

---

# MAIDESC-T2-D4/5: Spécification de ITC1-ITC2.

## Sept.2014

O. Allain

Lemma, Olivier.Allain@lemma-ing.com

**Summary.** Ce court document décrit les deux cas tests proposés par Lemma pour le projet MAIDESC. Un calcul de réorientation de ménisque en 3D. Un calcul de chute d'une colonne d'eau sur un obstacle lui aussi en 3D.

**Key words:** Ménisque, multi-fluide, interface, adaptation de maillage

## 1 Introduction

Les cas tests de MAIDESC ont pour but de valider et évaluer les progrès réalisés en maillage adaptatif à partir des nouvelles méthodes mises au point dans le cadre du programme de recherche de MAIDESC.

Lemma propose deux calculs réalisés dans le passé par ses équipes et pour lesquels la documentation réalisée permet de bien évaluer un état de l'art antérieur aux innovations et développement de MAIDESC.

Une réorientation de ménisque a été calculée en bidimensionnel, sans adaptation automatique, mais avec toutefois des raffinements au voisinage de l'angle de contact. Lemma se propose de refaire ce calcul en 3D et avec adaptation automatique.

La chute d'une colonne d'eau a déjà été calculée en 3D adaptatif. Il s'agira de la recalculer avec une nouvelle version du mailleur contrôlé anisotrope (sans préjuger d'autres améliorations attendues de MAIDESC qui seront intégrées au fur et à mesure).

## 2 ITC1: Calcul de réorientation de ménisque sous gravité nulle

### 2.1 Introduction

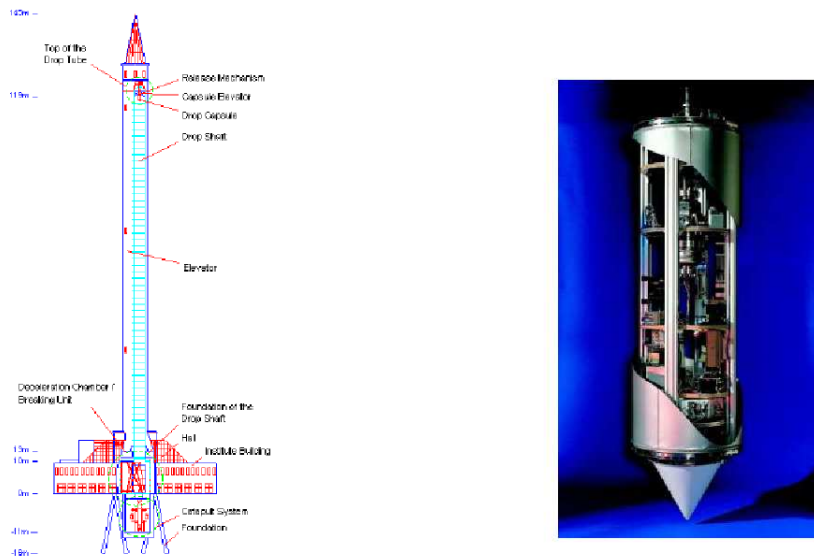
Le but de ce cas test est d'étudier la capacité de l'outil numérique à calculer la réorientation d'une surface libre dans un réservoir axisymétrique après une suppression soudaine de la

gravité.

*Dans le cas test MAIDESC, on propose de calculer ce cas test en 3D.*

Les calculs présentés ci-après ont été réalisés à Lemma par A.-C. Lesage ([4]).

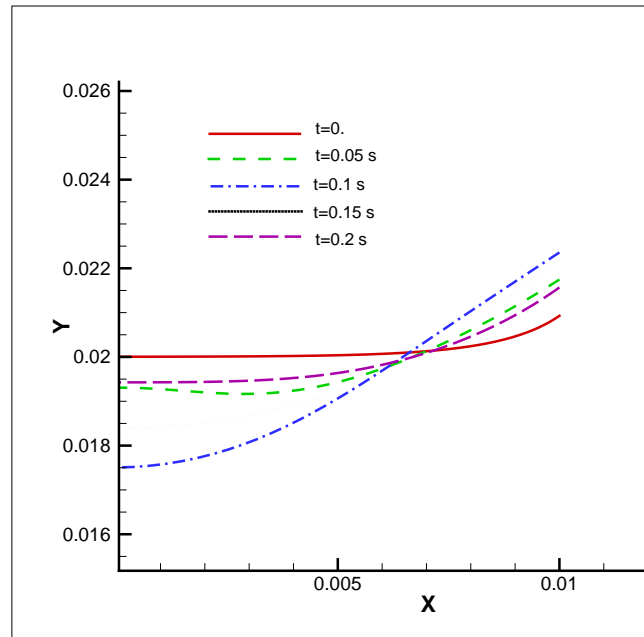
Le mouvement est dominé par des effets capillaires (le nombre de Bond varie de environ 100 à 0, le nombre de Weber est de l'ordre de 1). Le couplage avec les effets thermique n'est pas pris en compte. Les résultats numériques sont comparés avec les données expérimentales fournis par le ZARM. Le ZARM (Université de Brême) a réalisé des expériences de réorientation en laissant tomber un tube rempli de liquide dans une tour spéciale pour les expériences de chute libre et a enregistré le mouvement du liquide. La figure 1 montre la tour ainsi que la capsule qui contient le tube et les instruments de mesure.



**Fig. 1.** Dispositif expérimental du ZARM. Tour expérimentale pour les chutes libres. Capsule avec instruments de mesure.

### Conditions physiques du cas test

Un récipient vertical cylindrique de section circulaire et de rayon  $R$  est rempli avec un liquide formant un angle de contact statique  $\theta_0$  avec la paroi du récipient. Il est exposé à un soudain changement de la gravité de  $Bo \simeq 100$  à  $Bo \simeq 0$ . L'objectif de ce benchmark est de

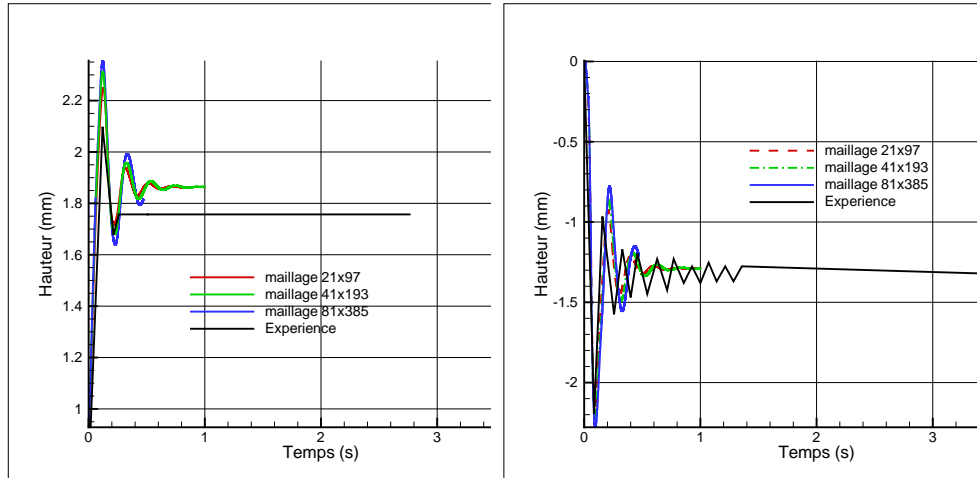


**Fig. 2.** Evolution de l'interface jusque  $t = 0.2s$  pour la réorientation du liquide M3

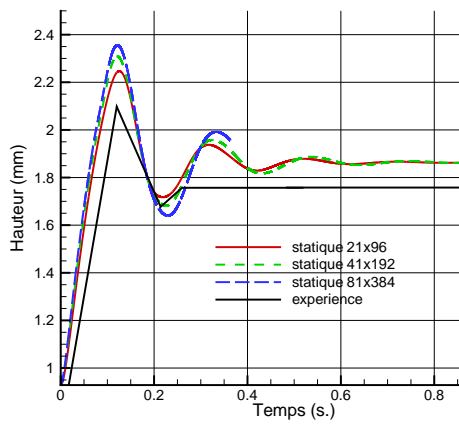
simuler le changement de forme de la surface libre lié aux forces capillaires. Quand l'équilibre est atteint, la forme de l'interface entre l'air et le liquide est sphérique. La position de la ligne de contact entre le liquide et la paroi est déterminée par la valeur de l'angle statique. L'exploitation des résultats du calcul montrera la forme de l'interface au cours du temps, la fréquence et l'amortissement des oscillations de l'interface ainsi que la distribution de pression et de vitesse.

#### Conditions initiales

A  $t = 0^-$ , le fluide est au repos. La distribution de pression et la forme de l'interface liquide/gaz est définie par l'équilibre entre la gravité et les forces de tension de surface (l'interface est horizontale au centre mais courbée dans le voisinage de la paroi). La norme du vecteur de gravité décroît instantanément de  $g = 9.81 \text{ m.s}^{-2}$  pour  $t = 0^-$  à  $g = 0 \text{ m.s}^{-2}$  pour  $t = 0^+$ .



**Fig. 3.** Réorientation du M3 avec un angle statique. Gauche: Evolution de la position de l'interface sur la paroi. Droite: Evolution de la position de l'interface au centre du réservoir.



**Fig. 4.** Réorientation du M3 avec un angle statique. Zoom sur la première seconde de calcul

**Propriétés des fluides**

Nous testons la réorientation de deux fluides utilisés dans les expériences du ZARM appelés respectivement M3 et Detra. Le fluide M3 a pour angle de contact statique  $\theta_0 = 55^\circ$ , ses propriétés sont définies dans le tableau 1. Le fluide Detra a pour angle de contact statique  $\theta_0 = 5.5^\circ$ , ses propriétés sont définies dans le tableau 2.

**Conditions limites**

On impose une condition de frottement sur la paroi. L'angle de contact dynamique  $\theta$  est d'abord maintenu à la valeur statique pour un premier test. Pour le fluide M3 nous avons aussi testé un angle de contact dynamique calculé par la loi de Blake [1].

Blake propose une modélisation physique grâce à une loi reliant la vitesse de la ligne de contact  $h_t$ , l'angle statique  $\theta_0$  et l'angle dynamique  $\theta_t$ :

$$h_t = 2K_S^0 \lambda \frac{h}{\eta v} \sinh\left(\gamma \frac{\cos(\theta_0) - \cos(\theta_t)}{2nkT}\right) \tag{1}$$

M3 est une huile silicone pour laquelle selon le papier de Blake à  $T = 293^\circ K$ , les coefficients de (1) valent respectivement  $K_S^0 = 1.7 \cdot 10^{11} s^{-1}$ ,  $\lambda = 0.8 \cdot 10^{-9} m/s$ ,  $v = \lambda^3$  et  $n = 1.6 \cdot 10^{18} m^{-2}$ .

Rayon de l'éprouvette	: $R = 10 \text{ mm.}$
Hauteur de l'éprouvette	: $h = 20 \text{ mm.},$
Densité	: $\rho_l = 879 \text{ kg/m}^3,$
Tension de surface	: $\sigma = 0.00181 \text{ N.m.}^{-1},$
Viscosité cinématique	: $\mu = 2.92 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2.s$
Angle de contact statique	: $\theta_0 = 55^\circ$

**Table 1.** Données expérimentales pour le liquide M3.

Rayon de l'éprouvette	: $r = R \text{ mm.}$
Hauteur de l'éprouvette	: $h = 30 \text{ mm.},$
Densité	: $\rho_l = 905 \text{ kg/m}^3,$
Tension de surface	: $\sigma = 0.00268 \text{ N.m.}^{-1},$
Viscosité cinématique	: $\mu = 2.51 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2.s$
Angle de contact statique	: $\theta_0 = 5.5^\circ$

**Table 2.** Données expérimentales pour le liquide Detra.

La simulation de la réorientation du liquide M3 et du liquide Detra en comparaison avec les expériences du ZARM a également été étudiée en détail par Van Mourik et Veldman [5],[6].

## 2.2 Résultats pour la réorientation du liquide M3

Nous avons calculé la réorientation du liquide M3 avec l'outil numérique axisymétrique. Pour une première comparaison avec les données expérimentales du ZARM, nous avons imposé une condition d'angle statique  $\theta_0 = 55^\circ$ .

Pour le calcul de la courbure et le maintien de l'angle de contact statique, nous avons utilisé un calcul de la courbure variationnel couplé avec une condition d'angle variationnelle.

Nous avons effectué une convergence en maillages rectangulaires (dimension  $0.01m \times 0.048m$ ), emboîtés et raffinés sur la paroi, de respectivement  $21 \times 96$ ,  $41 \times 192$ ,  $81 \times 384$  nœuds.

La réorientation commence à partir d'une interface plane avec une forte courbure au niveau de l'angle de contact sur le mur. Puis l'interface oscille autour de la position finale d'équilibre qui est un arc circulaire.

La figure 2 montre une advection avec un champ de vitesse régulier de l'interface sur les 0.2s premières secondes. Dans de telles conditions régulières, nous pouvons faire une étude de convergence à  $t = 0.005s$  pour deux variantes d'application de notre théorie afin de mesurer la convergence de la méthode Level Set ainsi que celle du champ de vitesse. Nous initialisons la fonction Level Set  $\phi$  à l'aide d'un prolongement affine en  $z$  afin d'avoir une courbure régulière sur le point de contact.

### Analyse d'algorithmes pour le calcul de réorientation

Nous testons deux algorithmes d'advection de  $\phi$ :

- **Schéma 1** nous advectons  $\phi$  avec le champ de vitesse axial déduit de la vitesse physique et nous n'appliquons aucune réinitialisation.
- **Schéma 2** nous advectons  $\phi$  avec la vitesse physique et nous réinitialisons  $\phi$  comme le prolongement affine en  $z$ .

La figure 3 donne pour chaque maillage la réponse à la réduction brutale de la gravité sur la position de l'interface sur la paroi du cylindre et au centre (avec comparaison à l'expérience du ZARM). Elle montre la convergence en maillage sur l'évolution temporelle de la position de l'interface en utilisant le **Schéma 2** pour le calcul. Nous mesurons une convergence numérique à l'ordre deux sur la position du point de contact de l'interface avec le mur pour  $t = 0.12s$ .

Afin de mesurer la convergence sur la position de l'interface, nous considérons les normes  $\|\phi_h - \phi_{2h}\|_{L_2}$  et  $H(\phi)$ ,  $\|H(\phi_h) - H(\phi_{2h})\|_{L_1}$  (normes utilisées et définies au chapitre 6 section 5 pour l'étude de la convergence en maillage sur l'instabilité de Rayleigh).

Les tableaux 3 et 4 montre une convergence d'ordre inférieur à deux. Cependant le tableau 4 montre une moins bonne convergence de la norme de l'erreur  $L_2$  sur  $\phi$  pour le **Schéma 1** que pour le **Schéma 2**.

Cependant il demeure une singularité durant les phases instationnaires dans notre implémentation variationnelle de la courbure au point de contact. Ceci est probablement le principal obstacle à l'obtention d'une précision d'ordre deux globale pour notre calcul.

Au vu de la perte de précision du **schéma 1**, due à l'approximation de la trace de la vitesse sur l'interface, nous utiliserons dans la suite uniquement le **schéma 2**. Les figures 5 et 6 montrent l'évolution des champs de pression et de vitesse pour ce schéma.

Nombre de nœuds selon $e_r$	norme de l'erreur $L_2$ sur $\phi$	norme de l'erreur $L_1$ sur $H(\phi)$
11	-	-
21	$1.06668 \cdot 10^{-7}$	$3.40992 \cdot 10^{-8}$
41	$5.32013 \cdot 10^{-8}$	$1.45119 \cdot 10^{-8}$
Ordre numérique	1.003	1.233
81	$2.51436 \cdot 10^{-8}$	$4.73495 \cdot 10^{-9}$
Ordre numérique	1.081	1.62

**Table 3.** Réorientation capillaire d'un ménisque. Ordre numérique sur la norme de l'erreur à  $t = 0.005s$  for **Schéma 1**.

Nombre de nœuds selon $e_r$	norme de l'erreur $L_2$ sur $\phi$	norme de l'erreur $L_1$ sur $H(\phi)$
11	-	-
21	$1.10242 \cdot 10^{-7}$	$3.43735 \cdot 10^{-8}$
41	$4.72528 \cdot 10^{-8}$	$1.38395 \cdot 10^{-8}$
Ordre numérique	1.22	1.31
81	$1.84879 \cdot 10^{-8}$	$4.70746 \cdot 10^{-9}$
Ordre numérique	1.35	1.555

**Table 4.** Réorientation capillaire d'un ménisque. Ordre numérique sur la norme de l'erreur à  $t = 0.005s$  pour le **Schéma 2**.

### 3 ITC2: 3D dam break

This three-dimensional example aims at validating the proposed method on a long-time simulation involving a 3D complex interface. The problem consists in a water column falling in a parallelepipedic box containing a cubic obstacle. This experiment has been performed by the Maritime Research Institute Netherlands (MARIN)<sup>1</sup>. Water height and pressure measurements are available on a series of points as functions of time. Their positions in the computational domain are shown in Figure 7. All the test case and experiment data are available on the Smoothed Particle Hydrodynamics European Research Interest Community (SPHERIC)<sup>2</sup>.

The experiment involves a violent transient flow with a very complex interface when the water impacts the obstacle and the opposite wall (at a physical time close to 2 seconds). Then, the flow returns to a smooth sloshing mode. Several calculations of this case have been presented in the litterature, see for instance [2] and [7]. They illustrate that long-term accuracy is a difficult challenge. The computations presented here were performed by D. Guégan, [3].

The simulation has been run until a physical time of 6 seconds which corresponds to a forward wave motion, a backward one, and then a second forward motion. As regards mesh adaptation, we apply the method presented in [3] where the mesh is adapted to the interface and the dynamic of the flow. The mesh adaptation is chosen to be isotropic. 120 mesh adaptations have been performed. That is to say, the simulation time interval has been split into 120 sub-intervals of 0.05 seconds.

<sup>1</sup> <http://www.marin.nl/web/show>.

<sup>2</sup> [http://wiki.manchester.ac.uk/spheric/index.php/SPHERIC\\_Home\\_Page](http://wiki.manchester.ac.uk/spheric/index.php/SPHERIC_Home_Page)

The interface evolution obtained in this simulation is depicted in Figures 8 and 9 at different physical times. It is compared to pictures of the MARIN experiment<sup>3</sup> (on the right). The violence of the transient flow at the impact on the obstacle and the opposite wall is illustrated between time 0.8 and 1.2 seconds. First, the impact of the water column on the obstacle produces a powerful jet that falls behind the obstacle. Then, the flow climbs the opposite wall and breaks. The combination of the jet and the breaking results in a turbulent flow behind the obstacle. This makes the visual comparison between numerical results and experiment very hard, even if we remark that the simulation is in phase with the experiment. To refine the comparison, the simulation will be confronted to experiment thanks to the water height and pressure sensors. The interface geometry between the physical times of 1.6 and 2.4 seconds demonstrates the complexity of the simulation, notably by the presence of several tube- and veil-shaped structures for the interface. As remarked in the 2D case, with a capillarity model, these structures would transform into drops. The bottom picture of Figure 9 shows the return to equilibrium of the flow at time 5.6 seconds.

Associated adapted meshes used to compute these solutions are presented in Figure 10. We clearly notice the mesh refinement in the neighboring region of the interface. The behavior of the interface is visible inside the mesh. The top picture shows the jet and the water climbing the opposite wall. The middle picture shows the interaction between the jet and the breaking. The bottom one is the mesh for computing the end of the breaking with the formation of tubes.

Figure 11 plots the evolution of the number of vertices with respect to the physical time. We observe that the mesh size is highly dependent of the flow behavior. At the beginning of the simulation and for physical times greater than 3 seconds when the flow is smooth, adapted meshes with only 50000 vertices have been generated to achieve the prescribed accuracy. On the contrary, an adapted mesh with almost 860000 vertices has been generated just before  $t = 2$  seconds to simulate accurately the breaking wave after the impact on the wall when the flow becomes complex. The average number of vertices for the whole simulation is approximately 236400.

Figures 12 and 13 show a comparison between the experiment and the numerical simulation for the water height and pressure sensors. The water height measures are presented in Figure 12 for sensors H1, H2, H3 and H4 (defined in Fig.7). First of all, an important observation is that in some cases the prediction presents a very large deviation to experiment. This deviation is much larger than the expected one as regards the comparison of interface location with respect to the experiment photographs. These large errors, appearing in sensors H1, H2 and H4, can be explained by the fact that we have chosen to evaluate the water height by  $z_1 - z$  where  $z_1$  is the first altitude from  $z = 0$  where air is present. Except for the time interval for which the fluid column is strongly inhomogenous, we observe a good agreement with the experimental data, particularly for H2 and H3. The amplitude and the slope of the water height jumps are well captured.

The pressure sensors P1, P3, P5 and P7 are depicted in Figure 13. The sensor P1 points out an excellent agreement between the computation and the experiment for the whole simulation, *i.e.* until 6 sec. The position and the amplitude of the two pressure jumps are very well captured. For the other three sensors, very good agreement are obtained, except for the first pressure peak of sensor P3 which is under evaluated.

<sup>3</sup> It is important to note that in MARIN pictures only a part of the domain is represented. The part of the domain where the water was initially held back by the hatch is missing. It represents one third of the domain total length. This missing part is shown by the icon top right of the picture.



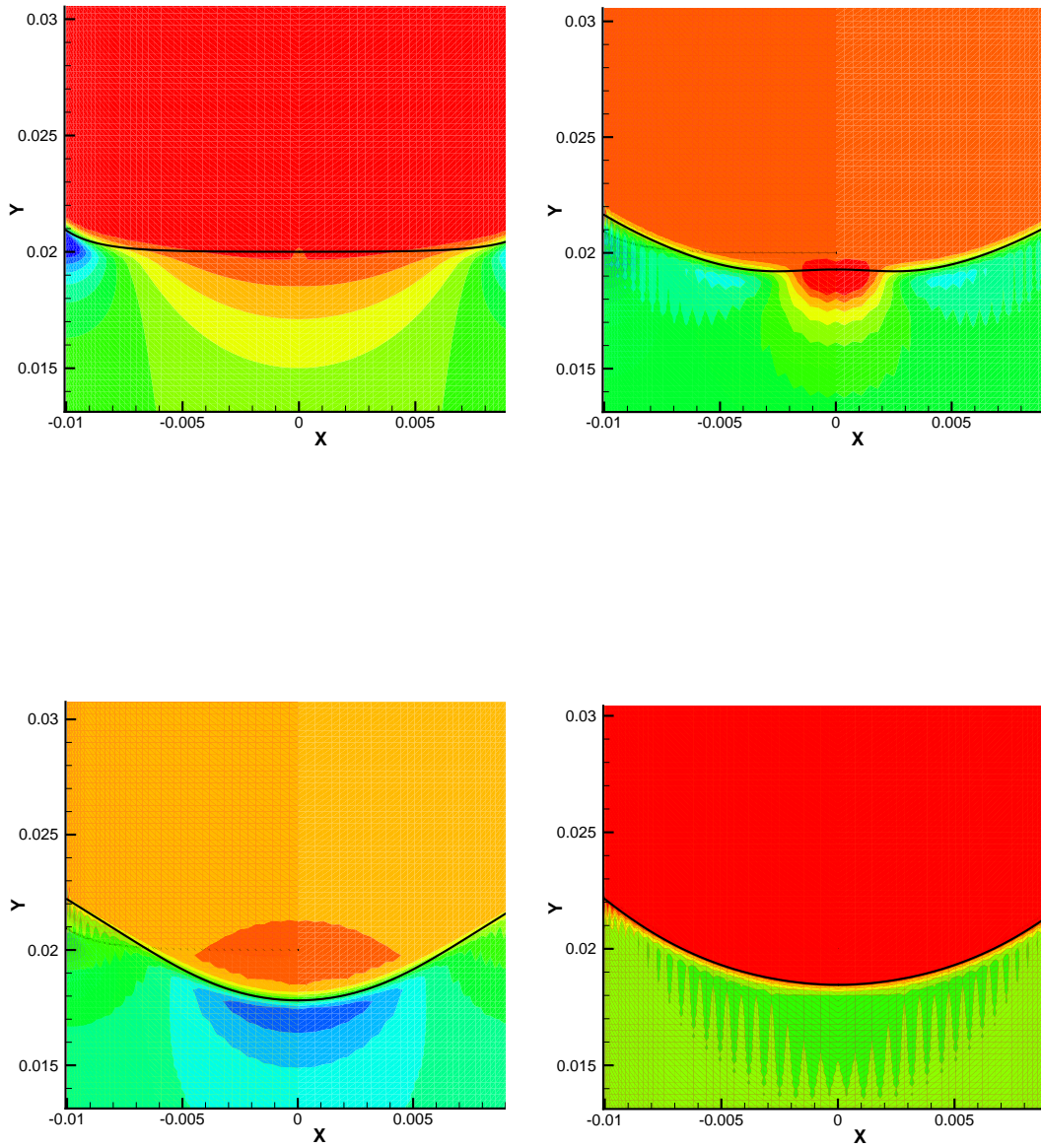
However, a particular feature of the proposed methodology (as compared to other existing computations) is the good accuracy at the end of the simulation, although this part of the simulation is computed only with meshes of size around 60000 vertices.

## 4 Remerciements

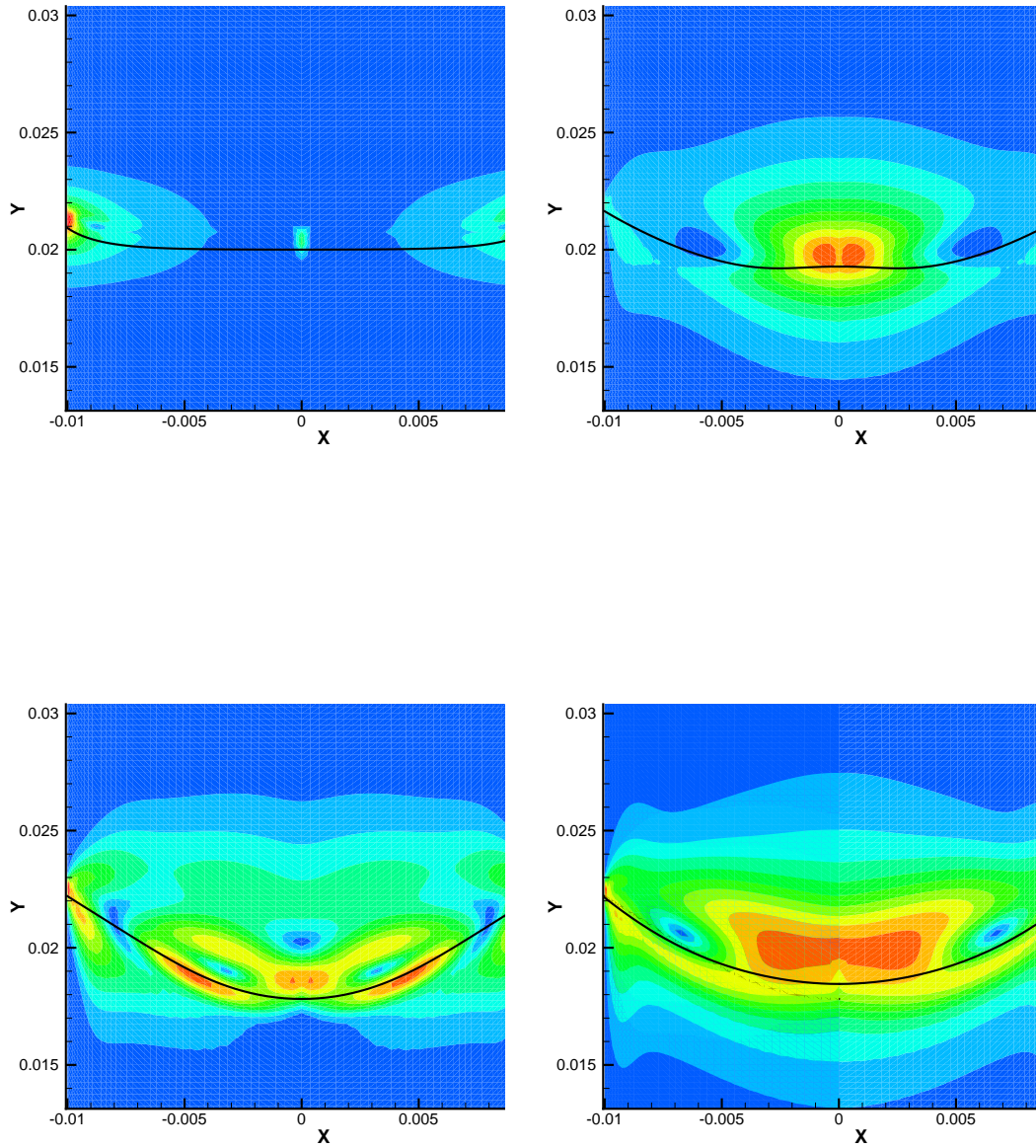
Ce rapport est une livraison du projet MAIDESC n<sup>o</sup> ANR-13-MONU-0010 de l'Association Nationale de la Recherche.

## References

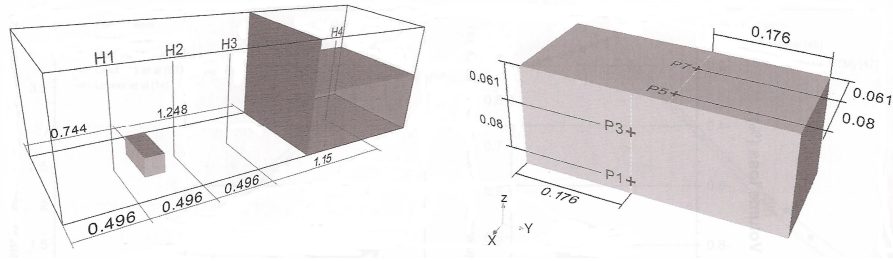
1. Blake T. D. Dynamic contact angles and wetting kinetics. *Wettability*, pages 251–309, 1993.
2. R.N. Elias and A.L.G.A. Coutinho. Stabilized edge-based finite element simulation of free-surface flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 54(6-8):965–993, 2007.
3. D. Guégan, O. Allain, A. Dervieux, and F. Alauzet. An  $l^\infty$ - $l^p$  mesh adaptive method for computing unsteady bi-fluid flows. *Int. J. Num. Meth. Engg.*, 84(11):1376–1406, 2010.
4. A.-C. Lesage. *Méthodes Level Set pour les écoulements bi-fluides incompressibles avec tension de surface et angle de contact sur maillages non-structures*. PhD thesis, Université de Nice Sophia Antipolis, Nice, France, Novembre 2006.
5. Van Mourik S. Numerical modelling of the dynamic contact angle. Master's thesis, Université de Groningen, Groningen, Pays-Bas, Août 2002.
6. Van Mourik S., Veldman A.E.P., and Dreyer M.E. Simulation of capillary flow with dynamic contact angle. *Microgravity Sci. Technol.*, XVII(3):87–94, 2005.
7. Kleesman K. M. T., Fekken G., Veldman A. E. P., B. Iwanowski, and B. Buchner. A Volume-of-Fluid based simulation method for wave impact problems. *Journal of Computational Physics*, 206(1):363–393, June 2005.



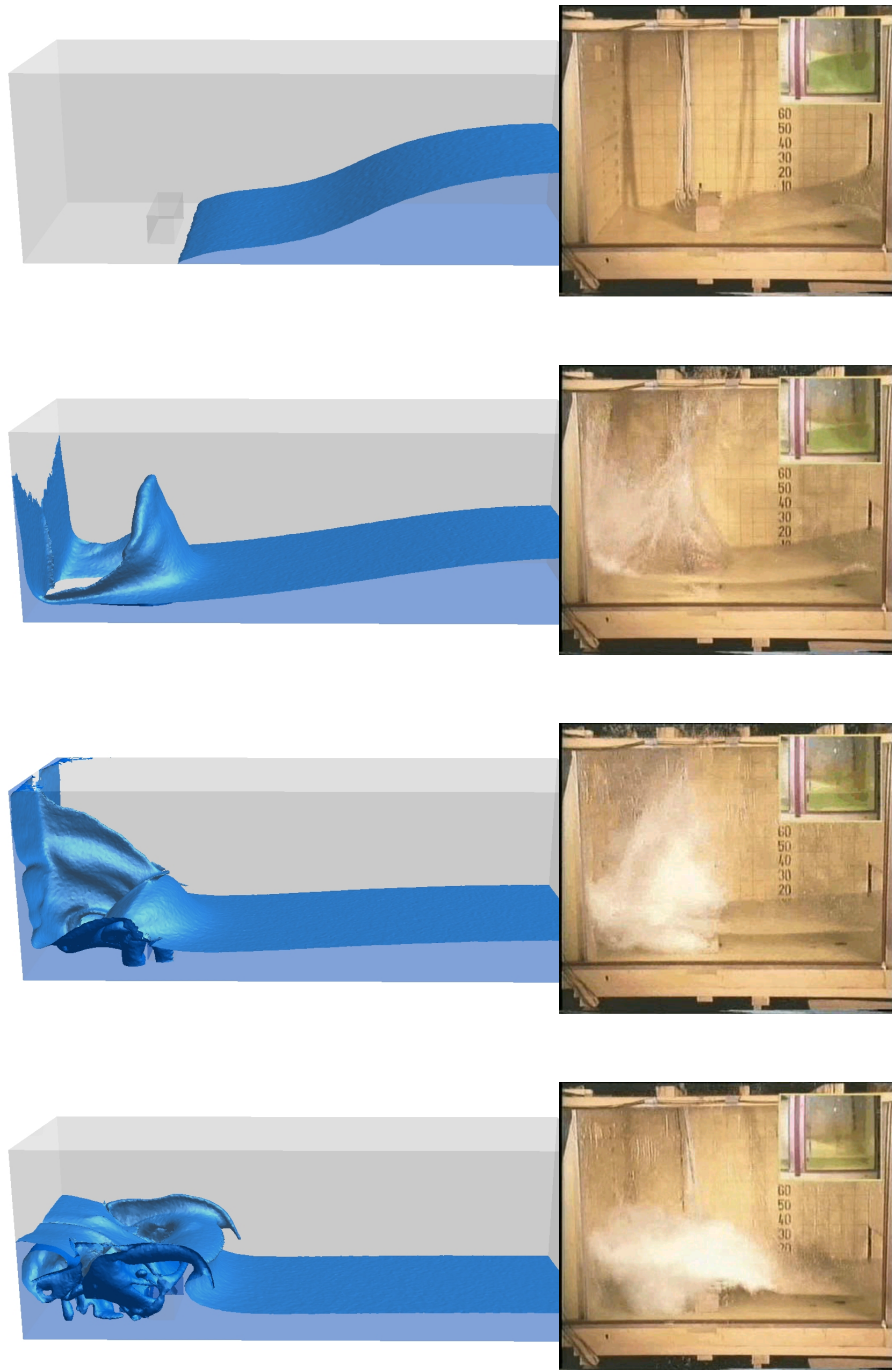
**Fig. 5.** Evolution du champ de pression jusque  $t = 0.15s$  pour la réorientation du liquide M3.  
 En haut à gauche:  $t=0s$ . En haut à droite:  $t=0.05s$ . En bas à gauche:  $t=0.1s$ . En bas à gauche:  
 $t=0.15s$



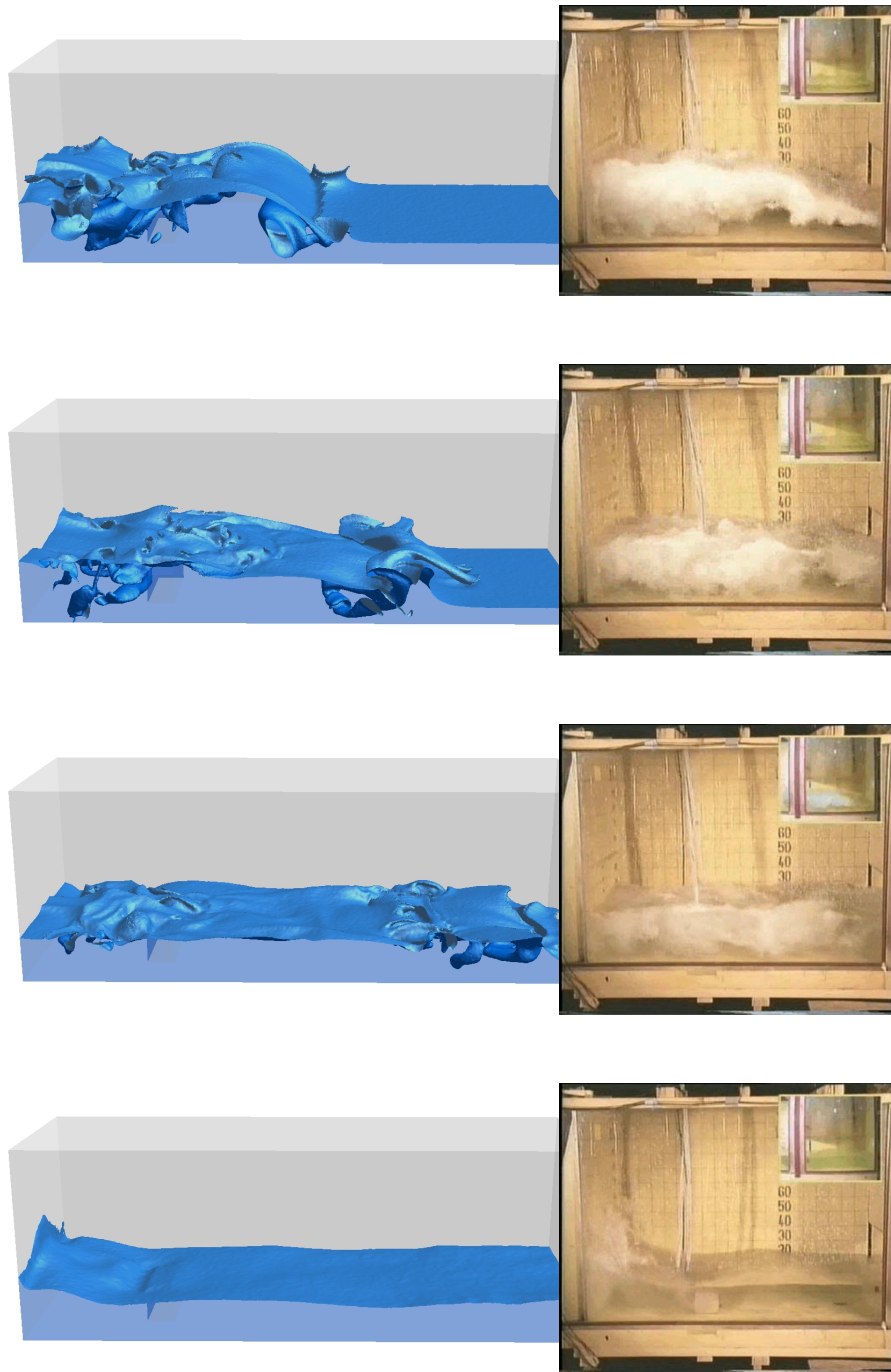
**Fig. 6.** Evolution du champ de vitesse jusque  $t = 0.15s$  pour la réorientation du liquide M3.  
 En haut à gauche:  $t=0s$ . En haut à droite:  $t=0.05s$ . En bas à gauche:  $t=0.1s$ . En bas à droite:  $t=0.15s$



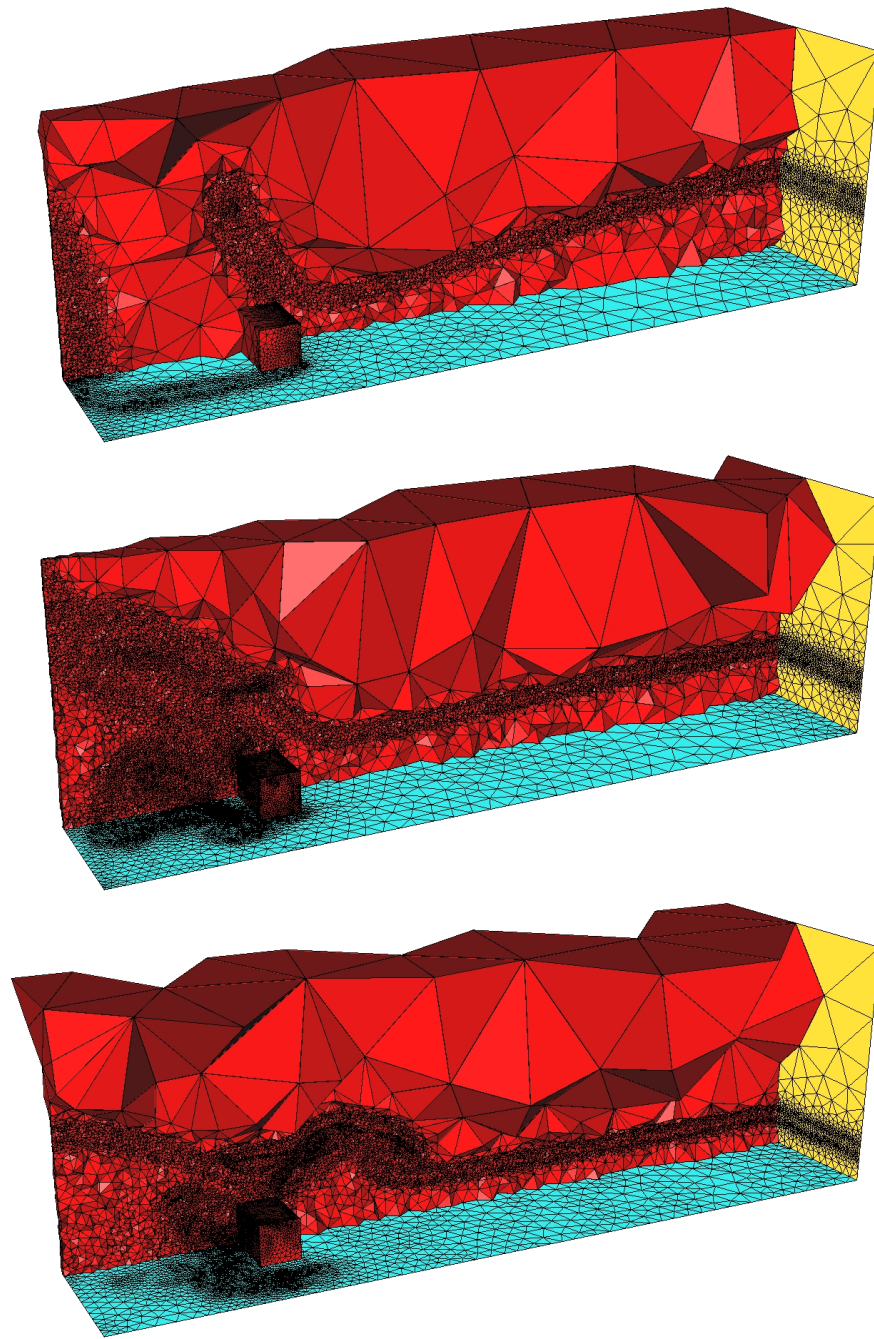
**Fig. 7.** 3D falling water column on a obstacle. Left, the simulation geometry with the initial conditions and the position of the water height sensors. Right, the position of the pressure sensors on the obstacle. Pictures courtesy of R.N. Elias and A.L.G.A. Coutinho extracted from [2].



**Fig. 8.** 3D falling water column on a obstacle. Comparison between the interface obtained in the simulation (left) and the pictures from the MARIN experiment (right). From top to bottom, snapshots for every 0.4 seconds, from time  $t = 0.4$ s to  $t = 1.6$ s.

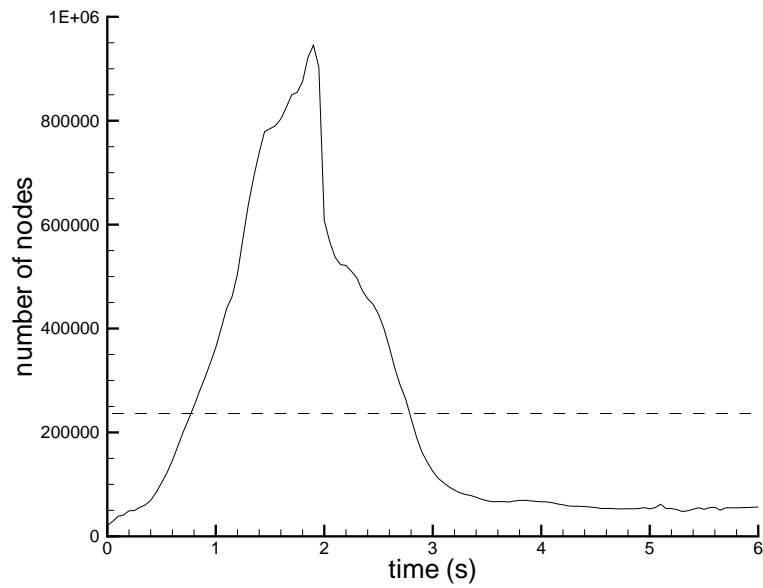


**Fig. 9.** 3D falling water column on a obstacle. Comparison between the interface obtained in the simulation (left) and the pictures from the MARIN experiment (right). From top to bottom, snapshots for  $t = 2s$ ,  $t = 2.4s$ ,  $t = 2.8s$  and  $t = 5.6s$ .

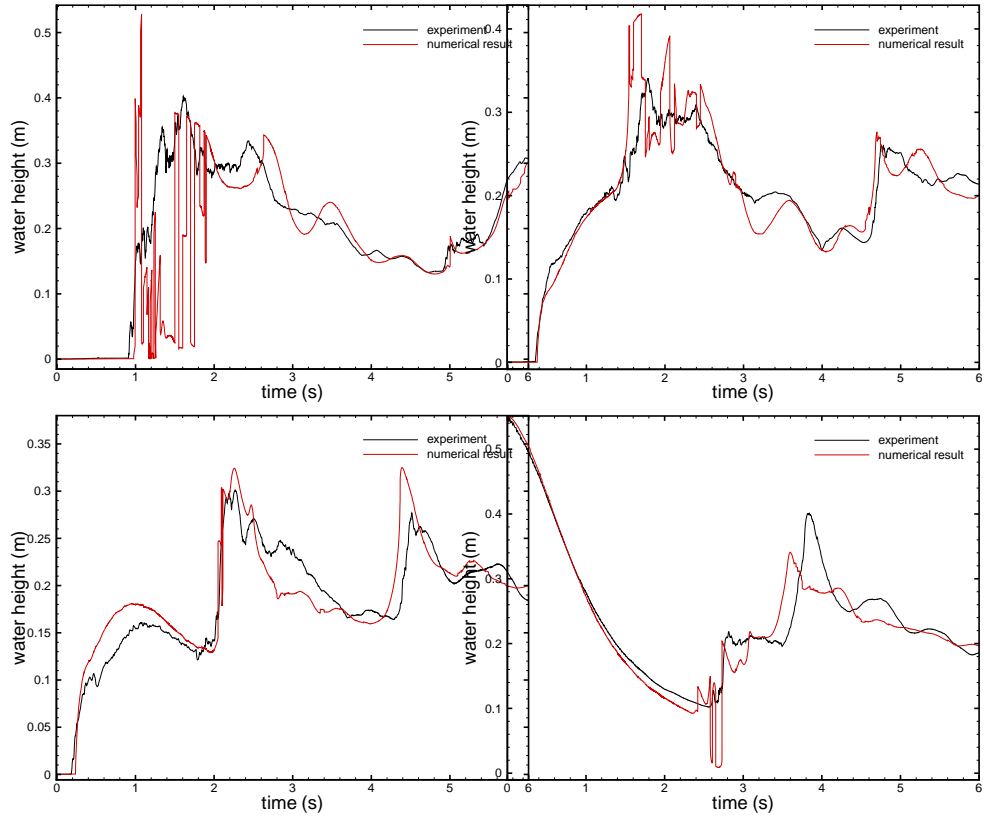


**Fig. 10.** 3D falling water column on a obstacle. Mesh adaptation based on the interface and moments. Some view of instantaneous meshes on a section of domain at  $y = 0.5m$  - Top, the mesh at  $t = 0.8s$  ( $\approx 250\,000$  vertices) - Middle, the mesh at  $t = 1.2s$  ( $\approx 500\,000$  vertices) - Bottom, the mesh at  $t = 1.8s$  ( $\approx 900\,000$  vertices).

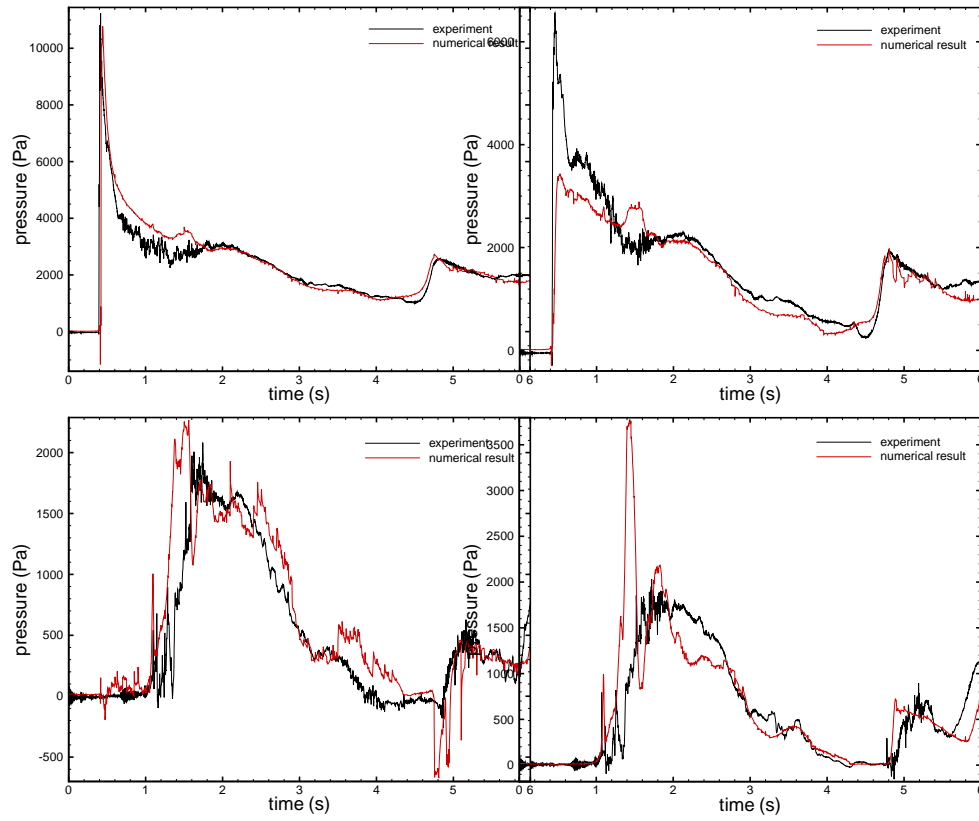




**Fig. 11.** 3D falling water column on a obstacle. Variation of the number of mesh vertices as a function of time. The dashed line represent the average number of vertices for the whole simulation  $\approx 236400$  vertices.



**Fig. 12.** 3D falling water column on a obstacle. Comparison of water height between the computation (red) and the experiment (black). From left to right and top to bottom, the sensors H1, H2, H3 and H4 defined in Fig.7.



**Fig. 13.** 3D falling water column on a obstacle. Comparison of pressure level between the computation (red) and the experiment (black). From left to right and top to bottom, the sensors P1, P3, P5 and P7.