,258	4,112
1,65	Diverges	4,354	4,258	4,066
1,85		4,407	4,284	4,038
		Diverges		

Let us now compare axial velocity and extra-stress profiles obtained at We=0.7 with both techniques. For the velocity profiles along the axis of symmetry and in the equatorial plane, Fig.10 shows the good correspondence between the SUPG4x4 results and those obtained with Mesh II and Mesh III. One observes a slight deviation on the right-hand side of the figure near the cylindrical wall. The deviation may be due to the fact that the element size h is still relatively large in that portion of the flow domain as compared with the elements near the sphere. In Fig.11a, we show the extra-stress component T_{zz} in the equatorial plane obtained with Mesh II and Mesh III. We find that the value of T_{zz} on the boundary tends to the value obtained with SUPG when the mesh is refined. Fig.11b shows the T_{zz} profile on the axis of symmetry. This graph shows in particular the effect of stress diffusivity at the peak where the curvature of the stress profile is high.

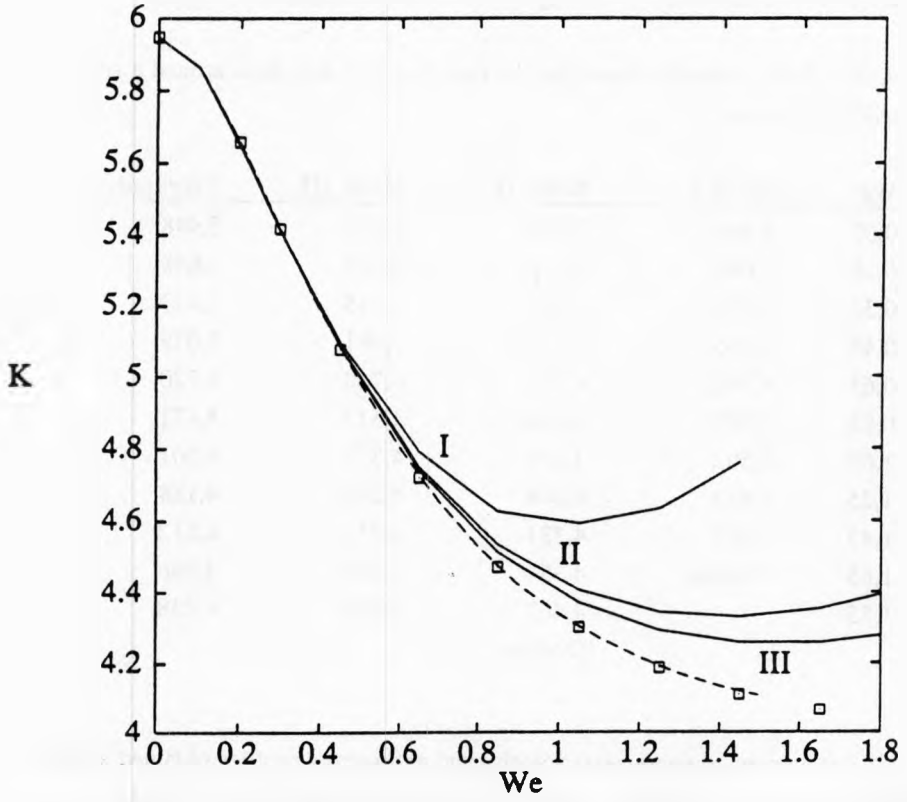


Fig 10 Drag correction factor for the flow around a sphere in a tube; plain lines correspond to SU4x4 with the meshes of Fig.2; the dotted line to Mesh III with SUPG4x4; the symbols to the Richardson extrapolation.

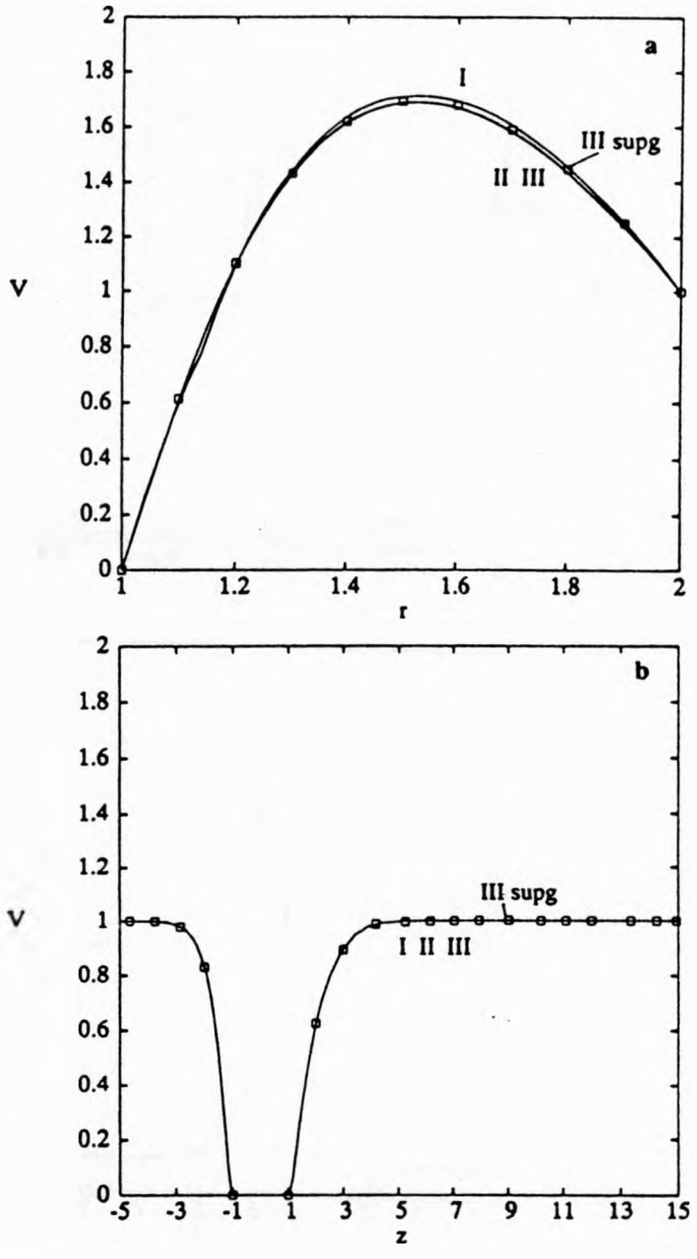


Fig.11 Axial velocity profile in the equatorial plane (a) and along the axis of symmetry (b) obtained with the SU4x4 method for Meshes I, II, III; the symbols indicate SUPG4x4 results with Mesh III.

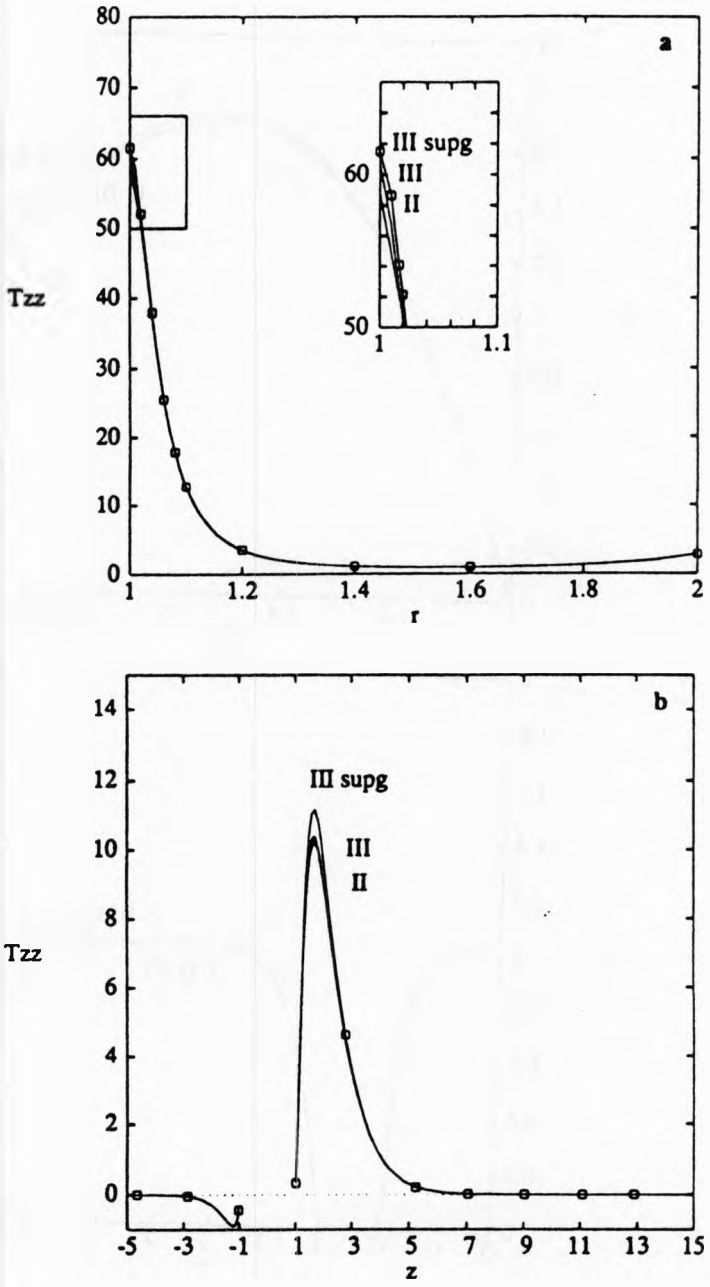


Fig.12 Extra-stress component T_{zz} in the equatorial plane (a) and along the axis of symmetry (b) obtained with the SU4x4 method for meshes II and III; the symbols indicate SUPG4x4 results with Mesh III.

6. Conclusions

6.1. The previous examples demonstrate that the streamline-upwind/Petrov Galerkin method, coupled with bilinear sub-elements for the stresses, is stable and accurate for viscoelastic flow problems occuring in smooth geometries. Early tests of the method in [1] were negative in view of the presence of stress singularities in the stick-slip problem. In view of its higher rate of convergence as compared to SU, accurate results can be obtained with SUPG at an acceptable degree of mesh refinement. Further work is needed for handling stress singularities; the non-integrable character of the surface forces [18] may however impede the stability of the method.

6.2. We have shown once more that the streamline-upwind non-consistent method (SU4x4), while being highly stable, converges toward accurate results when the element size decreases. It had been demonstrated before [13] for the flow of a Maxwell fluid through a corrugated tube. The new example of the flow around a sphere is even more revealing because the flow domain is complex while the elements have unequal size. It is remarkable to find that a simple linear extrapolation of the results obtained with two meshes has produced accurate results for the drag. It is also interesting to note that, in our examples, the velocity field converges faster than the stress field. However, the artificial stress diffusivity proper to SU creates inaccuracies in the boundary layers and in regions where the magnitude of the second derivative of the stresses is important.

6.3. Most problems of practical interest are endowed with stress singularities. For such problems, the SU4x4 method is able to produce stable results up to high values of the Weissenberg number [1]. Their accuracy must however be verified by performing the calculations on at least two, preferably three finite element meshes of decreasing element size [7,8]. Our experience shows that the velocity field becomes insensitive to element size at an early stage of mesh refinement while any measure related to the stress field (drag, flow resistance, Couette correction) requires an evaluation on meshes with increasing refinement.

Acknowldgements

The results presented in this paper have been obtained within the framework of Interuniversity Attraction Poles initiated by the Belgian State, Prime Minister's Office, Science Policy Programming. V. Legat wishes to acknowledge a scholarship from the *Fonds National de la Recherche Scientifique*. The authors wish to thank Professor R.C. Armstrong for an early communication of his results on the drag correction factor.

References

[1] J.M. Marchal, M.J. Crochet,
A New Mixed Finite Element for Calculating Viscoelastic Fluid,
J. Non-Newtonian Fluid Mech..,26, 77-114 (1987).

[2] I. Babuska,
The Finite Element Method with Lagrangian Multipliers,
Numer. Math., 20, 179-192 (1973).

[3] F. Brezzi,
On the Existence, Uniqueness and Approximation of Saddle Point Problems Arising from Lagrange Multipliers,
RAIRO Num. Anal., 8-R2, 129-151, (1974).

[4] A.N. Brooks, T.J.R. Hughues,
Streamline-upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations,
Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 32, 199-252 (1982).

[5] B. Debbaut, J.M. Marchal, M.J. Crochet,
Numerical Simulation of Highly Viscoelastic Flows through an Abrupt Contraction,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 29, 119-146 (1988).

[6] J. Dheur, M.J. Crochet,
Stratified Flows of Newtonian and Viscoelastic Fluids,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 32, 1-18 (1989).

[7] V. Delvaux, M.J. Crochet,
Numerical Simulation of delayed Die Swell
Rheol. Acta, 29, 1-10 (1990).

[8] V. Delvaux, M.J. Crochet,
Numerical Prediction of Anomalous Transport Properties in Viscoelastic Flow,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 37, 297-315 (1990).

[9] S. Pillitsis, A.N. Beris,
Calculation od Steady-state Viscoelastic Flow in an Undulating Tube,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 31,231-287 (1989).

[10] R.C. King, M.R. Apelian, R.C. Amstrong, R.A. Brown,
Numerically Stable Finite Element Techniques for Viscoelastic Calculations in Smooth and Singular Geometries,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 29, 147-216 (1988).

[11] W. Lunsmann, R.A. Brown , R.C. Armstrong,
to be submitted, (1991).

[12] M. Fortin, R. Pierre,
On the Convergence of the Mixed Method of Crochet and Marchal for Viscoelastic Flows,
Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 73, 341-350 (1989).

[13] M.J. Crochet, V. Delvaux, J.M. Marchal, ,
On the convergence of the Streamline-Upwind Mixed Finite Element
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 34, 261-268 (1991).

[14] F. Sugeng, R.I. Tanner,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 20 (1986) 281.

[15] R. Zheng, N. Phan-Thien, R.I. Tanner,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 36 (1990) 27.

[16] M.J. Crochet,
Numerical Simulation of Highly Viscoelastic Flow,
Proc. of the Xth Int. Cong. on Rheology, Sidney,
P. Uhlherr, Monash University Printing Service, 1, 19-24 (1988).

[17] N. Phan-Thien, R.I. Tanner,
Proc. 3rd European Rheol. Conf., ed. D.R. Oliver, Elsevier 394, (1990).

[18] G.G. Lipscomb, R. Keunings, M.M. Denn,
Implications of Boundary Singularities in Complex Geometries,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 24, 85-96 (1987).

Annexe.

Conception d'un logiciel numérique.

L'objet de ce dernier chapitre est de détailler la construction du logiciel Polyflow3® avec lequel nous avons réalisé nos expériences numériques. L'univers des simulations tridimensionnelles nécessite des structures de données qui ne sont pas courantes dans les programmes standards. C'est la raison pour laquelle il nous parait opportun de préciser les principaux choix effectués dans l'architecture générale du code afin d'intégrer aisément des géométries et des formulations complexes.

Historiquement, la réalisation de ce programme numérique est le résultat d'un patient travail d'équipe. Il y a environ une dizaine d'années, la première version du programme voyait le jour au sein de l'Unité de Mécanique et Mathématiques Appliquées. L'expérience accumulée par la réalisation de codes numériques a permis d'aborder l'écriture de la troisième version du code, il y a cinq années. Ce programme est le résultat de la collaboration fructueuse d'une vingtaine de personnes et cette thèse n'est qu'une modeste facette des possibilités du logiciel. D'autres recherches s'effectuent en parallèle et ont permis de créer un environnement scientifique exceptionnel pour le jeune doctorant.

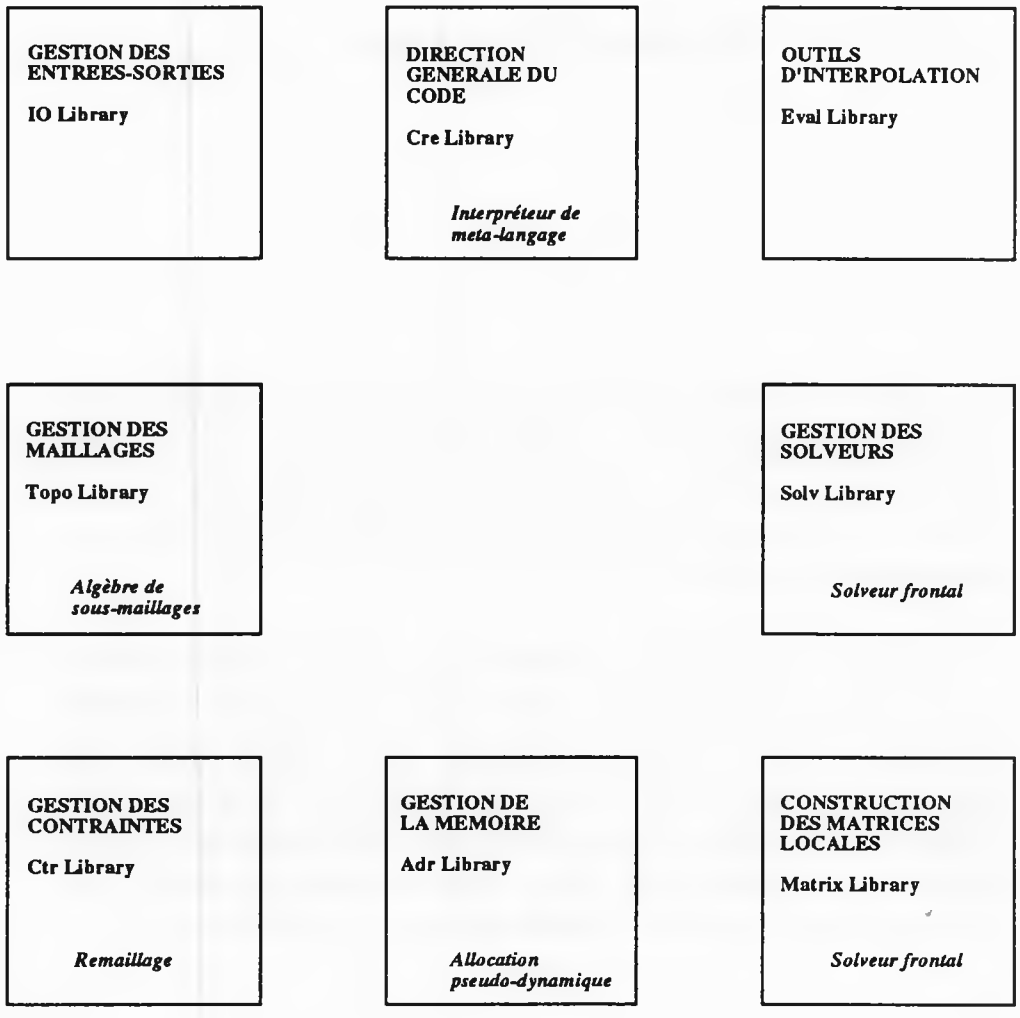


Fig. 6.1 Structure générale du logiciel.

6.1. Structures de données d'un code d'éléments finis.

Les structures de données (Fig. 6.1) ont été établies afin de répondre aux objectifs suivants (Polyflow 86):

- Généralité géométrique et dimensionnelle des maillages : les maillages et les sous-maillages de dimension zéro à trois sont définis de la manière la plus générale possible. Il n'y a pas de contrainte de connexité du maillage ou de sa frontière. L'algèbre des sous-maillages orientés permet la création de maillages frontières ou interfaces. La création d'objets particuliers "frontière" ou "interface" peut être ainsi évitée.

- Indépendance de l'interpolation et de la topologie : la structure des maillages est définie de manière totalement indépendante de la notion d'interpolation des variables. En particulier, les notions des fonctions de forme et de fonctions de transformation de l'élément parent en élément réel sont définies de manière indépendante de la structure topologique.

- Multiplicité des domaines : la résolution couplée ou non d'équations différentes sur des maillages particuliers de dimensions éventuellement distinctes est possible. Ceci est requis d'une part par la volonté de résoudre des modèles physiques différents dans des régions distinctes. D'autre part, la décomposition de domaines pour l'usage de machines parallèles requiert une telle possibilité.

- Concept de champs d'inconnues : les inconnues discrètes sont décrites dans une structure aussi proche que possible de la terminologie des modèles mathématiques. Un champ est défini comme l'ensemble des valeurs nodales d'une variable mathématique. Les caractéristiques mathématiques d'une variable apparaissent naturellement comme les attributs d'un champ : dimension tensorielle, nombre de composantes et sous-maillage de définition. Le type de l'interpolation complète la caractérisation du champ.

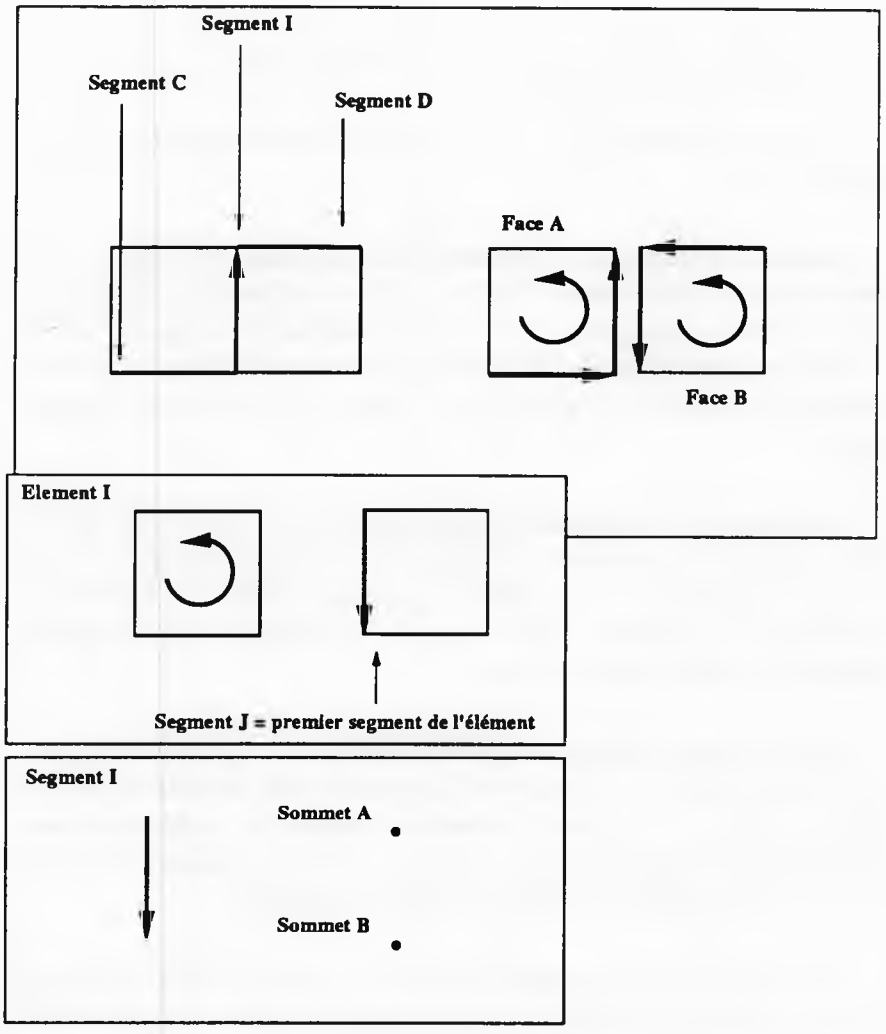


Fig. 6.2 Structure de données d'un maillage bidimensionnel.

Une telle structure peut sembler artificiellement complexe. Cependant, l'expérience montre que toutes les possiblités d'un code doivent être envisagées à la conception afin d'éviter des remaniements ultérieurs. Par ailleurs, une structure de données plus riche permet d'exprimer plus aisément des opérations difficiles sur les codes numériques standards. Par exemple, citons la description des conditions aux limites qui s'impose sur la restriction d'un champ sur un sous-maillage de dimension inférieure. En outre, le calcul de ces conditions aux limites d'un problème de dimension n est formulé comme la résolution d'un problème de dimension n-1.

Une seconde qualité essentielle d'un logiciel est l'exactitude. Ce point devient particulièrement critique lorsque la taille du code et le nombre de concepteurs augmentent. Pour répondre à une logique multiplication des options, il convient de diviser en blocs et couches fonctionnels aussi indépendants que possible. Les relations entre les diverses parties du code sont une des parties les plus critiques du logiciel, car elles correspondent également aux limites entre les interventions de divers concepteurs du logiciel. Il est donc particulièrement utile de spécifier, de documenter et de limiter ces relations.

Cette optique va parfois à l'encontre d'une autre qualité du code : l'efficacité. Toutefois, seules de très petites parties du code sont réellement goumandes en CPU lors de l'exécution du programme. C'est donc principalement dans l'élimination frontale que la programmation doit rechercher l'efficacité. Dans les autres parties du code, le souci d'exactitude et de clarté prime sur une programmation à la recherche de fausses économies. Une telle stratégie de travail contribue grandement à la maintenance d'un code numérique.

6.1.1. Structure du maillage et des sous-maillages.

A la base de notre description des maillages, se trouvent les principes généraux détaillés dans le chapitre deux. Cependant ,pour une implémentation efficace de l'algèbre des maillages, nous nous basons sur la propriété qu'un maillage de dimension n se compose successivement d'objets de dimension zéro à n. La structure primaire d'un maillage de dimension n se définit comme les n+1 tableaux :

$Objet_{n-1}$ I	(Element A , Element B , $Objet_{n-1}$ C , $Objet_{n-1}$ D)
Element I	($Objet_{n-1}$ J)
$Objet_{n-1}$ I	($Objet_{n-2}$ A , $Objet_{n-2}$ B.....)
....	
$Objet_1$ I	($Objet_0$ A , $Objet_0$ B)

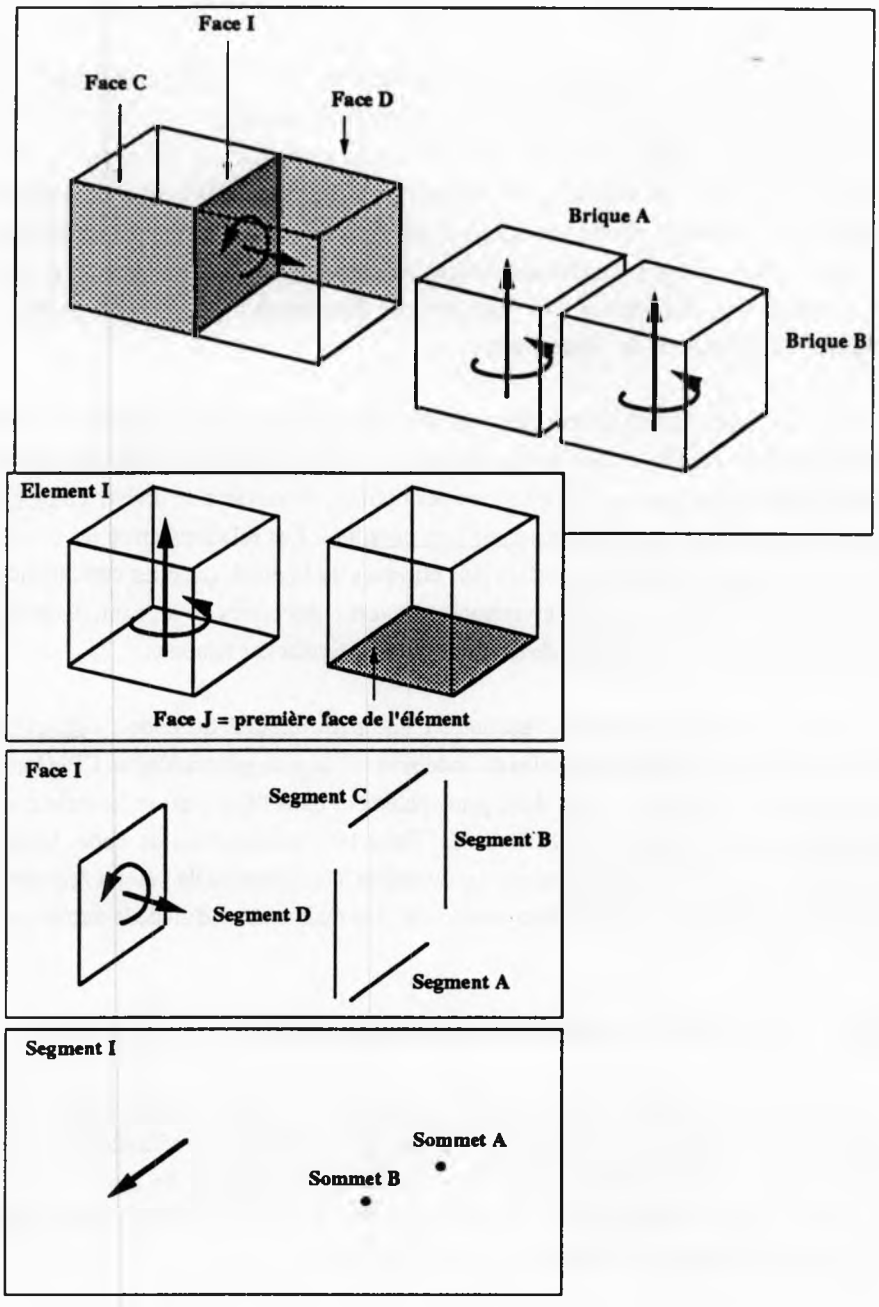


Fig. 6.3 Structure de données d'un maillage tridimensionnel.

La base de la structure est la première table d'objets de dimension n-1. les deux premières entrées sont les éléments qui contiennent l'objet I. L'ordre de ces entrées définit l'orientation de l'objet I qui est positive par rapport à l'élément A et négative par rapport au second élément B. La troisième entrée C de cette table est l'objet qui précède I dans la définition de l'élément A, tandis que D est l'objet qui suit I dans la définition de l'élément B.

Cette structure est complétée d'une part par une table des éléments qui pointent vers le premier des objets de dimension n-1 qui le constituent. D'autre part, pour chaque objet de dimension i, on construit la liste des objets de dimension i-1 le composant. Sur base de cette structure primaire, des tables secondaires (par exemple, la liste des objets des diverses sous-maillages) sont construites.

De manière plus systématique (Fig. 6.2)(Fig. 6.3), la structure primaire s'écrit donc en fonction de la dimension géométrique du maillage :

- maillage de dimension un :

  Sommet I (Segment A , Segment B , Sommet C , Sommet D)
  Segment I (Sommet J)

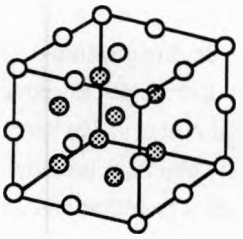
- maillage de dimension deux :

  Segment I (Face A , Face B , Segment C , Segment D)
  Face I (Segment J)
  Segment I (Sommet A , Sommet B)

- maillage de dimension trois :

  Face I (Brique A , Brique B , Face C , Face D)
  Brique I (Face J)
  Face I (Segment A , Segment B , Segment C , Segment D)
  Segment I (Sommet A , Sommet B)

Une telle description peut sembler lourde mais elle présente les avantages suivants. D'une part, les numéros de sommets, segments, faces et de briques ne sont à priori contraints par aucune relation d'ordre. D'autre part, l'orientation des objets est précisée dès la table primaire. Finalement, il n'y aucune contrainte géométrique sur la définition des maillages. L'insertion de triangles, de prismes ou de tétraèdres ne pose aucune difficulté. Une telle structure chaînée permet de rechercher efficacement les résultats de l'algèbre de sous-maillages : intersection, frontière ....



27 valeurs nodales =
1 valeur associée à la brique,
+ 6 valeurs associées aux faces,
+ 12 valeurs associées aux segments,
+ 8 valeurs associées aux sommets.

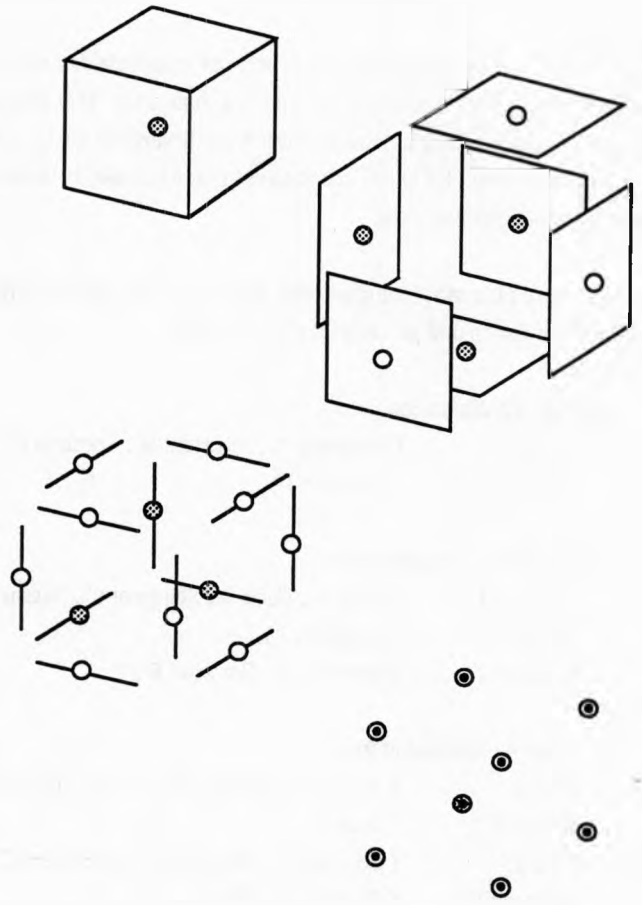


Fig. 6.4 Définition de l'interpolation triquadratique.

Il faut rappeller que la structure des maillages est totalement indépendante de la position des sommets. Nous travaillons dans une algébre entière et évitons tous les problèmes numériques liés aux tolérances d'une géométrie basée sur les coodonnées réelles des sommets. Les coordonnées des sommets sont décrites de manière tout à fait séparée par un vecteur position qui est défini comme un champ.

6.1.2. Structure des champs.

Toutes les variables et les données définies sur un domaine sont connues dans une structure unique que nous appelons le champ. Comme les coordonnées qui décrivent la transformation de chaque élément parent en élément réel sont aussi définies par des fonctions de forme, il est naturel de les décrire par le biais de la structure de champ. Un tel raisonnement peut s'étendre aux données du problème. En effet, les variables d'un problème deviennent très fréquemment les données d'un autre. C'est le cas des conditions aux limites, des problèmes découplés, des pré-processeurs et post-processeurs.

Un champ est caractérisé par un sous-maillage de définition, une nature tensorielle, un type d'interpolation et l'ensemble des valeurs nodales. La définition des valeurs nodales est construite sur base de l'association entre des valeurs nodales et des objets topologiques. Une interpolation linéaire consiste à associer une valeur nodale scalaire à chaque sommet, tandis qu'une interpolation quadratique consiste à associer une valeur nodale à chaque objet du maillage (Fig. 6.4). En réalité, cette manière de définir les valeurs nodales sur base des objets du maillage permet d'imaginer un très large choix d'interpolation. Une interpolation 7x7 par élément s'obtient en définisssant une valeur nodale par sommet, 5 par segment, 25 par faces et 125 par brique. La deuxième caractéristique d'une interpolation est la définition des fonctions de forme qui sont définies sur base des conventions utilisées pour la description des éléments parents d'un maillage. Inclure, par exemple, une interpolation spectrale ne pose aucune difficulté.

Un des avantages majeurs de ce type de structure est la définition des données aux frontières. Il est aisé de retrouver les valeurs nodales de la frontière; par leur définition elles sont liées aux objets du maillage. Il suffit donc de considérer les objets présents dans le sous-maillage frontière et d'en déduire les valeurs nodales correspondantes.

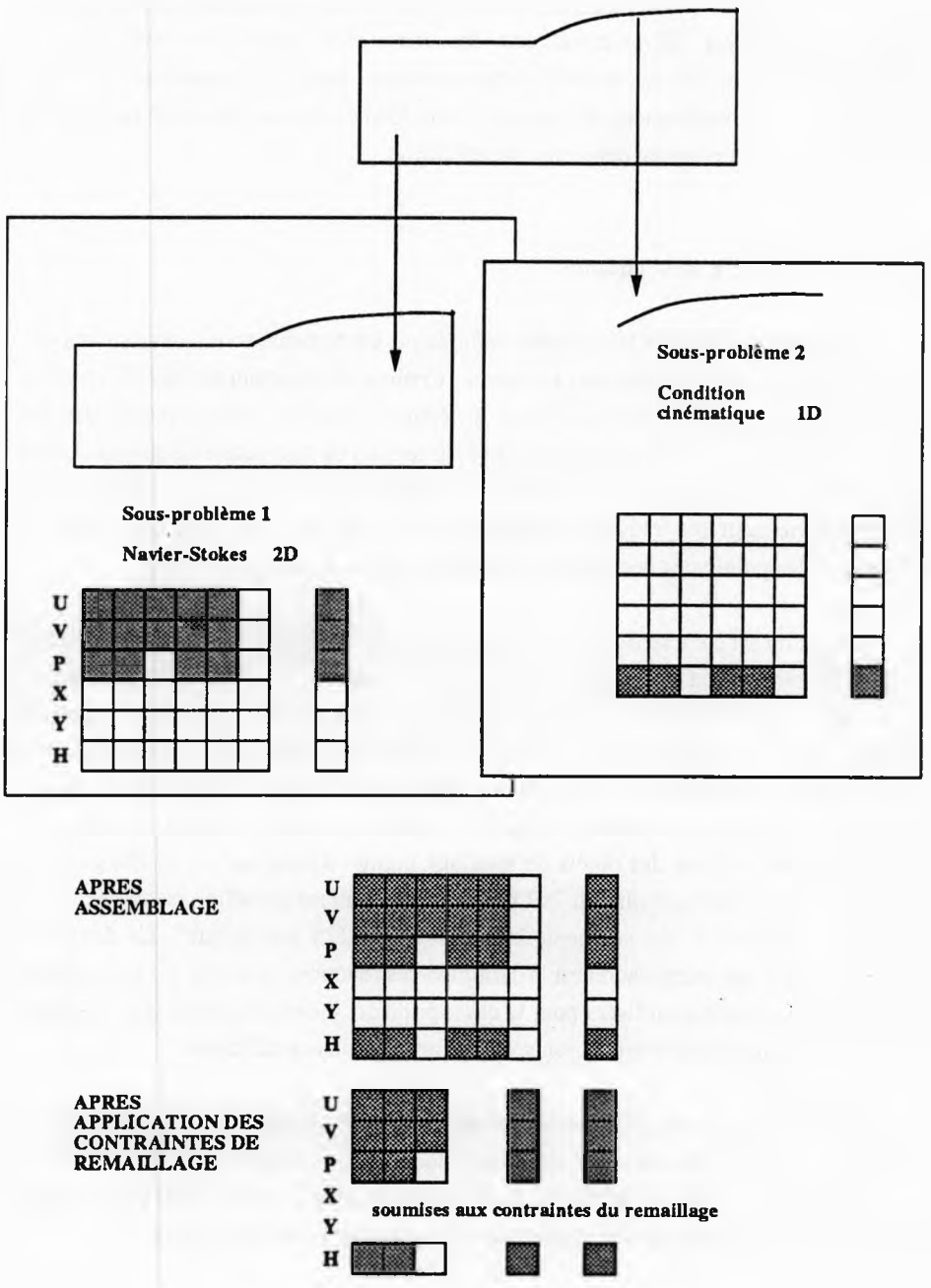


Fig. 6.5 Illustration du concept de sous-problèmes et de contraintes dans le cas particulier du problème de l'extrusion.

6.1.3. Structure des sous-problèmes.

Tout problème d'éléments finis suppose la présence d'équations. La structure de sous-problème est caractérisée par une liste ordonnée d'équations, une liste ordonnée de champs inconnus, un ensemble de champs de données et un sous-maillage de définition. Pour qu'une telle structure soit licite, il convient que le maillage du problème soit inclus dans les sous-maillages de définition des champs considérés. C'est par le biais d'une telle structure que nous associons une équation à chaque champ. C'est la correspondance de la liste des équations et de la liste des champs qui implique l'association d'une équation du mouvement à un champ de vitesses et d'une équation de masse à un champ de pression. Pour chaque sous-problème, une matrice locale est obtenue par l'intégration de la forme discrète des équations sur chaque élément du sous-maillage de définition. La taille de cette matrice locale est fixée par le type d'interpolation des champs inconnus du sous-problème. Les diverses paramètres matériels des équations et la manière d'effectuer l'intégration complètent la définition du sous-problème (Fig. 6.5).

Par ailleurs, il faut noter qu'un sous-problème est caractérisé par un unique sous-maillage. Un problème faisant intervenir plusieurs domaines se définit comme la superposition d'une série de sous-problèmes. Un problème à surfaces libres se compose donc au minimum de deux sous-problèmes définis respectivement sur le domaine de l'écoulement et sur la surface libre.

6.1.4. Structure des contraintes.

La contrainte est une restriction des degrés de liberté des interpolants. Nous nous limitons aux contraintes linéaires qui englobent les conditions essentielles exprimées dans un repère cartésien ou normal-tangentiel, les maillages hiérarchiques, les interfaces mobiles, les conditions de périodicité et d'anti-symétrie. Une description détaillée du concept de contrainte a été effectuée dans la quatrième partie.

La structure de données se compose d'une relation linéaire, d'un champ auquel s'applique la contrainte, de champs à partir desquels la contrainte est formulée et d'un sous-maillage de définition. Ensuite, le mécanisme des opérations lignes et colonnes associées aux éléments finis contraints sont mis en oeuvre par le solveur. Par ailleurs, il s'agit de veiller au traitement des conflits générés par des contraintes contradictoires.

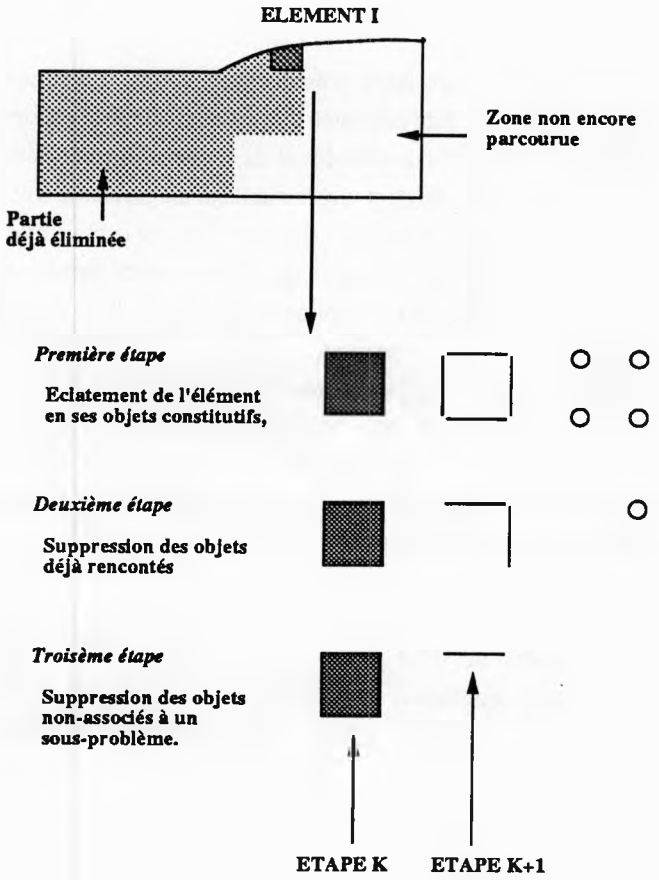


Fig. 6.6 Définition des étapes du solveur frontal.

6.1.5. Structure de résolutions de problème.

Une résolution d'un problème d'éléments finis se fait par la définition d'une série de sous-problèmes, d'un ensemble de contraintes et la sélection d'une technique de résolution. La technique de résolution est indépendante de la définition du problème. Les inconnues sont définies de manière automatique comme étant les valeurs nodales des champs, inconnues de la liste des sous-problèmes.

Nous supposons que nous recherchons les inconnues de notre problème par une méthode directe frontale. En effet, la résolution couplée de toutes les équations du problème se révèle être la technique de loin la plus robuste. Il y a lieu de considérer l'impact des singularités des écoulements que nous souhaitons considérerer : fluides viscoélastiques et surfaces libres. Précisons toutefois que l'extension de cette technique à des problèmes tridimensionnels hautement complexes nécessiterait des ressources informatiques que l'on n'espère pas trouver dans les super-ordinateurs des prochaines années. Clairement, il est requis de développer de nouveaux types de solveurs pour ce genre de problèmes. Mais pour la mise au point de nouvelles techniques d'éléments finis, nous préférons nous tourner vers la fiabilité et la robustesse des méthodes directes.

Rappelons brièvement le fonctionnement d'un solveur frontal. Les inconnues sont éliminées dans un certain ordre, qui permet d'accomplir simultanément les opérations d'assemblage et de triangularisation du système. Chaque fois qu'un élément est assemblé, l'ensemble des inconnues nodales peut être partitionné en trois groupes précis :

- les inconnues éliminées dont les lignes et les colonnes ont été préalablement assemblées,
- les inconnues actives dont les lignes et les colonnes sont partiellement assemblées,
- les autres inconnues dont les lignes et les colonnes n'ont pas encore été assemblées même partiellement.

Le front des inconnues actives se propage dans le maillage en laissant derrière lui les inconnues éliminées. La largeur de front est le nombre maximal d'inconnues simultanément actives. Tous les calculs de factorisation sont donc effectués dans une matrice active dont la taille vaut le carré de la largeur de front. Cette procédure permet d'économiser la mémoire et le temps calcul si la largeur de front est modeste par rapport aux nombre total d'inconnues. L'obtention d'une largeur de front optimale est directement liée à l'ordre avec lequel on effectue l'assemblage des matrices locales des éléments finis.

On en déduit que la numérotation des éléments du maillage est le moyen de réduire la largeur de front. Précisons que la minimisation de la largeur de front d'un maillage est un problème extrêmement complexe. En réalité, le compromis entre le coût de la numérotation et la qualité de l'ordre produit n'est que le résultat d'une démarche heuristique.

On parcourt donc l'ensemble des éléments du maillage. Ensuite chaque élément est décomposé en ses objets constituants en veillant à ce que chaque objet n'apparaisse qu'une fois. Ensuite, on vérifie si cet objet est élément d'un sous-maillage d'un des sous-problèmes à résoudre. Si tel est le cas, cet objet devient une étape du solveur frontal. A chaque étape, on construit les vecteurs d'apparition et de disparition des inconnues locales. On attribue une priorité aux inconnues sur base de l'ordre local. On modifie les deux vecteurs et les priorités sur base des contraintes : les inconnues contraintes sont éliminées avant toute étape d'assemblage tandis que les inconnues du membre de droite d'une contrainte sont rendues actives. Connaissant l'ensemble des inconnues qui apparaissent et disparaissent à chaque étape, on les ordonne sur base de leurs priorités et on leur attribue une destination dans la matrice active. On déduit finalement la taille maximale requise pour la matrice active. Il est dès lors possible de parcourir une seconde fois l'ensemble des éléments du maillage afin d'assembler et d'éliminer la matrice active (Fig. 6.6).

L'obtention des inconnues fournit la solution de notre problème d'éléments finis et nous terminons de la même manière la description des principales structures de données du logiciel. Il nous reste cependant à détailler la manière dont nous entrons en relation avec ces structures.

6.2. Définition d'un méta-langage dans un code d'éléments finis.

Les relations entre le chercheur et le code numérique sont un des points essentiels de la construction d'un logiciel numérique. A priori, la recherche suppose l'ignorance du résultat final. Ainsi le jeune chercheur ignore quelle méthode numérique sera le bon choix pour le problème qu'on lui soumet. Et sa première démarche sera l'essai, la programmation d'une technique, l'étude de ses performances. Ensuite, sur base des résultats, il tente une nouvelle expérience qui suppose à nouveau programmation ou adaptation de son logiciel. Il s'ensuit un effort considérable de programmation pour trouver une méthode numérique.

Nous proposons une démarche alternative qui consiste à se construire une boîte à outils numériques qui permettent l'essai et l'analyse d'un grand nombre de méthodes d'éléments finis. La définition d'un outil suppose la description de l'usage de cet outil. Il

s'agit donc de définir un langage pour l'utilisation de la bibliothèque des outils. Une telle démarche entre dans le cadre général des principes des sciences de l'informatique : la construction successive de langages de plus en plus haut niveau pour l'utilisateur. Il nous semble donc tout naturel que le numéricien en éléments finis construise son propre langage spécialisé. Sur base de la formulation abstraite d'un problème discret, il peut ainsi obtenir de manière immédiate le résultat d'une simulation numérique. D'autre part, il lui reste possible de construire, si nécessaire, de nouveaux outils afin d'élargir son domaine d'investigations. Une telle démarche apparaît nettement plus constructive et permet un développement conjoint d'outils numériques identiques pour des méthodes numériques distinctes par des chercheurs distincts.

Les instructions du langage sont de différents types. A chaque type d'instruction correspond un type d'action à effectuer par le logiciel. Cette action peut être soit la mise en place d'une structure de données soit la réalisation d'un algorithme précis. Le résultat de l'action d'une instruction reçoit un identificateur et peut ainsi devenir une donnée d'une instruction ultérieure.

Les instructions sont également liées entre elles par une relation d'arborescence qui fixe l'ordre séquentiel d'éxécution des actions. Le logiciel exécute d'abord l'action de l'instruction mère, puis de chacune des descendances des instructions filles en commencant par l'aînée. La petite fille issue de la fille aînée précède donc la fille cadette par exemple. Par ailleurs, une instruction d'un type particulier se place en général à un endroit précis de la généalogie en raison de la nécessité d'effectuer préliminairement les actions dont le résultat est une des données de l'instruction courante.

Nous pouvons définir une instruction par un identificateur, d'éventuels arguments et un éventuel résultat de la manière suivante :

identificateur(argument-1, argument-2, ...) = résultat-1, resultat-2

L'ordre des instructions spécifie l'âge des instructions d'une même génération, tandis que la descendance de chaque instruction apparaît à la suite de celle-ci, avec une indentation adéquate. Ainsi la définition d'un problème bidimensionnel de Poiseuille peut être exprimée d'une manière simplifiée comme une série d'instructions du meta-langage :

```
open() = file_mesh,file_result
  topo(file_mesh,op) = domain,wall,inflow,outflow,symmetry
  fields()
    field(domain,quadratic,vector) = coord
      read(file_mesh)
    field(domain,quadratic,vector) = velocity
    field(domain,linear,scalar) = pressure
    field(inflow,constant-on-mesh,scalar) = grad
    field(inflow,constant-on-mesh,scalar) = q
      evalx(constant,1)
    probs()
      prob(inflow,Navier-Stokes-1D,coord,q,velocity,grad) = pr1
        bevaxs(wall,velocity,(zero-constant,zero-constant))
        bevaxs(symmetry,velocity,(zero-constant,nihil))
      prob(domain,Navier-Stokes-2D,coord,velocity,pressure) = pr2
        bevaxs(wall,velocity,(zero-constant,zero-constant))
        bevaxs(symmetry,velocity,(zero-constant,nihil))
        bevaxs(outflow,velocity,(nihil,zero-constant))
        bevaxs(inflow,velocity,(identity,identity))
      evolu(file_result)
        solver(frontal,pr1) = convergence1
        solver(frontal,pr2) = convergence2
```

Cette série d'instructions constitue une représentation précise des diverses étapes que le logiciel doit suivre de manière séquentielle :

- Ouverture de deux fichiers : l'un contenant la description du maillage et l'autre dans lequel nous déposerons le résultat de notre simulation.

- Lecture de la description topologique du maillage et génération d'une série de sous-maillages : le domaine, le mur, la section d'entrée, la section de sortie et l'axe de symétrie.

- Création de cinq champs : les coordonnées, les vitesses, les pressions, le gradient de pression et le débit. Les deux derniers champs sont définis sur le sous-maillage d'entrée, tandis que les trois premiers sont définis sur le domaine bidimensionnel. Les valeurs nodales sont initialisées à zéro, l'exception des coordonnées qui sont lues dans un fichier et du débit qui est initialisée à une valeur unitaire constante.

- Création de deux sous-problèmes : un problème est relatif au calcul du profil de vitesse sur la section d'entrée pour un débit unitaire, tandis que le second reprend les équations de Navier-Stokes sur le domaine bidimensionnel.

- Définition de contraintes pour chaque sous-problème. Une condition essentielle de non-glissement sur le mur et une vitesse normale nulle sur le plan de symétrie sont imposées pour les deux sous-problèmes. Des contraintes supplémentaires sont imposées pour le second problème : une vitesse tangentielle nulle à la section de sortie, une vitesse imposée à la valeur antérieure du champ à la section d'entrée.

- Résolution du problème unidimensionnel : le profil de vitesses à l'entrée est calculé par une méthode frontale.

- Résolution du problème bidimensionnel : les valeurs nodales de vitesses et de pression sont calculées sur l'ensemble du maillage par une méthode frontale tandis que la contrainte à l'entrée consiste désormais à imposer le profil de vitesses obtenues à l'étape précédente.

Si un tel langage est un outil précieux offert au chercheur pour la construction de nouvelles méthodes numériques, il est clair que dans le cas des problèmes standards un simple utilisateur préfère utiliser un pré-processeur interactif qui génère de manière automatique les quelques lignes de ce méta-langage. C'est le rôle dévolu au programme Polydata®.

Conclusions.

Notre recherche s'inscrit dans une perspective globale qui peut se résumer d'une manière raccourcie en la question suivante :

"Comment prédire la section d'une filière pour obtenir un extrudat donné ?"

Pour y répondre, nous nous sommes lancés dans le développement d'un logiciel de simulation numérique pour des problèmes d'extrusion. Trois difficultés majeures ont jalonné notre parcours.

- Tout d'abord, nous avons souhaité pouvoir prendre en compte des géométries tridimensionnelles inconnues. La mise au point d'algorithmes efficaces de déformation de maillages a été la première brique de notre recherche.

- Ensuite, soucieux d'une modélisation réaliste du fluide, nous nous sommes intéressés à la simulation des fluides viscoélastiques. Un modèle simplifié unidimensionnel nous a permis de réaliser un outil d'analyse des diverses conjectures émaillant la recherche depuis plusieurs années. Une telle démarche est apparue être une manière efficace de comprendre ce qui cause la perplexité des numériciens dans les coûteuses simulations bidimensionnelles (et tridimensionnelles dans un futur proche).

- Finalement, nous nous sommes heurtés à l'inexistence de résultats théoriques sur les problèmes à surfaces libres. Le choix correct d'une méthode d'éléments finis doit s'effectuer sur base de l'évaluation d'arguments hautement conjecturaux. Il est clair que l'analyse que nous tirons de nos expériences numériques ouvre la voie d'une importante recherche théorique, car de nombreuses questions restent sans réponse.

Ces trois axes de notre recherche constituent la volonté de mieux reproduire les géométries complexes des extrudeuses, de mieux reproduire le comportement des fluides polymériques et finalement de mieux comprendre les exigences et les qualités des méthodes d'éléments finis. Trouver et identifier les faiblesses d'une méthode a été le chemin de la seconde facette de cette recherche qui consiste à trouver les remèdes adéquats et à comprendre la raison de leur succès.

Par ailleurs, il est clair que d'autres axes de recherche nous restent peu connus : nous pensons en particulier à la mise en oeuvre de méthodes autres que la classique méthode frontale pour résoudre nos équations et à de nouvelles méthodes numériques. En effet, une difficulté majeure de nos simulations consiste en l'importance des moyens informatiques à mettre en oeuvre. Il deviendra donc nécessaire de découpler les systèmes algébriques que nous construisons et de trouver une alternative à la méthode de Newton-Raphson.

Aujourd'hui, la simulation numérique entre dans l'entreprise comme un nouvel outil d'aide à la conception. Nous espérons que l'usage de la simulation numérique puisse se généraliser et permettre aux numériciens et aux concepteurs de filières d'ouvrir un dialogue pour confronter la modélisation des scientifiques et le monde réel de l'industrie. Cette interaction entre modèle numérique, modèle physique, expérience et besoins économiques de l'industrie reste le défi majeur d'une importante recherche interdisciplinaire.

Louvain-la-Neuve, le 25 mai 1992.

Bibliographie.

M.R. Apelian, R.C. Amstrong, R.A. Brown,
Impact of the Constitutive Equation and Singularity on the Calculation of Stick-Slip Flow : the modified upper-convected Maxwell Model,
J. Non-Newtonian Fluid mech.,29 , 147-216 (1988).

X. Aubert,
Transformations de coordonnées et schémas compacts aux différences finies appliquées à la résolution des équations de Navier-Stokes,
PhD Thesis, Louvain-la-Neuve (1983).

I. Babuska,
The Finite Element Method with Lagrangian Multipliers,
Numer. Math., 20, 179-192 (1973).

A.N. Beris, R.C. Amstrong, R.A. Brown,
Spectral Finite Element Caculations of the Flow of a Maxwell Fluid between Excentric Rotating Cylinders,
J. Non-Newtonian Fluid mech.,22 , 129-167 (1985).

R.B. Bird, R.C.Amstrong, O. Hassager,
Dynamic of Polymeric liquids, vol 1 : Fluid Mechanics
John Wiley & Sons (1977).

D. Berghezan, F. Dupret,
Numerical Solution of Stratified Coating Flow by a Variationnal Method,
J. Comp. Physic, sous presse (1992).

D. Berghezan,
Simulation numérique d'écoulements en couches intervenant dans l'industrie photographique,
PhD Thesis, Louvain-la-Neuve (1991).

M.B. Bush, R.I. Tanner, N. Phan-Thien,
A Boundary Element Investigation of Extrudate Swell
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 18, 143-162 (1985).

M.B. Bush, N. Phan-Thien,
Three-Dimensional Viscous Flows with a Free Surface : Flow out of long square die
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 18, 211-218 (1985).

F. Brezzi,
On the Existence, Uniqueness and Approximation of Saddle Point Problems Arising from Lagrange Multipliers,
RAIRO Num. Anal., 8-R2, 129-151, (1974).

A.N. Brooks, T.J.R. Hughues,
Streamline-upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations,
Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 32, 199-252 (1982).

K.N. Christodoulou, L.E. Scriven,
Finding Leading Modes of a Viscous Free Surfacs Flow :
An Asymmetric Generalized Eigen problem,
J. Sci. Comp., 3, 355 (1988).

P.G. Ciarlet,
The Finite Element Method for Elliptic Problems.
North Holland, Amsterdam (1978).

P.J. Coates, R.C. Amstrong, R.A. Brown,
Calculation of Steady-State Viscoelastic Flow though Axisymmetric Contractions with the EEME Formulation,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., (submitted) (1991).

L. Collatz,
The Numerical Treatment of Differential Equations.
Springer Verlag (1966).

A. Couniot, L. Dheur, O. Hansen, F. Dupret,
A Finite Element Method for Simulating Injection Molding of Thermoplastics,
Proc. of Numiform Conf., Fort Collins, Balkema Publisher, 235-241 (1989).

A. Couniot,
Développement d'un algorithme de remaillage automatique pour la simulation du moulage par injection,
PhD Thesis, Louvain-la-Neuve (1991).

M.J. Crochet, A.R. Davies, K. Walters,
Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow,
Elsevier, Amsterdam (1984).

M.J. Crochet,
Numerical Simulation of Highly Viscoelastic Flow,
Proc. of the Xth Int. Cong. on Rheology, Sidney,
P. Uhlherr, Monash University Printing Service, 1, 19-24 (1988).

M.J. Crochet,
Numerical Simulation of Viscoelastic Flow : a Review,
Rubber Chem. and Tech., Rubber Reviews, Vol 62, 3, 426-455 (1989).

M.J. Crochet, V. Delvaux, J.M. Marchal, ,
On the convergence of the Streamline-Upwind Mixed Finite Element
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 34, 261-268 (1991).

M.J. Crochet, V. Legat ,
The Consistent Streamline-Upwind/Petrov-Galerkin Method for Viscoelastic Flow Revisited,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., in press (1991).

B. Debbaut, J.M. Marchal, M.J. Crochet,
Numerical Simulation of Highly Viscoelastic Flows through an Abrupt Contraction,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 29, 119-146 (1988).

B. Debbaut,
Simulation numérique des écoulements viscoélastiques,
PhD Thesis, Louvain-la-Neuve (1988).

V. Delvaux,
Surfaces libres et changements de type dans les écoulements de fluides viscoélastiques,
PhD Thesis, Louvain-la-Neuve (1989).

V. Delvaux, M.J. Crochet,
Numerical Simulation of delayed Die Swell
Rheol. Acta, 29, 1-10 (1990).

V. Delvaux, M.J. Crochet,
Numerical Prediction of Anomalous Transport Properties in Viscoelastic Flow,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 37, 297-315 (1990).

A. Denayer,
Automatic Generation of Finite Element Meshes,
Comp. and Struct., 9, 359-364 (1978).

J. Dheur, M.J. Crochet,
Stratified Flows of Newtonian and Viscoelastic Fluids,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 32, 1-18 (1989).

J. Dheur,
Simulation numérique des écoulements stratifiés,
PhD Thesis, Louvain-la-Neuve (1988).

F. Dupret,
Etude numérique d'écoulements irrotationnels incompressibles avec tension superficielle par une méthode variationnelle,
J. de Mécan. 20, 649 (1981).

F. Dupret,
A Method for the Computation of Viscous Flow by Finite Element with Free Boundaries and Surface Tension,
in "Finite Element Flow Analysis", T. Kawai, Univ. of Tokyo Press, Tokyo (1982).

M.S. Engelman, R.L. Sani, P.M. Gresho,
The Implementation of Normal and/or Tangential Boundary Conditions in Finite Element Codes for Incompresible Fluid Flow,
Int. J. Num. Meth. Fluids, 2, 225-238 (1982).

B.A. Finlayson,
Existence of Variational Principles for Navier-Stokes Equations,
Phys. Fluids, 15, 963 (1982).

M. Fortin, R. Glowinski,
Méthodes de Lagrangien augmenté.
Dunod (1982).

M. Fortin,
Résolution des équations de fluides incompressibles par la méthode des éléments finis,
Proc. of 3th Int. Conf. Num. Meth. Fluid Mech., Paris, Springer-Verlag (1972).

M. Fortin, R. Pierre,
On the Convergence of the Mixed Method of Crochet and Marchal for Viscoelastic Flows,
Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 73, 341-350 (1989).

P.M. Gresho, S.T. Chang, R.L. Lee, C.D. Upson,
A Modified Finite Element Method for Solving TIme-Dependent Uncompressible Navier-Stokes Equations,
Int. J. Num. Meth. Fluids, 4, 557-598 (1984).

G.H. Golub, C.F. Van Loan,
Matrix computations.
The John Hopkins University Press, Baltimore, Maryland, Second Ed. (1989).

W.J. Gordon, C.A. Hall,
Construction of Curvilinear Coordinate Systems and Application to Mesh Generation,
Int. J. Num. Meth. Engin., 7, 461-477 (1973).

P. Henrici,
Applied and Computational Complex Analysis,
Vol III discrete Fourier analysis, Cauchy integrals, construction of conformal maps, univalent functions, Pure and Applied Mathematics. John Wiley & Sons, New York-London-Sidney-Toronto (1986)

T.J.R. Hughues, A.N. Brooks,
A theoretical Framework for petrov-Galerkin Methods with Discontinuous Weighting Functions : Application to the Streamline-Upwind Procedure
in "Finite Element method in Fluids",
John Wiley & Sons, Vol. 4, 47-65 (1982).

G. Iooss, D.D. Joseph,
Elementary Stability and Bifurcation Theory.
Springler Verlag, (1982).

D.D. Joseph, M. Renardy, J.C. Saut,
Hyperbolicity and Change of Type into Flow of Viscoelastic Fluids,
Arch. Rational Mech., 87, 213-251, (1985).

C. Johnson,
Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method.
Cambridge University Press, Cambridge, (1987).

A. Karagiannis, A.N. Hrymak and J. Vlachopoulos,
Three-Dimensional Extrudate Swell of Creeping Newtonian Jets,
A.I.Ch.E. J. 34, 2088-2094 (1988).

A. Karagiannis, A.N. Hrymak and J. Vlachopoulos,
Three-Dimensional Non-Isothermal Extrusion Flows,
Rheol. Acta, 28, 121-133 (1989).

A. Karagiannis, A.N. Hrymak and J. Vlachopoulos,
Three-Dimensional Studies on Bicomponent Extrusion,
Rheol. Acta, 29, 71-87 (1990).

R. Keunings,
Simulation numérique d'écoulements à surfaces libres de fluides viscoélastiques,
PhD Thesis, Louvain-la-Neuve (1982).

R. Keunings,
Simulation of Viscoelastic Fluid Flow,
in "Fundamentals of Computer Modeling for Polymer Processing"
ed. C.L. Tucker III, Carl Hanser Verlag (1988).

R.C. King, M.R. Apelian, R.C. Amstrong, R.A. Brown,
Numerically Stable Finite Element Techniques for Viscoelastic Calculations in Smooth and Singular Geometries,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 29, 147-216 (1988).

S.F. Kistler, Scriven L.E.,
Coating Flows, in "Computational Analysis of Polymer Processing",
Pearson & Richardson, Applied Science, London, 243-299 (1983).

S.F. Kistler, Scriven L.E.,
Coating Flow Theory by Finite Element and Asymptotic Analysis of the Navier-Stokes System,
Int. J. Num. Meth. Fluids, 4, 207-229 (1984).

O.A. Ladyzhenskaya,
The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow.
Gordon and Breach Science Publishers, New York-London-Paris (1969).

V. Legat, J.M. Marchal,
Prediction of Three-Dimensional General Shape Extrudates by an Implicit Iterative Scheme,
Int. J. Numerical Methods in Fluids. 14, 609-625 (1992).

V. Legat, J.M. Marchal,
On the Stability and Accuracy of Numerical Techniques Used to Simulate the flow of Differential Viscoelastic Fluids : a One-Dimensional Model
J. of Rheol.. sous presse (1992).

V. Legat, J.M. Marchal,
Die Design : an Implicit Formulation Based on Lagrange Multipliers,
Int. J. Numerical Methods in Fluids. soumis à publication (1992).

V. Legat, J.M. Marchal,
Three-Dimensional Extrusion : an Implicit Formulation for Generalized Newtonian Fluids
Proc. of XIth Int. Cong. on Rheol., Bruxelles. (1992).

G.G. Lipscomb, R. Keunings, M.M. Denn,
Implications of Boundary Singularities in Complex Geometries,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 24, 85-96 (1987).

X.L. Luo, R.I. Tanner,
A decoupled Finite Element Streamline-Upwind Scheme for Viscoelastic Flow Problems,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 31, 143-162 (1989).

W. Lunsmann, R.A. Brown , R.C. Armstrong,
to be submitted, (1991).

J.M. Marchal, M.J. Crochet, R. Keunings,
Adaptive Refinement for Calculating Viscoelastic Flow,
Proc. Vth Int. Symp. on Finite Element and Flow Problems,
Eds Carey & Oden, Austin (1984).

J.M. Marchal,
Méthodes d'éléments finis pour le calcul des écoulements de fluides viscoélastiques différentiels,
PhD Thesis, Louvain-la-Neuve (1987).

J.M. Marchal, M.J. Crochet,
A New Mixed Finite Element for Calculating Viscoelastic Fluid,
J. Non-Newtonian Fluid Mech..,26, 77-114 (1987).

M.A. Mendelson, P.W. Yeh, R.A. Brown, R.C. Amstrong,
Approximation Error in Finite Element Calculation of Viscoelastic Fluid Flows,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 10, 31-54 (1982).

J.T. Oden,
Finite Element of Non-Linear Continua,
Mc Graw-hill, Adv. Engin. Series, New York (1972).

J.T. Oden, J.N. Reddy,
An Introduction to the Mathematical Theory of Finite Elements,
John Wiley, New York (1976).

J.M. Ortega, W.C. Rheinbolt,
Iterative Solution of Non-Minear Equations in Several Variables,
Academic press (1970).

S. Pillitsis, A.N. Beris,
Calculation od Steady-state Viscoelastic Flow in an Undulating Tube,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 31,231-287 (1989).

D. Rajagopalan, R.A. Brown, R.C. Amstrong,
Finite Element Methods for Calculation of Steady Viscoelastic Flow Using
Constitutive Equations with a Newtonian Viscosity,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 36, 159-192 (1990).

M. Renardy,
Existence of Slow Steady Flows of Viscoelastic Fluids with Differential Constitutive
Equations,
Z. angew. Math. Mech., 65, 449-451 (1985).

M. Renardy,
Inflow Boundary Conditions for Steady Flows of Viscoelastic Fluids with
Differential Constitutive Laws,
Tech. Sum. Report 2916 Univ.of Wisconsin Madison, Math. Res. Cent (1986).

M. Renardy, W.J. Hrusa, J.A. Nohel,
Mathematical Problems in Viscoelasticity,
Longman Scientific & Technical, John Wiley & Sons (1987).

M. Renardy,
Recent Advances in the Mathematical Theory of Steady Flow of Viscoelastic Fluids
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 29, 11-24 (1988).

S. Richardson
A Stick-Slip Problem Related to the Motion of a Free jet at Low Reynolds Number,
Proc. Cambridge Phil. Soc., 67, 477-489 (1970).

J. Rosenberg,R. Keunings,
Numerical Integration of Differential Viscoelastic Models,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 39, 269-290 (1991).

K.J. Ruschak,
Flow of a Falling Film into a Pool,
A.I.Ch.E. J.., 24, 705 (1978).

K.J. Ruschak,
A Method for Incorporating Free Boundaries with Surface Tension in Finite Element Fluid Flow Simulators,
Int. J. Num. Meth. Eng., 15, 639 (1980).

K.J. Ruschak,
A Three-Dimensional Linear Stability Analysis for Two-Dimensional Free Boundary Flows by Finite Element Method,
Comp. Fluids., 11, 391-401 (1983).

H. Saito and L.E. Scriven,
Study of Coating Flow by the Finite Element Method,
J. Comp. Phys., 42, 53 (1981).

R.L. Sani, P.M. Gresho, R.L. Lee, D.F. Griffiths,
The Cause and the Cure of the Spurious Pressures generated by certain FEM Solutions of the Incompressible Navier-Stokes Equations,
Part I, Int. J. Num. Meth. Fluids, 1, 17 (1981),
Part II, Int. J. Num. Meth. Fluids, 1, 171 (1981).

D. Scanlan, L.E. Scriven,
Two-Slot Coater Analysis : Inner Layer Separation Issues in Two-Layer Coating,
A.I.Ch.E. Int. Symp. On Mech. Thin-Film Coating Orlando (1990).

C.R.. Schneidesch,
Numerical Simulation of Incompressible Flows in Complex Geometries by Preconditioned Chebyshev Collocation,
PhD Thesis, Louvain-la-Neuve (1992).

G. Strang, G.J. FIx,
An Analysis of the Finite Element Method,
Prentice-Hall Englewood Cliffs, New jersey (1973).

J.F. Thompson, Z.U.A. Warsi, C.W. Mastin,
Boundary-Fitted Coordinate Systems for Numerical Solution of Partial Differential Equations : a Review,
J. Comp. Phys., 47, 1 (1982).

J.F. Thompson,
Grid Generation Techniques in Computational Fluid Dynamics,
A.I.A.A. J., vol 22-11, 1505-1523 (1984).

J.F. Thompson, Z.U.A. Warsi, C.W. Mastin,
Numerical Grid Generation,
Elsevier, New York (1985).

T. Tran-Cong, N. Phan-Thien,
Three-Dimensional Extrusion proces by Boundary Element Method II : Extrusion of a viscoelastic fluid,
Rheol. Acta, 27, 639-648 (1988).

T. Tran-Cong, N. Phan-Thien,
Die Design by a boundary element method,
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 30, 37-48 (1988).

J.J.. Van Schaftingen,
Méthodes d'éléments finis pour les écoulements viscoélastiques,
PhD Thesis, Louvain-la-Neuve (1985).

O. Wambersie, M.J. Crochet,
Transient Finite Element Method for calculating Steady State Three-Dimensional Free Surfaces,
Int. J. Numerical Methods in Fluids, 14, 343-360 (1992).

P. Wouters,
Simulation Numérique des Echanges Thermiques et Application à la Croissance des Cristaux Semi-Conducteurs
PhD Thesis, Louvain-la-Neuve (1985).

T. Yokoi, L.E. Scriven,
Profile Extrusion and Die Shape Designed by Galerkin's Method with Streamline-Adapted Basis Functions,
J. Non-Newtonian Fluid Mech. soumis à publication (1991).

O.C. Zienkiewicz,
The Finite Element Method,
McGraw-Hill, London, 3rd Ed., (1977).