

# Couplage de la méthode LBM avec un élément fini de membrane pour la prise en compte des effets de tension de surface

F. Séguy<sup>1</sup>, S. Valette<sup>1</sup>, P. Bocher,<sup>2</sup> E. Lévêque<sup>3</sup>, E. Feulvarch<sup>1</sup>

<sup>1</sup> University of Lyon, Ecole Centrale de Lyon, LTDS, UMR 5513 CNRS, 58 Rue Jean Parot, Saint-Etienne 42023, France

<sup>2</sup> École De Technologie Supérieure ÉTS, 1100 Rue Notre Dame O, Montréal QC H3C 1K3, Quebec, Canada

<sup>3</sup> University of Lyon, CNRS, Ecole Centrale de Lyon, Univ Claude Bernard Lyon 1, INSA Lyon, LMFA, UMR5509, F-69130, Ecully, France

**Résumé** — L'objectif de cette étude est de proposer une méthode de couplage numérique efficace pour la simulation de deux fluides non miscibles de masses volumiques très différentes. Plus précisément, cette étude cherche à compléter un modèle éléments finis de membrane défini dans [4] développé en amont pour y adjoindre une simulation de dynamique des fluides à travers la méthode Boltzmann sur Réseau. La première étape est de développer et tester le modèle dans des dynamiques de relaxation de bulle, ce qui sera l'objet de cet article.

**Mots clés** — Couplage, FEM, LBM, hydrodynamique, tension de surface.

## 1 Introduction

La simulation numérique d'écoulements multiphasiques et des phénomènes de mouillabilité représentent un enjeu industriel et scientifique important dans des domaines comme la fabrication additive [2] ou la fonctionnalisation des surfaces [3]. Pour modéliser ces interfaces complexes, la méthode de Boltzmann sur Réseau s'impose en alternative aux méthodes conventionnelles de type Navier-Stokes. Une des approches multiphasiques populaire est le modèle de pseudo-potential de Shan-Chen. Cependant, ce modèle possède des limitations intrinsèques dans des configurations à ratio de densité élevés, comme des simulations de mouillabilité approchant des ratios 1000:1 dans l'interaction liquide-gaz. Ces limitations causent des instabilités dans les forces de tension de surface et des phénomènes de "spurious currents" (fig. 1) indésirables [5].

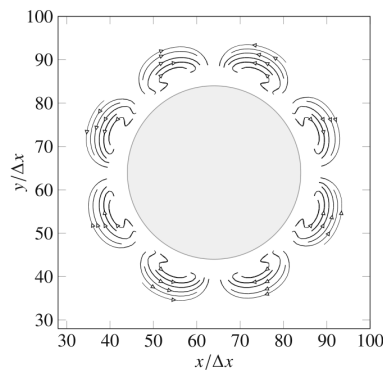


FIGURE 1 – "Spurious currents" dans un LBM à pseudo-potential [5]

Diverses stratégies ont été proposées pour éliminer ces instabilités, comme l'utilisation d'équations d'états [3] mais la complexité et la réduction des pas de calcul limitent la viabilité industrielle. Lever les limitations du modèle en limitant les coûts de calcul demeure un verrou à lever dans le domaine. C'est dans ce contexte qu'un couplage entre un élément fini de membrane, introduisant les mécaniques de tension de surface, et la méthode Boltzmann sur Réseau est proposé.

## 2 Éléments finis de membrane

L'idée initiale du couplage est de compléter un modèle développé par Feulvarch et al [4] décrit comme un modèle éléments finis de membrane. Ce modèle est une méthode Lagrangienne qui permet de fixer les conditions aux bords du domaine fluide en suivant l'interface air-liquide. Après avoir fait l'hypothèse que l'évolution de cette interface est pilotée en grande partie par l'effet normal de la tension de surface (fig.2), il est possible de construire une géométrie en simulant uniquement une membrane extérieure et, avec les bons paramètres, passer outre la simulation du bain de fusion. Cela permet un calcul rapide sur une machine de faible puissance de dynamique d'équilibre de bain de fusion dans un contexte de fabrication additive. Cette stratégie de suivre une surface pilotée par la tension de surface la rend intéressante pour des applications de mouillabilité.

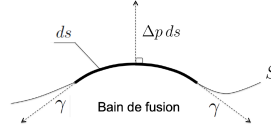


FIGURE 2 – Schéma de principe de l'effet normal de la tension de surface [4]

L'équation principale dictant l'évolution de la membrane est la suivante :

$$\forall \delta \mathbf{v}, \int_S \delta \mathbf{v} \cdot (\Delta \bar{p} + \beta z) \mathbf{n} ds - \int_S \delta \mathbf{D} : (I\gamma) ds = 0 \quad (1)$$

Elle représente l'équilibre des forces entre les forces de surpression et les forces de tension de surface, ce qui mènera par minimisation de l'énergie à une forme géométrique à double courbure négative. Le paramètre  $\beta$  sert à approcher les effets hydrodynamiques tel que l'effet Marangoni en ajoutant une dynamique de surpression  $\Delta p$  et représente une énergie potentielle supplémentaire. Le signe de  $\beta$  influe sur l'évolution de la surpression en fonction de l'altitude  $z$ , ce qui cause une diminution ou une augmentation du rayon de courbure.

Après discrétisation en éléments finis et normalisation par la tension de surface  $\gamma$ , l'équation (1) devient la suivante

$$\int_S N_i (\Delta \bar{p}^* + \beta^* z) \mathbf{n} ds - \int_S \mathbf{B}_i ds = 0 \quad (2)$$

Cette équation nous permet de calculer un  $\Delta \bar{p}^*$  moyen sur tous les nuds du maillage de la membrane ainsi qu'un  $\Delta \bar{p}_i^*$  local, qui nous permettra de calculer la géométrie stabilisée après injection de matière grâce à l'équation suivante :

$$\mathbf{x}_i^{(k+1)} = \mathbf{x}_i^{(k)} + \lambda^{(k)} \left( \Delta \bar{p}^{*(k)} - \Delta \bar{p}_i^{*(k)} \right) \mathbf{n}_i^{(k)} \quad (3)$$

Selon (3) la géométrie évoluera jusqu'à ce qu'un équilibre soit atteint : Lorsque les  $\Delta \bar{p}_i^*$  sont très proches des  $\Delta \bar{p}^*$  moyens.

Néanmoins, ignorer l'hydrodynamique du bain est à la fois la force et la limite du modèle. Comme le domaine simulé n'est qu'une maille 2D qui gonfle en suivant la loi de Laplace-Young, l'histoire thermique du bain de fusion est ignorée. La connaissance de cette histoire thermique est nécessaire pour calculer des distorsions thermiques qui peuvent être importantes lors des procédés de fabrication additive. De plus, le paramètre  $\beta$  est un paramètre qui demande une base de données initiale pour couvrir un large domaine de conditions d'impression. Un modèle plus complet est nécessaire pour simuler avec une meilleure fiabilité physique.

L'idée est donc d'adjoindre à ce modèle éléments finis de membrane une méthode Boltzmann sur Réseau, qui est facile à mettre en oeuvre et permettra une parallélisation des calculs. Cela remplacera l'implémentation des effets hydrodynamiques du  $\beta$  par une véritable simulation d'hydrodynamique.

### 3 Méthode de Boltzmann sur Réseau

La méthode Lattice Boltzmann (LBM) est une approche numérique distincte des méthodes traditionnelles tel que les éléments finis. Au lieu de résoudre des équations macroscopiques de conservation, la LBM simule la physique des fluides à une échelle mésoscopique. Le domaine est représenté par un réseau cartésien de cellules (fig. 3) défini par le pas spatial  $\Delta x$ , où on injecte des populations de particules qui évolueront selon l'équation (4) de Boltzmann discrétisée [5] :

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = \Omega_i(f) \quad (4)$$

Le terme à gauche représente l'étape de "streaming", où les particules vont bouger sur un réseau cartésien, tandis que le terme de droite représente l'opérateur de collision. Il existe divers opérateurs de collision séparés en plusieurs familles, notamment les opérateurs SRT pour "single relaxation time" et MRT pour "multiple relaxation time". En comptant les distributions de particules et en utilisant les équations d'états de la LBM, il est possible d'obtenir des valeurs macroscopiques comme la densité  $\rho$  ou la pression  $p$ .

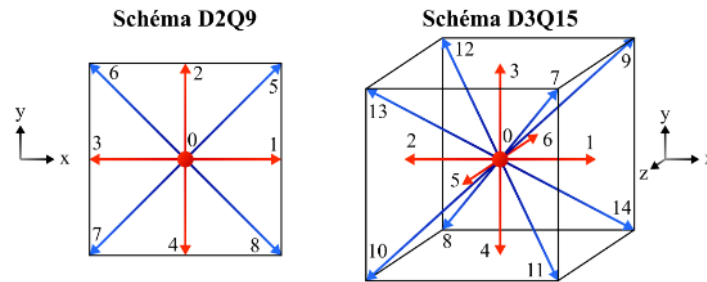


FIGURE 3 – Schéma de cellules de discrétisation LBM [3]

Pour la simulation d'hydrodynamique telle que la mouillabilité, l'une des méthodes LBM les plus utilisées est le modèle dit à "pseudo-potentiel" de Shan-Chen. De nombreux modèles ont été établis avec succès, néanmoins un problème demeure : Le ratio de densité entre les phases de fluide induit des instabilités numériques lorsqu'il est trop élevé (pour certaines méthodes, ce nombre est égal à 15 mais certains modèles arrivent à un ratio de 1000), ce qui est suffisant pour certaines applications [3]. Néanmoins, des ratios plus grands sont difficiles à simuler et demandent des modèles plus complexes et plus coûteux en temps de calcul.

Des couplages fluides-structures utilisant une formulation FEM et une formulation LBM ont déjà été étudiés [6], néanmoins les applications sont limitées et le concept encore peu exploré dans le contexte de simulation de mouillabilité. Une extension de la LBM qui permet de faciliter ce couplage est la méthode d'Immersed Boundary (IBM) développée par Peskin [7] et appliquée aux particularités de la LBM. L'idée est d'ajouter à la grille LBM eulérienne des marqueurs lagrangiens (fig.4) qui évolueront selon la dynamique du fluide.

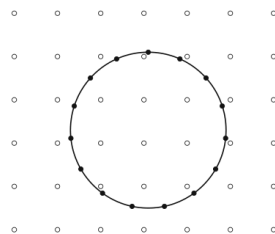


FIGURE 4 – Schéma de discrétisation IBM [5]

La méthode IBM permet de transformer un problème aux conditions limites de structure à un problème en conditions limites de force. La vitesse imposée par la structure devient une distribution de force, qui permet de faire bouger le fluide et corriger sa vitesse, et la vitesse du fluide s'interpole à la structure qui se met à bouger.

## 4 Algorithme de couplage

Ce couplage a pour enjeu de lever le verrou de ratio de densité des problèmes comme le problème de mouillabilité en proposant une méthode novatrice de couplage en étant efficace numériquement. Notamment, on ne s'intéresse qu'à l'hydrodynamique interne et pas à la dynamique de l'air ambiant. Cependant, l'objectif est dans un premier temps de développer le couplage et de le vérifier numériquement. La simulation proposée pour cela est celle de la relaxation d'une bulle elliptique dans un fluide comme illustré dans [1].

L'idée de l'algorithme de couplage est la suivante : En utilisant le principe de l'IBM (fig. 4), une discrétisation lagrangienne représentant les noeuds de la membrane sera placée sur une grille eulérienne permettant d'appliquer la méthode Boltzmann sur Réseau. L'équation (3) sera modifiée de la manière suivante :

$$\mathbf{x}_i^{(k+1)} = \mathbf{x}_i^{(k)} + \lambda^{(k)} \left( \Delta \bar{p}_f^{(k)} - \Delta \bar{p}_m^{(k)} \right) \mathbf{n}_i^{(k)} \quad (5)$$

avec  $\Delta \bar{p}_f^{(k)}$  le delta de pression calculé par la LBM et  $\Delta \bar{p}_m^{(k)}$  le delta de pression de la membrane calculée lors de l'algorithme décrit précédemment. La pression extérieure est supposée constante : La dynamique de la membrane est pilotée par la différence entre le delta de pression lié à la tension superficielle et le delta de pression lié à l'hydrodynamique interne de la goutte.

La géométrie cherche à évoluer tel que le delta de pression calculé par la géométrie soit égal au delta de pression du fluide local au noeud. On peut le voir de la façon suivante : L'équilibre sera atteint lorsque la dynamique du fluide est en adéquation avec la dynamique de la membrane.

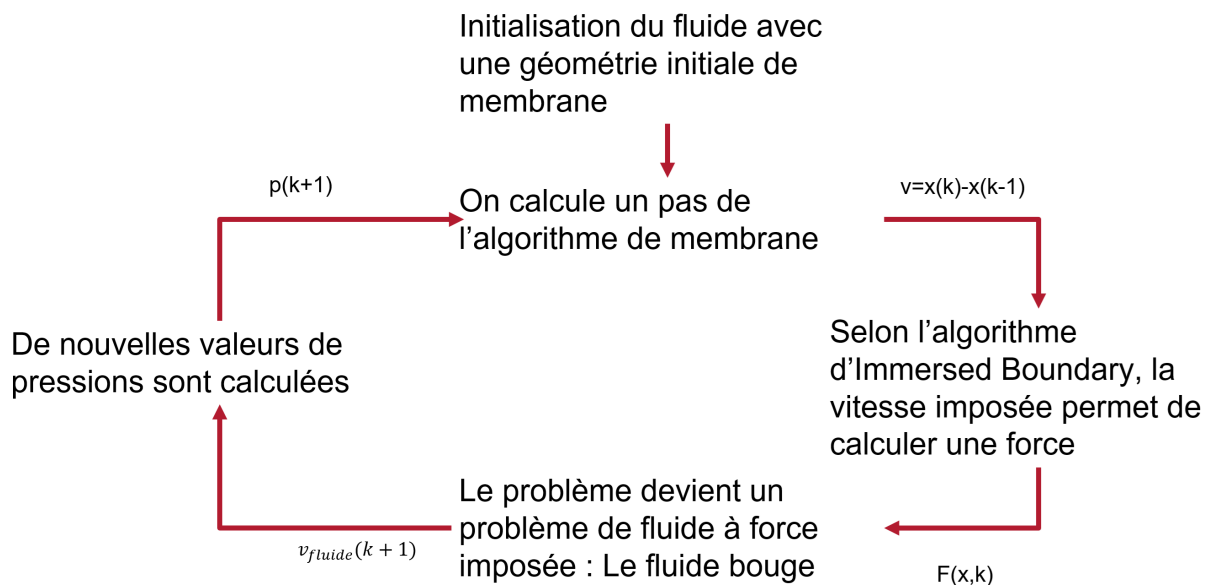


FIGURE 5 – Diagramme de l'algorithme de couplage

Comme décrit sur la fig.5, le couplage possède deux variables de communication entre les modèles : La vitesse de la membrane ainsi que la pression du fluide. La vitesse de la membrane, comme le pas de temps LBM est unitaire, est la différence de position entre le pas  $k$  et le pas  $k-1$ . La pression du fluide est la pression calculée grâce à l'algorithme LBM.

## 5 Perspective

Comme décrit auparavant, le cas d'étude choisi est celui de la relaxation d'une bulle initialement elliptique. Ce cas a été choisi car il illustre parfaitement l'intérêt de l'algorithme de membrane et de son couplage avec l'IBM : La relaxation d'une bulle est majoritairement pilotée par la tension de surface, représentée par la membrane, mais peut être perturbée par l'hydrodynamique du fluide interne.

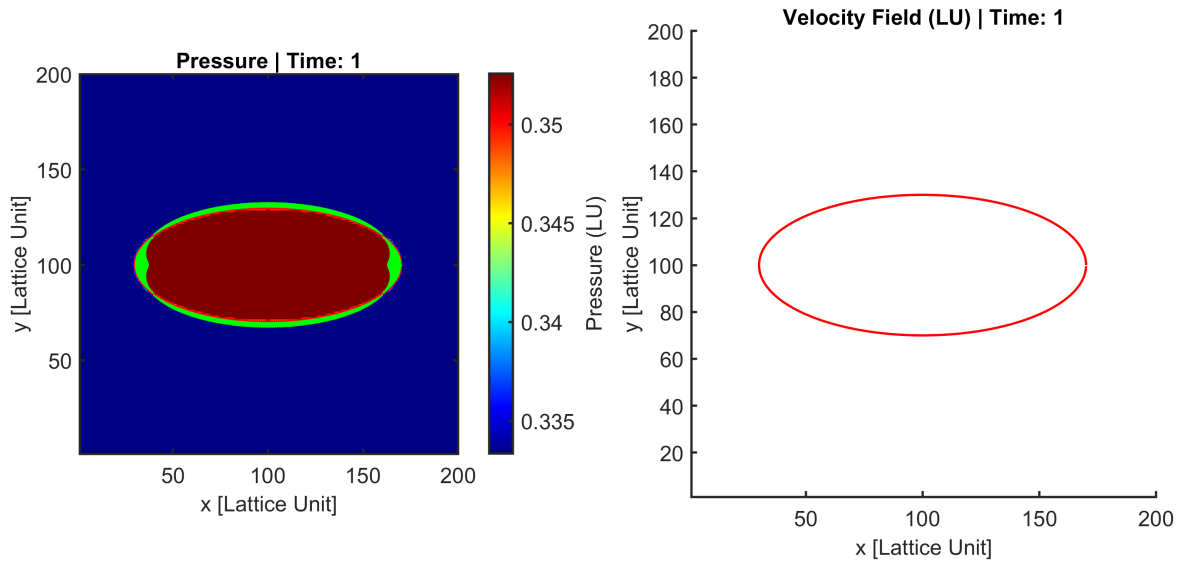


FIGURE 6 – Initialisation de la simulation

La simulation est initialisée selon la fig.6. Une grille LBM de 200x200 unités lattice est initialisée avec une densité en unité lattice de 1 à l'extérieur, et d'une densité initiale approchant un état physique réaliste à l'intérieur et une vitesse nulle partout. Les conditions aux limites du domaine sont des conditions de périodicité. La membrane est initialisée analytiquement suivant l'équation paramétrique d'une ellipse, et est définie en unités lattice comme les valeurs de pression ou de vitesse. Les flèches vertes représentent le champ de vitesse de la membrane.

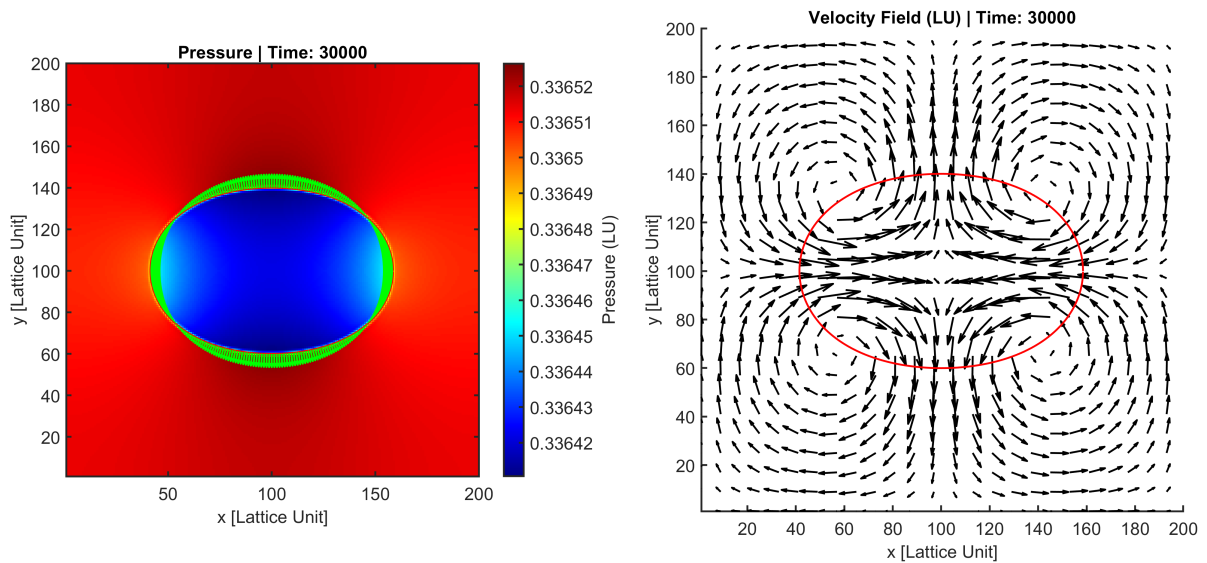


FIGURE 7 – Membrane en cours de stabilisation

La figure 7 montre la simulation à mi-chemin de la stabilisation. Des courants de recirculation peuvent être observés dû à la réponse du fluide, tandis qu'une surpression sur les pôles de l'axe X et une dépression sur les pôles de l'axe Y sont visibles. Cette distribution de pression est cohérente avec une dynamique de bulle.

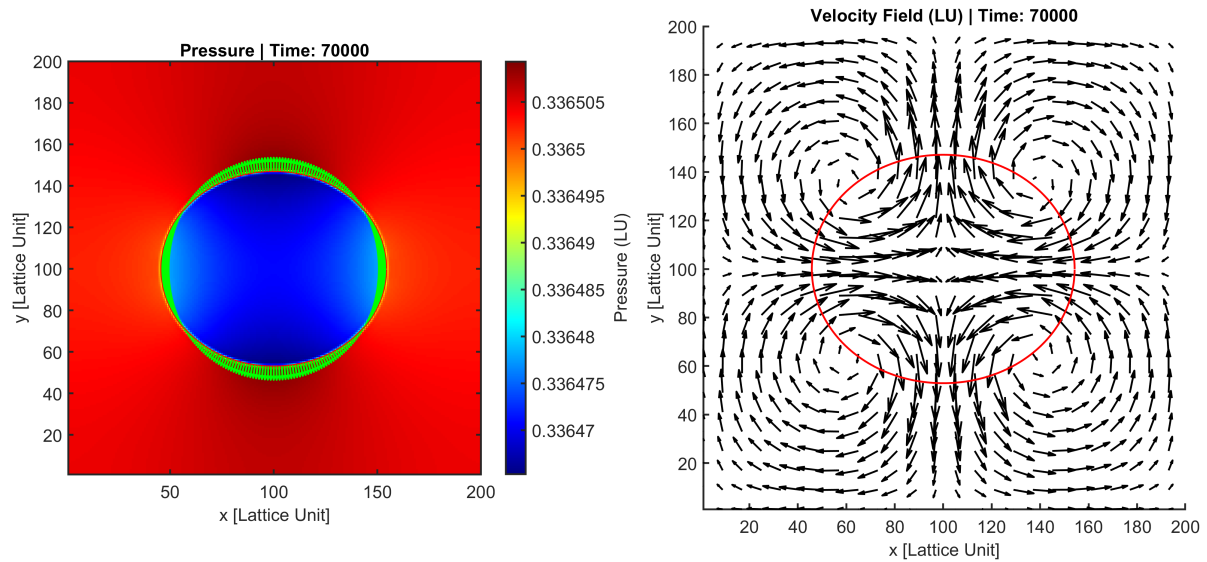


FIGURE 8 – Membrane stabilisée

La fig.8 représente la fin de la simulation, lorsque la membrane elliptique s'est relaxée en un cercle. Entre l'état initial et l'état final, il y a une différence d'aire d'environ 2%

On obtient donc l'état relaxé désiré qui est un cercle avec une aire très similaire à l'aire de l'ellipse. Cette simulation représente un premier exemple de couplage de l'élément fini de membrane dans un fluide. Néanmoins, on observe un manque d'oscillations normalement observées en dynamique de bulle.

Ce travail a présenté une méthode de couplage FEM-LBM novatrice qui vise à résoudre des problèmes de mouillabilité de surface en limitant les coûts de calcul. Ce premier cas test représente la relaxation d'une bulle elliptique en se reposant sur la méthode de couplage décrite dans cette étude. Néanmoins, une étude numérique est nécessaire pour calibrer les différents paramètres et le domaine de stabilité de la méthode.

Cet exemple pave le chemin pour une simulation future de mouillabilité de surface avec une interaction entre un substrat, l'air et la goutte de fluide. De plus, l'introduction d'une source de chaleur dans la simulation pourrait mettre en évidence l'effet Marangoni, et l'adapter à un problème de fabrication additive qui en est l'objectif final.

## Références

- [1] Asaki T. J., Marston P. L. *Free decay of shape oscillations of bubbles acoustically trapped in water and sea water.*, Journal Of Fluid Mechanics, 149–167, 1995.
- [2] Cadiou S., Courtois M., Carin M., Berckmans W., Masson, P. L. *3D heat transfer, fluid flow and electromagnetic model for cold metal transfer wire arc additive manufacturing (Cmt-Waam).*, Additive Manufacturing, 2020.
- [3] Epalle, A. *Simulation numérique par méthode Lattice-Boltzmann des propriétés de mouillabilité des surfaces texturées*, HAL, 2023.
- [4] Feulvarch E., Rassineux A., Roux J., Sova A., Pouvreau C., Josse, F. *A membrane finite element for fast simulation of overlapping beads geometry during direct energy deposition additive manufacturing.*, Computational Mechanics, 679–688, 2024.
- [5] Krüger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O., Silva G., Viggien E. M *The Lattice Boltzmann method*, Springer, 2016.
- [6] Li Z.,Favier J. *A non-staggered coupling of finite element and lattice Boltzmann methods via an immersed boundary scheme for fluid-structure interaction.*, Computers & Fluids, 90–102,2016.
- [7] Peskin C.S., *The immersed boundary method.*, Acta Numerica, Cambridge University Press, 479–517, 2002.