

Méthode des Éléments Finis-Particules pour des écoulements multiphasiques

F. Ruyffelaere¹, T. Leysens¹, M. Henry¹, J. Lambrecht¹, J-F. Remacle¹

¹*MMC, Université Catholique de Louvain,*

{felix.ruyffelaere, thomas.leysens, michel.henry, jean-francois.remacle, jonathan.lambrechts}@uclouvain.be

Résumé — La simulation d'écoulements multiphasiques présente encore des défis tant dans la compréhension physique des phénomènes associés que dans la robustesse des schémas numériques employés. Nous proposons un modèle purement lagrangien (PFEM), capable de capturer avec précision les changements topologiques du fluide et robuste face à des géométries complexes. Notre méthode propose une adaptation progressive du maillage afin de capturer nettement l'interface entre les différentes phases et d'y imposer les conditions liées.

Mots clés — PFEM, écoulements multiphase, adaptation de maillage.

1 Introduction

La capacité à reproduire numériquement des écoulements multiphasiques présente un enjeu majeur dans de nombreux secteurs. Dans l'industrie, une variété de procédés repose sur les interactions entre plusieurs fluides pour exploiter des phénomènes complexes. Parmi les applications courantes, on peut citer l'atomisation, la cavitation de bulles, l'émulsification ou encore certains phénomènes acoustiques [1]. La physique qui gouverne ces processus étant particulièrement riche et difficile à appréhender, les simulations numériques sont devenues un outil essentiel pour les industries voulant analyser et optimiser leurs procédés. Le besoin d'un modèle précis et robuste, capable de s'adapter à une gamme d'applications en expansion, apparaît ainsi comme pleinement justifié.

Pour capturer cette diversité de phénomènes complexes, les modèles numériques doivent relever plusieurs défis. La conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie au cours du temps est évidemment essentielle. Le modèle doit aussi gérer les discontinuités présentes aux interfaces, les changements topologiques potentiellement abrupts sur différentes échelles, ainsi que, dans certains cas, le maintien de l'équilibre thermodynamique interfacial. Pour répondre à ces difficultés, plusieurs classes de modèles reviennent régulièrement dans la littérature.

Dans l'approche eulérienne, les équations de Navier–Stokes sont résolues sur un domaine fixe. Dans ce cadre, deux grandes approches coexistent pour représenter l'interface entre phases. Les méthodes dites "interface-tracking" utilisent par exemple des marqueurs pour définir explicitement l'interface. À chaque itération, ces marqueurs sont advectés afin de mettre à jour sa position. Ce type de méthode nécessite souvent des traitements particuliers pour relier les marqueurs au maillage, ce qui peut limiter la précision globale. À l'inverse, les méthodes "interface-capturing" reposent sur une fonction de phase indiquant localement le fluide présent, comme dans les approches Volume-of-Fluid (VoF) ou Level Set Method (LSM). L'interface est alors localisée aux endroits où cette fonction prend une valeur intermédiaire. Cette représentation diffuse tend toutefois à lisser la transition entre phases et peut dégrader la convergence pour une résolution donnée.

Une alternative est l'approche lagrangienne où le fluide est représenté par une collection de particules advectées avec l'écoulement et portant leurs propriétés physiques. La Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) en est un exemple emblématique. Cette méthode sans maillage construit la solution au moyen d'interpolations entre particules [2]. Historiquement, ce type d'approche présente un net avantage pour suivre des changements topologiques brusques et complexes, tels que les interfaces ou les surfaces libres [3], puisque la représentation du fluide est directement transportée avec l'écoulement. Elle s'adapte également de manière naturelle aux géométries complexes. En contrepartie, l'usage d'interpolations conduit

souvent à une perte de précision par rapport aux méthodes fondées sur une grille, et le coût lié à la recherche des plus proches voisins peut devenir significatif.

Dans ce travail, nous proposons une approche unifiant ces deux cadres afin de combiner leurs points forts. Nous nous appuyons sur les travaux de [4], qui ont développé la méthode des éléments finis particulaires (PFEM) pour des écoulements à surface libre, et proposons ici une extension permettant de traiter des fluides multiphasiques avec un nombre arbitraire de phases.

2 Méthode des éléments finis-particules

La méthode des éléments finis particulaires (PFEM) [3] est une approche lagrangienne dans laquelle le fluide est représenté par des points matériels advectés à chaque itération. Les PFEM combinent une représentation particulaire de la géométrie avec la mécanique continue des éléments finis par l'usage d'un maillage, dont les noeuds coïncident avec les particules du fluide. Cette stratégie hybride combine la robustesse des méthodes lagrangiennes pour suivre l'évolution topologique du fluide avec la précision et les garanties de convergence offertes par le FEM.

L'idée générale de la méthode est illustrée à la figure (1). À chaque itération, les équations du fluide sont résolues, puis les noeuds sont advectés selon le champ de vitesse obtenu. Une étape de remaillage rétablit ensuite la connectivité, fournissant le nouveau domaine pour l'itération suivante. Les étapes intermédiaires (2-3), également représentées, mettent en évidence les mécanismes nécessaires à la préservation de la topologie de l'interface. Les sous-sections suivantes détaillent ces traitements et décrivent leur adaptation au cas des écoulements multiphasiques.

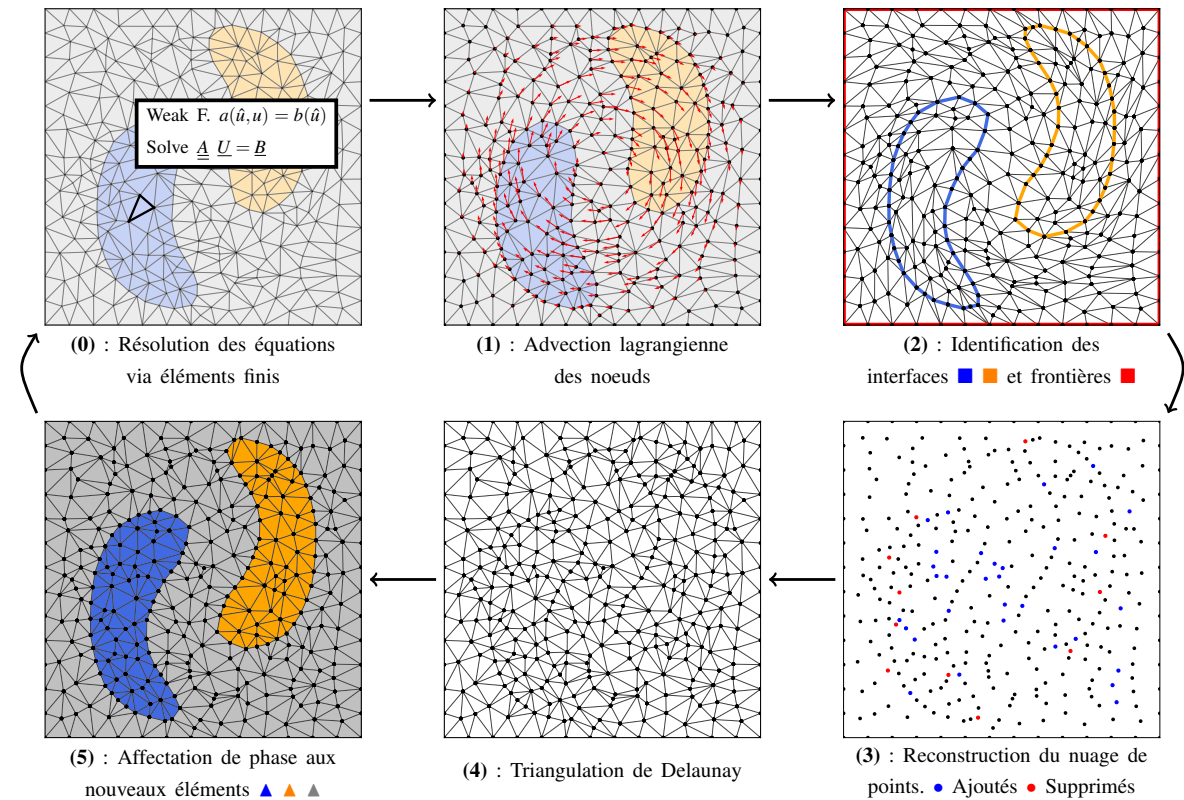


FIGURE 1 – Méthodologie PFEM pour des simulation de fluides multiphasiques. La solution est calculée par la méthode des éléments finis, les noeuds sont advectés de manière lagrangienne et un nouveau maillage est construit sur cette base, conforme aux interfaces.

(1) Équations de conservation

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \{2, 3\}$ un domaine contenant un nombre n de phase distinctes et immiscibles. Soit t le temps, $\underline{x} = \{x_i\}_{i=1}^d$ les coordonnées cartésiennes. L'évolution de $\underline{u}(\underline{x}, t)$ la vitesse et $p(\underline{x}, t)$ la pression

sont gouvernée par les équations de Navier-Stokes incompressibles, extensivement décrites dans [5] :

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \rho \underline{\underline{g}} \quad (1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1b)$$

avec ρ la densité, $\underline{\underline{\sigma}}$ le tenseur des contraintes de Cauchy et $\underline{\underline{g}}$ le vecteur d'accélération gravitationnelle. Pour un fluide newtonien isotropique nous avons :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}} + 2\mu \left(\frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) \right) \quad (2)$$

avec μ la viscosity dynamique et $\underline{\underline{I}}$ le tenseur identité. Pour Ω , les conditions frontières sont prescrites telles que :

$$\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}} \quad \text{on } \Omega_D \quad (3a)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{n}} = \hat{\underline{\underline{\sigma}}}_n \quad \text{on } \Omega_N \quad (3b)$$

Considérons à présent les sous-domaines $\{\Omega_k\}_{k=1}^n$ pour lesquels $\bigcup_{k=1}^n \Omega_k = \Omega$, chacun correspondant à une phase. Soit $\Gamma_{lp}(t)$ l'interface entre $\Omega_l(t)$, $\Omega_p(t)$. Les propriétés physiques des sous-domaines sont définies telles que :

$$\rho(\underline{\underline{x}}, t) = \begin{cases} \rho_l & \text{if } \underline{\underline{x}} \in \Omega_l(t) \\ \rho_p & \text{if } \underline{\underline{x}} \in \Omega_p(t) \end{cases}, \quad \mu(\underline{\underline{x}}, t) = \begin{cases} \mu_l & \text{if } \underline{\underline{x}} \in \Omega_l(t) \\ \mu_p & \text{if } \underline{\underline{x}} \in \Omega_p(t) \end{cases} \quad (4)$$

A l'interface $\Gamma_{lp}(t)$, en définissant $[\phi] = \phi_l - \phi_p$ le saut pour la quantité ϕ , les conditions de couplage sont données par la continuité de la vitesse et la balance entre la contrainte normale à l'interface et la tension de surface :

$$[\mathbf{u}] = \underline{\underline{0}} \quad \text{on } \Gamma_{int} \quad (5a)$$

$$[\underline{\underline{\sigma}}] \cdot \underline{\underline{n}} = \gamma \kappa \underline{\underline{n}} \quad \text{on } \Gamma_{int} \quad (5b)$$

avec $\underline{\underline{n}}$ le vecteur normal à l'interface, γ un coefficient (constant) de tension de surface et κ la courbure de l'interface.

Un élément clé de notre approche est la représentation nette des interfaces, qui coïncident directement avec les arêtes du maillage. Cette caractéristique rend l'imposition des conditions aux interfaces bien plus naturelle que dans les méthodes reposant sur des fonctions diffuses. Des grandeurs géométriques, comme la courbure, peuvent ainsi être calculées directement à partir de la géométrie du maillage, sans recourir à des reconstructions ou filtrages supplémentaires. De plus, cette représentation explicite allège le travail du solveur : les conditions interfaciales peuvent être directement intégrées dans la formulation faible.

(2) Identification des interfaces

Dans la littérature PFEM, et plus largement dans les modèles lagrangiens, une approche courante consiste à attribuer une "couleur" à chaque noeud pour représenter les différentes phases. Un élément dont les noeuds ont des couleurs différentes est alors soit traité de manière diffuse [6] (l'interface étant répartie dans l'élément), soit considéré comme appartenant à une seule phase [5]. Dans les deux cas, l'interface est soit lissée, soit incohérente avec la conservation de masse, ce qui peut réduire la précision de la simulation.

Nous proposons une alternative : au lieu de colorier les noeuds, nous assignons directement à chaque élément de volume ses propriétés physiques (masse volumique, viscosité) correspondant à sa phase. L'interface est alors identifiée en comparant les propriétés des éléments adjacents le long de chaque arête. Cette approche permet de capturer l'interface de manière nette, sans dépendre de conditions arbitraires sur les noeuds dont la connectivité change à chaque remaillage. Cette assignation par éléments n'est rendue possible que grâce à notre méthodologie spécifique de remaillage.

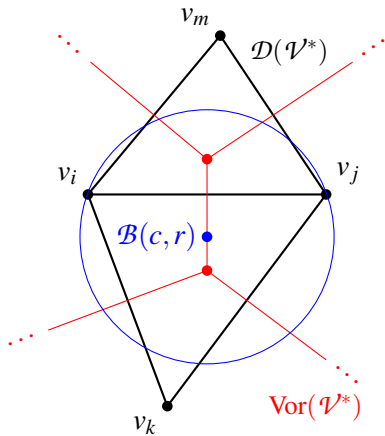
(3) Remaillage

L'atout majeur de notre approche réside dans la représentation directe des interfaces entre phases. Toutefois, si l'on considère une interface $\Gamma(t_i)$ à un instant discret t_i , un remaillage classique, tel qu'une triangulation de Delaunay en deux dimensions, ne garantit pas que l'interface advectée $\Gamma^+(t_i)$ soit correctement reproduite dans le maillage suivant. En fonction des critères d'optimalité utilisés, certaines arêtes ou faces frontalières peuvent pivoter lors du remaillage, provoquant ainsi une rupture de l'interface.

Une solution souvent envisagée consiste à recourir à des maillages contraints, dans lesquels les arêtes correspondant à l'interface sont imposées et récupérées via un algorithme itératif, comme proposé par [7]. Cependant, cette approche présente deux inconvénients majeurs : d'une part, elle tend à générer des éléments déformés le long de l'interface, ce qui nuit à la qualité du maillage ; d'autre part, la contrainte imposée à la géométrie empêche toute évolution topologique naturelle entre les phases (fusion, rupture, éclatement). Il est aussi important de mentionner que cette approche est difficilement généralisable en trois dimensions, où une tétrahédrisation n'est pas toujours possible pour un ensemble de faces imposées.

Nous proposons ici une alternative visant à faire émerger naturellement l'interface Γ^+ lors de l'étape de remaillage. Plutôt que de contraindre les arêtes, la géométrie de l'interface est préservée par une adaptation locale de la distribution des points matériels. Deux opérations sont alors possibles : (1) l'ajout de noeuds, permettant aussi d'affiner le maillage dans les régions où la résolution de l'interface l'exige, la solution étant reconstruite sur ces nouveaux points par interpolation ; (2) le filtrage de certains noeuds. En considérant l'algorithme utilisé pour le remaillage, il est dès lors possible de contrôler la connectivité entre les noeuds aux endroits d'intérêt.

Considérons un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ représenté par un ensemble de points \mathcal{V} , initialement connectés par une triangulation de Delaunay [7] notée \mathcal{D} . Les noeuds sont ensuite advectés, produisant un maillage modifié \mathcal{D}^+ . Supposons qu'il existe un ensemble d'arêtes $\{(v_i, v_j) \mid v_i, v_j \in \mathcal{V}\} \subset \mathcal{D}^+$ dont l'union forme un sous-ensemble géométrique Γ^+ . Notre objectif est de construire un nouvel ensemble de noeuds \mathcal{V}^* tel que la triangulation de Delaunay associée, $\mathcal{D}(\mathcal{V}^*)$, contienne par construction les arêtes de Γ^+ . Pour cela, nous montrons que si, pour une paire (v_i, v_j) , il existe une boule $\mathcal{B}(c, r)$ de centre $c \in \mathbb{R}^2$ et de rayon $r \in \mathbb{R}$ telle que $\mathcal{B}(c, r) \cap \mathcal{V}^* = \{v_i, v_j\}$, alors la paire (v_i, v_j) constitue une arête valide de la triangulation $\mathcal{D}(\mathcal{V}^*)$.



L'argument repose sur la relation de dualité entre la triangulation de Delaunay et le diagramme de Voronoï. Pour tout noeud v_i , la cellule de Voronoï correspondante est définie par

$$\text{Vor}(v_i) = \{p \in \mathbb{R}^2 \text{ t.q. } |pv_i| \leq |pv_j|, \forall v_j \in \mathcal{V}^*\}. \quad (6)$$

Les frontières entre cellules sont donc les lieux équidistants entre deux noeuds, et les sommets du diagramme sont les centres des cercles circonscrits aux triangles de Delaunay, conformément au critère de sphère vide. Une arête (v_i, v_j) appartient à la triangulation de Delaunay si et seulement si les cellules de Voronoï associées à v_i et v_j sont adjacentes. Considérons maintenant une boule $\mathcal{B}(c, r)$ satisfaisant la propriété de boule vide décrite ci-dessus. Par construction, le centre c vérifie $|cv_i| = |cv_j| = r < |cv_k|$ pour tout $k \notin \{i, j\}$ ce qui signifie que c est strictement plus proche de v_i et v_j que de tout autre noeud, tout en leur étant équidistant. L'existence d'un tel point implique que leurs cellules sont adjacentes, et donc que (v_i, v_j) est bien une arête de la triangulation $\mathcal{D}(\mathcal{V}^*)$.

En utilisant ce principe, il suffit de positionner les points du nouveau nuage \mathcal{V}^* de manière à garantir que chaque arête de Γ^+ possède au moins une boule vide \mathcal{B}_i qui lui est associée. Ce mécanisme constitue le coeur de notre méthode.

La figure (2) illustre la construction de \mathcal{V}^* à partir des entités advectées. À chaque arête d'interface, nous associons une zone de protection : les arêtes sont raffinées au besoin, et les noeuds environnants sont filtrés afin qu'aucun ne pénètre dans les boules \mathcal{B}_i . Ce procédé permet de maintenir des interfaces nettes tout en respectant une carte de taille imposée, assurant ainsi une résolution plus fine dans les zones critiques. La puissance de cette relation primal–dual entre le diagramme de Voronoï et la triangulation de Delaunay a déjà été exploitée dans la littérature, notamment par [11], où l'idée de protecting balls est également introduite.

En pratique, ce raffinement est indispensable pour préserver la topologie des interfaces sans éliminer excessivement de noeuds, ce qui garantit un maillage de bonne qualité. Il demeure toutefois contraint par une tolérance w_{\min} , afin de permettre à deux surfaces suffisamment proches d'évoluer vers un changement topologique — notamment par un pivot d'arête — lorsque la physique du problème l'exige.

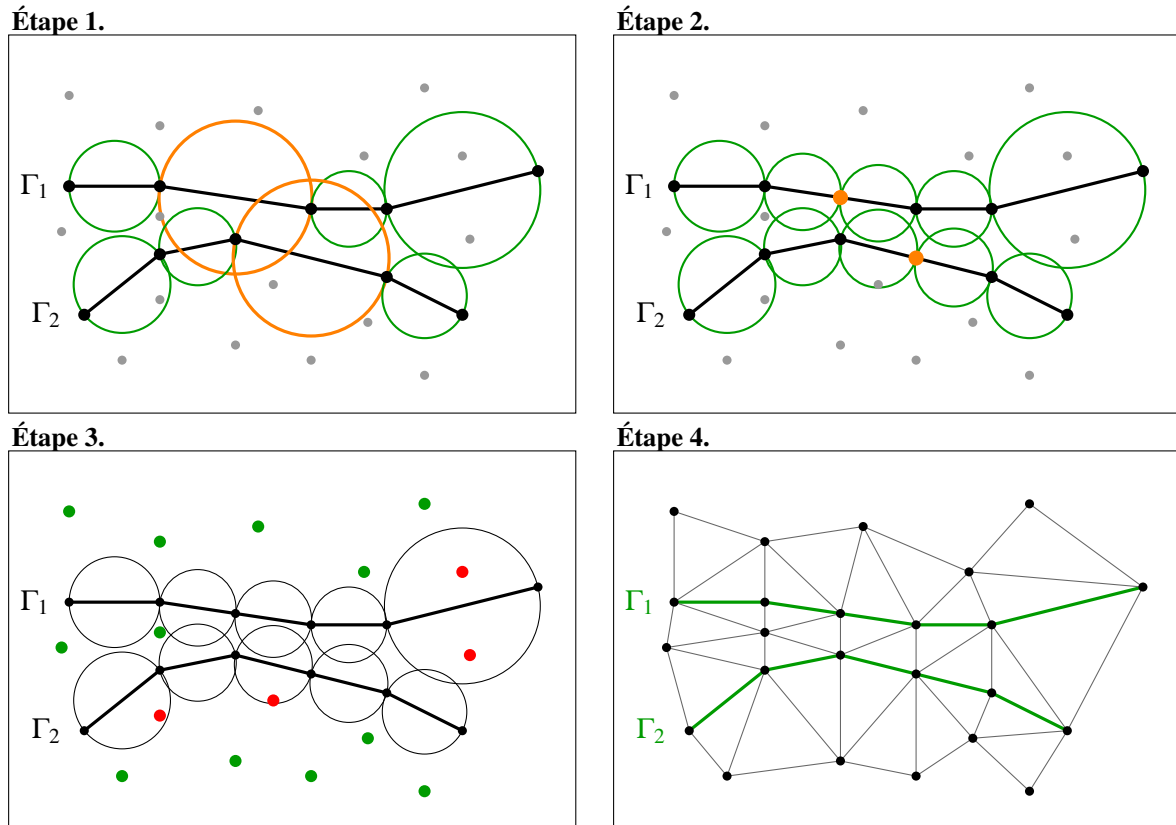


FIGURE 2 – Méthodologie de construction d'un ensemble de points \mathcal{V}^* garantissant l'apparition naturelle des interfaces Γ_i dans la triangulation de Delaunay. **Étape 1.** Seules les arêtes d'interface sont considérées. Celles qui sont trop longues ou ne satisfont pas le critère de empty ball sont identifiées. **Étape 2.** Les arêtes marquées sont raffinées afin que leur boule vide $\mathcal{B}(c_i, r_i)$ ne contienne aucun autre noeud d'interface. **Étape 3.** Les noeuds de volume sont filtrés lorsqu'ils violent la zone de protection d'une arête d'interface. **Étape 4.** Une triangulation de Delaunay est finalement effectuée ; les interfaces réapparaissent automatiquement, chaque arête étant associée à sa boule vide.

(4) Coloriage des éléments du nouveau maillage

La réaffectation des propriétés physiques aux éléments du nouveau maillage s'effectue en projetant les centres de masse des éléments reconstruits sur \mathcal{D}^+ . Dans les régions où les interfaces demeurent conformes, chaque élément hérite naturellement de la phase correspondante, assurant ainsi une représentation cohérente des propriétés. En revanche, dans les zones où l'interface devient non conforme — c'est-à-dire lorsque des pivots sont apparus — les éléments sont recoloriés en fonction de la position de leur centre de masse. Cette opération introduit une légère erreur de conservation de masse, proportionnelle à la taille des éléments affectés, donc directement liée à w_{\min} . Néanmoins, ces pivots sont indispensables pour permettre les changements topologiques entre phases. Une fois le maillage colorié, toutes les informations nécessaires à la résolution de l'itération suivante sont disponibles.

Dynamique d'une bulle

Pour une deuxième validation davantage physique, nous reproduisons ici le premier cas test présenté par les auteurs de [9]. Il s'agit de simuler une bulle de fluide (ρ_2, μ_2) , initialement au repos, montant dans une colonne de fluide (ρ_1, μ_1) . Les valeurs des paramètres physiques sont données dans le tableau (1).

ρ_1 [kg/m ²]	ρ_2 [kg/m ²]	μ_1 [kg/(m·s)]	μ_2 [kg/(m·s)]	g [m/s ²]	σ [N/m]
1000	100	10	1	-0.98	24.5

TABLE 1 – Paramètres physiques associés à la figure (4)

La figure (4) illustre les résultats de notre méthode. On peut observer pour 4c une concordance entre notre modèle et les résultats de la littérature, plus particulièrement avec le modèle TP2D analysé dans [9], indiqué par les marqueurs rouges.

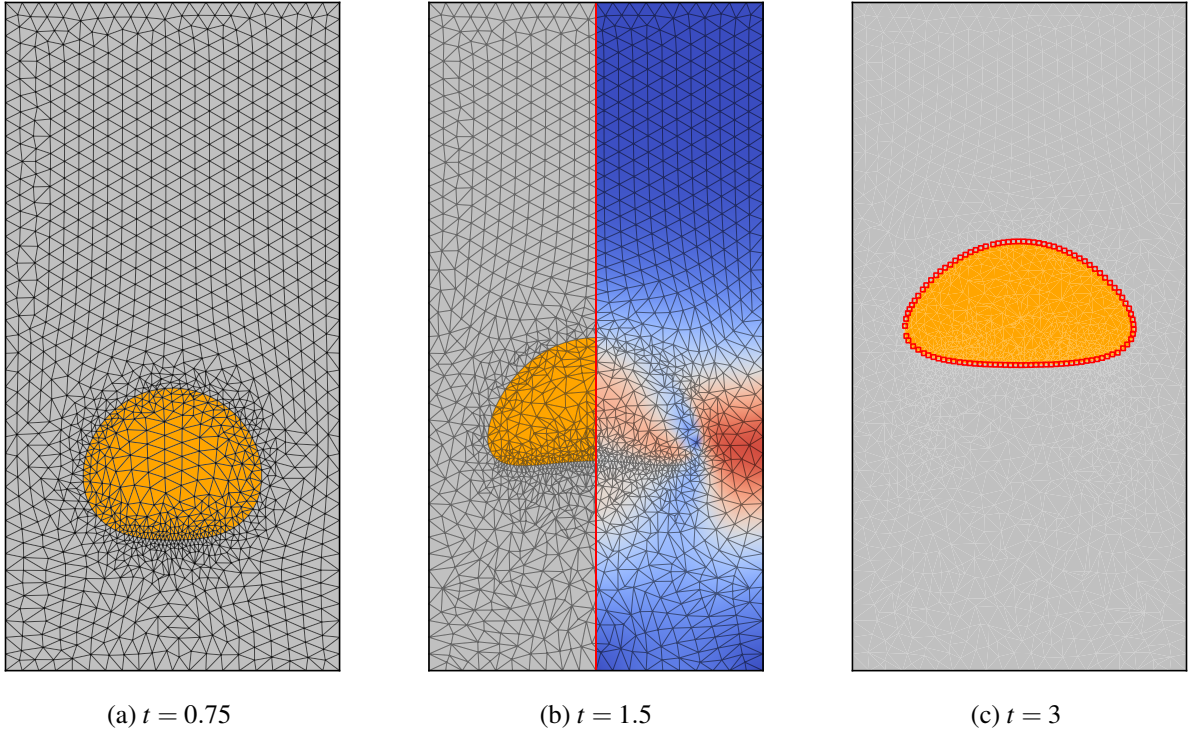


FIGURE 4 – Le premier cas test présenté dans [9] est reproduit. Le maillage ainsi que la norme du champ de vitesse sont respectivement présentés dans les sous figures (4a-4b). La solution obtenue est comparée avec une solution de référence proposée par les auteurs, affichée \square (4c) afin d'illustrer la fidélité de notre modèle.

La figure (5) offre une évaluation plus rigoureuse de la fidélité de notre modèle en le comparant à une solution de référence. Deux grandeurs caractéristiques y sont analysées. La vitesse verticale de la bulle calculée

$$U_y = \left[\frac{\int_{\Omega} U dx}{\int_{\Omega} 1 dx} \right]_y \quad (8)$$

ainsi que la circularité définie par

$$c = \frac{P_a}{P_b} = \frac{\text{Périmètre du cercle d'aire équivalente}}{\text{Périmètre de la bulle}} \quad (9)$$

On observe un bon accord entre la méthode proposée et celle de la littérature. L'écart relevé sur la circularité s'explique en partie par l'approximation géométrique de la bulle : la représentation polygonale de l'interface introduit une légère déviation par rapport au cercle exact, ce qui modifie marginalement son volume. Cette différence géométrique a également une influence sur la vitesse terminale. La sous figure (5c) montre une bonne conservation du volume de la bulle au cours du temps.

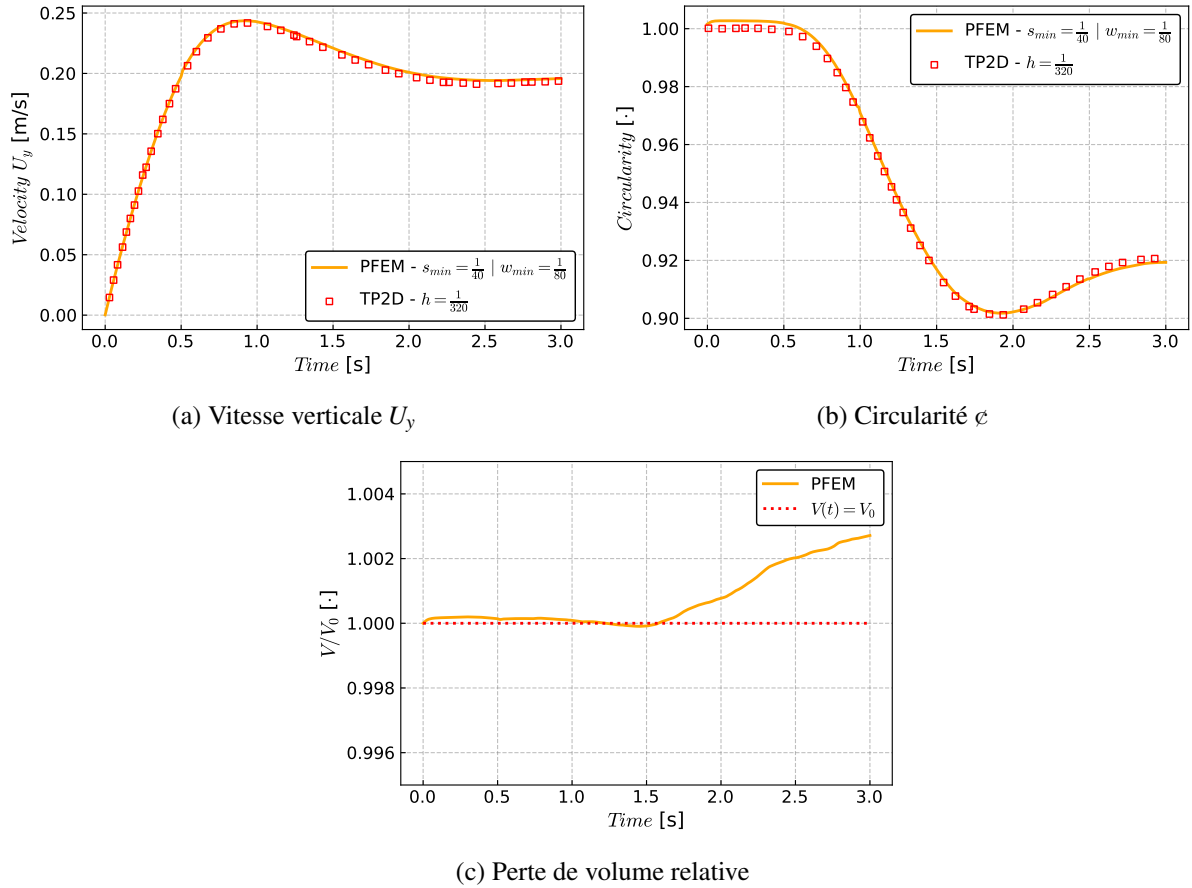


FIGURE 5 – Comparaison entre notre modèle PFEM, utilisant une taille élémentaire caractéristique s_{min} , et le modèle TP2D basé sur une grille régulière de pas h tel qu’analysé dans [9]. Les résultats illustrés montrent que, malgré des niveaux de raffinement différents, notre méthode parvient à reproduire fidèlement la dynamique de référence.

4 Travaux futurs

Notre méthode permet déjà de simuler des écoulements multiphasiques. La capacité d’adapter finement le maillage au voisinage des interfaces en fait une approche prometteuse, offrant une meilleure résolution dans les zones d’intérêt. La poursuite de nos travaux consiste à généraliser le traitement des équations d’interface afin de gérer des configurations topologiques plus complexes, notamment en intégrant les effets de tension de surface directement dans la formulation éléments finis, à l’instar de [10]. Nous prévoyons également d’améliorer la qualité du maillage en introduisant une stratégie de déaffinement, de manière à réduire le coût de calcul lors de simulations de longue durée. Notre capacité à représenter explicitement les interfaces dans le maillage fait également du PFEM une approche particulièrement prometteuse pour le couplage fluide–structure, notamment grâce à la précision géométrique obtenue au niveau des zones de contact entre le fluide et les corps solides.

Références

- [1] S. Jain, *High-Fidelity Simulations of Multiphase Flows*, AMS, Nasa Advanced Supercomputing, 2024.
- [2] L. Di G. Sigalotti, J. Klapp, M. Gómez Gesteira, *The mathematics of smoothed particle hydrodynamics (SPH) consistency*, Front. Appl. Math. Stat, 2021
- [3] S. Idelsohn, E. Oñate, *The particle finite element method : a powerful tool to solve incompressible flows with free-surfaces and breaking waves.*, Int J Numer Methods Eng 61(7) :964–989, 2005
- [4] T. Leyssens, M. Henry, J. Lambrechts, JF. Remacle, *A Delaunay refinement algorithm for the particle finite element method applied to free surface flows*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2024
- [5] S.R. Idelsohn, M. Mier-Torrecilla, J. Marti and E. Oñate, *The Particle Finite Element Method for Multi-Fluid Flows*, Springer Science, 2011
- [6] S. Idelsohn, M. Mier-Torrecilla, E. Oñate, *Multi-fluid flows with the Particle Finite Element Method*, Elsevier, 2009
- [7] S. W. Sloan, *A fast algorithm for generating constrained delaunay triangulations*, Computers Structures, 1993
- [8] L. P. Chew, *Guaranteed-Quality Mesh Generation for Curved Surfaces*, Department of C.S. Cornell University, 1993
- [9] S. Hysing, S. Turek, D. Kuzmin, N. Parolini, E. Burman, S. Ganesan, L. Tobiska, *Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, vol. 60, n°11, pp. 1259–1288, 2009.
- [10] J.-B. Leblond, H. Amin El Sayed, J.-M. Bergheau. On the incorporation of surface tension in finite-element calculations. *Comptes Rendus. Mécanique*, 2013, 341 (11-12), pp.770 - 775.
- [11] A. Abdelkader, C.L. Bajaj, M.S. Ebeida, A.H. Mahmoud, S.A. Mitchell, J.D. Owens and A.A. Rushdi, *Voro-Crust : Voronoi Meshing Without Clipping*, ACM Trans. Graph., vol. 39, no. 3, article 23, 2020.