

Simulation Cahn-Hilliard/Navier-Stokes du Passage d'une Bulle à Travers une Interface Liquide-Liquide

Franck Boyer^a, Céline Lapuerta^b & Bruno Piar^{b,*}

^aLaboratoire d'Analyse, Topologie et Probabilités (LATP),
39 rue F. Joliot Curie, F-13453 Marseille Cedex 13

^bInstitut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), Direction de Prévention de Accidents Majeurs,
BP3-13115 Saint-Paul-lez-Durance Cedex

* Correspondant. Courriel : bruno.piar@irsn.fr

Résumé :

Cet article présente et exploite un modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes triphasique original par la forme particulière de l'énergie libre et des équations d'évolution des paramètres d'ordre. Des propriétés de consistance algébrique et dynamique avec les systèmes diphasiques sous-jacents sont garanties. Les contraintes interfaciales sont représentées par des forces capillaires volumiques qui rendent compte des trois tensions de surface différentes. Le comportement d'une bulle au passage d'une interface liquide-liquide est calculé avec succès : la bulle peut rester piégée dans l'interface ou la traverser, auquel cas elle peut s'en extraire seule ou entraîner dans son sillage une gouttelette de liquide lourd. La dépendance du volume entraîné avec les propriétés des fluides en présence est étudiée. Les résultats obtenus sont en accord avec les observations expérimentales de la littérature.

Abstract :

This paper presents and applies a Cahn-Hilliard/Navier-Stokes model whose originality lies in a special free energy and in special evolution equations for the order parameters. Algebraic and dynamic consistency with the underlying diphasic systems is guaranteed. Interfacial stresses are represented by volumic capillary forces accounting for the three different surface tensions.

The behavior of a bubble crossing a liquid/liquid interface is successfully computed: the bubble may be captured by the interface or may escape, in which case wake entrainment of the heavier liquid may occur. The dependency of the entrained volume with the fluid properties is studied. The results are in good agreement with experimental observations of the literature.

Mots-clefs :

écoulement triphasique ; interface liquide-liquide ; bulles.

1 Introduction

Lors d'un hypothétique accident grave survenant dans un réacteur nucléaire à eau sous pression, un bain de corium (mélange de matériaux fondus provenant du cœur et de la cuve), encore chauffé par le dégagement de puissance résiduelle dû à la désintégration des produits de fission, est susceptible de se former puis de réagir avec les structures en béton qui le contiennent. Cette interaction s'accompagne de relâchements importants de gaz : vaporisation de l'eau contenue dans le béton et formation de dioxyde de carbone par décomposition du calcaire, principalement. Le bain est alors traversé par un flux de bulles.

Nous nous plaçons ici dans le contexte d'un scénario probable de l'accident où

- le bain atteint une configuration stratifiée horizontalement, composée de deux liquides non miscibles (la phase supérieure est majoritairement oxyde alors que la phase inférieure est majoritairement métallique) ;

- le flux gazeux vertical induit des perturbations de l'interface liquide-liquide, avec éventuellement un entraînement localisé de la phase lourde dans le sillage des bulles, mais sans déstratification globale.

La nature et l'intensité de ces perturbations sont déterminantes pour le déroulement de l'accident et font l'objet d'un ensemble d'études dans lesquelles la simulation numérique directe est mise en œuvre tant à des fins de compréhension des mécanismes élémentaires que pour alimenter en corrélations pertinentes des codes à plus grande échelle.

Nous présentons ici un modèle à interfaces diffuses de type Cahn-Hilliard/Navier-Stokes, adapté au contexte physique : écoulement incompressible de trois phases, non miscibles, sans changement de phase, avec de fortes transformations topologiques des interfaces. Le cas d'une bulle unique traversant une interface liquide-liquide est étudié numériquement, les résultats obtenus sont confrontés aux observations expérimentales rapportées dans la littérature.

2 Modèle de Cahn-Hilliard triphasique

Le modèle de Cahn-Hilliard repose sur une description des interfaces par des zones d'épaisseur finie, certes faible mais supérieure aux épaisseurs réelles [Jacqmin (1999)] et décrit l'évolution du système à travers la minimisation d'une *énergie libre* \mathcal{F} . Une phase i est représentée par une fonction régulière c_i , appelée *paramètre d'ordre*, valant 1 dans la phase i , 0 en dehors, et variant continûment entre 0 et 1 dans les interfaces entre la phase i et les autres phases.

Nous décrivons un système triphasique par trois paramètres d'ordre c_1 , c_2 et c_3 , sur un intervalle temporel $[0, T]$, et dans un domaine spatial Ω . En l'absence de changement de phase et de miscibilité macroscopique, les trois paramètres d'ordre sont liés par la relation :

$$c_1 + c_2 + c_3 = 1 \quad (1)$$

Dans notre modèle [Boyer & Lapuerta (2006), Lapuerta (2006)], la densité volumique associée à l'énergie libre \mathcal{F} , s'exprime comme la somme de trois termes capillaires $|\nabla c_i|^2$ et d'une fonction non convexe F_Λ :

$$\mathcal{F}(c_1, c_2, c_3) = \int_{\Omega} \frac{12}{\varepsilon} F_\Lambda(c_1, c_2, c_3) + \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_1 |\nabla c_1|^2 + \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_2 |\nabla c_2|^2 + \frac{3}{8} \varepsilon \Sigma_3 |\nabla c_3|^2, \quad (2)$$

où :

ε désigne l'épaisseur de toutes les interfaces ;

$\Sigma_i = \sigma_{ij} + \sigma_{ik} - \sigma_{jk}$; σ_{ij} étant la tension de surface entre les phases i et j ;

$$F_\Lambda = \frac{\Sigma_1}{2} c_1^2 (c_2 + c_3)^2 + \frac{\Sigma_2}{2} c_2^2 (c_1 + c_3)^2 + \frac{\Sigma_3}{2} c_3^2 (c_1 + c_2)^2 + \Lambda c_1^2 c_2^2 c_3^2 ; \Lambda \geq 0 ;$$

L'évolution en temps de $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3)$ est gouvernée par une équation de flot de gradient de l'énergie libre \mathcal{F} dans H^{-1} sous la contrainte (1) :

$$\begin{cases} \frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla \mu_i \right), \\ \mu_i = -\frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \Delta c_i + \frac{4 \Sigma_T}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{\Sigma_j} (\partial_i F_\Lambda(\mathbf{c}) - \partial_j F_\Lambda(\mathbf{c})) \right), \end{cases} \quad (3)$$

où Σ_T est défini par $\frac{3}{\Sigma_T} = \frac{1}{\Sigma_1} + \frac{1}{\Sigma_2} + \frac{1}{\Sigma_3}$. Les inconnues supplémentaires μ_1, μ_2, μ_3 sont appelées *potentiels chimiques généralisés*. Le coefficient M_0 est un paramètre du modèle, dit *mobilité*, qui peut dépendre des paramètres d'ordre.

Les inconnues (c_i, μ_i) vérifient des conditions au bord de type Neumann homogène ce qui permet d'assurer la conservation du volume de chaque phase, à tout instant.

Grâce à la contrainte (1), nous pouvons nous contenter de suivre l'évolution de seulement deux paramètres d'ordre c_1, c_2 , le troisième étant donné par $c_3 = 1 - c_1 - c_2$.

L'originalité de notre approche réside dans la forme particulière de l'énergie libre \mathcal{F} , qui permet d'avoir un modèle *algébriquement* et *dynamiquement* consistant, au sens suivant : d'une part l'énergie libre triphasique coïncide exactement avec celle du modèle de Cahn-Hilliard diphasique quand seulement deux des phases sont présentes ; d'autre part, si une des phases est initialement absente alors elle n'apparaîtra pas artificiellement au cours du temps, cette dernière caractéristique étant stable vis à vis des erreurs numériques. Ces propriétés de consistance nous démarquent d'autres approches qui ne les respectent pas, comme celles de Kim & Lowengrub (2005).

L'existence et l'unicité des solutions faibles et fortes sont démontrées en dimension 2 et 3 ainsi qu'un résultat de stabilité des états métastables [Boyer & Lapuerta (2006), Lapuerta (2006)].

En présence d'un écoulement incompressible, il convient de formuler, en plus, les bilans de masse et de quantité de mouvement.

Le saut de vitesse étant nul au passage d'une phase à l'autre, il est possible de définir une vitesse unique u , régulière sur tout le domaine. Les équations de Cahn-Hilliard et de Navier-Stokes sont alors couplées de façon que la création d'énergie libre par convection est à chaque instant l'opposée de la création d'énergie cinétique par capillarité [Jacqmin (1999)]. Ainsi, un terme d'advection est ajouté à l'équation d'évolution des paramètres d'ordre tout en laissant inchangée la définition des potentiels chimiques. L'évolution de la vitesse u et de la pression p est donnée par :

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)u \right) - \nabla \cdot (2\eta D(u)) + \nabla p = \sum_{i=1}^3 \mu_i \nabla c_i + \rho g, \\ \nabla \cdot u = 0, \end{cases} \quad (4)$$

où le terme source se décompose en une partie gravitaire et en une partie capillaire qui rend compte des contraintes interfaciales par des forces volumiques. Les propriétés thermophysiques, telles que la masse volumique ρ et la viscosité η , sont approchées par des fonctions continues, dépendant des paramètres d'ordre.

3 Applications

Le système d'équations de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes décrit précédemment est traité numériquement pas un schéma à pas fractionnaire, enchaînant la résolution des équations de Cahn-Hilliard par une méthode respectant l'estimation d'énergie, et la résolution des équations de Navier-Stokes par une méthode de pénalité-projection [Jobelin *et al.* (2006)]. La discrétisation spatiale est effectuée par éléments finis, avec le même élément pour la pression, les paramètres d'ordre et les potentiels chimiques, préservant ainsi la conservation du volume dans le problème discret. L'implémentation informatique est réalisée en utilisant la plate-forme PELICANS développée par l'IRSN.

3.1 Lentille piégée entre deux phases stratifiées

Considérons un système composé d'une lentille initialement sphérique, piégée entre deux phases stratifiées. Laissons évoluer ce système en absence de gravité. A l'équilibre, les positions des

interfaces dépendent des *paramètres d'étalement* S_1, S_2, S_3 (fig. 1) définis comme suit :

$$S_i = \sigma_{jk} - \sigma_{ij} - \sigma_{ik} = -\Sigma_i \quad \text{pour } i = 1, 2, 3 \text{ et } (i, j, k) \text{ deux à deux distincts.}$$

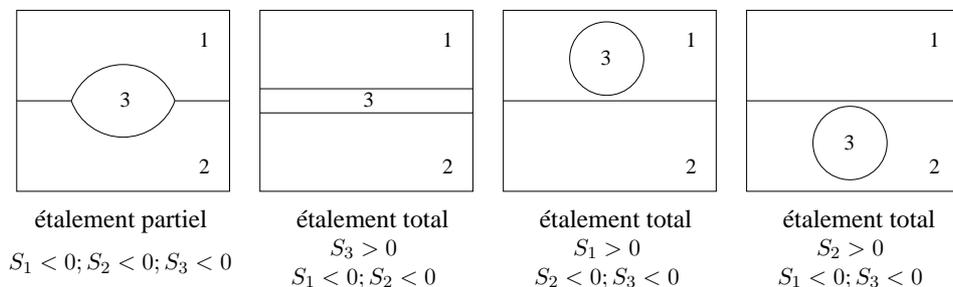
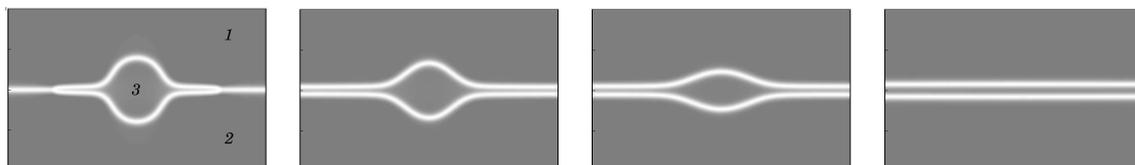


FIG. 1 – Etalement *partiel* ou *total* dans le cas où l'un des paramètres d'étalement S_i est négatif.

Les situations d'*étalement partiel*, où les angles de contact sont liés par la relation de Young, ont permis la validation numérique du modèle dans le cas où $\Lambda = 0$ [Lapuerta *et al.* (2005)]. Les configurations d'*étalement total*, où l'un des coefficients S_i est positif, sont plus délicates car l'énergie $F_{\Lambda=0}$ ne vérifie pas l'hypothèse de minoration requise par le théorème d'existence et d'unicité des solutions [Boyer & Lapuerta (2006), Lapuerta (2006)]. Dans ce cas, on observe numériquement une divergence des paramètres d'ordre hors des bornes physiques. Ceci explique la présence du terme $\Lambda c_1^2 c_2^2 c_3^2$ qui permet tant d'un point de vue théorique que pratique de stabiliser le système et ainsi de rendre compte des situations d'étalement total (fig. 2).

$$(\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}) = (3; 1; 1), S_3 > 0$$



$$(\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}) = (1; 1; 3), S_1 > 0$$

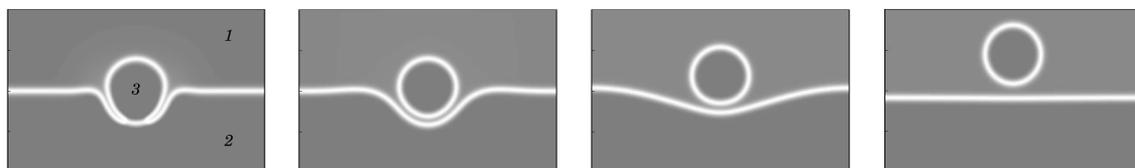


FIG. 2 – Simulations d'une situation d'étalement total ($\Lambda = 7$).

3.2 Comportement d'une bulle dans un bain stratifié

Lors de l'ascension d'une bulle dans un bain stratifié, celle-ci peut soit rester piégée dans l'interface, soit pénétrer dans la phase légère en entraînant éventuellement de la phase lourde. Greene *et al.* (1988) et Greene *et al.* (1991) proposent deux critères sur le volume de la bulle pour prédire le passage de celle-ci et le phénomène d'entraînement. Ces critères, basés sur un bilan macroscopique approché des forces de flottabilité et de tension de surface, ont été validés expérimentalement. Nous considérons les paramètres physiques suivants :

c_1 : bulle	$\varrho_1 = 1 \text{ kg.m}^{-3}$	$\eta_1 = 10^{-4} \text{ Pa.s}$	$\sigma_{\text{gaz-liquide}} = 0.07 \text{ N.m}^{-1}$
c_2 : fluide lourd	$\varrho_2 = 1200 \text{ kg.m}^{-3}$	$\eta_2 = 0.15 \text{ Pa.s}$	$\sigma_{\text{liquide-liquide}} = 0.05 \text{ N.m}^{-1}$
c_3 : fluide léger	$\varrho_3 = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$	$\eta_3 = 0.1 \text{ Pa.s}$	

On s'intéresse ici au premier critère qui prédit le passage de la bulle si son volume V est supérieur à :

$$V_p = \left(\frac{2\pi \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \sigma_{23}}{(\varrho_3 - \varrho_1)g} \right)^{\frac{3}{2}} \simeq 8.87 \cdot 10^{-8} \text{ m}^3, \text{ i.e. pour un rayon supérieur à } r_p \simeq 2.76 \cdot 10^{-3} \text{ m}.$$

L'étude numérique donne $r_p^{\text{num}} \simeq 2.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ ce qui est en bon accord avec le critère (fig. 3).

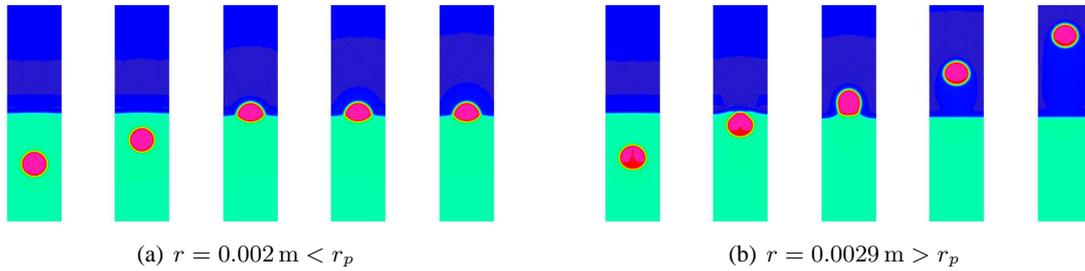


FIG. 3 – Ascension d'une bulle dans un bain stratifié.

Dans les situations d'entraînement, Greene *et al.* (1991) étudient expérimentalement la quantité de fluide lourd entraîné en fonction des masses volumiques et des viscosités. Nous proposons de retrouver ces comportements qualitativement en calculant la quantité de fluide lourd passant au dessus de la position initiale de l'interface liquide-liquide. Nous considérons comme calcul de référence le cas $r = 8 \text{ mm}$, en géométrie 3D axisymétrique, avec les propriétés précédentes (figure 4, courbes marquées par des ronds sur la figure 5). Nous obtenons des résultats en accord avec l'expérience : augmentation de la quantité entraînée lorsque la masse volumique du fluide léger augmente (fig. 5(a)) et lorsque les viscosités et la masse volumique du fluide lourd diminuent (fig. 5(b), 5(c) et 5(d)).

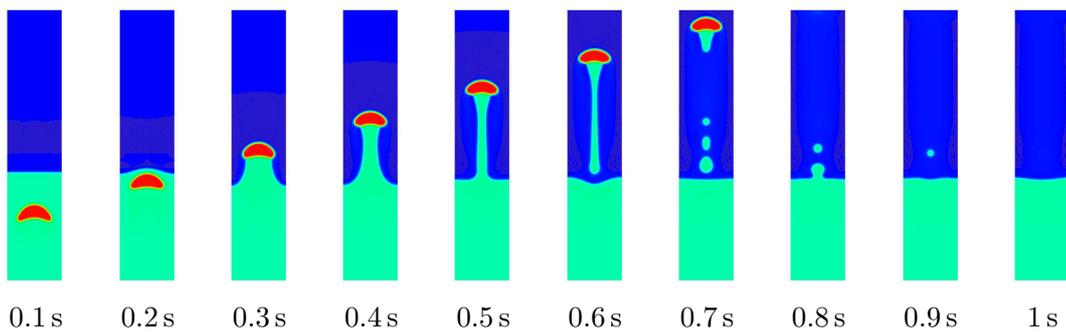
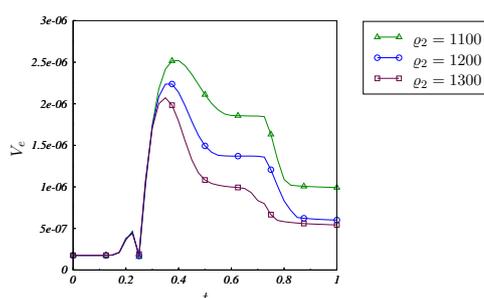


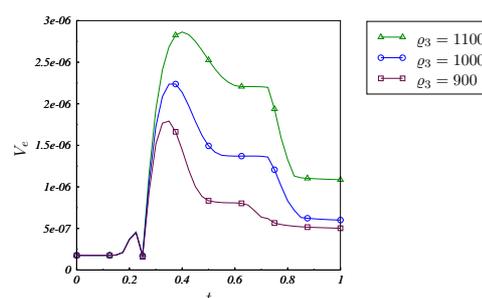
FIG. 4 – Entraînement de la phase lourde par le passage d'une bulle de rayon $r = 8 \text{ mm}$.

4 Conclusions et Perspectives

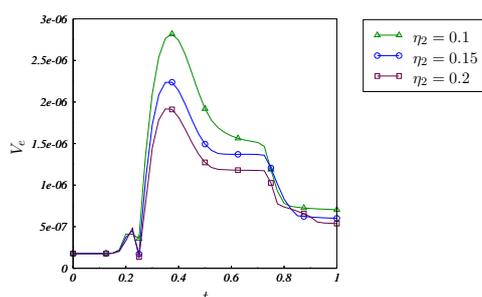
Un modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes, décrivant un écoulement de trois phases non miscibles sans changement de phase, a été établi et appliqué avec succès à l'étude du passage d'une bulle à travers une interface liquide-liquide. Parce qu'il repose sur une représentation des interfaces par des zones d'épaisseur finie, sa résolution numérique ne nécessite pas la délicate mise



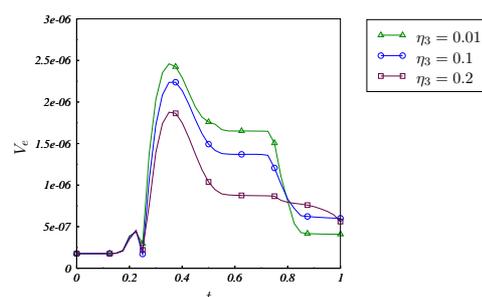
(a) influence de la masse volumique du fluide lourd



(b) influence de la masse volumique du fluide léger



(c) influence de la viscosité du fluide lourd



(d) influence de la viscosité du fluide léger

FIG. 5 – Evolution du volume entraîné V_e de la phase lourde dans la phase légère.

en œuvre des techniques spécifiques aux problèmes à frontières mobiles, mais, en contrepartie, pose de façon accrue la difficulté des multiples échelles caractéristiques s'échelonnant de la taille des interfaces jusqu'à celle du domaine de calcul. Les techniques de raffinement local adaptatif deviennent alors des méthodes de choix pour la capture numérique des phénomènes de transfert au voisinage des interfaces. Les développements associés sont actuellement en cours.

Références

- Boyer, F. & Lapuerta, C. 2006 Study of a three component Cahn-Hilliard flow model. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis* **40**(4) pp.653-687.
- Greene, G.A., Chen, J.C., Conlin, M.T. 1988 Onset of entrainment between immiscible liquid layers due to rising gas bubbles. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **31**(6) pp.1309-1317.
- Greene, G.A., Chen, J.C., Conlin, M.T. 1991 Bubble induced entrainment between stratified liquid layers. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **31**(6) pp.149-157.
- Kim, J. & Lowengrub, J. 2005 Phase field modeling and simulation of three-phase flows. *Interfaces and Free Boundaries* **7**(4) pp.435-466.
- Jobelin, M., Lapuerta, C., Latché, J.-C., Angot, Ph., Piar, B. 2006 A finite element penalty-projection method for incompressible flows. *Journal of Computational Physics* **217**(2) pp.502-518.
- Lapuerta, C. 2006 Echanges de masse et de chaleur entre deux phases liquides stratifiées dans un écoulement à bulles. *Thèse de Mathématiques Appliquées*. Université Aix-Marseille I
<http://net-science.irsn.org>
- Lapuerta, C., Boyer, F., Piar, B., Quintard, M., Angot, Ph. 2005 Un modèle de Navier-Stokes/Cahn-Hilliard pour la simulation d'écoulements incompressibles de trois phases non miscibles. *17^{ème} Congrès Français de Mécanique*. Troyes, Septembre 2005.
- Jacqmin, D. 1999 Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics* **155** pp.96-127.