



Développement d'une méthode de suivi d'interface. Applications aux écoulements diphasiques

Sébastien Tanguy

► To cite this version:

Sébastien Tanguy. Développement d'une méthode de suivi d'interface. Applications aux écoulements diphasiques. Modélisation et simulation. Université de Rouen, 2004. Français. NNT : . tel-00007613

HAL Id: tel-00007613

<https://theses.hal.science/tel-00007613>

Submitted on 3 Dec 2004

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE

Présentée à la
FACULTE DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITE DE ROUEN

En vue de l'obtention du
DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE ROUEN
DISCIPLINE : PHYSIQUE
SPECIALITE : ENERGETIQUE

Par
Sébastien Tanguy

DEVELOPPEMENT D'UNE METHODE DE SUIVI
D'INTERFACE. APPLICATIONS AUX
ECOULEMENTS DIPHASIQUES.

Soutenue le 8 novembre 2004

Composition du jury :

Jean-Paul Caltagirone : Professeur à l'Université de Bordeaux (*rapporteur*)
Jean-Luc Estivalezes : Ingénieur de recherche à l'ONERA Toulouse (*rapporteur*)
Jacques Magnaudet : Directeur de recherche CNRS , IMFT (*président du jury*)
Richard Saurel : Professeur, IUSTI , Polytech'Marseille (*examineur*)
Christophe Dumouchel : Chargé de recherche CNRS , CORIA Rouen (*examineur*)
Alain Berlemont : Directeur de recherche CNRS , CORIA Rouen (*directeur de thèse*)

*A ma compagne, Hélène pour son
soutien pendant ces longues années
d'études...*

Remerciements

Ce mémoire de thèse ne serait pas ce qu'il est sans l'aide précieuse de toutes les personnes qui ont contribué à la réalisation de ce travail.

Je tiens à remercier chaleureusement **Alain Berlemont**, mon directeur de thèse, pour son soutien, sa disponibilité et la confiance qu'il m'a témoignée tout au long de ces trois ans de thèse, mais aussi **Lucie Freret** pour son travail efficace sur la parallélisation du code et **Thibaut Menard** pour l'aide qu'il m'a apportée sur l'étude des jets cylindriques.

Je remercie également **Jérôme Yon** pour avoir développé une nouvelle technique de visualisation particulièrement esthétique et utile.

Je tiens à remercier particulièrement **François-Xavier Demoulin** pour ses conseils et l'intérêt qu'il a manifesté pour cette étude.

Je remercie le **CRIHAN** (*Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie*) et l'**IDRIS** (*Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique*) qui ont mis à ma disposition des moyens de calcul particulièrement performants.

Je remercie les membres de mon jury d'avoir accepté d'étudier ce travail.

Je remercie **Michel Ledoux** qui m'a accueilli au sein de son laboratoire.

Je remercie les doctorants du laboratoire pour leur bonne humeur et leur sympathie.

Bien sûr pour finir, je remercie mes proches, mes parents et ma compagne, pour leur soutien inconditionnel.

Table des matières

1.	Contexte de l'étude et notions fondamentales.....	1
1.	Introduction.....	1
1.1	Généralités et contexte de l'étude.....	1
1.2	Concept d'interface.....	3
2.	Conditions de saut à la traversée d'une interface.....	3
2.1	Interface « inerte » liquide-gaz.....	4
2.2	Interface réactive liquide-gaz : vaporisation.....	5
2.3	Interface réactive gaz frais- gaz brûlés : déflagration.....	7
3.	Conclusion.....	9
2.	Formalisme de la méthode Level Set.....	11
1.	Les méthodes de suivi d'interface.....	11
1.1	Généralités.....	11
1.2	Description des différentes méthodes.....	12
2.	La méthode Level Set.....	14
2.1	Motivation et principe de base.....	14
2.2	Analyse mathématique de l'équation de transport.....	16
3.	Méthodes numériques pour lois hyperboliques.....	17
3.1	Discretisations temporelles.....	17
3.2	Discretisations spatiales.....	21
4.	Exemples de suivi d'interface.....	28
4.1	Cercle de <i>Zalezak</i>	29
4.2	Ecoulement cisailé.....	33
4.3	Comparaison des différentes intégrations temporelles.....	37
5.	Algorithme de réinitialisation.....	39

5.1	La fonction distance algébrique.....	39
5.2	Algorithme de réinitialisation.....	40
5.3	Résolution de l'équation réinitialisation.....	41
5.4	Amélioration de la conservation de la quantité de surface...	48
3.	Résolution numérique des équations de Navier-Stokes incompressibles.....	51
1.	Formulation du problème à masse volumique variable.....	51
1.1	Généralités.....	51
1.2	Méthodes de projection d'ordre 1.....	52
1.3	Discretisation spatiale de la méthode de projection.....	53
1.4	Critère de stabilité numérique sur le pas de temps.....	55
1.5	Intégration temporelles : méthodes explicites.....	55
1.6	Intégrations temporelles : méthodes semi-implicites.....	56
2.	Simulation d'une double couche de cisaillement périodique.....	58
2.1	Conditions initiales.....	58
2.2	Couche de cisaillement épaisse.....	59
2.3	Couche de cisaillement fine.....	61
2.4	Intégration temporelle.....	63
2.5	Conclusions et remarques.....	64
3.	Les conditions limites.....	64
3.1	Position du problème.....	64
3.2	Condition limite d'injection.....	65
3.3	Condition limite de paroi.....	67
3.4	Condition limite « libre ».....	67
3.5	Ecoulement derrière une marche.....	69
4.	Résolution des équations de Navier-Stokes axisymétriques.....	72
4.1	Intérêt de la formulation axisymétrique.....	72
4.2	Equations de Navier-Stokes axisymétriques.....	72
5.	Conclusion.....	73

4. Méthodes numériques pour la simulation d'écoulements diphasiques.....	75
1. Formalisme.....	75
1.1 Dérivation de l'équation d'évolution de l'interface.....	75
1.2 Formulation globale des forces de tension de surface.....	76
1.3 Formulation locale des forces de tension de surface.....	77
2. « <i>Delta Function Method</i> ».....	78
2.1 Lissage des discontinuités.....	78
2.2 Méthode de projection et « <i>Delta Function Method</i> »....	79
2.3 Equation de <i>Poisson</i> à coefficients non-constants.....	79
3. <i>Ghost Fluid Method</i>	80
3.1 Introduction.....	80
3.2 Formalisme de base.....	81
3.3 Généralisation de la <i>Ghost Fluid Method</i>	85
3.4 Extension à une équation de <i>Poisson 2D</i>	88
4. Application de <i>Ghost Fluid Method</i> aux écoulements diphasiques.....	94
4.1 Résolution de l'équation de <i>Poisson</i> pour la pression.....	94
4.2 Discontinuité du tenseur visqueux.....	94
4.3 Pas de temps adaptatif : critère sur la courbure.....	95
4.4 Quelques remarques sur les codes de calcul développés.....	96
5. Validation des codes « diphasiques ».....	97
5.1 Goutte statique.....	97
5.2 Instabilité de Rayleigh-Taylor.....	99
5.3 Coalescence de deux gouttes de mercure.....	103
5.4 Conclusions sur les résultats obtenus.....	106
5. Etudes numériques des collisions de gouttes.....	107
1. Introduction.....	107
1.1 Généralités sur le phénomène d'atomisation secondaire....	107
1.2 Etudes expérimentales des collisions de gouttes.....	108

1.3	Etudes numériques des collisions de gouttes.....	109
2.	Résultats pour des collisions frontales.....	110
2.1	Régime (a) : coalescence après de faibles déformations.....	110
2.2	Régime (c) : coalescence après importantes déformations...	112
2.3	Régime (d) : coalescence suivi de séparation.....	114
2.4	Conclusion sur les résultats obtenus.....	117
3.	Comparaisons expériences /simulations.....	117
3.1	Régime (d) : séparation avec zéro satellite.....	118
3.2	Régime (d) : séparation avec un satellite.....	119
3.3	Régime (d) : séparation pour deux gouttes différentes.....	120
3.4	Régime (c) : coalescence à fort Weber	121
3.5	Régime (d) : séparation avec 3 satellites.....	122
3.6	Régime (e) : séparation pour des collisions non-frontales..	123
4.	Discussion des résultats.....	124
6.	Applications et perspectives de la méthode	127
1.	Introduction.....	127
2.	Sur la rupture des jets liquides.....	128
2.1	Quelques généralités sur l'atomisation des jets liquides.....	128
2.2	La théorie linéaire temporelle des instabilités capillaires.....	130
2.3	Simulations temporelles d'une instabilité capillaire.....	131
2.4	Simulation spatiale d'une instabilité capillaire.....	134
2.5	Atomisation des jets cisailés.....	140
3.	Modélisation d'interfaces réactives.....	147
3.1	Equation de propagation pour des interfaces réactives.....	147
3.2	Discontinuité de vitesse pour une interface réactive.....	150
3.3	Discontinuité de pression pour une interface réactive.....	151
3.4	Extension d'une variable discontinue.....	152
3.5	Simulation d'une flamme prémélangée par la G-equation ..	153
3.6	Vaporisation d'un liquide.....	158
3.7	Conclusion sur les interfaces réactives.....	164

Conclusion générale.....	165
Bibliographie.....	169

Chapitre 1

Contexte de l'étude et notions fondamentales

1. Introduction

1.1 Généralités et contexte de l'étude

L'étude des écoulements diphasiques est un sujet de recherche fondamental en mécanique des fluides, dont les applications industrielles sont très nombreuses, notamment lorsque l'on souhaite optimiser les rendements énergétiques des systèmes de propulsion.

Cependant, malgré le grand nombre d'études empiriques développées sur le sujet, la formation d'un spray de gouttelettes à partir de l'injection d'un écoulement liquide dans un gaz reste difficile à prédire. Ainsi, aucune théorie rigoureuse ne semble en mesure de prédire ce phénomène complexe, dans lequel différents processus sont couplés comme les instabilités capillaires, les instabilités de cisaillement, les écoulements en phase dispersée, la turbulence.....

En général, on distingue deux étapes lorsque l'on étudie ce type de phénomène, la première, « l'atomisation primaire », est l'étape de formation du spray de gouttelettes à partir du cœur liquide quasi-continu, et la deuxième, « l'atomisation secondaire », est l'étape de transport du spray pendant laquelle sa granulométrie peut évoluer. En effet les gouttes formées peuvent se casser en plusieurs petites gouttes si les forces de cisaillement qui s'exercent sur elles sont suffisamment fortes, de même si le spray est dense des collisions entre gouttes peuvent survenir et modifier la granulométrie du spray au fur et à mesure de son transport.

Le développement de techniques de simulation numérique, parallèlement et même en étroite interaction avec les études théoriques et expérimentales, apparaît comme une voie prometteuse pour comprendre et prédire la formation d'un spray et aider à la conception de systèmes d'injection.

Le développement d'un spray dans un écoulement turbulent a fait l'objet de nombreuses études. En particulier, dans leurs travaux développés au sein du **CORIA**, (**Berlemont & al, 1990**) utilisent une approche *lagrangienne* de la phase dispersée et une approche *eulérienne* de la phase continue, pour modéliser l'atomisation secondaire d'un spray. Le

champ de vitesse de la phase continue est prédit en tout point de l'écoulement, indépendamment de la phase dispersée, en utilisant un modèle de turbulence de type $k-\varepsilon$. Ensuite, la phase dispersée est introduite dans l'écoulement sous forme de particules ponctuelles qui évolueront en suivant le champ de vitesse de la phase continue. Différents processus aléatoires permettent de soumettre la particule aux fluctuations de l'écoulement turbulent. L'influence de la phase dispersée sur l'écoulement peut également être simulée par un couplage à l'aide de termes sources dans la simulation de la phase continue.

Lorsque la phase dispersée devient suffisamment dense, il devient nécessaire de prendre en compte les collisions interparticulaires (*Achim, 1999*), qui entraîneront, par exemple la coalescence ou la rupture de gouttes, suivant différents paramètres qui seront rappelés par la suite. Pour modéliser correctement ce type de comportements, il est important de trouver des cas-tests tenant compte de telles interactions. Cependant, les résultats expérimentaux ne sont pas toujours assez détaillés ou précis pour observer et modéliser de tels phénomènes, de par la difficulté des expériences et le grand nombre de paramètres mis en jeu.

Le but premier de ce travail de thèse était ainsi de développer un code de simulation numérique directe capable de suivre le mouvement d'une interface liquide-gaz dans un écoulement de fluide, afin d'étudier finement des collisions de gouttes.

Ce travail a nécessité le développement d'une technique de suivi d'interface approprié (nous avons choisi la méthode **Level Set**) et le développement d'un solveur des équations de **Navier-Stokes** incompressibles pour calculer le champ de vitesse. Différentes méthodes de couplage entre ces deux solveurs ont été testées notamment pour prendre en compte les termes de tension de surface et les sauts de densité.

Dans ce travail de thèse, tous les écoulements que nous considérons sont supposés incompressibles. Cette hypothèse semble tout à fait justifiée pour l'étude de collisions de gouttes. Cependant, c'est une simplification qui peut être pénalisante dans certains cas, pour la phase gazeuse, notamment pour l'étude de système ayant de fortes vitesses d'injection, ou lorsque des gradients thermiques ou d'espèces importants existent. Nous verrons ainsi dans la suite de ce mémoire que la prise en compte des effets de compressibilité dans la phase gazeuse est souhaitable pour l'étude d'écoulements diphasiques à forte vitesse, et que la prise en compte des variations de masse volumique sous l'effet des phénomènes de dilatation thermique et de mélange sera lors d'études futures une amélioration importante pour des modélisations d'interfaces réactives (vaporisation, front de flamme prémélangé).

Dans la suite de ce chapitre, nous allons clarifier le concept d'interface en physique et exposer des résultats théoriques fondamentaux associés à cette notion d'interface entre deux phases distinctes. Le concept d'interfaces réactives sera également introduit dans ce chapitre. Les **chapitres 2,3,4** sont dédiés à l'étude des méthodes numériques utilisées.

Le **chapitre 2** traitera des méthodes numériques de suivi d'interface, et nous exposerons le formalisme que nous avons choisi d'utiliser. Des résultats sur des cas-tests classiques seront également présentés. Dans le **chapitre 3**, nous décrirons la méthode d'intégration des équations de **Navier-Stokes** que nous avons implémenté. Les performances de cette méthode seront également testées sur différentes configurations. Enfin dans le **chapitre 4**, nous nous intéresserons aux méthodes de couplage qui existent entre le suivi d'interface et les méthodes de résolution des équations de **Navier-Stokes** pour la simulation des écoulements diphasiques.

Dans le **chapitre 5**, les résultats obtenus sur les collisions de gouttes seront exposés et comparés à des résultats expérimentaux. Enfin, dans le **chapitre 6**, différentes applications sont proposées, et nous verrons que les performances de l'approche **Level Set** pour l'étude de cas plus complexes comme l'atomisation primaire des jets liquides semblent prometteuses. Nous avons donc consacré une partie de ce travail de thèse à l'étude de ce phénomène grâce aux outils numériques développés.

Enfin les aptitudes de la méthode à décrire des phénomènes de propagation d'interface dites « réactives » (vaporisation d'un liquide, ou propagation d'un front de flamme prémélangé) ont également été abordées. Quelques résultats, permettant d'initier les recherches futures, seront également exposés sur ce sujet complexe dans le **chapitre 6**.

1.2 Concept d'interface

Lorsque l'on cherche à décrire ou à observer un phénomène physique multidimensionnel quelconque, on peut être confronté suivant la nature du problème étudié à des zones de faibles épaisseurs dans lesquels les gradients caractéristiques de certaines grandeurs physiques sont beaucoup plus importants que dans le reste du domaine. Une approche simplifiée consiste à supposer que l'épaisseur de cette zone sera négligeable, et que les gradients seront intégrés et remplacés par une **condition de saut**. La zone de faible épaisseur, réduite d'une dimension (un volume de faible épaisseur sera assimilé à une surface), est appelée **interface**.

Ainsi, mathématiquement, l'interface est un objet de dimension N qui évolue dans un espace de dimension $N+1$. Les grandeurs physiques subiront une discontinuité égale aux conditions de saut à la traversée de l'interface.

Une telle approche se justifie lorsque l'échelle des phénomènes que l'on souhaite observer est nettement supérieure à l'épaisseur de la zone de fortes variations. Les phénomènes physiques intervenant dans cette zone doivent alors être bien connus, pour prédire correctement les conditions de saut et la vitesse de propagation de l'interface.

En général, on utilise cette notion d'interface pour évoquer la surface de séparation qui existe entre deux phases (au sens thermodynamique du terme). Cette interface a alors pour origine la discontinuité des forces intermoléculaires entre les deux phases. Cependant, cette notion d'interface peut convenir pour définir beaucoup d'autres phénomènes physiques. Par exemple, une onde de choc peut être considérée comme une interface entre un écoulement subsonique et un écoulement supersonique, un front de flamme prémélangé peut être considéré comme une interface entre des gaz frais et des gaz brûlés.

2. Conditions de saut à la traversée d'une interface

Ce paragraphe présente les conditions de saut associées à différents types d'interface physique. Nous distinguerons notamment deux types d'interface, les interfaces « inertes » et les interfaces « réactives ». On regroupera sous cette dernière dénomination, l'ensemble des phénomènes physiques pour lesquels l'évolution de l'interface ne dépend pas seulement de la vitesse du milieu dans lequel elle évolue, mais aussi d'un phénomène cinétique qui transforme l'une des phases en une autre phase. Ainsi, le terme « réactif »

généralement utilisé pour désigner les phénomènes chimiques prend ici un sens plus large, puisqu'il comprend aussi les changements de phase.

2.1 Interface « inerte » liquide – gaz

Nous considérerons ici le cas d'une interface « non-réactive » ou « inerte », c'est-à-dire que l'évolution de l'interface n'est contrôlée que par la vitesse du milieu dans lequel elle se trouve. C'est le cas des écoulements diphasiques lorsqu'il n'y a pas d'évaporation (ou plutôt lorsque la vitesse de vaporisation est négligeable par rapport à la vitesse caractéristique de l'écoulement).

Les équations de conservation qui régissent le comportement d'écoulements incompressibles sont les équations de Navier-Stokes incompressibles :

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} + \frac{\nabla p}{\rho} = \frac{\nabla \cdot (\mu \mathbf{D})}{\rho} + \mathbf{g} \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (1.2)$$

où $\mathbf{V}$ est le vecteur vitesse, p la pression, μ la viscosité cinématique, et $\mathbf{g}$ le vecteur accélération due à la pesanteur et $\mathbf{D}$ est le tenseur des contraintes que l'on peut exprimer sous la forme suivante :

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & 2\frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} & 2\frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

Dans une telle configuration, il est communément admis que le vecteur vitesse est continu à la traversée de l'interface. Mathématiquement en terme de condition de saut, cela se traduit par la relation suivante :

$$[\mathbf{V}]_I = 0 \quad (1.4)$$

où l'opérateur $[\cdot]_I$ est l'opérateur condition de saut à la traversée d'une interface I . Les propriétés physiques des fluides subissent naturellement un saut à la traversée de l'interface :

$$\begin{aligned} [\rho]_I &= \rho_{\text{liq}} - \rho_{\text{gaz}} \\ [\mu]_I &= \mu_{\text{liq}} - \mu_{\text{gaz}} \end{aligned} \quad (1.5)$$

La loi de **Laplace** nous fournit une relation importante sur la contribution des forces capillaires sur le saut de pression à la traversée d'une interface entre deux fluides immiscibles :

$$[p] = \sigma \kappa \quad (1.6)$$

Où σ est le coefficient de tension de surface et κ la courbure de l'interface. En réalité, cette relation n'est rigoureuse que dans le cas d'une interface statique. Si l'interface est en mouvement, on peut dériver (*Scardovelli & al, 1999*), (*Kang & al, 2000*), (*Popinet & al, 1999*), (*Popinet, 2000*) à partir de (1.1), (1.2), (1.4) et (1.6), les conditions suivantes qui donnent une relation sur le saut de la contrainte normale :

$$[\mathbf{n} \cdot (-p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D}) \cdot \mathbf{n}]_I = \sigma \kappa \quad (1.7)$$

et une relation sur le saut de la contrainte tangentielle :

$$[\mu \mathbf{t} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{n}]_I = 0 \quad (1.8)$$

Où $\mathbf{n}$ est le vecteur normal à l'interface, $\mathbf{t}$ est le vecteur tangent et $\mathbf{I}$ la matrice unitaire.

2.2 Interface réactive liquide – gaz : vaporisation

Comme on l'a vu précédemment, la dénomination d'interface réactive s'applique aux mouvements d'interface animés d'une vitesse propre, en plus de la vitesse du milieu dans lequel se trouve cette interface. Dans le cas d'une interface liquide-gaz, ce phénomène s'apparente à un changement de phase. Par exemple, si l'on souhaite suivre l'évolution de l'interface d'une goutte en train de se vaporiser, le mouvement de l'interface sera caractérisé par la vitesse de la goutte et par le débit de vapeur libéré par la goutte.

Si l'on s'intéresse à une interface réactive entre deux fluides de densités différentes, le champ de vitesse est discontinu à la traversée de l'interface. En effet la conservation de la masse impose que le débit massique de liquide vaporisé soit égal au débit massique de vapeur libérée par la goutte. On peut traduire cette condition par la relation suivante :

$$\dot{\omega}_{vap} = \rho_{liq} (\mathbf{V}_{liq} - \mathbf{V}_s) \cdot \mathbf{n} = \rho_{gaz} (\mathbf{V}_{gaz} - \mathbf{V}_s) \cdot \mathbf{n} \quad (1.9)$$

Où $\dot{\omega}_{vap}$ est le taux de vaporisation local (débit massique par unité de surface), et $\mathbf{V}_s$ est la vitesse de l'interface que l'on calcule avec la relation suivante :

$$\mathbf{V}_s = \mathbf{V}_{liq} + \mathbf{V}_{evap} \quad (1.10)$$

$\mathbf{V}_{evap}$ étant la vitesse de régression de l'interface. On peut alors établir la relation suivante entre $\dot{\omega}_{vap}$ et $\mathbf{V}_{evap}$:

$$\dot{\omega}_{vap} = -\rho_{liq} \mathbf{V}_{evap} \cdot \mathbf{n} \quad (1.11)$$

Les deux relations (1.9) conduisent à la condition de saut pour le vecteur vitesse :

$$[\mathbf{V}]_r = \dot{\omega}_{vap} \left[\frac{I}{\rho} \right]_r \mathbf{n} \quad (1.12)$$

Dans (Nguyen & al, 2001), les auteurs dérivent également la condition de saut suivante pour la pression, à la traversée d'une interface réactive :

$$[p]_r = -(\dot{\omega}_{vap})^2 \left[\frac{I}{\rho} \right]_r \quad (1.13)$$

Cette contribution sur le saut de pression doit donc être ajoutée à (1.7), pour avoir le saut de pression exact à la traversée de l'interface. Les problèmes de changement de phase sont toujours couplés aux transferts thermiques et aux transferts de masse. Si l'on souhaite s'intéresser aux conditions de saut qui s'appliquent sur une interface se vaporisant, il est donc nécessaire d'introduire des équations supplémentaires pour tenir compte de la conservation de l'énergie et des espèces chimiques. Pour l'équation de l'énergie, on utilisera une équation simplifiée généralement utilisée pour les écoulements à faible nombre de *Mach* :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) T = \frac{\nabla \cdot (\lambda \nabla T)}{\rho C_p} \quad (1.14)$$

Où λ est la conductivité thermique du fluide, C_p la capacité calorifique massique à pression constante du fluide et T la température du milieu. Dans ce cas simplifié l'équation de l'énergie se ramène donc à une équation instationnaire de convection/diffusion. On fera l'hypothèse de l'équilibre thermique à la surface de la goutte, à savoir que la température est continue à la traversée de l'interface. Une condition de saut est cependant nécessaire pour prendre en compte l'énergie de chaleur latente que la phase liquide doit recevoir pour changer de phase. Cette condition de saut traduit l'égalité entre le saut du flux thermique conductif à la traversée de l'interface et la puissance thermique utilisée pour le changement de phase. Mathématiquement, on a la relation suivante (Calimez, 1998), (Welch, 1995), (Welch & al, 2000) :

$$\dot{\omega}_{vap} h_{lg} + [\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}]_r = 0 \quad (1.15)$$

Où h_{lg} est la chaleur latente de vaporisation. La plupart des combustibles utilisés dans les applications industrielles sont des mélanges composés de nombreuses espèces chimiques différentes, ce qui complique considérablement la modélisation. Cependant, nous ne considérerons ici que les équations pour un liquide monocomposant qui s'évapore dans un gaz qui sera aussi monocomposant à l'instant initial (avant que la vaporisation ne débute), le composant gazeux étant bien-sûr différent du composant liquide. Les transferts de masse s'effectueront exclusivement de la phase liquide vers la phase gazeuse (pas d'absorption dans le liquide). Par souci de simplicité on appellera « fioul », l'espèce

chimique vaporisée et « oxydant » le composant gazeux initial. L'équation de conservation des espèces chimiques s'écrit sous une forme analogue à l'équation de l'énergie :

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)Y = \frac{\nabla \cdot (\rho D_m \nabla Y)}{\rho} \quad (1.16)$$

où D_m est le coefficient de diffusion massique du fioul dans l'oxydant et Y la fraction massique de l'espèce chimique suivie, en l'occurrence du fioul. Comme on ne considère que deux composants, dont un seul qui se vaporise, une seule équation de conservation d'espèce chimique est nécessaire puisque si l'on connaît la fraction massique d'un composant, on peut en déduire facilement la fraction massique de l'autre composant. On peut établir (*Calimez, 1998*), (*Bassano, 2003*) une condition de saut analogue à (1.15) pour cette équation:

$$-\dot{\omega}_{vap} Y_{gaz}^\Gamma + [\rho D_m \nabla Y \cdot \mathbf{n}]_\Gamma = -\dot{\omega}_{vap} Y_{liq}^\Gamma \quad (1.17)$$

Dans le cas de vaporisation monocomposant sans absorption, la fraction massique du fioul dans le liquide sera toujours égale à 1 et vaudra 0 à l'instant initial dans le gaz. La relation (1.17) peut donc s'écrire :

$$\dot{\omega}_{vap} = \frac{[\rho D_m \nabla Y \cdot \mathbf{n}]_\Gamma}{1 - Y_{gaz}^\Gamma} \quad (1.18)$$

Contrairement à la température la fraction massique est discontinue à la traversée de l'interface. En effet, Y_{liq}^Γ sera égale à 1, alors que Y_{gaz}^Γ doit être estimée grâce à une loi de type **Clausius-Clapeyron** à partir de la pression de vapeur saturante et de la température de l'interface.

2.3 Interface réactive gaz frais –gaz brûlés : déflagration

La déflagration est un régime de combustion couramment rencontré dans lequel un front de flamme se propage dans un milieu gazeux prémélangé. Pour ce type de front de flamme, une modélisation interfaciale semble pertinente. Cependant l'utilisation du concept d'interface est plus délicat lorsque l'on s'intéresse à la propagation de flammes prémélangées. En effet, même s'il existe des lois macroscopiques qui permettent de modéliser l'influence d'une interface liquide – gaz sur un écoulement, la formation et l'existence de cette interface ne peuvent être appréhendées qu'en utilisant une théorie physique microscopique. Au contraire, la description interne d'un front de flamme prémélangée est possible en résolvant les équations de la mécanique des milieux continus, puisque les mécanismes physiques en jeu sont essentiellement des phénomènes de diffusion et de réactions chimiques. Ainsi, l'épaisseur moyenne d'un front de flamme prémélangée est de l'ordre d'une centaine de microns, alors que l'épaisseur d'une interface liquide - gaz est de l'ordre d'une dizaine de nanomètres.

L'utilisation du concept d'interface pour des simulations de front de flammes prémélangées ne sera possible que si la taille des plus petites structures de l'écoulement

simulé est supérieure à l'épaisseur du front de flamme, car le champ aérodynamique ne doit pas influencer la dynamique interne au front de flamme, sans quoi le concept d'interface devient erroné. Ce type de modèle est connu dans la littérature sous le nom de **G-equation. Markstein**, l'un des premiers à utiliser ce concept, propose une vitesse pour le front de flamme sous la forme suivante :

$$\mathbf{V}_{comb} = S\mathbf{n} = (S^0 - L\kappa)\mathbf{n} \quad (1.19)$$

où $\mathbf{V}_{comb}$ est la vitesse du front, S est la composante normale de la vitesse du front, S^0 est la vitesse d'une flamme plane laminaire dans les mêmes conditions thermodynamiques, L est une constante, appelée longueur de **Markstein**, caractéristique des propriétés thermo-diffusives du mélange gazeux, qui peut être déterminée empiriquement, et enfin κ est la courbure locale du front. Les analyses de stabilité effectuées sur des flammes planes conduisent systématiquement à des comportements instables, si l'on prend $L=0$, alors que de nombreuses configurations expérimentales permettent de stabiliser des flammes planes. C'est dans le but d'accorder la théorie linéaire des instabilités aux expériences qui prouvaient qu'une flamme plane pouvait être stable, que **Markstein** a introduit une vitesse de propagation, dépendante des effets de thermo-diffusion. A partir de cette vitesse de front de flamme, on peut calculer un taux de réaction local analogue à (1.11) :

$$\dot{\omega}_{comb} = -\rho_{reac}\mathbf{V}_{comb}.\mathbf{n} \quad (1.20)$$

Dans ce type de modélisation, on admet que la température est discontinue à la traversée du front de flamme, ce qui, à pression constante, engendre une discontinuité de la masse volumique, et donc une discontinuité de la vitesse.

En définissant ainsi, l'opérateur saut appliqué à une grandeur A à la traversée de ce type d'interface :

$$[A]_{\Gamma} = A_{reac} - A_{inerte}$$

on peut établir pour les fronts de flamme une relation analogue à (1.12) :

$$[\mathbf{V}]_{\Gamma} = \dot{\omega}_{comb} \left[\frac{1}{\rho} \right]_{\Gamma} \mathbf{n} \quad (1.21)$$

Selon (**Nguyen & al, 2001**), la condition de saut sur la pression pour les fronts de flamme est :

$$[p] = -(\dot{\omega}_{comb})^2 \left[\frac{1}{\rho} \right]_{\Gamma} \quad (1.22)$$

L'influence des effets de diffusion thermique et diffusion moléculaire étant déjà prise en compte dans l'équation (1.19), les approches de ce type ne sont pas couplées avec des équations de conservation pour l'énergie et pour les espèces chimiques. Ainsi, l'un des défauts de ce type de modèle réside dans le trop grand nombre de paramètres fixés

arbitrairement (ou empiriquement) comme $S, L, \left[\frac{I}{\rho} \right]_r$, ce qui rend ce formalisme peu prédictif. Cependant, nous proposerons au **chapitre 6** quelques améliorations possibles qui pourrait rendre ce formalisme plus prédictif et plus attractif.

3. Conclusion

Ce premier chapitre d'introduction nous a permis, dans un premier temps de discuter du contexte et de l'intérêt de cette étude, puis dans un deuxième temps de poser le formalisme physique que nous utiliserons par la suite pour effectuer cette étude.

Le chapitre suivant va traiter des techniques numériques spécifiques au suivi d'interface et en particulier de la méthode ***Level Set***, que nous avons implémenté et utilisé dans cette thèse.

Chapitre 2

Formalisme de la méthode Level Set

1. Les méthodes de suivi d'interface

1.1 Généralités

L'étude numérique du mouvement d'une interface dans un milieu continu pose de nombreux problèmes, auxquels des solutions très diverses ont été apportées. Ainsi de nombreux critères doivent être étudiés afin d'évaluer la qualité d'une méthode de suivi d'interface.

Parmi ces critères, on peut citer les propriétés purement géométriques, à savoir, la capacité à décrire correctement le mouvement d'une interface dans un champ de vitesse donné, notamment dans les zones où les vitesses sont sous-résolues.

Ce comportement est particulièrement important, car la physique des interfaces dépend de phénomènes physiques d'échelles très diverses, qui peuvent aboutir à des singularités spatiales (formation d'angle lors de la déformation d'une interface ou lors du recouvrement de deux interfaces) autour desquelles le champ de vitesse est sous-résolu. De telles singularités ne peuvent être résolues rigoureusement, il est donc important que la méthode soit robuste et qu'elle converge vers la solution physique.

La capacité à localiser précisément l'interface dans le domaine de calcul est également un atout géométrique important, lorsque l'on veut imposer des conditions de saut raides. De plus, il est intéressant que le formalisme soit suffisamment général pour que l'extension en **3D** à partir d'un cas **2D** soit abordable d'un point de vue formel.

Une méthode de suivi d'interface doit aussi posséder de bonnes propriétés algébriques pour être efficace. Par exemple, le calcul de la courbure, de la normale et/ou de la tangente à l'interface doit être précis et rapide, car les conditions de saut ou la vitesse de propagation de l'interface dépendent souvent de ces paramètres.

Ainsi, pour résumer, les méthodes de suivi d'interface doivent allier des propriétés de haute résolution, de robustesse et de souplesse d'utilisation.

1.2 Descriptions des différentes méthodes

On peut distinguer deux grandes catégories de suivi d'interface, les méthodes *lagrangiennes* (*Front-tracking*) et les méthodes *eulériennes* (*Front-capturing*). Dans les premières, le suivi du front est réalisé grâce à une description explicite de l'interface, au sens où l'interface est décrite par un ensemble d'objets qui seront transportés dans le domaine de calcul à la vitesse locale. La reconnection de cet ensemble d'objets permettra de reconstruire la géométrie de l'interface. La particularité des méthodes *eulériennes* est de considérer l'interface comme un champ scalaire, qui sera transporté par le champ de vitesse grâce à une équation de transport.

Parmi les méthodes *lagrangiennes*, on peut citer les algorithmes sur grille mobile, pour lesquels le maillage épouse la forme de l'interface (*Magnaudet & al, 1995*). Leur avantage réside dans leur faculté à tenir compte très précisément des conditions de saut à travers l'interface (ces conditions de saut sont en fait des conditions limites entre les deux domaines séparés par le maillage-interface). En revanche, ces méthodes manquent de flexibilité lorsque l'on souhaite suivre des mouvements d'interface complexes, puisqu'il faut reconstruire le maillage à chaque pas de temps.

D'autres méthodes *lagrangiennes* ont été développées avec plus de succès sur des maillages fixes. Il s'agit par exemple des chaînes de marqueurs ou suivi de front. L'interface est représentée par un ensemble de points connectés entre eux se déplaçant sur une grille fixe. Même si elles possèdent souvent une résolution très supérieure aux méthodes *eulériennes* (*Rider & al, 1995*), (*Enright & al, 2002*) et qu'elles permettent une localisation très précise de l'interface, elles souffrent de plusieurs inconvénients liés à leur nature *lagrangienne*.

Les marqueurs doivent être régulièrement redistribués dans le domaine de calcul, pour éviter qu'ils ne s'accumulent dans certaines zones et que la résolution de l'interface ne soit altérée dans d'autres zones de par une trop grande distance entre eux. De plus, les changements topologiques (recouvrement ou séparation de deux interfaces) ne s'effectuent pas naturellement ; pour les rendre possible un critère arbitraire doit être imposé pour définir l'instant de la jonction ou de la séparation des interfaces, et c'est certainement là le principal inconvénient de ces méthodes.

La reconstruction de l'interface et le calcul de ses caractéristiques géométriques (courbure, normale, tangente) n'est pas immédiat et nécessite souvent des algorithmes supplémentaires complexes et coûteux. Tous ces inconvénients sont largement amplifiés sur des simulations tridimensionnelles.

De nombreux travaux (*Unverdi & al, 1992*), (*Brackbill & al, 1992*), (*Popinet & al, 2000*) ont été effectués sur le sujet permettant de corriger certains de ces inconvénients, mais parfois au prix de l'altération d'autres qualités de ces algorithmes.

On distingue deux types de méthodes *eulériennes*, les méthodes *V.O.F. (Volume Of Fluid)*, et les méthodes *Level Set* (lignes de niveaux).

Les premières, spécialement conçues pour la simulation d'écoulements diphasiques, sont basées sur le principe de conservation de la masse. La distribution de fraction volumique de liquide (ou gaz) est répartie dans le domaine de calcul sur un maillage fixe, puis elle est transportée par le champ de vitesse (*Lafaurie & al, 1994*), (*Gueyffier & al, 1999*), (*Puckett & al, 1997*), (*Benkenida & al, 2000*). Les caractéristiques de l'interface sont

déduites du champ de fraction volumique. Les méthodes **V.O.F.** sont robustes lors des changements topologiques, qui s'effectuent de façon implicite. La conservation du volume est garantie lorsque l'on transporte la fraction volumique, mais lorsque l'écoulement est sous-résolu, des effets parasites peuvent apparaître dans les zones singulières comme la désintégration d'un filament en '**blob**' (tâche sphérique), dégradant ainsi la précision des structures fines. Ce phénomène, appelé 'tension de surface numérique' (**Rider & al, 1995**), semble inévitable avec un formalisme **eulérien**, lorsque l'on souhaite décrire des structures d'interface dont l'épaisseur est de l'ordre de la maille de calcul. Des techniques de raffinement dynamique de maillage peuvent permettre cependant de résoudre ce problème (**Vincent & al, 2000**).

Les méthodes **V.O.F.** souffrent d'un autre défaut plus contraignant. Leurs propriétés algébriques sont insuffisantes, et de ce fait la localisation du front est diffuse rendant difficile et imprécis le calcul des grandeurs le caractérisant (normale, courbure, tangente). Ainsi, des phénomènes de courants parasites surviennent lorsque des problèmes à fort saut de masse volumique sont étudiés (par exemple interface eau-air à pression et température ambiante). Ces courants parasites, qui peuvent empêcher la réalisation d'un calcul où les sauts sont trop raides, ont l'inconvénient de ne pas diminuer lorsque l'on raffine le maillage. De plus, pour des simulations tridimensionnelles, le formalisme devient plus complexe et plus coûteux, car il est nécessaire d'effectuer une reconstruction de l'interface à partir du champ de fraction massique.

Enfin la méthode **Level Set** est la méthode de suivi d'interface la plus récente, elle a été développée par **Osher & al** en **1988**. Son principe est de définir une fonction interface dans le domaine de calcul dont la courbe de niveau zéro est l'interface que l'on cherche à décrire. La résolution d'une équation de convection permet alors de prédire les mouvements de l'interface dans un champ de vitesse donné. Cette méthode manipule les changements topologiques naturellement, et permet de calculer facilement les caractéristiques géométriques du problème grâce à cette fonction interface. Sa mise en œuvre est aussi directe en **2D** qu'en **3D**.

L'application de cette méthode à la simulation d'écoulements diphasiques n'a pas été immédiate car un certain nombre de défauts sont apparus. Par exemple, les erreurs numériques dissipatives dans la résolution de l'équation de transport entraînent des pertes de masse d'autant plus importantes que le champ de vitesse est sous-résolu, d'autre part la présence de zone de cisaillement ou d'étirement dans le champ de vitesse va fortement étaler ou resserrer les lignes de niveau, altérant ainsi ses propriétés algébriques remarquables.

Cependant, depuis les premiers pas de cette méthode des progrès majeurs ont été réalisés, tant dans l'amélioration de la résolution de l'équation de transport, que dans l'amélioration de ses propriétés algébriques.

La suite de ce chapitre sera consacrée au formalisme **Level Set**, et à ces développements récents, qui en font une méthode robuste, précise et élégante.

2. La méthode Level Set

2.1 Motivation et principe de base

Les bases du formalisme de la méthode **Level Set** ont été posées par (**Osher & al, 1988**). Cette méthode inspirée des travaux précédents de (**Sethian, 1984**) sur la propagation de front de flamme a été motivée par la difficulté numérique de représenter une structure de forme arbitraire de dimension N , dans un domaine de dimension $N+1$.

Cette première ébauche appelée **P.S.C., Propagation of Surfaces under Curvature**, permettait de suivre le mouvement d'une interface transportée par un champ de vitesse quelconque, ou dépendant de la courbure locale du front.

Partant du constat que les méthodes de marqueurs étaient déficientes, lors des changements topologiques, et que les méthodes **V.O.F.** avaient des propriétés algébriques limitées, les auteurs proposèrent un formalisme **eulérien** plus général, en associant au mouvement de l'interface une équation de transport pour une fonction. Si cette méthode a été introduite la première fois par (**Osher & al, 1988**), décrire la propagation d'une interface grâce à une telle équation de transport est une idée beaucoup plus ancienne. Dans son livre (**Markstein, 1964**), décrit déjà une démarche similaire dans le cadre de la caractérisation d'un front de flamme.

La position du front est alors représentée par la ligne de niveau zéro de cette fonction. Toutes les valeurs de cette fonction situées d'un même côté de l'interface, sont de même signe. Celles situées de l'autre côté sont de signe opposé.

Etant donné, une interface Γ , la méthode **Level Set** consiste à introduire une fonction continue $\phi(\mathbf{x}, t)$, dont la courbe de niveau zéro représente l'interface, c'est-à-dire :

$$\Gamma = \{\mathbf{x} | \phi(\mathbf{x}, t) = 0\} \quad (2.1)$$

La relation suivante est également respectée :

$$\left. \frac{d\phi(\mathbf{x}, t)}{dt} \right|_{\mathbf{x} \in \Gamma} = 0 \quad (2.2)$$

Par extension, on généralise cette relation à l'ensemble des lignes de niveau définies par :

$$\Gamma_k = \{\mathbf{x} | \phi(\mathbf{x}, t) = C_k\} \quad (2.3)$$

et, on obtient :

$$\frac{d\phi(\mathbf{x}, t)}{dt} = 0$$

d'où l'équation aux dérivées partielles :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} = 0 \quad (2.4)$$

On peut réécrire cette équation sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \phi = 0 \quad (2.5)$$

Le formalisme ainsi obtenu s'inscrit dans le cadre général des systèmes d'équations aux dérivées partielles, pour lesquels des phénomènes de propagation d'interface doivent être décrits.

A partir de cette première ébauche, on peut déjà effectuer certaines remarques :

- Les propriétés algébriques remarquables de la méthode sont évidentes. En effet le vecteur normal à l'interface peut être calculé facilement grâce à la fonction ϕ :

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (2.6)$$

On peut en déduire aisément la courbure de l'interface :

$$\kappa(\phi) = -\nabla \cdot \mathbf{n} \quad (2.7)$$

Les vecteurs unitaires tangents à l'interface peuvent également être calculés en créant une base orthonormale avec le vecteur $\mathbf{n}$.

- L'équation (2.2) est une équation exacte qui doit être respectée pour que l'interface se propage à la bonne vitesse, en revanche son extension (2.5) est un raccourci commode qui permet de suivre le mouvement d'un objet de dimension N et de forme arbitraire sur un maillage structuré de dimension $N+1$, ce qui est particulièrement intéressant du point de vue de la résolution numérique. Néanmoins, un certain nombre d'interrogations peuvent être soulevées. L'équation (2.2) suppose que l'on connaisse la vitesse de propagation de la ligne de niveau zéro grâce à des considérations physiques, en revanche la vitesse des autres lignes de niveau ne peut pas être connue à partir de considérations physiques, puisque ces lignes n'ont pas de réalités physiques. En revanche, il est important que notre fonction ϕ reste continue dans tout le domaine, afin que les propriétés algébriques de la méthode restent intéressantes. Ainsi, nous verrons par la suite que l'extension (2.5) pose en général un certain nombre de problèmes quant à la cohérence des lignes de niveau, et que des algorithmes supplémentaires doivent être mis en oeuvre pour calculer des extensions de la vitesse de l'interface ou pour renormaliser les lignes de niveau.

- Le fait que ce soit la ligne de niveau zéro qui représente l'interface n'est pas anodin. En effet lors de changements topologiques où deux interfaces vont être en contact, la fonction ϕ sera égale à $\phi_1 + \phi_2$. La seule valeur pour laquelle, on aura $\phi = \phi_1 = \phi_2$ est zéro.
- On constate également que la méthode peut être généralisée à N dimensions sans contrainte particulière.

2.2 Analyse mathématique de l'équation de transport

L'équation de transport qui a été dérivée se ramène donc à un problème de valeur initiale. L'analyse de cette équation et de ses comportements caractéristiques va nous permettre de justifier le choix des méthodes numériques que nous utiliserons pour résoudre notre problème de suivi d'interface. L'équation de propagation de l'interface est une équation de type hyperbolique, excepté pour le cas particulier intéressant où la vitesse dépend de la courbure de l'interface, qui conduit alors une équation parabolique.

Les lois hyperboliques sont connues pour développer des solutions discontinues, même lorsque les conditions initiales sont continues. De telles singularités (discontinuités de la fonction ou de sa dérivée) ne sont pas solutions des équations différentielles mais des équations intégrales. On parle alors de solutions faibles de l'équation intégrale. Les solutions faibles ne sont pas uniques en général, une condition dite « **d'entropie** » doit être trouvée, pour savoir laquelle de ces solutions décrit le comportement physique souhaité (**LeVeque, 1992**), (**Sethian, 1996**).

Cette condition d'entropie correspond généralement à une solution dite « faiblement visqueuse ». Le terme visqueux provient de l'analogie avec la dynamique des gaz, où lorsque l'on cherche à décrire une onde de choc grâce aux équations d'**Euler** (qui sont aussi des équations hyperboliques), les solutions satisfaisantes que l'on obtient numériquement sont légèrement lissées aux abords des surfaces de discontinuité, comme si l'on avait ajouté une faible viscosité numérique.

Dans notre cas, les solutions d'entropie seront des solutions pour lesquelles les angles susceptibles de se former seront lissés numériquement, comme si la vitesse de propagation de l'interface dépendait faiblement de la courbure. C'est donc la courbure qui joue le rôle de la viscosité en lissant les discontinuités ; on peut poursuivre plus loin l'analogie en remarquant que les termes visqueux confèrent aux équations de **Navier-Stokes** un caractère parabolique, tout comme l'équation de propagation de l'interface devient parabolique lorsque la vitesse de propagation de l'interface dépend de la courbure. Cette analyse rapide de l'équation de transport permet d'appréhender les difficultés numériques rencontrées lors de la résolution d'équations hyperboliques. Ainsi les schémas centrés de différences finies classiques, dérivés à partir d'hypothèses de différentiabilité sont très instables lorsqu'on les applique à des équations hyperboliques à cause du développement de singularités. De nouvelles techniques doivent alors être développées pour permettre la résolution numérique de telles équations. C'est l'objet du prochain paragraphe.

3. Méthodes numériques pour lois hyperboliques

L'un des principaux attraits de la méthode **Level Set** réside dans sa formulation mathématique sous forme d'équations aux dérivées partielles. La qualité des calculs effectués dépend alors fortement des discrétisations spatiales et temporelle qui ont été développées. Dans ce contexte, les travaux réalisés sur la discrétisation des équations d'**Euler** ou de **Navier-Stokes** compressibles en régime supersonique semblent adaptés au formalisme **Level Set**. En effet, des schémas numériques performants ont été spécialement conçus pour le calcul de la propagation d'ondes de choc dans les milieux fluides. La prédiction de tels phénomènes nécessite des méthodes numériques très robustes, capables de décrire des surfaces de discontinuité de certaines variables. En contre-partie de leur grande robustesse, ces schémas introduisent des erreurs numériques dissipatives qui ont tendance à lisser les solutions obtenues, notamment dans les zones de fort gradient (on parle de dissipation numérique).

Ce phénomène devient particulièrement nuisible sur les simulations de type interaction « turbulence-onde de choc ». En effet, si la dissipation numérique introduite par le schéma est trop importante, la description de la turbulence en est affectée, et il en résultera une sur-évaluation de la dissipation d'énergie cinétique turbulente.

Ainsi de nombreuses études ont été effectuées pour diminuer les erreurs numériques introduites dans ce type de simulations. Cependant, un compromis entre la robustesse du calcul et la précision souhaitée est inévitable. Dans (**Shu & al, 1988**) les auteurs proposent une discrétisation intéressante pour les lois hyperboliques, qui présente l'avantage d'être « intrinséquement robuste » quelles que soient les singularités de la solution, tout en introduisant une dissipation moindre par rapport aux méthodes déjà existantes ; ces schémas sont appelés **ENO** (**Essentially Non Oscillatory**).

Dans (**Jiang & al, 1994**), les auteurs proposent des améliorations de ces schémas, qui constituent actuellement l'un des meilleurs compromis (robustesse/précision) pour les simulations d'écoulements supersoniques turbulents ; ce sont les schémas **WENO** (**Weighted Essentially Non Oscillatory**) .

Les études de (**Osher & al, 1988**) ont montré que les schémas **ENO** et/ou **WENO** sont adaptés pour la discrétisation de l'équation de propagation de l'interface (2.5). En effet leur grande robustesse permet d'une part d'accepter les singularités susceptibles de se développer dans les solutions d'équations hyperboliques, et d'autre part, grâce à leur précision d'ordre élevé, on peut espérer obtenir une assez bonne description des structures fines de l'interface.

Dans la suite de ce paragraphe, nous allons exposer succinctement un certain nombre de schémas numériques appropriés pour la résolution de l'équation (2.5), puis nous discuterons au paragraphe suivant les résultats obtenus sur des tests de suivi d'interface.

3.1 Discrétisations temporelles

Etant donné, la complexité des schémas numériques qui seront utilisés pour la discrétisation spatiale, la discrétisation temporelle de notre équation sera explicite. Ainsi un critère sur le pas de temps est nécessaire pour assurer la stabilité des calculs. Pour ce

type d'équations on peut obtenir la stabilité en utilisant la condition de ***Courant-Friedrichs-Lewy***, à savoir que les ondes numériques dues aux erreurs de troncature doivent se propager au moins aussi vite que les ondes physiques.

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} > |u|$$

D'où :

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{\max\{|u|\}}$$

Cette condition peut également être interprétée comme une condition qui interdit à une courbe caractéristique de la solution « d'avancer » de plus d'une maille Δx pendant un intervalle de temps Δt . Finalement on utilise la relation suivante en **1D** :

$$\Delta t = cfl \frac{\Delta x}{\max\{|u|\}}$$

Où cfl est un nombre compris entre 0 et 1, appelé nombre de ***Courant-Friedrichs-Lewy***, qui peut varier suivant les schémas numériques utilisés. En **3D** cette relation devient :

$$\Delta t = \frac{cfl}{\frac{\max\{|u|\}}{\Delta x} + \frac{\max\{|v|\}}{\Delta y} + \frac{\max\{|w|\}}{\Delta z}} \quad (2.8)$$

En général, la discrétisation temporelle d'équations de transport pose moins de difficultés que la discrétisation spatiale. En effet, les méthodes les plus couramment utilisées pour les équations différentielles ordinaires s'adaptent très bien à la discrétisation temporelle des équations aux dérivées partielles. Dans cette section, nous allons décrire différents schémas d'intégration en temps, leur pertinence sera discutée sur des exemples numériques.

Schéma d'Euler explicite

Le schéma le plus simple précis à l'ordre 1, son application à l'équation (2.5), donne l'algorithme suivant :

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \Delta t (\mathbf{V}^n \cdot \nabla) \phi^n \quad (2.9)$$

Peu coûteux ce schéma s'avère souvent insuffisant pour des simulations complexes.

Schéma à points multiples (Adams-Bashforth)

Le principe des schémas à points multiples est d'obtenir une dérivée d'ordre supérieur à 1 en utilisant les valeurs du second membre à des instants antérieurs au temps n . Le schéma d'**Adams-Bashforth** d'ordre 2 en est un exemple. Son application conduit à la discrétisation temporelle suivante :

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \frac{\Delta t}{2} (3(\mathbf{V}^n \cdot \nabla) \phi^n - (\mathbf{V}^{n-1} \cdot \nabla) \phi^{n-1}) \quad (2.10)$$

Des schémas d'ordre plus élevé peuvent être dérivés, néanmoins le schéma d'**Adams-Bashforth** d'ordre 2 est le plus couramment utilisé.

Schéma à pas multiples (Runge-Kutta)

Très souvent utilisé, le schéma **Runge-Kutta** offre un très bon compromis entre stabilité numérique et précision. Le principe des schémas à pas multiples est d'évaluer plusieurs valeurs intermédiaires de la variable intégrée à l'intérieur d'un pas de temps. Chaque évaluation intermédiaire constitue un pas (d'où schémas à pas multiples) supplémentaire. L'ordre de précision du schéma peut être augmenté en augmentant le nombre de pas intermédiaires. Nous donnons ici la démarche qui permet d'obtenir la discrétisation d'ordre 2 et d'ordre 3.

Runge-Kutta d'ordre 2 (**RK2**) :

$$\begin{aligned} - 1^{er} \text{ pas} & \quad \phi^{n+1} = \phi^n - \Delta t (\mathbf{V}^n \cdot \nabla) \phi^n \\ - 2^{ème} \text{ pas} & \quad \phi^{n+2} = \phi^{n+1} - \Delta t (\mathbf{V}^{n+1} \cdot \nabla) \phi^{n+1} \\ - \text{résultat :} & \quad \phi^{n+1} = \frac{\phi^n + \phi^{n+2}}{2} \end{aligned}$$

Runge-Kutta d'ordre 3 (**RK3**) :

$$\begin{aligned} - 1^{er} \text{ pas} & \quad \phi^{n+1} = \phi^n - \Delta t (\mathbf{V}^n \cdot \nabla) \phi^n \\ - 2^{ème} \text{ pas} & \quad \phi^{n+2} = \phi^{n+1} - \Delta t (\mathbf{V}^{n+1} \cdot \nabla) \phi^{n+1} ; \quad \phi^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3\phi^n + \phi^{n+2}}{4} \\ - 3^{ème} \text{ pas} & \quad \phi^{n+\frac{3}{2}} = \phi^{n+\frac{1}{2}} - \Delta t (\mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}} \cdot \nabla) \phi^{n+\frac{1}{2}} \\ - \text{résultat :} & \quad \phi^{n+1} = \frac{\phi^n + 2\phi^{n+\frac{3}{2}}}{3} \end{aligned}$$

En suivant la procédure exposée ci-dessus on voit que le schéma de **Runge-Kutta** d'ordre n peut être décomposé comme une succession de n pas d'**Euler**, avec des pondérations à chaque pas. L'inconvénient majeur lié à l'utilisation de ce type de schémas est une augmentation importante du temps de calcul à chaque itération. (Un **RK2** est deux

fois plus coûteux en temps de calcul qu'un schéma d'**Euler** ou un schéma **Adams-Bashforth**, le **RK3** est trois fois plus coûteux)

Schéma d'ordre 2 (Bell, Colella, Glaz)

On peut également chercher une approximation du second membre de l'équation de convection au temps $n+1/2$. A partir de ϕ^n et de $\mathbf{V}^n$ connu, on calcule :

$$\phi_{ijk}^{n+\frac{1}{2}} = \phi_{ijk}^n - \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{V}_{ijk}^n \cdot \nabla) \phi_{ijk}^n$$

puis, on applique le schéma suivant :

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \Delta t (\mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}} \cdot \nabla) \phi^{n+\frac{1}{2}} \quad (2.11)$$

Cette méthode n'est d'ordre 2 que si l'évaluation de $\phi^{n+1/2}$ par rapport à ϕ^n est également d'ordre 2. (**Bell & al, 1992**) proposent la technique suivante pour estimer $\phi^{n+\frac{1}{2}}$ à partir de ϕ^n et de $\mathbf{V}^n$.

On évalue les dérivées spatiales avec le schéma « **upwind** » d'ordre 2 suivant :

Si $u_{ijk} > 0$:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{ijk} = \frac{\phi_{ijk} - \phi_{i-1,jk}}{\Delta x} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{u_{ijk} \Delta t}{\Delta x} \right) \left(\frac{\phi_{i+1,jk} - \phi_{ijk} - \phi_{i-1,jk} + \phi_{i-2,jk}}{\Delta x} \right) \quad (2.12.a)$$

Autrement si $u_{ijk} < 0$:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{ijk} = \frac{\phi_{i+1,jk} - \phi_{ijk}}{\Delta x} - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{u_{ijk} \Delta t}{\Delta x} \right) \left(\frac{\phi_{i+2,jk} - \phi_{i+1,jk} - \phi_{ijk} + \phi_{i-1,jk}}{\Delta x} \right) \quad (2.12.b)$$

Les dérivées suivant y et z peuvent être calculées de la même manière. Cette procédure s'apparente à un schéma à pas multiples d'ordre 2 puisque l'on doit effectuer deux intégrations spatiales, néanmoins le schéma spatial décrit ici a l'avantage d'être relativement simple et rapide. La combinaison de ce schéma, où l'intégration en temps est liée à l'intégration en espace, avec un schéma de discrétisation spatiale plus coûteux pour $\phi^{n+1/2}$ (**ENO 3, WENO 5**) doit permettre un gain sur le temps de calcul relativement important par rapport à une résolution temporelle utilisant un schéma **RK2**, puisque l'on utilisera le schéma spatial d'ordre élevé une seule fois par itération, tout en maintenant une précision d'ordre 2 sur l'intégration en temps.

3.2 Discrétisations spatiales

Nous présentons à présent différents schémas numériques adaptés à la discrétisation des dérivées spatiales de l'équation (2.5) :

$$(\mathbf{V} \cdot \nabla)\phi = u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + w \frac{\partial \phi}{\partial z} \quad (2.13)$$

Tous les schémas étudiés dans ce travail de thèse sont des schémas de type différences finies (discrétisation suivant une seule direction du maillage) adaptés à des maillages cartésiens.

Par souci de simplicité nous allons raisonner en **2D**, mais l'extension des différentes formulations au cas **3D** est immédiate, de même nous ne donnons ici que les relations permettant de calculer les dérivées premières suivant x , mais on peut généraliser le raisonnement pour calculer les dérivées suivant y et z .

Schéma « Upwind »

Comme nous l'avons déjà souligné les schémas centrés sont instables lorsqu'ils sont appliqués aux équations hyperboliques. En revanche en s'inspirant de la méthode des caractéristiques, on peut élaborer un schéma très simple et très robuste.

En effet si la vitesse $u_{ij} > 0$, les valeurs de ϕ évoluent de la gauche vers la droite, donc si l'on se place en un point à un instant donné la méthode des caractéristiques nous indique de regarder vers la gauche pour connaître la valeur de ϕ à un instant ultérieur, et inversement si $u_{ij} < 0$ il faut regarder vers la droite pour connaître la valeur de ϕ à l'instant d'après. Ce petit raisonnement nous conduit à la construction d'un schéma « **upwind** » (décentré suivant la direction de propagation des courbes caractéristiques) d'ordre 1.

Si $u_{ij} > 0$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{ij} = \frac{(\phi_{ij} - \phi_{i-1,j})}{\Delta x}$$

Autrement si $u_{ij} < 0$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{ij} = \frac{(\phi_{i+1,j} - \phi_{ij})}{\Delta x}$$

Bien que très dissipatif, ce schéma est bien connu pour sa grande stabilité numérique même lorsqu'on l'applique à des équations de convection hyperboliques. De plus la procédure consistant à décentrer le stencil du schéma suivant la direction de propagation des courbes caractéristiques a été reprise dans la construction de la plupart des schémas numériques d'ordre élevé utilisés pour discrétiser ce type d'équations.

Schéma Bell Colella Glaz (B.C.G) d'ordre 2

C'est un schéma numérique pour lequel l'intégration en temps et en espace sont fortement couplées. Dans le paragraphe précédent sur les méthodes d'intégration en temps, nous avons partiellement découplé l'intégration temporelle de l'intégration spatiale, pour que le schéma en temps soit utilisable avec d'autres schémas en espace. Ici, nous exposons la technique d'intégration complète, qui conduit à un schéma d'ordre 2 en temps et en espace.

Ce schéma a été développé avec succès par (**Bell & al, 1989**) pour fournir une discrétisation robuste et précise des termes convectifs des équations d'**Euler** ou de **Navier-Stokes** incompressible. Il a également été utilisé par (**Bell & al, 1992**) pour discrétiser une équation de convection.

On cherche à calculer le terme $\phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}}$, les deux extrapolations suivantes sont possibles :

$$\begin{aligned}\phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}G} &= \phi_{ij} + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{ij}^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_{ij}^n \\ \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}D} &= \phi_{i+1j} - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i+1j}^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_{i+1j}^n\end{aligned}$$

Où l'indice G ou D désigne respectivement une approximation calculée à partir des dérivées à gauche ou à droite du point considéré. On peut en déduire :

$$\begin{aligned}\phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}G} &= \phi_{ij}^n + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{ij}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(u_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{ij}^n + v_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{ij}^n \right) \\ \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}D} &= \phi_{i+1j}^n - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i+1j}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(u_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{ij}^n + v_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{ij}^n \right)\end{aligned}$$

Les dérivées spatiales sont alors évaluées en utilisant les relations (2.12.a) et (2.12.b). Ensuite une procédure de type « **upwind** » est utilisée sur ϕ :

$$\left\{ \begin{aligned} \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}} &= \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}G} & si \quad u_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}} > 0 \\ \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}} &= \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}D} & si \quad u_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}} < 0 \\ \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{\phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}G} + \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}D}}{2} & si \quad u_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}} = 0 \end{aligned} \right.$$

Finalement, on obtient l'algorithme suivant :

$$\phi_{ij}^{n+1} = \phi_{ij}^n - dt \left(u_{ij}^{n+\frac{1}{2}} \frac{\left(\phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}} - \phi_{i-\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}} \right)}{\Delta x} + v_{ij}^{n+\frac{1}{2}} \frac{\left(\phi_{ij+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \phi_{ij-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right)}{\Delta y} \right) \quad (2.14)$$

Schéma Essentially Non Oscillatory d'ordre 3 (ENO3)

Dans (*Shu & al, 1988*), les auteurs introduisent des polynômes d'interpolation essentiellement non oscillant pour la solution numérique des lois de conservation. L'idée de base est d'utiliser un stencil d'interpolation adaptatif qui obtient automatiquement les informations provenant de la région où la solution est localement la plus lisse. Ces schémas ont ensuite été appliqués avec succès sur des problèmes de suivi d'interface (*Osher & al, 1988*).

La procédure à suivre pour calculer $\phi_{i+1/2j}$ est la suivante :

- « *upwind* »

-

$$\begin{cases} k_1 = i & \text{si } u_{i+\frac{1}{2}j} > 0 \\ k_1 = i+1 & \text{si } u_{i+\frac{1}{2}j} \leq 0 \end{cases}$$

- schéma d'ordre 1 :

$$\phi_{i+\frac{1}{2}j}^{(1)} = \phi_{k_1j}$$

- schéma d'ordre 2 :

$$a = \frac{\phi_{k_1j} - \phi_{k_1-1j}}{\Delta x}$$

$$b = \frac{\phi_{k_1+1j} - \phi_{k_1j}}{\Delta x}$$

$$c = \begin{cases} a & \text{si } |a| \leq |b| \\ b & \text{autrement} \end{cases}$$

$$k_2 = \begin{cases} k_1 - 1 & \text{si } |a| \leq |b| \\ k_1 & \text{autrement} \end{cases}$$

$$\phi_{i+\frac{1}{2}j}^{(2)} = \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{(1)} + \frac{\Delta x}{2} c (1 - 2(k_1 - i))$$

- schéma d'ordre 3 :

$$\begin{aligned}
 a &= \frac{\phi_{k_2-1j} - 2\phi_{k_2j} + \phi_{k_2+1j}}{(\Delta x)^2} \\
 b &= \frac{\phi_{k_2j} - 2\phi_{k_2+1j} + \phi_{k_2+2j}}{(\Delta x)^2} \\
 c &= \begin{cases} a & \text{si } |a| \leq |b| \\ b & \text{autrement} \end{cases} \\
 \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{(3)} &= \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{(2)} - \frac{(\Delta x)^2}{3} c(3(k_2 - i)^2 - 1)
 \end{aligned}$$

Finalement on obtient l'algorithme suivant, si on utilise un schéma d'Euler pour l'intégration en temps :

$$\phi_{ij}^{n+1} = \phi_{ij}^n - dt \left(u_{ij} \frac{\left(\phi_{i+\frac{1}{2}j}^{n(3)} - \phi_{i-\frac{1}{2}j}^{n(3)} \right)}{\Delta x} + v_{ij} \frac{\left(\phi_{ij+\frac{1}{2}}^{n(3)} - \phi_{ij-\frac{1}{2}}^{n(3)} \right)}{\Delta y} \right) \quad (2.15)$$

La généralisation des schémas **ENO** à des précisions supérieures à l'ordre 3 est tout à fait possible. Des détails sur la formulation générale sont donnés dans (*Shu & al, 1988*).

Schéma Weighted Essentially Non Oscillatory d'ordre 5 (WENO5)

(*Liu & al, 1994*) ont mis en évidence que le fait de choisir le stencil où la solution est la plus lisse peut engendrer une dissipation importante dans des régions où la solution devrait être bien résolue. Ils ont alors proposé une méthode **Weighted Essentially Non Oscillatory**, c'est-à-dire, une formulation **ENO** pondérée, dans laquelle on prend une combinaison des différentes approximations **ENO** possibles. Bien sûr, si l'une des approximations **ENO** est interpolée à travers une discontinuité, on lui attribue un poids minimum de manière à ce que sa contribution, et donc les erreurs numériques en découlant, soit minimisée. Originellement d'ordre 4, la précision de ce schéma a été augmentée jusqu'à l'ordre 5 par (*Jiang & al, 1996*).

L'algorithme est le suivant :

$$\begin{aligned}
v_1^- &= \frac{\phi_{i-2j} - \phi_{i-3j}}{\Delta x} & v_1^+ &= \frac{\phi_{i+3j} - \phi_{i+2j}}{\Delta x} \\
v_2^- &= \frac{\phi_{i-1j} - \phi_{i-2j}}{\Delta x} & v_2^+ &= \frac{\phi_{i+2j} - \phi_{i+1j}}{\Delta x} \\
v_3^- &= \frac{\phi_{ij} - \phi_{i-1j}}{\Delta x} & v_3^+ &= \frac{\phi_{i+1j} - \phi_{ij}}{\Delta x} \\
v_4^- &= \frac{\phi_{i+1j} - \phi_{ij}}{\Delta x} & v_4^+ &= \frac{\phi_{ij} - \phi_{i-1j}}{\Delta x} \\
v_5^- &= \frac{\phi_{i+2j} - \phi_{i+1j}}{\Delta x} & v_5^+ &= \frac{\phi_{i-1j} - \phi_{i-2j}}{\Delta x}
\end{aligned}$$

Les exposants + et - correspondent aux deux dérivées $\frac{\partial \phi^-}{\partial x}$ et $\frac{\partial \phi^+}{\partial x}$, que l'on cherche à calculer. Dans la suite de ce paragraphe, on donne la procédure pour calculer $\frac{\partial \phi^-}{\partial x}$, on utilise le même algorithme pour calculer $\frac{\partial \phi^+}{\partial x}$ en remplaçant les indices - par +. On définit les variables suivantes :

$$\begin{aligned}
S_1^- &= \frac{13}{12} (v_1^- - 2v_2^- + v_3^-)^2 + \frac{1}{4} (v_1^- - 4v_2^- + 3v_3^-)^2 \\
S_2^- &= \frac{13}{12} (v_2^- - 2v_3^- + v_4^-)^2 + \frac{1}{4} (v_2^- - v_4^-)^2 \\
S_3^- &= \frac{13}{12} (v_3^- - 2v_4^- + v_5^-)^2 + \frac{1}{4} (3v_3^- - 4v_4^- + v_5^-)^2
\end{aligned}$$

Et les pondérations :

$$\begin{aligned}
a_1^- &= \frac{1}{10} \frac{1}{(\varepsilon + S_1^-)^2}, & w_1^- &= \frac{a_1^-}{a_1^- + a_2^- + a_3^-} \\
a_2^- &= \frac{6}{10} \frac{1}{(\varepsilon + S_2^-)^2}, & w_2^- &= \frac{a_2^-}{a_1^- + a_2^- + a_3^-} \\
a_3^- &= \frac{3}{10} \frac{1}{(\varepsilon + S_3^-)^2}, & w_3^- &= \frac{a_3^-}{a_1^- + a_2^- + a_3^-}
\end{aligned}$$

Où ε est une valeur donnée très petite ($\varepsilon = 10^{-6}$) permettant de s'affranchir d'éventuelles valeurs nulles au dénominateur.

Finalement, on obtient l'expression suivante de la dérivée :

$$\frac{\partial \phi^-}{\partial x} = w_1^- \left(\frac{v_1^-}{3} - \frac{7v_2^-}{6} + \frac{11v_3^-}{3} \right) + w_2^- \left(-\frac{v_2^-}{6} - \frac{5v_3^-}{6} + \frac{v_4^-}{3} \right) + w_3^- \left(\frac{v_3^-}{3} + \frac{5v_4^-}{6} - \frac{v_5^-}{6} \right) \quad (2.16)$$

Ensuite, on choisit la dérivée que l'on utilisera suivant le sens de propagation des caractéristiques :

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial \phi^-}{\partial x} & \text{si } u_{ij} > 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial \phi^+}{\partial x} & \text{si } u_{ij} < 0 \end{cases}$$

Modification sous forme conservative du schéma *Weighted Essentially Non Oscillatory* d'ordre 5

Comme on l'a déjà souligné le choix du schéma est particulièrement important. En effet la précision sur la résolution de l'équation (2.5) doit être optimale, pour que l'on puisse décrire le plus efficacement possible les structures fines de l'interface qui ne manqueront pas d'apparaître dans les différentes simulations que l'on effectuera. Une structure est considérée comme numériquement fine lorsque son épaisseur est de l'ordre d'une ou deux mailles. La plus ou moins bonne résolution de telles structures est conditionnée par la qualité de la discrétisation adoptée.

Deux types d'erreur peuvent apparaître lorsque l'on souhaite résoudre ce genre de structures : la première, caractéristique des méthodes **Level Set** est la disparition de la structure d'où des pertes de masse pas toujours négligeables (**Rider & al, 1995**) (**Enright & al, 2002**), le deuxième type d'erreur rencontré concerne plutôt les méthodes **Volume Of Fluid** et se manifeste par la fragmentation artificielle du filament en plusieurs filaments, avec cependant une bonne conservation de la masse.

Dans le but d'améliorer ces pertes de masse avec la méthode **Level Set**, **Jean-Luc Estivalezes** a proposé une forme légèrement modifiée du schéma **WENO 5** qui, nous le verrons par la suite, apporte une amélioration importante aux pertes de masse et à la résolution des structures fines (**Estivalezes , 2002**). L'idée de base de ce schéma est d'appliquer la procédure de lissage et de pondération non pas sur les dérivées mais sur la variable à discrétiser. La solution lissée est ensuite dérivée en utilisant un schéma centré.

L'algorithme est le suivant :

$$\begin{array}{llll} a_1^- = \phi_{i+3j} & a_1^+ = \phi_{i-2j} & b_1^- = \phi_{i+2j} & b_1^+ = \phi_{i-3j} \\ a_2^- = \phi_{i+2j} & a_2^+ = \phi_{i-1j} & b_2^- = \phi_{i+1j} & b_2^+ = \phi_{i-2j} \\ a_3^- = \phi_{i+1j} & a_3^+ = \phi_{ij} & b_3^- = \phi_{ij} & b_3^+ = \phi_{i-1j} \\ a_4^- = \phi_{ij} & a_4^+ = \phi_{i+1j} & b_4^- = \phi_{i-1j} & b_4^+ = \phi_{ij} \\ a_5^- = \phi_{i-1j} & a_5^+ = \phi_{i+2j} & b_5^- = \phi_{i-2j} & b_5^+ = \phi_{i+1j} \end{array}$$

Comme précédemment, on ne donne ici que la procédure pour calculer ϕ^- , on utilise le même algorithme pour calculer ϕ^+ en remplaçant les variables $a_i^{+/-}$ par les variables $b_i^{+/-}$. Pour calculer ϕ^+ , il est nécessaire de redéfinir toutes les variables intermédiaires que nous allons utiliser pour calculer ϕ^- .

On définit les variables suivantes :

$$S_1^- = 13(a_1^- - 2a_2^- + a_3^-)^2 + 3(a_1^- - 4a_2^- + 3a_3^-)^2$$

$$S_2^- = 13(a_2^- - 2a_3^- + a_4^-)^2 + 3(a_2^- - a_4^-)^2$$

$$S_3^- = 13(a_3^- - 2a_4^- + a_5^-)^2 + 3(3a_3^- - 4a_4^- + a_5^-)^2$$

$$S_1^+ = 13(a_1^+ - 2a_2^+ + a_3^+)^2 + 3(a_1^+ - 4a_2^+ + 3a_3^+)^2$$

$$S_2^+ = 13(a_2^+ - 2a_3^+ + a_4^+)^2 + 3(a_2^+ - a_4^+)^2$$

$$S_3^+ = 13(a_3^+ - 2a_4^+ + a_5^+)^2 + 3(3a_3^+ - 4a_4^+ + a_5^+)^2$$

$$R_1^- = \frac{a_1^-}{3} - \frac{7a_2^-}{6} + \frac{11a_3^-}{6}$$

$$R_2^- = -\frac{a_2^-}{6} + \frac{5a_3^-}{6} + \frac{a_4^-}{3}$$

$$R_3^- = \frac{a_3^-}{3} + \frac{5a_4^-}{6} - \frac{a_5^-}{6}$$

$$R_1^+ = \frac{a_1^+}{3} - \frac{7a_2^+}{6} + \frac{11a_3^+}{6}$$

$$R_2^+ = -\frac{a_2^+}{6} + \frac{5a_3^+}{6} + \frac{a_4^+}{3}$$

$$R_3^+ = \frac{a_3^+}{3} + \frac{5a_4^+}{6} - \frac{a_5^+}{6}$$

Et les pondérations :

$$p_1^- = \frac{1}{(\varepsilon + S_1^-)^2} \quad p_1^+ = \frac{1}{(\varepsilon + S_1^+)^2}$$

$$p_2^- = \frac{6}{(\varepsilon + S_2^-)^2} \quad p_2^+ = \frac{6}{(\varepsilon + S_2^+)^2}$$

$$p_3^- = \frac{3}{(\varepsilon + S_3^-)^2} \quad p_3^+ = \frac{3}{(\varepsilon + S_3^+)^2}$$

La variable que l'on souhaite dériver est lissée en utilisant la relation suivante :

$$\phi_{i-\frac{1}{2}j}^{WENO-} = \frac{p_1^- R_1^- + p_2^- R_2^- + p_3^- R_3^-}{p_1^- + p_2^- + p_3^-}$$

$$\phi_{i+\frac{1}{2}j}^{WENO-} = \frac{p_1^+ R_1^+ + p_2^+ R_2^+ + p_3^+ R_3^+}{p_1^+ + p_2^+ + p_3^+}$$

On utilise alors une procédure similaire pour déterminer $\phi_{i-\frac{1}{2}j}^{WENO+}$ et $\phi_{i+\frac{1}{2}j}^{WENO+}$.

On peut ensuite calculer la dérivée, que l'on utilisera suivant le sens de propagation des caractéristiques :

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_{i+\frac{1}{2}j}^{WENO-} - \phi_{i-\frac{1}{2}j}^{WENO-}}{\Delta x} & si \quad u_{ij} > 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_{i+\frac{1}{2}j}^{WENO+} - \phi_{i-\frac{1}{2}j}^{WENO+}}{\Delta x} & si \quad u_{ij} < 0 \end{cases} \quad (2.17)$$

Ce schéma peut également être utilisé sous forme conservative en utilisant la relation suivante :

$$\frac{\partial(\phi u)}{\partial x} = \frac{F_{i+\frac{1}{2}j} - F_{i-\frac{1}{2}j}}{\Delta x} \quad (2.18)$$

Avec :

$$\begin{cases} F_{i+\frac{1}{2}j} = u_{i+\frac{1}{2}j} \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{WENO-} & si \quad u_{i+\frac{1}{2}j} > 0 \\ F_{i+\frac{1}{2}j} = u_{i+\frac{1}{2}j} \phi_{i+\frac{1}{2}j}^{WENO+} & si \quad u_{i+\frac{1}{2}j} < 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} F_{i-\frac{1}{2}j} = u_{i-\frac{1}{2}j} \phi_{i-\frac{1}{2}j}^{WENO-} & si \quad u_{i-\frac{1}{2}j} > 0 \\ F_{i-\frac{1}{2}j} = u_{i-\frac{1}{2}j} \phi_{i-\frac{1}{2}j}^{WENO+} & si \quad u_{i-\frac{1}{2}j} < 0 \end{cases}$$

Dans la suite de ce manuscrit, nous appellerons ce schéma **WENO 5** « modifié ».

4. Exemples de suivi d'interface

Différentes configurations sont utilisées pour tester et comparer l'habileté des différentes méthodes de suivi d'interface à prédire le mouvement d'une interface dans un champ de vitesse donné. Dans cette section, nous comparons les schémas numériques explicités aux paragraphes précédents, sur ces configurations. Les cas étudiés sont les tests que l'on

trouve le plus souvent dans la littérature lorsque l'on souhaite coupler le suivi d'interface à la mécanique des fluides (*Rider & al, 1995*), (*Enright & al, 2002*).

Le premier exemple que nous exposerons est le cercle de **Zalezak**, qui permet d'évaluer la capacité d'un algorithme à transporter sans déformation une forme géométrique complexe. Ensuite nous étudierons le transport et la déformation d'une forme géométrique simple dans un champ de vitesse cisailé (tourbillon). Ce dernier cas permet de tester la capacité de la méthode à résoudre correctement des structures filamenteuses très fines. Plusieurs critères sont à prendre en compte pour évaluer l'habileté et l'efficacité d'une méthode numérique :

- évaluation des pertes de surface (les cas ont été testés en **2D** sur des champs à divergence nulle donc la quantité de surface doit être conservée dans le cas idéal).
- convergence en temps et en espace de la méthode.
- bonne résolution des formes géométriques.
- évaluation du temps *CPU*.

Pour la discrétisation temporelle, le pas de temps utilisé, afin d'assurer la stabilité du calcul, est fixé :

$$dt = \frac{dx}{2}$$

car la somme des valeurs maximales des composantes des vitesses ne dépasse jamais 1.

4.1 Cercle de Zalezak

Les caractéristiques de cette simulation sont les suivantes :

$$\begin{aligned} l_x &= 100 \\ l_y &= 100 \\ x &\in [0;100] \\ y &\in [0;100] \\ u &= \frac{\pi(50 - y)}{314} \\ v &= \frac{\pi(x - 50)}{314} \end{aligned}$$

Le champ de vitesse défini est stationnaire. Le cercle fendu de **Zalezak** est centré en (50,75), son rayon vaut 15. La fente incluse a une épaisseur de 5 et une longueur de 25. La **figure (2.1)** illustre la configuration initiale de ce test.

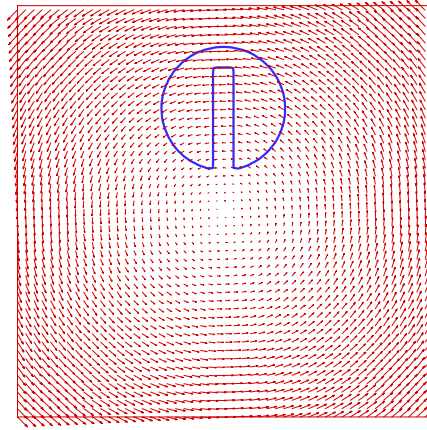


figure (2.1) : champ de vitesse et profil initial d'interface

La fonction **Level Set** doit être étendue dans tout le domaine, et afin qu'elle soit continue, on choisit de la définir comme étant la fonction distance algébrique, entre le point considéré et l'interface. Sur la *figure (2.2)* ci-dessous, on peut observer la distribution régulière et équidistante de quelques lignes de niveau.

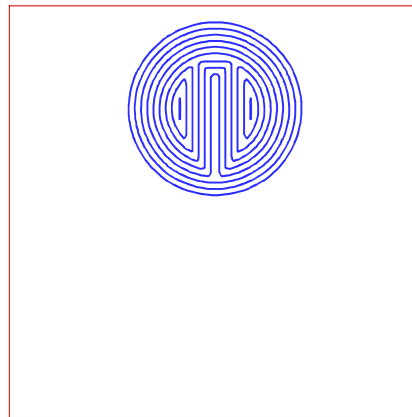


figure (2.2) : répartition des lignes de niveau d'une fonction distance

On peut remarquer que la fonction distance est continue, mais pas dérivable car sa dérivée subit des discontinuités, notamment dans les angles de la fente. Le cercle effectue une rotation toutes les 628 unités temporelles, et la comparaison du profil après une rotation et du profil initial permet de tester les différents schémas numériques. On remarque qu'un tel champ (non dérivable) ne peut être discrétisé que par un schéma robuste qui lisse les discontinuités. On compare donc les schémas **ENO 3**, **WENO 5**, et **B.C.G.** d'ordre 2. La maillage utilisé est 100×100 . Les *figures (2.3)* présentent les résultats obtenus avec un schéma **RK3** pour la discrétisation temporelle, sauf pour le schéma **B.C.G.** dont la spécificité est de coupler l'intégration spatiale et l'intégration temporelle.

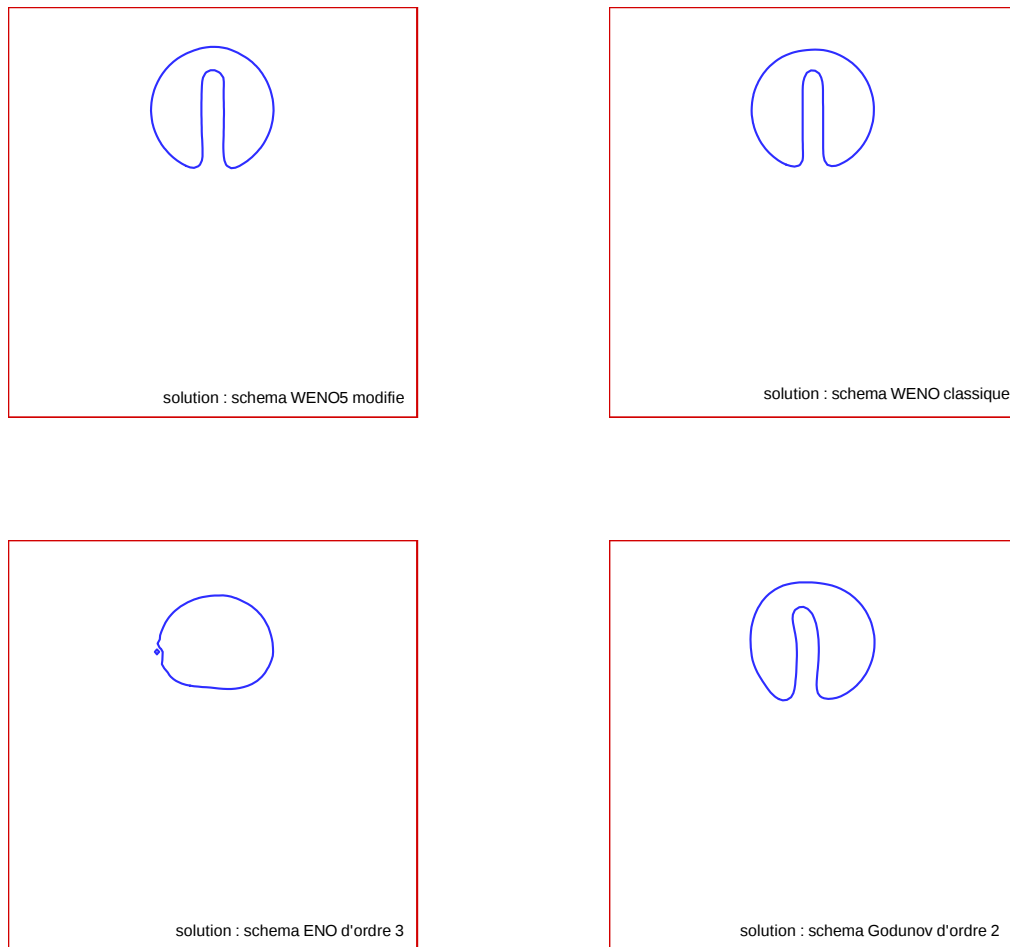


figure (2.3) : comparaison des profils d'interface pour différents schémas

Les tests réalisés montrent que la qualité du schéma conditionne très fortement la solution obtenue. On peut ainsi observer que les deux schémas **WENO** utilisés conduisent à des résultats à peu près équivalents et de très bonne qualité. En revanche, le schéma de **B.C.G.** d'ordre 2 engendre une déformation importante de la forme géométrique alors que le schéma **ENO** d'ordre 3 montre un résultat très loin de la solution, puisque la fente du cercle est totalement dissipée.

Nous comparerons donc dans la suite de ce paragraphe le profil initial à la solution obtenue avec le schéma **WENO** (ou sa forme modifiée), pour évaluer les capacités de la méthode sur ce cas-test.

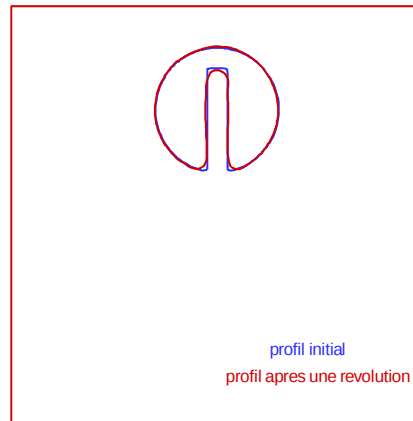


figure (2.4) : comparaison des profils d'interface après une révolution complète

La **figure (2.4)** montre que la solution obtenue après une rotation complète est très satisfaisante, en effet la profondeur de la fente et la forme générale du cercle ont été conservées. Des différences entre les deux courbes apparaissent, cependant dans les zones singulières, en effet les angles ont été légèrement lissés. On pourrait négliger ce lissage en considérant que c'est une erreur numérique inhérente aux schémas, et conclure qu'elle est inévitable et de peu d'importance si l'on considère les bons résultats obtenus sur la forme générale. En réalité cette erreur numérique est très importante, car le lissage des angles est nécessaire au respect de la condition d'entropie pour la propagation des surfaces. En effet, un solveur purement **lagrangien** (méthodes des traceurs) possède des propriétés de résolution suffisante pour transporter sans déformation, ni lissage, des formes singulières discontinues. Mais de telles propriétés peuvent devenir un handicap lorsque deux surfaces vont se rencontrer et coalescer, ou lorsqu'une surface va se scinder en deux. La zone singulière ne sera alors pas résolue, car la discontinuité qui se développera ne sera pas régularisée, ne permettant pas de calculer la solution respectant la condition d'entropie du problème. Une telle approche ne peut pas être robuste lors des changements topologiques, à moins qu'elle ne soit couplée à d'autres considérations plus ou moins arbitraires pour imposer les instants et les endroits où le changement topologique intervient. Au contraire, lorsque l'on utilise la méthode **Level Set** avec des schémas numériques adaptés, les singularités sont régularisées, permettant ainsi de respecter la condition d'entropie (ou condition faiblement visqueuse, on pourrait parler ici de conditions de vitesse dépendant faiblement de la courbure). Avec une telle approche les courbes peuvent se superposer, sans que le développement de singularités ne surviennent. De plus amples détails ont été donnés sur ce sujet par (**Sethian, 1996**).

Dans le but de valider les schémas utilisés, il est important de vérifier la convergence de la méthode en raffinant le maillage. La **figure (2.5)** présente les résultats obtenus avec le schéma **WENO 5** classique pour deux maillages différents, à savoir (**100x100**) et (**200x200**). On constate effectivement sur cette figure que la solution obtenue après une rotation avec le maillage le plus fin, est plus proche du disque initial avec des erreurs dissipatives de moindre importance.

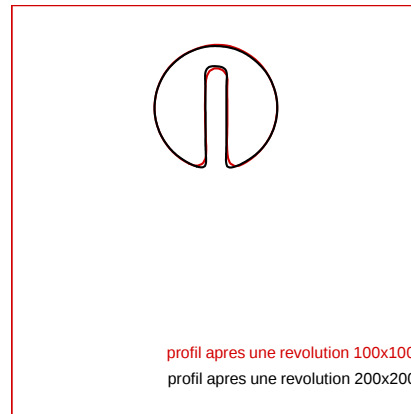


figure (2.5) : convergence spatiale de la méthode

Sur la **figure (2.6)**, on peut observer la structure des lignes de niveau après une rotation complète. Ces lignes de niveau ont été transportées sans déformation, comme la ligne de niveau zéro, à part les zones singulières qui ont été régularisées. La propriété de distance algébrique a donc été à peu près conservée.

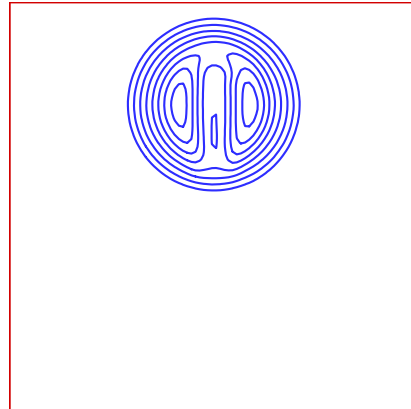


figure (2.6) : fonction distance après une révolution

4.2 Ecoulement cisailé

Un second test intéressant est celui du transport et de la déformation d'un cercle dans un écoulement cisailé. Ce test va permettre d'étudier la capacité de notre méthode à décrire des structures filamenteuses longues et très fines. Cette simulation a été proposée par (**Rider & al, 1995**). Dans leur étude, les auteurs ont comparé quatre méthodes de suivi d'interface différentes, la méthode **Level Set**, la méthode **V.O.F.**, et deux méthodes **lagrangiennes**. Leurs résultats mettent en évidence que la méthode **Level Set** est peu satisfaisante pour la simulation de structures d'interface très fines. Nous allons voir dans

cette partie que suivant le schéma que l'on utilise pour la convection de l'interface, les résultats peuvent être largement améliorés.

Les conditions de la simulation sont les suivantes :

$$\begin{aligned}
 l_x &= 1 \\
 l_y &= 1 \\
 x &\in [0;1] \\
 y &\in [0;1] \\
 \psi &= \frac{1}{\pi} \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y) \\
 u &= -\frac{\partial \psi}{\partial y} \\
 v &= \frac{\partial \psi}{\partial x}
 \end{aligned}$$

A l'instant initial, l'interface est un cercle centré en $(50,75)$ de rayon 15 unités spatiales. Le champ de vitesse cisailé et le disque à l'instant initial sont représentés sur la **figure (2.7)**.

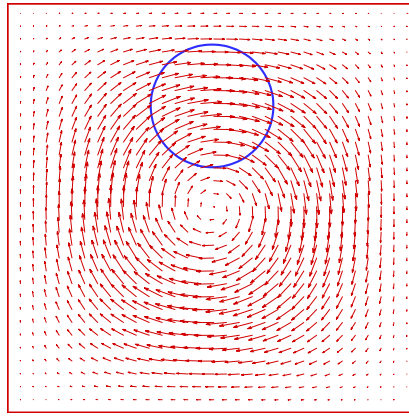


figure (2.7) : profil initial et champ de vitesse

Comme précédemment, la fonction **Level Set** est initialisée comme la fonction distance au disque à l'instant initial. Les simulations sont effectuées sur un maillages 128×128 , et nous avons adopté la même démarche que précédemment pour tester les schémas de discrétisation spatiale (on utilise toujours un **RK3** pour l'intégration temporelle, sauf pour le schéma de **B.C.G.** d'ordre 2). Dans la solution exacte présentée dans (**Rider & al, 1995**), on observe que le cercle initial se transforme en un long serpent qui s'affine au fur et à mesure du temps.

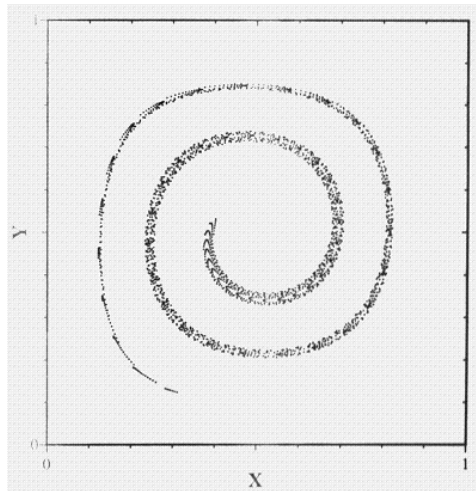


figure (2. 8) : Solution exacte présentée par (Rider & al, 1995)

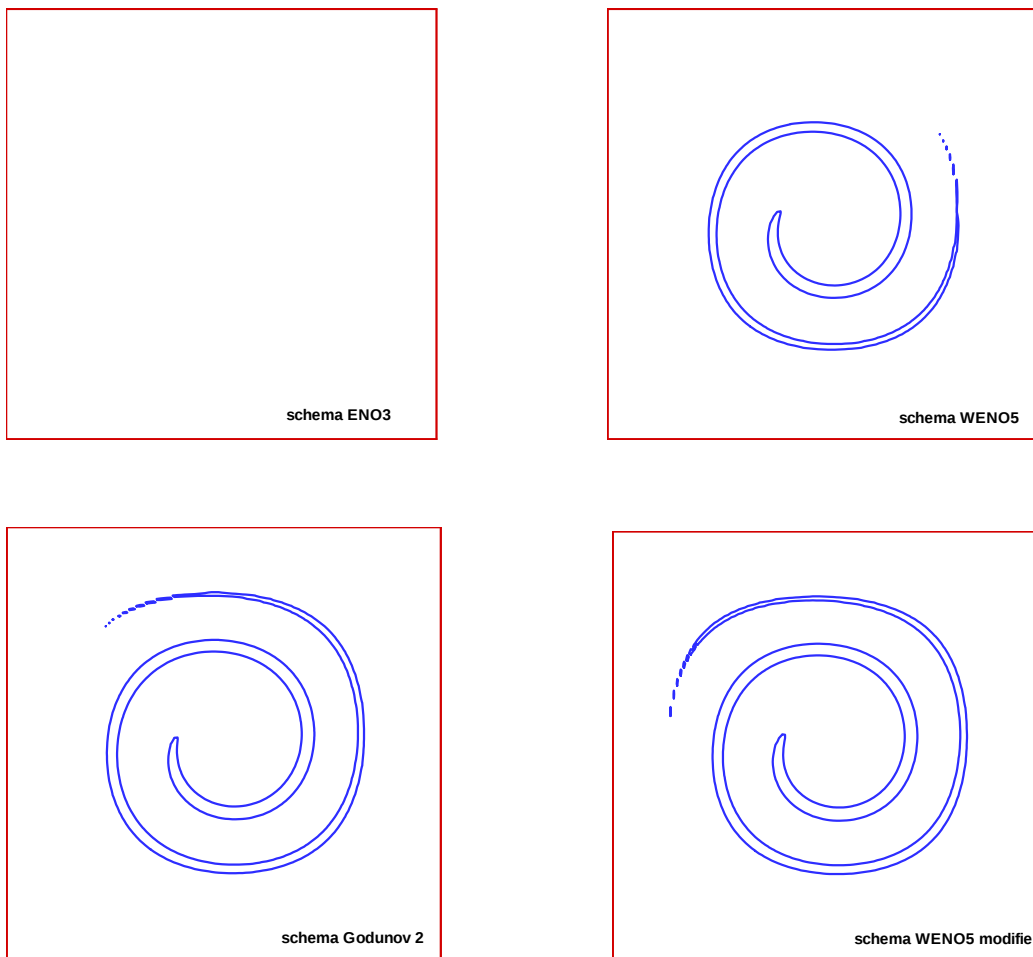


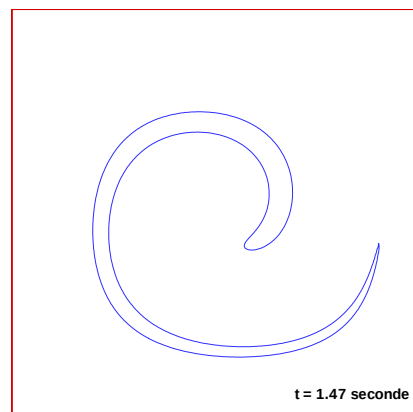
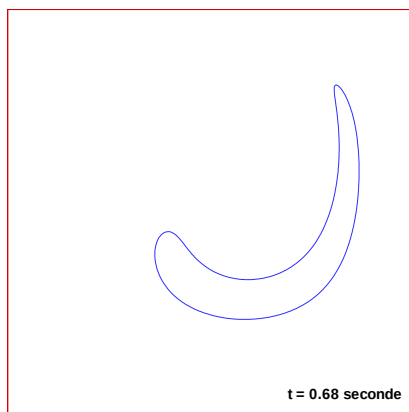
figure (2.9) : Solution finale 128x128 pour différents schémas

La **figure (2.9)** présente les résultats obtenus pour les quatre schémas au temps $t = 3$ unités temporelles. On observe ainsi que :

- le schéma **ENO 3** est de loin celui qui donne les plus mauvais résultats, puisque le serpentín est complètement perdu (de même la fente dans le cercle de **Zalezak** avait été dissipée).
- Le schéma de **B.C.G.** est beaucoup plus performant, avec une assez bonne résolution du filament. (mais les résultats étaient un peu décevants sur le cercle de **Zalezak**)
- Le schéma **WENO 5** « classique » conduit à des pertes de surface importantes sur le cas du serpentín (mais il donnait de très bon résultats sur le cercle de **Zalezak**).
- Le schéma **WENO 5** « modifié » donne des résultats très supérieurs au **WENO 5** « classique » sur le cas du serpentín (et des résultats comparables au **WENO 5** « classique » sur le cercle de **Zalezak**). Il montre donc une résolution supérieure pour la description de structures très fines, tout en conservant les propriétés de robustesse caractéristiques des schémas dédiés aux lois hyperboliques.

La solution obtenue sur la grille 128×128 est plus ou moins dégradée par rapport à la solution exacte suivant le schéma utilisé. Lorsque l'épaisseur du filament devient faible, les erreurs numériques dues à la sous-résolution se caractérisent par des pertes de surface. Le schéma **WENO 5** « modifié » conduit cependant à une solution largement plus précise que les résultats exposés dans (**Rider & al, 1995**) et (**Enright & al, 2002**).

Nous allons maintenant vérifier la convergence spatiale de nos méthodes numériques, afin de s'assurer que la solution de notre calcul converge vers la solution exacte présentée dans (**Rider & al, 1995**). Pour cela, nous utiliserons le schéma le plus précis (**WENO 5** « modifié ») sur un maillage 256×256 .



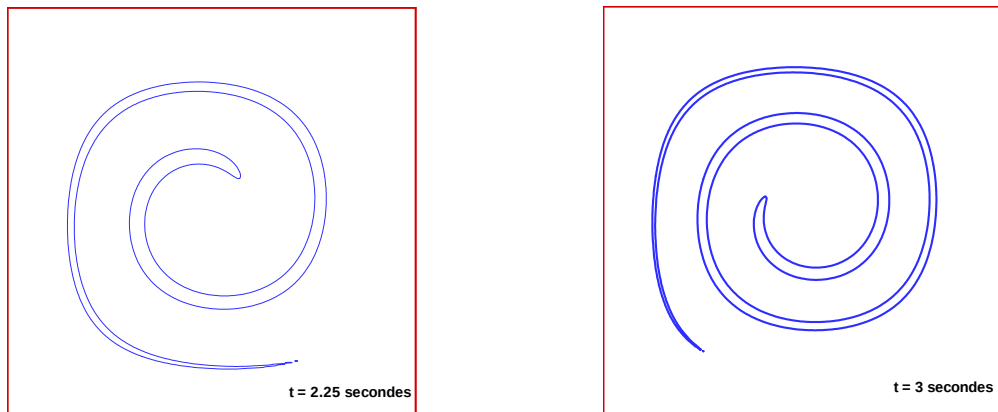


figure (2.10) : solution convergée à différents instants, 256x256, schéma WENO5 modifié

La solution obtenue sur la **figure (2.10)** avec un maillage 256x256 est conforme à la solution exacte présentée **figure (2.8)**.

Contrairement au cas de **Zalezak**, dans le cas du serpent le champ de vitesse est fortement cisailé. Un défaut de la méthode apparaît lorsque l'on visualise plusieurs lignes de niveau, on observe sur la **figure (2.11)** que ces lignes vont être resserrées dans certains endroits et étirées dans d'autres. Ce phénomène risque de dégrader la précision avec laquelle, on calculera les propriétés géométriques de l'interface, comme la normale et la courbure. Nous reviendrons par la suite sur ce comportement.

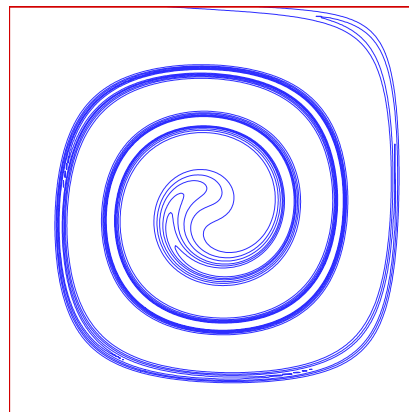


figure (2.11) : visualisation de différentes lignes de niveau

4.3 Comparaison des différentes intégrations temporelles

Dans la partie précédente, on a utilisé le schéma **Runge-Kutta** d'ordre 3 (à part pour le schéma **B.C.G.** espace + temps) pour la discrétisation temporelle de l'équation (2.5), car il est formellement plus précis que les autres. Néanmoins, sa grande précision est au prix

d'un temps de calcul beaucoup plus élevé, nous avons donc étudié l'influence du schéma temporel sur la précision de la solution et sur le temps de calcul. Nous avons testé les différentes intégrations en temps, combinées avec le schéma **WENO 5** « modifié ». Les résultats de cette étude sont résumés dans les deux tableaux ci-dessous.

Cas 1 : serpent (128x128)

Schéma temporel	% Pertes de masse	Temps CPU (sec)
Euler	<i>instable</i>	<i>X</i>
Adams-Bashforth	100%	10.5
RK2	5.08%	19.8
RK3	5.08%	29.0
B.C.G. (temporel)	4.05%	11.8

Cas 2 : cercle de zalezak (100x100)

Schéma spatial	% Pertes de masse	Temps CPU (sec)
Euler	<i>instable</i>	<i>X</i>
Adams-Bashforth	0.50%	11.2
RK2	0.02%	20.2
RK3	-0.02%	29.5
B.C.G. (temporel)	-0.20%	12.0

A la lecture de ces tableaux, on observe que :

- Le schéma d'**Euler** d'ordre 1 est beaucoup moins stable (nombre de *cfl* égal à 0.125 au lieu de 0.5 pour assurer la stabilité du calcul). Il n'est donc pas judicieux d'utiliser ce schéma.
- Le schéma d'**Adams-Bashforth** donne de bons résultats sur le cercle **Zalezak**, mais de très mauvais résultats sur le serpent. Il semble inadapté au suivi des structures d'interface fines.
- Le schéma **Runge-Kutta** d'ordre 2 donne des résultats équivalents au schéma **Runge-Kutta** d'ordre 3.
- Le schéma **Bell-Colella-Glaz (B.C.G)** d'ordre 2 donne des résultats comparables au **RK3**, mais il est beaucoup plus rapide qu'un **RK3**.

Le schéma d'**Euler** peut donner d'assez bons résultats si on l'utilise avec un pas de temps quatre fois plus petit, en revanche sur les cas étudiés les autres schémas ne sont pas sensibles à une diminution du pas de temps, à partir du moment où la condition *cfl* est respectée. On peut donc en déduire que nos calculs ont convergé, comme attendu, en temps.

4.4 Influence du schéma de discrétisation spatiale

Nous récapitulons les résultats obtenus sur les deux cas-tests étudiés dans les deux tableaux suivants. Les temps *CPU* sont ceux obtenus avec le schéma **B.C.G.** pour l'intégration en temps.

Cas 1 : serpent (128x128)

Schéma spatial	% Pertes de masse	Temps CPU (sec)	Respect des formes
ENO 3	100 %	6.92	X
Godunov	12.7 %	7.01	Bon
WENO 5	37.0%	9.39	Moyen
WENO 5 modifié	4.05%	11.8	Très bon

Cas 2 : cercle de zalezak (100x100)

Schéma spatial	% Pertes de masse	Temps CPU (sec)	Respect des formes
ENO3	9.23%	6.39	Mauvais
Godunov	-4.29%	7.08	Moyen
WENO 5	0.47%	9.50	Très bon
WENO 5 modifié	-0.2 %	12.0	Très bon

La combinaison du schéma **B.C.G.** d'ordre 2 pour l'intégration en temps et du schéma **WENO 5** « modifié » pour la discrétisation spatiale est donc la discrétisation qui offre la meilleure précision pour un temps de calcul moindre par rapport à l'utilisation d'un **RK3** (presque 3 fois moins). Nous adopterons donc cette combinaison pour la résolution numérique de l'équation (2.5) dans la suite de cette étude.

5. Algorithme de reinitialisation

5.1 La fonction distance algébrique

Comme on a pu le constater sur le cas du serpent, l'une des principales difficultés pour la simulation d'écoulements diphasiques incompressibles avec la méthode **Level Set** réside dans l'écartement ou le resserrement des lignes de niveau lorsque l'on transporte la fonction ϕ . En effet le champ de vitesse étant généralement fortement cisailé dans les applications que l'on veut simuler, la méthode devient alors trop imprécise pour être utilisable telle quelle.

La notion de distance algébrique à l'interface est alors essentielle, le principe est de transporter la ligne de niveau zéro, à la vitesse dictée par la physique du problème, puis de recalculer les autres lignes de niveau de manière à ce qu'elle respectent la propriété de distance algébrique à l'interface, c'est-à-dire :

$$|\nabla \phi| = 1 \quad (2.19)$$

Numériquement, on voit bien que la précision sur la fonction ϕ sera optimale si cette propriété est respectée, car les gradients de ϕ seront toujours de l'ordre de 1. De plus les lignes de niveau seront équidistantes ce qui, on le verra par la suite, facilitera le couplage avec la physique. Enfin la position de l'interface à l'intérieur d'une maille sera connue avec une meilleure précision, puisque les valeurs aux nœuds du maillage nous donneront la distance à laquelle l'interface se trouve.

5.2 Algorithme de réinitialisation

(*Sussman & al, 1994*) ont mis au point un algorithme de réinitialisation de la fonction ϕ . Le principe de cet algorithme est de corriger de façon itérative la position des lignes de niveau par rapport à la ligne de niveau zéro, de manière à ce qu'elle respecte la propriété de distance algébrique. L'algorithme se présente sous la forme d'une équation aux dérivées partielles instationnaire que l'on doit résoudre à la fin de chaque pas de temps, jusqu'à ce que l'on aboutisse à un état stationnaire qui correspondra à une réinitialisation complète de la fonction ϕ dans l'ensemble du domaine. Cette équation s'écrit :

$$\frac{\partial d}{\partial \tau} = \text{sign}(\phi)(1 - |\nabla d|) \quad (2.20)$$

où τ est un temps fictif correspondant au temps de réinitialisation de la fonction ϕ . Cette équation est résolue avec la condition initiale suivante :

$$d(\mathbf{x}, t, \tau = 0) = \phi(\mathbf{x}, t)$$

La fonction « *sign* » est approximée numériquement par une fonction lissée :

$$\text{sign}_{dx}(\phi) = \begin{cases} -1 & \phi < -dx \\ \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + dx^2}} & |\phi| \leq dx \\ 1 & \phi > dx \end{cases} \quad (2.21)$$

Cette équation, qui ne traduit aucun principe physique, peut être utilisée, car d'un point de vue formel, elle ne modifie pas la position de la ligne de niveau zéro, qui, conformément à l'équation (2.2), est la seule ligne de niveau dont on connaît la vitesse de propagation. Les autres lignes peuvent alors être convectées de manière indépendante, en particulier en imposant de respecter cette propriété de distance algébrique à l'interface.

On peut mettre l'équation (2.20) sous une forme particulière pour faire apparaître une vitesse de propagation des courbes caractéristiques :

$$\frac{\partial d}{\partial \tau} + \mathbf{w} \cdot \nabla d = \text{sign}(\phi) \quad (2.22)$$

avec

$$\mathbf{w} = \text{sign}(\phi) \frac{\nabla d}{|\nabla d|} \quad (2.23)$$

Sous sa nouvelle forme, on reconnaît aisément une équation hyperbolique non-linéaire (*Sussman & al, 1994*), qui ressemble beaucoup à l'équation (2.5). On peut donc utiliser cette nouvelle forme pour adapter les méthodes de résolution de l'équation (2.5) à l'équation (2.22). On remarque également que les courbes caractéristiques sont orientées dans la direction normale à l'interface, mais vers l'extérieur. Ceci signifie que le processus de réinitialisation se propagera des points les plus proches de l'interface vers les points les plus éloignés. Or on sait que notre fonction ϕ doit vérifier la propriété de fonction distance essentiellement près de l'interface pour que le calcul de la courbure soit plus précis. Ainsi nous verrons qu'en pratique seulement 2 itérations de l'algorithme, à chaque pas de temps physique, sont suffisantes pour réinitialiser correctement ϕ , à condition naturellement que ϕ soit une fonction distance algébrique au début du pas de temps considéré.

5.3 Résolution de l'équation de réinitialisation

Cette équation hyperbolique doit également être résolue avec des méthodes spécifiques. Nous utiliserons donc le schéma **WENO 5** et le schéma **RK2** pour les dérivées spatiales et les dérivées temporelles. Les relations (2.22) et (2.23) nous permettent de connaître le sens de propagation des courbes caractéristiques, on peut ainsi appliquer une procédure « **upwind** » en se référant au signe des composantes de vitesse du vecteur $\mathbf{w}$, comme on l'a déjà fait pour la résolution de l'équation (2.5). D'autres méthodes plus complexes peuvent être utilisées pour décentrer le schéma (*Fedkiw & al, 1999*). Néanmoins, après les avoir testées, nous n'avons pas constaté d'améliorations par rapport à la méthode « **upwind** » exposée ci-dessus.

L'algorithme de réinitialisation a été testé sur le cercle de *Zalezak* et sur le serpent. Nous allons donc exposer les résultats obtenus sur ces cas-tests, en utilisant les schémas numériques qui se sont avérés les plus adaptés, à savoir le **WENO 5** « modifié » pour la discrétisation spatiale et le schéma **B.C.G.** pour l'intégration temporelle de (2.5), et les schémas spécifiés ci-dessus pour résoudre (2.20). Nous allons cependant introduire un test préliminaire qui consiste à construire une fonction distance algébrique à partir d'une condition initiale discontinue sur ϕ .

Construction d'une fonction distance

On réalise un premier test pour vérifier le bon fonctionnement de l'algorithme de réinitialisation. Il s'agit de reconstruire une fonction distance à partir d'une forme d'interface circulaire, mais avec une fonction ϕ discontinue à travers l'interface, à savoir $\phi=1$ à l'intérieur de notre interface, $\phi=-1$ à l'extérieur. Dans ce test, l'interface ne doit pas bouger, mais les lignes de niveau doivent se réorganiser au fur et à mesure des itérations de la résolution de l'équation (2.20). Les conditions du test sont les suivantes :

$$l_x = 100$$

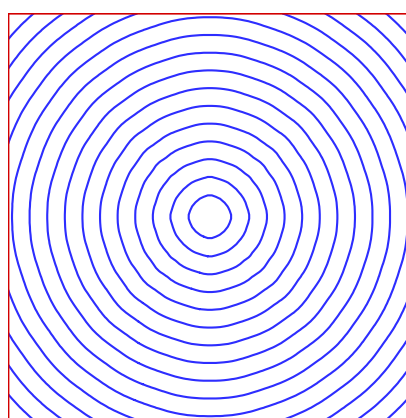
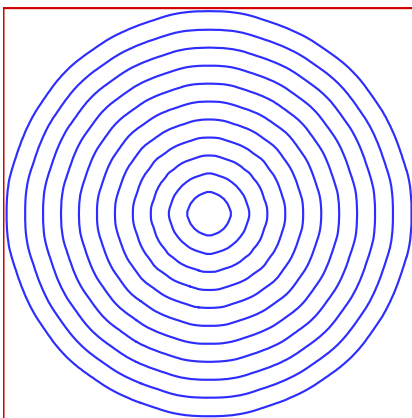
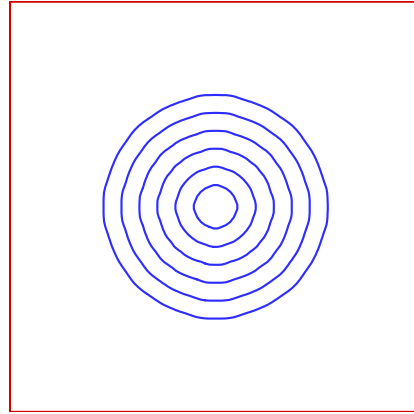
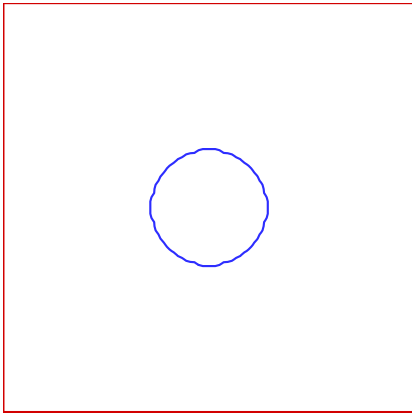
$$l_y = 100$$

$$x \in [0;100]$$

$$y \in [0;100]$$

$$u = 0$$

$$v = 0$$



figures (2.12) : Calcul d'une fonction distance à partir d'un champs d'interface discontinu

Le cercle est centré en $(50,50)$, son rayon vaut 15 . Le maillage comporte 100×100 nœuds. Une première visualisation des lignes de niveau suivant le plan (O,x,y) est proposée sur la **figure (2.12)**.

On peut également représenter $\phi(x,y)$ sur un graphique à 3 dimensions, afin de mieux visualiser l'effet de la réinitialisation sur l'ensemble des lignes de niveau :

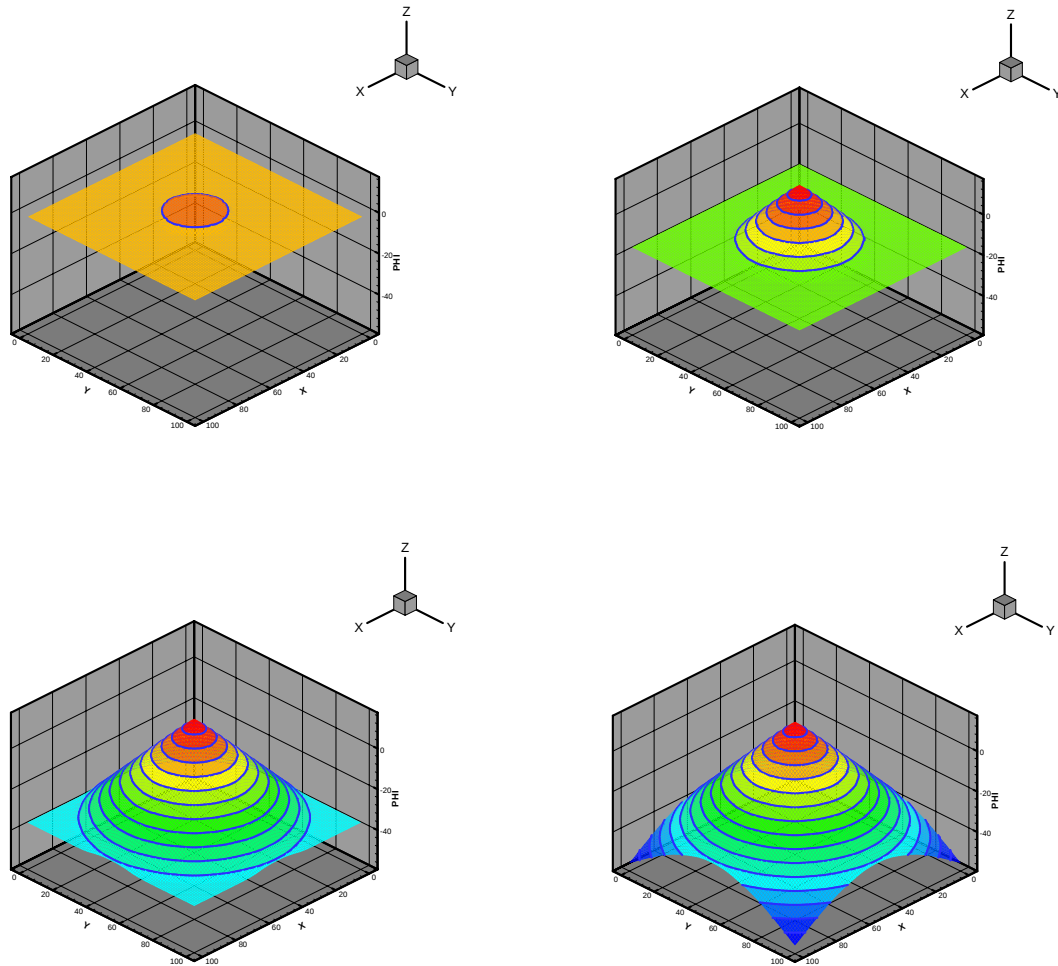


figure (2.13) : Visualisation 3D de la construction d'une fonction distance à partir d'un champs d'interface discontinu

Pour les deux représentations graphiques, l'intervalle de temps entre chaque zone, sur le temps fictif τ , est 15.15 unités temporelles. L'état stationnaire dans tout le domaine est atteint au bout de 60 itérations soit un temps fictif de 60.6 unités temporelles. Au terme de la réinitialisation, les résultats obtenus sont très satisfaisants ; on observe que notre algorithme converge bien vers un état stationnaire, et l'isotropie des lignes de niveau n'est pas altérée par la discrétisation sur une grille cartésienne. Cependant des pertes de surface supplémentaires sur le disque initial, sont induites par ce processus de réinitialisation. Dans le cas ci-dessus elles sont de l'ordre de 3% après réinitialisation complète de la

fonction distance algébrique. Cela signifie que la résolution de l'équation (2.20) peut entraîner un léger déplacement de la courbe de niveau 0.

Application de la réinitialisation au cercle de Zalezak

La solution du cercle de **Zalezak** avec l'algorithme de réinitialisation après une révolution est tracée et comparée avec le profil initial sur la **figure (2.14)**. Si l'on compare cette solution à celle obtenue **figure (2.4)**, on s'aperçoit que le résultat est moins satisfaisant puisque, même si la forme générale reste assez bonne, la fente a été plus lissée que sur la solution **figure (2.4)**. Les pertes de masse sont du même ordre de grandeur puisqu'elles sont estimées à -0.23% au lieu de -0.20% . Cependant le résultat reste plus satisfaisant que celui présenté par (**Enright & al, 2002**) pour les tests qu'ils ont effectués avec un schéma **WENO 5** « classique ».

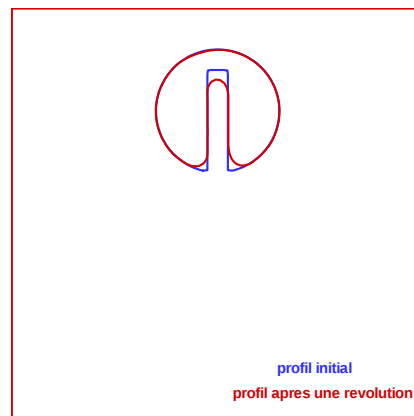


figure (2.14) : profils d'interface avec réinitialisation de l'interface, 100x100

La convergence en espace de l'algorithme a été testée avec succès sur un maillage 200x200 :

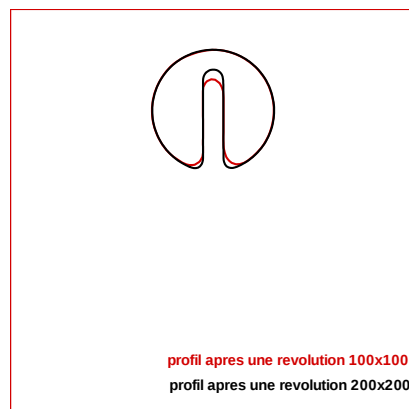


figure (2.15) : Comparaison des profils d'interface avec réinitialisation de l'interface 100x100 et 200x200

Sur le maillage 200×200 , les pertes de surface sont légèrement moins importantes, puisqu'elles sont estimées à 0.1% .

Application de la réinitialisation au serpent

On a vu précédemment que lorsque la fonction ϕ était convectée par un champ de vitesse fortement cisailé, les lignes de niveau pouvaient devenir très resserrées ou très étirées, ce qui a motivé la mise au point d'un algorithme de réinitialisation de la fonction distance. Dans le cas du serpent le champ de vitesse est fortement cisailé, c'est donc le cas idéal pour vérifier l'efficacité de l'équation (2.20).

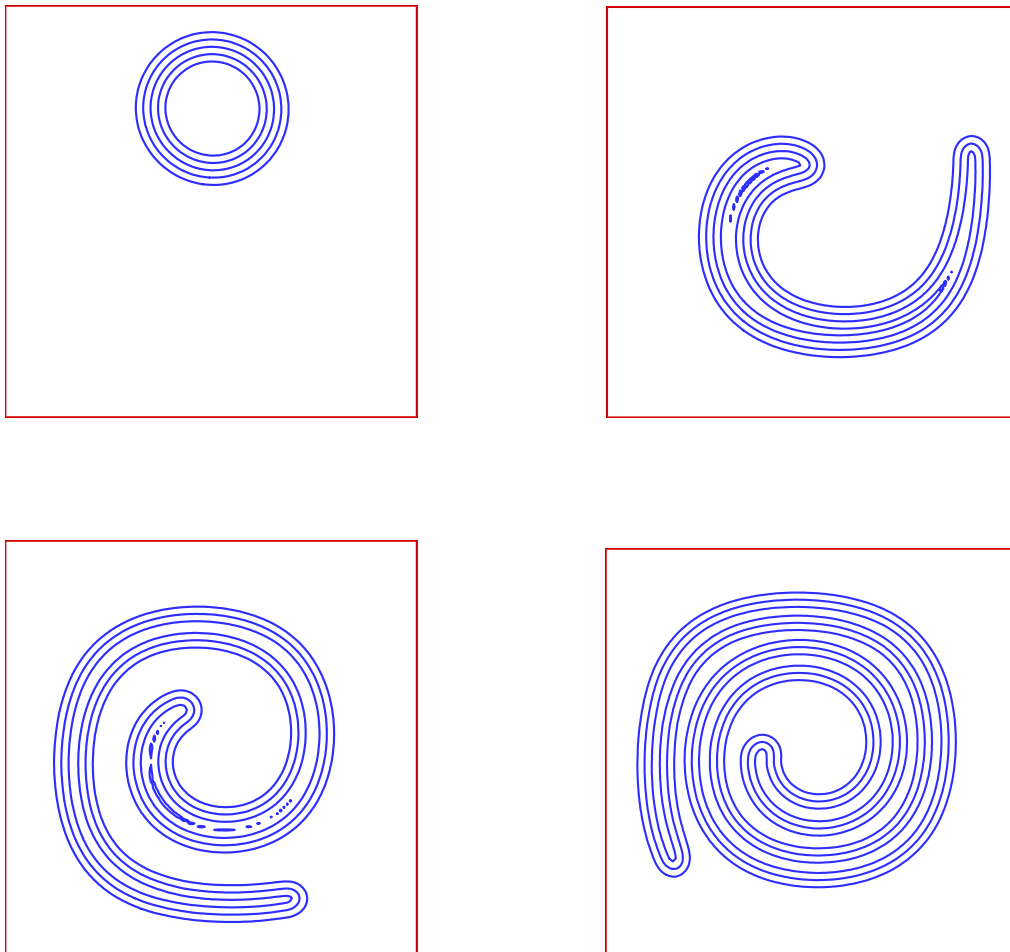


figure (2.16) : évolution des lignes de niveau en utilisant l'algorithme de réinitialisation

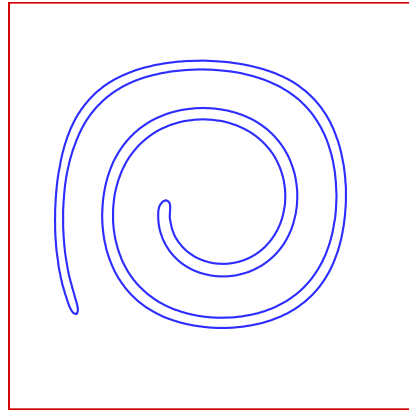


figure (2.17) : solution finale avec réinitialisation (128x128)

Sur la **figure (2.16)** On a tracé 5 lignes de niveau et on a suivi leur évolution au cours du temps. L'intervalle de temps entre chaque zone est de une seconde. On observe sur les figures que l'espacement entre les lignes de niveau ne varient pas en espace (l'intervalle est constant le long des lignes de niveau), ni en temps. L'algorithme de réinitialisation permet donc de prévenir l'étalement ou le resserrement des lignes de niveau.

Si on s'intéresse maintenant aux propriétés de résolution de la méthode, on est confronté à un phénomène un peu surprenant, puisque la longueur du panache du serpentin correspond à peu près à la solution exacte, en ce sens l'algorithme de réinitialisation améliore les propriétés de résolution de notre méthode de suivi d'interface. En revanche l'épaisseur du panache est clairement surestimée par rapport à la solution exacte. On a donc un problème de « gains de surface ». Dans le cas présenté sur la **figure (2.17)**, sur un maillage (128x128), les « gains de surface » sont estimés à 16%. Lorsque l'on raffine le maillage (256x256), le résultat converge vers la solution exacte (**figure 2.18**), mais avec à nouveau des pertes de surface estimées à 2.7%.

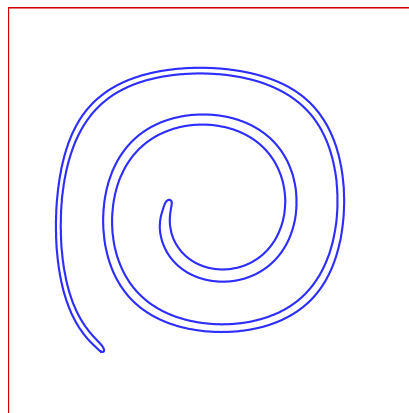


figure (2.18) : solution finale avec réinitialisation (256x256)

Conclusion concernant la réinitialisation de la fonction distance

Il ressort de cette étude que l'algorithme est performant pour recalculer une fonction distance, mais qu'il n'aide pas à la conservation de la quantité de surface. Ainsi, bien que la fonction ϕ soit résolue dans des conditions de discrétisation optimales, il apparaît que des erreurs numériques assez importantes peuvent altérer la qualité de la solution (diffusion des angles). Ceci vient en partie du lissage de la fonction signe de ϕ , qui rend la localisation de l'interface diffuse pendant la réinitialisation.

Dans le cas du cercle de **Zalezak**, qui était très bien résolu par la méthode initiale, l'algorithme dégrade légèrement la solution même si il n'introduit pas de pertes de surface supplémentaires. Dans le cas du serpent, des gains de surface assez importants surviennent avec le maillage 128×128 . Cependant, sur ce cas on observe une meilleure prédiction de la longueur du filament en utilisant le schéma **WENO 5** « modifié », la méthode devient alors intéressante pour décrire des structures fines, même si l'on sait qu'un épaississement artificiel peut survenir. On peut considérer ceci comme un réel progrès par rapport à la méthode **Level Set** utilisé dans (**Enright & al, 2002**) puisqu'en utilisant le schéma **WENO 5** « classique » pour l'équation (2.5) et l'équation (2.20), les pertes de quantité de surface sont très importantes (environ 35%). On peut voir sur la **figure (2.19)** que la résolution du filament est assez mauvaise.

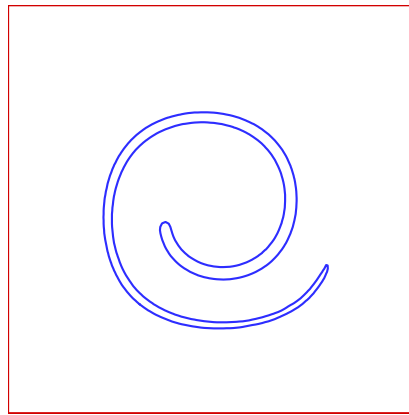


figure (2.19) : solution finale avec réinitialisation (128x128) et schéma WENO5 classique

Le problème de non-conservation de la quantité de surface reste entier, même si les propriétés de résolution ont été largement améliorées grâce au schéma **WENO 5** « modifié ». De plus, on a observé que la méthode converge correctement en temps et en espace vers la solution exacte. Les « gains de surface » calculés sur ce cas sont importants, mais il faut modérer ce résultat car le filament décrit est très long, donc un faible épaississement sur une longueur importante peut conduire à des gains de surface assez importants. Dans les simulations d'écoulements à deux phases que nous effectuerons, il est peu probable que l'on rencontre des structures filamenteuses aussi longues.

5.4. Amélioration de la conservation de la quantité de surface

L'algorithme de réinitialisation présente de nombreux avantages, c'est une procédure très robuste, qui permet de calculer avec précision les caractéristiques géométriques de l'interface.

Cependant, les cas-test étudiés nous ont permis de mettre en évidence que l'utilisation de cet algorithme pouvait dégrader les propriétés de conservation de masse de la méthode. Plusieurs auteurs ont travaillé sur ce problème afin d'améliorer la résolution de la fonction ϕ .

Algorithme de réinitialisation avec contrainte sur la conservation de la surface

Dans (**Sussman & al , 1998**) modifient l'algorithme de réinitialisation de manière à améliorer la conservation de la quantité de surface. L'idée de base est d'ajouter à l'équation (2.20), la contrainte suivante, qui traduit la conservation de la surface par rapport au processus de réinitialisation.

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\int_{\Omega_{ij}} H(d) \right) = 0 \quad \text{avec} \quad H(d) = 2\text{sign}_{dx}(d) - 1$$

Où Ω_{ij} est une cellule de calcul. L'algorithme de réinitialisation devient alors :

$$\frac{\partial d}{\partial \tau} = \text{sign}(\phi)(1 - |\nabla d|) + \lambda_{ij} f(\phi) = L(\phi, d) + \lambda_{ij} f(\phi) \quad (2.24)$$

On peut alors déterminer λ_{ij} :

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\int_{\Omega_{ij}} H(d) \right) = \int_{\Omega_{ij}} H'(d) \frac{\partial d}{\partial \tau} \approx \int_{\Omega_{ij}} H'(\phi) \frac{\partial d}{\partial \tau} = \int_{\Omega_{ij}} H'(\phi) (L(\phi, d) + \lambda_{ij} f(\phi)) = 0$$

d'où :

$$\lambda_{ij} = \frac{- \int_{\Omega_{ij}} H'(\phi) L(\phi, d)}{\int_{\Omega_{ij}} H'(\phi) f(\phi)} \quad \text{avec} \quad f(\phi) = H'(\phi) |\nabla \phi| \quad (2.25)$$

La fonction $f(\phi)$ choisie, permet de localiser les effets de la contrainte au voisinage de l'interface.

Selon (**Sussman & al, 1998**), cette procédure améliore nettement les résultats obtenus. Cependant cette procédure a été testée avec des schémas **ENO 3** pour la résolution de (2.5) et de (2.20). Si l'on teste cette procédure avec le schéma **WENO 5** « modifié » pour résoudre (2.5) et le schéma **WENO 5** « classique » pour résoudre (2.20), les résultats sont beaucoup moins concluants, puisque les gains de masse valent à peu près à 25% sur le cas du serpent au lieu des 16% trouvés précédemment, en revanche sur le cas du cercle de

Zalezak cette procédure permet d'améliorer légèrement la description de la fente. Dans la suite de ce travail, nous avons choisi de ne pas utiliser cette contrainte, car à notre avis elle n'apporte pas d'améliorations indiscutables sur le problème de conservation.

Algorithme de conservation de la quantité de surface totale

(**Chang & al, 1996**) proposent un algorithme supplémentaire, dont le but est de rajouter ou d'enlever la quantité de surface manquante ou en excès, suivant le signe du défaut de masse.

Cette méthode se compose de quatre étapes. Tout d'abord l'interface est convectée normalement, ensuite la réinitialisation est appliquée de manière à calculer une fonction distance, puis le défaut de quantité de surface est calculé, et enfin un algorithme itératif est appliqué pour enlever ou rajouter la quantité surface perdue ou en excès. Cette dernière étape nécessite la résolution de l'équation suivante :

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + (A_0 - A(t))(-P + \kappa(\phi))|\nabla \phi| = 0 \quad (2.26)$$

La quantité $(A_0 - A(t))$ est l'estimation du défaut de masse, P est une constante positive, τ est un temps fictif de réinitialisation. Cette équation devient stationnaire lorsque le défaut de masse vaut 0, donc elle converge vers une solution sans perte de masse.

Même si nous n'avons pas testé cet algorithme, on peut s'interroger sur sa pertinence ; en effet il n'est pas du tout évident qu'un algorithme qui assure la conservation totale de la quantité de surface puisse réellement améliorer les propriétés de résolution locale de la méthode **Level Set**. De plus la courbure apparaît dans l'équation (2.26), pour que les corrections soient introduites de façon préférentielle dans les zones où la courbure est plus forte. Or les structures d'interface très fines n'ont pas forcément une courbure plus importante que d'autres zones. Enfin, nous n'avons trouvé aucune publication qui montre les résultats de cet algorithme sur le cercle de **Zalezak** ou sur le serpent, pour que l'on puisse juger sa pertinence.

Pour les raisons exposées ci-dessus, cet algorithme ne nous semble pas non plus un candidat intéressant au problème de la non-conservation de la quantité de surface.

Couplage méthode Level Set et méthode Volume-Of-Fluid (CLSVOF)

(**Sussman & al, 2000**) couplent la méthode **Level Set** avec la méthode **V.O.F.** et obtiennent un algorithme plus complexe, mais qui semble plus prometteur que les deux précédents. Le but de leurs travaux est de combiner les bonnes propriétés géométriques de la méthode **Level Set** (calcul de la normale et de la courbure à l'interface immédiat), à une méthode qui conserve la quantité de surface implicitement. Une procédure différente est appliquée pour recalculer la fonction distance à l'interface afin d'éviter les mouvements d'interface pendant la réinitialisation, cette procédure n'est cependant intéressante que dans le cadre du couplage avec une méthode **V.O.F.**.

Les capacités de l'algorithme ont été testées sur le cercle de **Zalezak**, et de très bons résultats ont été obtenus sur un maillage (100x100). Les pertes ou gains de masse sont tout à fait négligeables conformément aux méthodes **V.O.F.** traditionnelles. L'habileté de la méthode à décrire des structures d'interface fines comme le serpent n'a

malheureusement pas été testée par (*Sussman & al, 2000*). Cette méthode reste cependant une perspective sérieuse de développement de ce travail.

Couplage méthode Level Set et méthode Lagrangienne (Particle Level Set)

(*Enright & al, 2002*) partent du constat que les méthodes *lagrangiennes* sont de loin les plus précises (*Rider & al, 1995*), car elles bénéficient d'une résolution de sous-maille. Ils développent donc une méthode qui permet de combiner la finesse de résolution des méthodes *lagrangiennes*, tout en conservant la robustesse et la précision de la méthode *Level Set* pour le calcul des propriétés géométriques de l'interface (courbure, normale). L'idée de base est simple, puisqu'il s'agit de corriger les erreurs numériques induites sur la position de la ligne de niveau zéro, par la discrétisation de l'équation (2.5) et de l'équation (2.20), grâce à un solveur *lagrangien*, qui est naturellement plus précis.

Les résultats présentés par (*Enright & al, 2002*) montrent que l'algorithme est d'une grande précision à la fois sur le cercle de *Zalezak* et sur le serpent. Dans ces conditions, les défauts de quantité de surface deviennent négligeables.

Cette méthode semble cependant un peu plus difficile à mettre en œuvre et à gérer sur des simulations d'écoulements turbulents *3D* effectuées sur des machines parallèles.

En effet, l'un des inconvénients que l'on rencontre est d'optimiser la distribution des particules dans les zones où il est nécessaire d'avoir une résolution très fine, afin d'alléger les contraintes en temps de calcul et en espace mémoire.

Conclusion sur le problème des défauts de masse

On constate clairement à la suite de cette revue bibliographique des études sur la conservation de la masse que le problème reste particulièrement difficile à résoudre. Parmi les différentes méthodes numériques développées par différents auteurs, le couplage de la méthode *Level Set* avec la méthode *V.O.F.* ou avec une méthode *lagrangienne* peuvent être une réponse à ce problème. Il semble cependant que le couplage avec une méthode *lagrangienne* soit rapidement prohibitif en temps de calcul sur des configurations *3D*. Le couplage avec une méthode *V.O.F.* reste également à être étudié plus précisément afin de déterminer sa pertinence. Dans ce travail de thèse, un progrès important a été obtenu par l'utilisation du schéma *WENO 5* « modifié » d'*Estivalezes*, même si la conservation de la masse n'est pas garantie. Nous avons donc décidé de ne pas utiliser de méthodes de correction des pertes de masse, en revanche nous avons toujours quantifié les défauts de masse dans nos simulations afin de nous assurer qu'elles sont négligeables et qu'elles n'altèrent pas la solution calculée.

Chapitre 3

Résolution numérique des équations de Navier Stokes incompressibles

1. Formulation du problème à masse volumique constante

1.1 Généralités

Les mouvements de fluides dont la vitesse est petite devant la vitesse du son ($v < 0.15c$) sont généralement considérés incompressibles, c'est-à-dire que la masse volumique du fluide est constante dans tout le domaine de calcul et dans le temps. Des approches faiblement compressibles peuvent également être utilisées, lorsque l'on étudie des cas où les variations de masse volumique ne sont pas négligeables, si elles ne sont pas induites par les forces aérodynamiques de l'écoulement. C'est le cas par exemple de certains écoulements réactifs dans lesquels les variations de masse volumique peuvent être générées par des gradients d'espèces ou des gradients thermiques importants, alors que les effets de compressibilité aérodynamique sont négligeables.

Ainsi, l'approche incompressible est très souvent utilisée en mécanique des fluides, si l'écoulement étudié le justifie, car elle permet une intégration numérique plus rapide des équations de **Navier-Stokes** (les ondes acoustiques n'étant pas résolues le critère de stabilité sur le pas de temps est beaucoup moins restrictif). Dans le cadre de l'étude des écoulements liquide-gaz, cette approche est toujours justifiée pour le liquide, en revanche il existe des systèmes d'atomisation pour lesquels les effets de compressibilité du gaz ne peuvent être négligés en raison des fortes vitesses mises en jeu. Néanmoins nous n'étudierons pas ici ces systèmes, car le développement de méthodes permettant une approche compressible pour le gaz et une approche incompressible pour le liquide dépasse le cadre de cette thèse.

Les équations de **Navier-Stokes** instationnaires incompressibles s'écrivent :

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} + \frac{\nabla p}{\rho} = \nu \Delta \mathbf{V} + \mathbf{g} \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (3.2)$$

L'équation (3.1) traduit la conservation de la quantité de mouvement dans le milieu fluide, et l'équation (3.2) la conservation de la masse. Différentes procédures ont été testées pour l'intégration numérique de ces équations, voir (*Peyret & Taylor, 1983*), (*Bell & al, 1989*), (*Kim & al, 1985*), (*Minion & al, 1997*) ; nous avons choisi de développer une méthode de projection. La méthode présente l'avantage d'être simple à appréhender et à généraliser en **3D**, tout en donnant de bons résultats.

1.2 Méthode de projection d'ordre 1

Comme il est impossible de calculer de façon complètement explicite un champ à divergence nulle, nous allons calculer implicitement la pression qui apparaît dans l'équation de l'impulsion, pour nous assurer que notre champ de vitesse respecte à la fois la conservation de la quantité de mouvement et de la masse. La pression calculée sera alors une pression dynamique, découplée de la pression thermodynamique du fluide, qui sera elle supposée constante en temps et en espace. En utilisant une telle approche, on ne peut éventuellement modifier la pression thermodynamique d'un gaz que par l'intermédiaire de sa masse volumique.

A partir de ces hypothèses, une discrétisation temporelle permet d'écrire le système ainsi :

$$\frac{\mathbf{V}^{n+1} - \mathbf{V}^n}{\Delta t} + (\mathbf{V}^n \cdot \nabla) \mathbf{V}^n + \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho} = \nu \Delta \mathbf{V}^n \quad (3.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V}^{n+1} = 0 \quad (3.4)$$

On fait alors apparaître une vitesse intermédiaire calculée avec les termes explicites de l'équation (3.3), mais qui ne contient pas la pression.

$$\mathbf{V}^* = \mathbf{V}^n - \Delta t ((\mathbf{V}^n \cdot \nabla) \mathbf{V}^n - \nu \Delta \mathbf{V}^n) \quad (3.5)$$

D'après (3.3) et (3.5), cette vitesse intermédiaire qui ne respecte pas la condition de divergence nulle, peut également s'exprimer ainsi :

$$\mathbf{V}^* = \mathbf{V}^{n+1} + \Delta t \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho} \quad (3.6)$$

En appliquant (3.4) dans (3.6), on obtient une équation de **Poisson** pour la pression :

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla p^{n+1}}{\rho} \right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{V}^*}{\Delta t} \quad (3.7)$$

Connaissant alors la pression, on en déduit un champ de vitesse à divergence nulle grâce à l'équation (3.6).

On utilise souvent les méthodes de projection sur des maillages de type **MAC** (**Marker And Cell**), il s'agit en fait de maillages décalés, c'est-à-dire que les inconnues du problème ne sont pas toutes calculées sur la même grille de calcul. Les grandeurs scalaires telles que la pression, la température etc... seront repérées par l'indice (i,j) , tandis que les composantes des vecteurs seront calculés sur une grille décalée d'une demi-maille dans la direction de la composante considérée.

Les développements qui suivent sont écrits pour les équations bidimensionnelles pour simplifier les notations, la généralisation au cas **3D** ne pose pas de problème particulier.

Dans le cas d'un écoulement incompressible bidimensionnel, on aura donc à calculer les grandeurs suivantes : p_{ij} , $u_{i+1/2j}$, $v_{ij+1/2}$. La discrétisation en temps et en espace s'écrit alors :

$$u_{i+\frac{1}{2}j}^* = u_{i+\frac{1}{2}j}^n - \Delta t \left(u_{i+\frac{1}{2}j}^n \frac{\partial u^n}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2}j} + v_{i+\frac{1}{2}j}^n \frac{\partial u^n}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2}j} - v \left(\frac{\partial^2 u^n}{\partial x^2} \Big|_{i+\frac{1}{2}j} + \frac{\partial^2 u^n}{\partial y^2} \Big|_{i+\frac{1}{2}j} \right) \right) \quad (3.8)$$

$$v_{ij+\frac{1}{2}}^* = v_{ij+\frac{1}{2}}^n - \Delta t \left(u_{ij+\frac{1}{2}}^n \frac{\partial v^n}{\partial x} \Big|_{ij+\frac{1}{2}} + v_{ij+\frac{1}{2}}^n \frac{\partial v^n}{\partial y} \Big|_{ij+\frac{1}{2}} - v \left(\frac{\partial^2 u^n}{\partial x^2} \Big|_{ij+\frac{1}{2}} + \frac{\partial^2 v^n}{\partial y^2} \Big|_{ij+\frac{1}{2}} \right) \right) \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial^2 p^{n+1}}{\partial x^2} \Big|_{ij} + \frac{\partial^2 p^{n+1}}{\partial y^2} \Big|_{ij} = \frac{\rho}{\Delta t} \left(\frac{\partial u^*}{\partial x} \Big|_{ij} + \frac{\partial v^*}{\partial y} \Big|_{ij} \right) \quad (3.10)$$

$$u_{i+\frac{1}{2}j}^{n+1} = u_{i+\frac{1}{2}j}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2}j} \quad (3.11)$$

$$v_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1} = v_{ij+\frac{1}{2}}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \Big|_{ij+\frac{1}{2}} \quad (3.12)$$

1.3 Discrétisation spatiale de la méthode de projection

Habituellement, les méthodes de projection sur maillage décalé utilise des schémas de différences finies centrés d'ordre 2 pour la discrétisation des dérivées spatiales. C'est ce que nous ferons, sauf pour les termes convectifs que nous discrétiserons avec des schémas **WENO**, car ils offrent un bon compromis stabilité/précision.

Nous rappelons ici les formulations utilisées pour les schémas centrés d'ordre 2 avec une variable f_{ij} quelconque.

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{ij} = \frac{f_{i+\frac{1}{2},j} - f_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2\Delta x}$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{ij}}{\Delta x}$$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{ij} = \frac{f_{i+1,j} - 2f_{ij} + f_{i-1,j}}{\Delta x^2}$$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{f_{i+\frac{3}{2},j} - 2f_{i+\frac{1}{2},j} + f_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x^2}$$

La généralisation aux dérivées dans les autres directions est immédiate. La résolution des équations sous forme explicite ne pose aucun problème, en revanche nous allons voir que la discrétisation de l'équation de Poisson pour la pression va nous obliger à résoudre un système linéaire. On notera :

$$b_{ij} = \frac{\rho}{\Delta t} \left(\left. \frac{\partial u^*}{\partial x} \right|_{ij} + \left. \frac{\partial v^*}{\partial y} \right|_{ij} \right)$$

$$\left. \frac{\partial^2 p^{n+1}}{\partial x^2} \right|_{ij} + \left. \frac{\partial^2 p^{n+1}}{\partial y^2} \right|_{ij} = b_{ij}$$

$$\frac{1}{\Delta x^2} (p_{i+1,j}^{n+1} + p_{i-1,j}^{n+1} + p_{ij+1}^{n+1} + p_{ij-1}^{n+1} - 4p_{ij}^{n+1}) = b_{ij} \quad (3.13)$$

Le système linéaire correspondant est un système dont la matrice est pentadiagonale symétrique, définie positive. Les méthodes directes (factorisation de **Cholesky**, par exemple) sont très coûteuses en temps *CPU*, lorsque l'on souhaite résoudre des systèmes de grande dimension. On utilise donc des méthodes itératives parmi lesquelles on peut citer, les méthodes de gradient conjugué préconditionné, les méthodes multigrille, ou une combinaison des deux suivant la nature du problème que l'on souhaite étudier. Ces méthodes sont toutes aussi précises car la précision souhaitée est fixée par l'utilisateur, mais des différences très importantes en temps de calcul peuvent apparaître suivant la méthode utilisée et les coefficients de la matrice. L'optimisation du temps de calcul de la méthode de résolution est d'autant plus importante que c'est en général le sous-programme dans lequel le code passe le plus de temps. Une étude plus détaillée de ces méthodes a été réalisée au **chapitre 4**.

1.4 Critère de stabilité numérique sur le pas de temps

Le critère de stabilité sur le pas de temps est dicté par les termes traités de façon explicite, à savoir la convection, la viscosité et la gravité.

Nous avons utilisé avec succès le critère de stabilité numérique proposé par (*Kang & al, 2000*) à savoir :

$$\begin{aligned} Ccfl &= \frac{1}{\frac{|u|_{\max}}{\Delta x} + \frac{|v|_{\max}}{\Delta y} + \frac{|w|_{\max}}{\Delta z}} \\ Vcfl &= \frac{1}{\nu \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} + \frac{2}{\Delta z^2} \right)} \\ Gcfl &= \sqrt{\frac{|g|}{\Delta y}} \\ \Delta t &\leq \frac{1}{\left((Ccfl + Vcfl) + \sqrt{(Ccfl + Vcfl)^2 + 4Gcfl^2} \right)} \end{aligned} \quad (3.14)$$

1.5 Intégration temporelle : méthodes explicites

Il est généralement admis que la résolution des équations de **Navier-Stokes** dans le cas d'écoulements complexes nécessitent des techniques numériques d'ordre élevé, aussi bien pour la discrétisation spatiale que pour l'intégration en temps. La méthode de projection exposée au début de ce chapitre n'étant que d'ordre 1 en temps, il semble nécessaire de s'interroger sur l'éventuel couplage de cette méthode avec des techniques plus précises.

La méthode Runge Kutta explicite

On a vu au paragraphe précédent que la méthode **Runge-Kutta** pouvait être interprétée comme une succession de pas d'Euler (le nombre de pas dépendant de la précision). La méthode de projection exposée ci-dessus pouvant être considérée comme un pas d'**Euler** explicite, l'utilisation de schémas **Runge-Kutta** pour l'intégration en temps est donc évidente. A la fin de chaque pas d'**Euler**, seules les vitesses sont pondérées par les coefficients associés à la procédure **Runge-Kutta** car la pression n'est pas intégrée en temps explicitement. On peut donc généraliser la méthode de projection d'ordre 1 à un ordre n , en effectuant n pas d'un schéma **Runge-Kutta** d'ordre n .

La méthode de projection d'ordre 2 explicite avec schéma Adams-Basforth

La méthode de projection peut également être couplée avec un schéma d'**Adams-Basforth** pour assurer une meilleure précision temporelle. Le schéma d'**Adams-Basforth** n'est alors appliqué que sur l'équation de convection-diffusion. L'algorithme à programmer est le suivant :

$$\mathbf{V}^* = \mathbf{V}^n - \frac{\Delta t}{2} (3((\mathbf{V}^n \cdot \nabla) \mathbf{V}^n - \nu \Delta \mathbf{V}^n) - ((\mathbf{V}^{n-1} \cdot \nabla) \mathbf{V}^{n-1} - \nu \Delta \mathbf{V}^{n-1})) \quad (3.15)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla p^{n+1}}{\rho} \right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{V}^*}{\Delta t}$$

$$\mathbf{V}^{n+1} = \mathbf{V}^* - \Delta t \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho}$$

Cette procédure a été utilisée avec succès dans (**Kim & al, 1985**), (**Peyret & Taylor, 1983**), son principal intérêt est d'assurer une précision d'ordre 2 sans alourdir le temps de calcul.

1.6 Intégration temporelle : méthodes semi-implicites

Dans les méthodes exposées ci-dessus, la convection et la diffusion sont traitées avec des schémas explicites. Une contrainte sur le pas de temps doit donc être imposée pour chacun de ces termes. Il existe des méthodes dites semi-implicites qui permettent de s'affranchir de la contrainte visqueuse sur le pas de temps. En effet, ce critère peut devenir particulièrement restrictif, lorsque Δx est très petit puisque ($V_{cfl} \sim O(\Delta x^2)$). Les termes visqueux étant linéaires, une discrétisation implicite de ces termes conduit à la résolution d'un système linéaire pour chaque composante de vitesse. Comme la matrice de ce système linéaire a les mêmes propriétés que la matrice obtenue avec la discrétisation de l'équation de **Poisson** pour la pression, on peut utiliser le même solveur dans les deux cas. Cependant cette méthode n'est intéressante que si la contrainte sur les pas de temps visqueux est nettement plus grande que celle sur le pas de temps convectif, car une telle procédure alourdit considérablement le coût numérique d'une itération temporelle. Dans ce travail de thèse, nous n'utiliserons pas de méthodes semi-implicites, car les simulations effectuées ne semblent pas le justifier. Cependant, dans la suite de ce paragraphe, nous citons rapidement quelques exemples de méthodes semi-implicites.

La méthode de projection d'ordre 1 semi-implicite

La méthode semi-implicite la plus simple utilise un schéma Euler explicite pour discrétiser les termes convectifs et un schéma Euler implicite pour discrétiser les termes diffusifs. La démarche à suivre est la suivante :

$$\mathbf{V}^* = \mathbf{V}^n - \Delta t ((\mathbf{V}^n \cdot \nabla) \mathbf{V}^n)$$

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \left(\frac{\nabla p^{n+1}}{\rho} \right) &= \frac{\nabla \cdot \mathbf{V}^*}{\Delta t} \\ \mathbf{V}^{n+1} - \nu \Delta t \Delta \mathbf{V}^{n+1} &= \mathbf{V}^* - \Delta t \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho}\end{aligned}\quad (3.16)$$

Où l'équation (3.16) est résolue en calculant la solution du système linéaire correspondant.

La méthode de projection d'ordre 2 semi-implicite Adams-Basforth

Une méthode plus sophistiquée d'ordre 2 utilise le schéma d'**Adams-Basforth** pour la discrétisation explicite des termes convectifs, et le schéma de **Crank-Nicholson** pour la discrétisation implicite des termes de diffusion.

$$\begin{aligned}\mathbf{V}^* - \nu \frac{\Delta t}{2} \Delta \mathbf{V}^* &= \mathbf{V}^n - \frac{\Delta t}{2} (3(\mathbf{V}^n \cdot \nabla) \mathbf{V}^n - (\mathbf{V}^{n-1} \cdot \nabla) \mathbf{V}^{n-1}) + \nu \frac{\Delta t}{2} \Delta \mathbf{V}^n \\ \nabla \cdot \left(\frac{\nabla p^{n+1}}{\rho} \right) &= \frac{\nabla \cdot \mathbf{V}^*}{\Delta t} \\ \mathbf{V}^{n+1} &= \mathbf{V}^* - \Delta t \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho}\end{aligned}\quad (3.17)$$

La discrétisation de l'équation (3.17) mène à la résolution d'un système linéaire.

La méthode de projection d'ordre 2 B.C.G. (Bell, Colella, Glaz) semi-implicite

Dans (**Bell & al, 1989**), les auteurs ont mis au point une méthode de projection d'ordre 2 semi-implicite particulièrement intéressante. L'une des spécificités de leur travail réside dans l'utilisation de la décomposition de **Hodge** d'un champ de vecteur, pour obtenir une intégration en temps rapide et précise. De plus, les termes convectifs sont discrétisés avec des schémas robustes, habituellement utilisés pour la capture d'ondes de choc dans des codes compressibles ou pour la discrétisation d'équations hyperboliques. Leurs travaux ont ainsi conduit à la mise au point d'algorithmes très robustes et très précis pour la résolution des équations de **Navier-Stokes** incompressibles. Ces travaux ont été repris et discutés dans de nombreuses publications (**Minion & al, 1997**), (**Zhu & al, 1992**). Dans la suite de notre exposé nous allons étudier la précision et la robustesse des différentes méthodes numériques que nous utiliserons sur les cas-tests proposés dans (**Bell & al, 1989**), et nous pourrons ainsi comparer nos résultats avec un code considéré comme une référence.

2. Simulation d'une double couche de cisaillement périodique

2.1 Conditions initiales

(*Bell & al, 1989*) proposent un cas test particulièrement intéressant pour la validation de codes de mécanique des fluides incompressibles. Il s'agit d'une double couche de cisaillement perturbée sinusoïdalement. L'écoulement va alors se déstabiliser et former des tourbillons. L'intérêt de cette simulation est double :

- Elle permet d'effectuer un calcul « propre » dans lequel les conditions limites n'ont aucune influence. (On travaille en conditions limites périodiques)
- Dans le cas où la viscosité tend vers zéro, le calcul est numériquement instable si l'on utilise des schémas centrés, car les équations sont hyperboliques. Il est alors nécessaire d'utiliser des schémas spécifiques. Avec ce test nous pourrions quantifier les pertes numériques d'énergie cinétique, provenant de la dissipation numérique inhérente à ce type de schémas. En d'autres termes, ce test nous permet de comparer les performances de différents schémas dans le cas important où l'écoulement est sous-résolu. On qualifiera de sous-résolu une simulation effectuée avec un maillage trop large pour capturer toutes les structures de l'écoulement.

Les conditions initiales sont les suivantes :

$$\begin{aligned}l_x &= 1 \\l_y &= 1 \\x &\in [0;1] \\y &\in [0;1] \\u &= \begin{cases} \tanh\left(\frac{y-0.25}{ro}\right) & y \leq 0.5 \\ \tanh\left(\frac{0.75-y}{ro}\right) & y > 0.5 \end{cases} \\v &= \delta \sin(2\pi x) \\\delta &= 0.05\end{aligned}$$

La variable ro permet de contrôler l'épaisseur initiale de la couche de cisaillement, alors que δ est l'amplitude de la perturbation initiale. Nous effectuerons des simulations pour deux épaisseurs différentes, $ro = \frac{l}{30}$ pour une couche de cisaillement « épaisse » *figure*

(3.1) ou $ro = \frac{l}{300}$ pour une couche de cisaillement « fine » *figure (3.2)*.

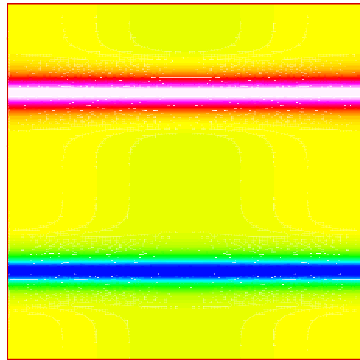
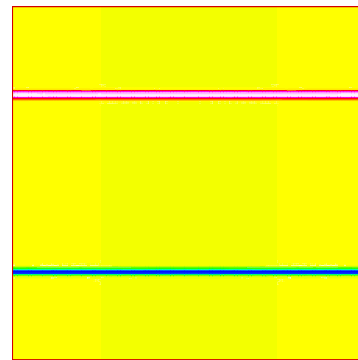


figure (3.1) : Champ de vorticité de la couche de cisaillement « épaisse »



figure(3.2) : Champ de vorticité de la couche de cisaillement « fine »

Dans le cas de la couche de cisaillement « épaisse » la condition initiale est suffisamment lisse pour comparer l'aptitude des différents schémas numériques à simuler précisément le développement de l'instabilité de la couche de cisaillement. Le cas de la couche de cisaillement « fine » permettra de tester la robustesse des différentes méthodes numériques.

La résolution de l'équation de **Poisson** est réalisée en utilisant la méthode du gradient conjugué préconditionné par une factorisation de **Cholesky** incomplète. Nous verrons que la précision imposée sur la résolution de cette équation va influencer sur la valeur moyenne de la divergence du champ de vitesse.

Conformément à la démarche adoptée au chapitre précédent, les premiers tests seront réalisés avec un schéma **RK3** pour l'intégration temporelle, des comparaisons seront ensuite réalisées entre les différents types d'intégration temporelle discutés au préalable.

2.2 Couche de cisaillement « épaisse »

Les premières simulations ont été réalisées dans le cas non-visqueux pour une couche de cisaillement « épaisse ». Ce test permet de quantifier les pertes d'énergie cinétique dues à la dissipation numérique, afin de pouvoir comparer les différents schémas utilisés.

Les résultats, sur un maillage 128×128 , sont reportés sur le tableau ci-dessous, pour une simulation réalisée jusqu'à un temps physique de deux secondes :

Double couche de cisaillement « épaisse »

Schéma spatial	% Pertes d'énergie cinétique	Temps CPU (sec)	Stabilité numérique
Centré 2	-	-	Non
ENO 3	12.8%	305.8	Oui
WENO 5	1.99%	798.7	Oui
WENO 5 Modifié	0.24%	926.1	Oui

Les résultats obtenus ont été comparés avec succès aux résultats de (*Bell & al, 1989*). On peut notamment observer que si l'on utilise le schéma **WENO** « modifié », les pertes d'énergie cinétique engendrées par le schéma numérique au temps $t = 2 \text{ secondes}$, sont légèrement inférieures à celles calculées dans (*Bell & al, 1989*) à savoir 0.24% pour nos résultats et 0.35% dans (*Bell & al, 1989*). Comme on pouvait s'y attendre, quand on utilise un schéma centré pour la discrétisation des termes convectifs dans le cas non-visqueux, la simulation est numériquement instable.

Pour les autres schémas, on observe les mêmes tendances que sur les cas tests d'interface, le schéma **WENO 5** « modifié » est de loin le moins dissipatif. Ce schéma semble donc très bien adapté à la simulation d'écoulements turbulents, pour lesquels il est important que toutes les structures de l'écoulement soient correctement décrites, c'est-à-dire que la dissipation numérique soit négligeable devant la dissipation visqueuse.

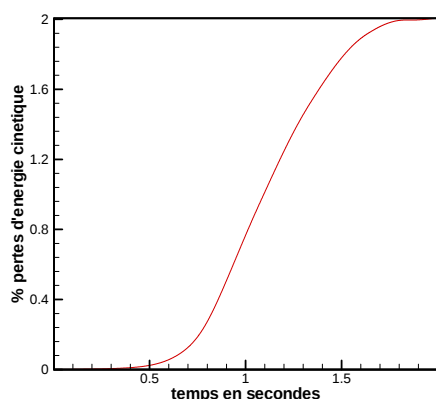


figure (3.3) : % pertes d'énergie cinétique en fonction du temps (WENO 5 « classique »)

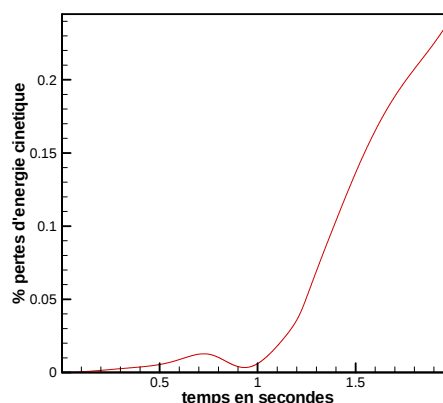


figure (3.4) : % pertes d'énergie cinétique en fonction du temps (WENO 5 « modifié »)

On peut estimer la précision avec laquelle l'énergie cinétique est conservée en étudiant l'influence du raffinement du maillage sur la réduction de l'erreur numérique.

Pertes d'énergie cinétique pour la double couche de cisaillement « épaisse »

Schéma spatial	64x64	128x128	256x256
WENO 5	5.07%	1.99%	0.83%
WENO 5 Modifié	1.29%	0.24%	0.0167%

On peut visualiser sur la *figure (3.5)* l'évolution du rotationnel du champs vitesse à différents instants du développement de l'instabilité de cisaillement, obtenu avec le schéma **WENO 5** « modifié » sur le maillage 128x128.

Nous avons également vérifié la conservation de la masse dans ce calcul, en calculant à chaque instant la moyenne et la valeur maximale de la valeur absolue de la divergence du champ de vitesse sur tout le domaine, on notera ces grandeurs respectivement $|\nabla \cdot \mathbf{V}|$ et $|\nabla \cdot \mathbf{V}|_{max}$.

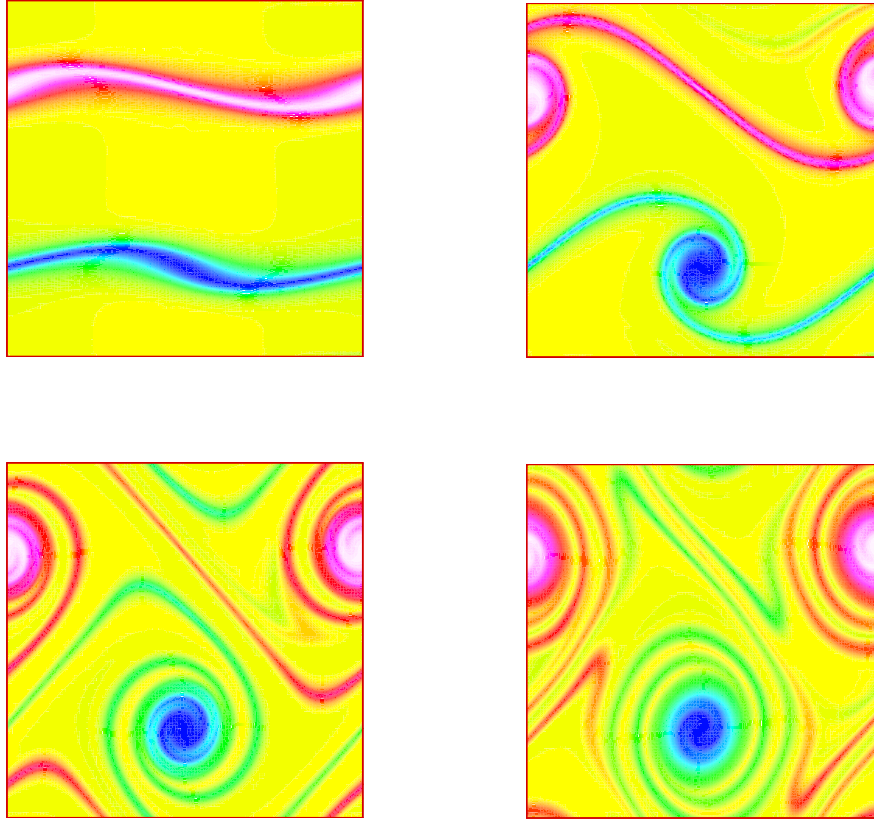


figure (3.5) : Champs de vorticité à $t = 0.5$ sec, $t = 1$ sec, $t = 1.5$ sec et $t = 2$ sec

On a obtenu les résultats suivants :

Précision ε	$ \nabla \cdot \mathbf{V} _{\max} t_{\text{initial}}$	$ \overline{\nabla \cdot \mathbf{V}} t_{\text{initial}}$	$ \nabla \cdot \mathbf{V} _{\max} t_{\text{final}}$	$ \overline{\nabla \cdot \mathbf{V}} t_{\text{final}}$
$\varepsilon = 10^{-2}$	$2.5 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$	$8.8 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$	$\sim 8 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$	$\sim 3 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$
$\varepsilon = 10^{-4}$	$2.2 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$	$1.1 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$	$\sim 8 \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1}$	$\sim 3 \cdot 10^{-9} \text{ s}^{-1}$
$\varepsilon = 10^{-6}$	$4.3 \cdot 10^{-7}$	$1.1 \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1}$	$\sim 8 \cdot 10^{-10} \text{ s}^{-1}$	$\sim 3 \cdot 10^{-11} \text{ s}^{-1}$

La précision ε fixée dans la méthode de résolution du système linéaire pour l'équation de **Poisson** pour la pression a une incidence directe sur les valeurs de ces deux grandeurs comme on peut le voir sur le tableau ci-dessus. Ces résultats mettent en évidence le bon fonctionnement de la méthode de projection pour coupler les équations de **Navier-Stokes** avec l'équation de conservation de la masse.

2.3 Couche de cisaillement « fine »

On s'intéresse maintenant à la couche de cisaillement « fine », toujours dans le cas non-visqueux. L'intérêt de cette simulation est de vérifier la stabilité et la précision des

méthodes numériques lorsque la condition initiale est discontinue. Le tableau ci-dessous présente les résultats obtenus sur un maillage 128×128 .

Double couche de cisaillement « fine »

Schéma spatial	% Pertes d'énergie cinétique	Temps <i>CPU</i> (sec)	Stabilité numérique
Centré 2	-	-	Non
ENO3	-	-	Non
WENO 5	8.41%	1757	Oui
WENO5 « Modifié »	3.96%	1956	Oui

Comme on pouvait s'y attendre la dissipation d'énergie cinétique introduite par le schéma numérique est plus importante que sur le cas de la couche de cisaillement « épaisse ». On peut visualiser sur la **figure (3.6)** l'évolution temporelle du vecteur vorticité, pour une simulation réalisée avec le schéma **WENO 5** « modifié » sur un maillage 128×128 .

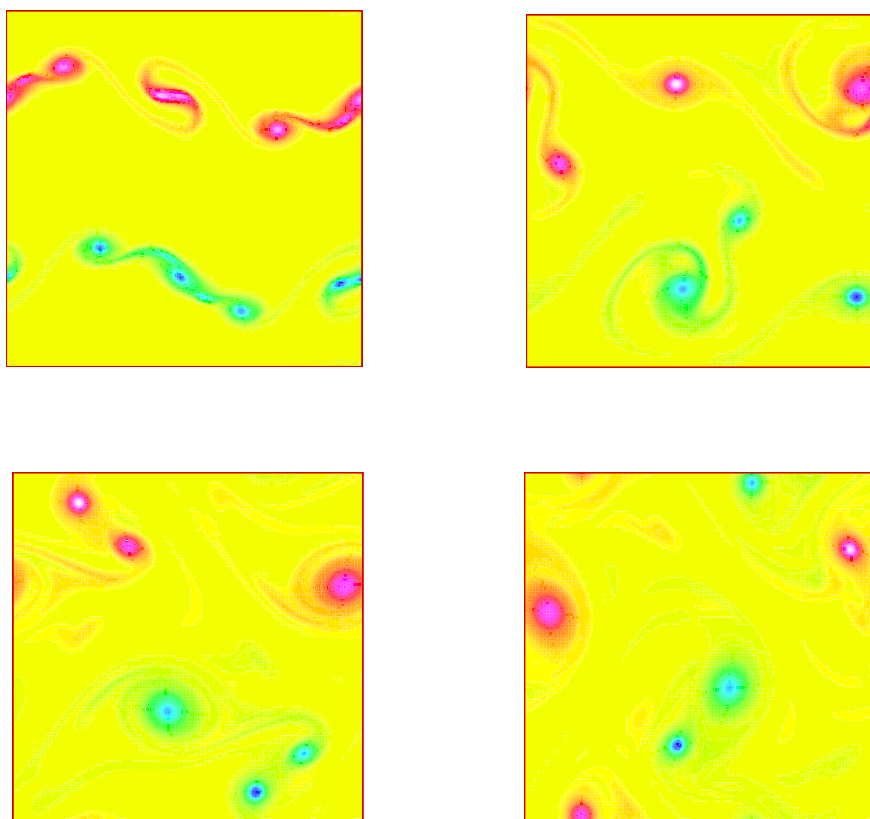


figure (3.6) : Champs de vorticité à $t = 0.5$ sec, $t = 1$ sec, $t = 1.5$ sec et $t = 2$ sec (128×128)

L'étude de l'erreur numérique en fonction de la résolution de la simulation (tableau ci-dessous) montre que l'ordre de précision du code est moins bon que sur le cas de la couche de cisaillement « épaisse ». Ceci s'explique par le fait que même si le schéma est formellement d'ordre 5, dans les zones sous-résolues la précision est nettement dégradée.

De plus sur la **figure (3.6)** , on constate que des fréquences différentes de la fréquence initiale se sont développées dans le champs de vitesse.

Pertes d'énergie cinétique pour la double couche de cisaillement « fine »

Schéma spatial	64x64	128x128	256x256
WENO 5	12.9%	8.41%	4.94%
WENO 5 Modifié	8.08%	3.96%	1.70%

On constate à nouveau que le schéma **WENO 5** « modifié » fournit des résultats nettement plus précis que le schéma **WENO 5** classique.

Les tests effectués sur la divergence du champs de vitesse ont également donné de bons résultats sur la couche de cisaillement « fine ».

Comme précédemment, nous avons vérifié que la condition de divergence nulle était bien respecté dans l'ensemble du domaine. On a obtenu les résultats suivants :

Précision ε	$ \nabla.V _{\max} t_{initial}$	$ \nabla.V t_{initial}$	$ \nabla.V _{\max} t_{final}$	$ \nabla.V t_{final}$
$\varepsilon = 10^{-2}$	$3.9 \cdot 10^{-3} s^{-1}$	$1.7 \cdot 10^{-3} s^{-1}$	$\sim 5 \cdot 10^{-5} s^{-1}$	$\sim 3 \cdot 10^{-6} s^{-1}$
$\varepsilon = 10^{-4}$	$4.7 \cdot 10^{-5} s^{-1}$	$2.3 \cdot 10^{-6} s^{-1}$	$\sim 5 \cdot 10^{-7} s^{-1}$	$\sim 3 \cdot 10^{-8} s^{-1}$
$\varepsilon = 10^{-6}$	$3.9 \cdot 10^{-7}$	$1.7 \cdot 10^{-8} s^{-1}$	$\sim 5 \cdot 10^{-9} s^{-1}$	$\sim 3 \cdot 10^{-10} s^{-1}$

2.4 Intégration temporelle

Nous avons également étudié l'influence de la discrétisation temporelle sur la qualité des résultats. Notamment, on souhaite trouver une intégration en temps plus courte que la méthode de projection associée à un schéma **RK3**, mais qui donnerait des résultats équivalents. L'utilisation d'un schéma de type **B.C.G.** pour l'intégration des équations de **Navier-Stokes** incompressibles est plus complexe que pour une équation de convection simple. Notamment, il est plus difficile de découpler la partie temporelle et la partie spatiale de ce schéma. Dans (**Bell & al, 1989**) tous les détails sont donnés pour réaliser cette implémentation. Cependant dans le cadre de ce travail nous n'avons pas développé cette méthode complexe pour la tester, mais grâce aux résultats fournis dans (**Bell & al, 1989**) nous avons pu comparer favorablement nos résultats (voir au **paragraphe 2.2** de ce chapitre).

Des tests comparatifs nous ont conduit aux résultats suivants :

couche de cisaillement « épaisse » (128x128)

Schéma spatial	% Pertes d'énergie cinétique	Temps CPU (sec)
Adams-Bashforth	0.24%	1427
RK2	0.24%	4315
RK3	0.23%	8571
B.C.G.	0.35%	inconnu

Ces calculs ont tous été réalisés avec le schéma **WENO 5** «modifié» pour la discrétisation spatiale, à l'exception du résultat obtenu avec B.C.G. qui a été réalisé par (*Bell & al, 1989*).

On peut donc faire les observations suivantes :

- Le schéma d'**Adams-Bashforth** donne des résultats équivalents au schéma **Runge-Kutta** d'ordre 3.
- Le schéma **Runge-Kutta** d'ordre 2 donne des résultats équivalents au schéma **Runge-Kutta** d'ordre 3.

A partir de nos comparaisons nous avons décidé d'utiliser le schéma d'**Adams-Bashforth** pour l'intégration temporelle des équations de **Navier-Stokes** dans la suite de ce travail de thèse.

2.5 Conclusions et remarques

Au vu des résultats obtenus sur cette série de cas-test, on peut être très satisfait du comportement du code. Notamment, le schéma **WENO 5** «modifié» permet de diminuer de façon très significative la dissipation numérique de l'énergie cinétique, tout comme on avait observé son très bon comportement sur la réduction des pertes de quantité de surface pour le suivi d'interface. De plus, comme on a pu le constater sur le cas de la couche de cisaillement «fine», ce schéma semble aussi robuste qu'un schéma **WENO 5** «classique». Les résultats sont comparables (voir légèrement meilleurs) à ceux obtenus par (*Bell & al, 1989*) avec un code qui est reconnu comme étant très performant. La discrétisation des termes visqueux ne nécessite pas de traitement spécial, elle peut être réalisée en utilisant un schéma centré d'ordre 2 pour calculer les dérivées secondes (c'est un terme naturellement dissipatif qui n'est pas susceptible de devenir numériquement instable). De plus, l'utilisation de la méthode d'**Adams-Bashforth** permet une intégration en temps rapide et précise.

3. Les conditions limites

3.1 Position du problème

La mise en oeuvre de conditions limites robustes et précises est une étape essentielle dans la construction d'un code de mécanique des fluides. Suivant le type d'applications que l'on considère, différentes possibilités de conditions limites doivent être envisagées. Les plus utilisées et celles que nous avons implémentées sont les suivantes :

- **Condition limite périodique** : cette condition permet d'étudier le développement temporel d'un phénomène physique (développement d'une instabilité par exemple).

- **Condition limite de symétrie** : Grâce à cette condition on peut imposer un axe de symétrie dans la simulation pour réduire la taille du domaine de calcul lorsque l'on sait que le phénomène étudié est symétrique.
- **Condition limite de paroi** : Lorsque l'une des frontières du domaine est délimitée par une paroi solide on utilisera une condition de paroi afin de calculer les profils corrects de couche limite.
- **Condition limite d'injection** : Cette condition est utilisée pour simuler l'injection de fluide sur une partie du domaine.
- **Condition limite « libre » ou « ouverte »** : Cette condition dite « libre » ou « ouverte » doit permettre au fluide de sortir ou d'entrer librement au gré de l'écoulement imposé dans le domaine. C'est une condition neutre qui ne doit pas influencer sur la dynamique de l'écoulement calculée dans tout le domaine, on peut aussi l'appeler condition de sortie (***outflow boundary***). Cette dénomination est un peu réductrice, puisque pour être efficace une condition de ce type doit être capable de laisser sortir des tourbillons.

L'implémentation des conditions limites périodiques et des conditions limites symétriques est classique, nous nous intéresserons donc dans ce paragraphe aux conditions d'injection, aux conditions de paroi et aux conditions « libres ».

La discrétisation spatiale de la méthode de projection nécessite une attention particulière sur les frontières du domaine. Notamment, l'apparition d'un vecteur vitesse intermédiaire $\mathbf{V}^*$ qui sera discrétisé dans l'équation (3.7) pose la question suivante : quel type de condition limite doit-on imposer à cette vitesse qui n'a pas de sens physique puisque c'est un artifice de calcul ? Un autre problème survient lorsque l'on s'intéresse aux conditions limites sur la pression que l'on doit imposer sur l'équation (3.7). En effet dans le cas d'écoulements incompressibles la pression n'est pas une variable thermodynamique puisqu'il n'y a pas d'équation d'état, on parle alors d'une pression dynamique qui est définie à une constante près. Donc seul le gradient de pression a un sens physique, il peut être interprété comme une force par unité de volume.

Nous finirons ce paragraphe par l'étude d'un test qui fait intervenir ces trois types de conditions. Dans la suite de cette étude sur les conditions limites, nous nous intéresserons à la discrétisation des équations sur une face d'un domaine bidimensionnel, la généralisation aux autres faces ne pose pas de problèmes particuliers. De même les techniques décrites ici sont applicables en **3D**, sans difficultés supplémentaires.

3.2 Condition limite d'injection

La condition limite d'injection est en réalité une condition de profil de vitesse imposé, puisque suivant le signe du champ de vitesse imposé, on peut simuler une injection dans le domaine ou une aspiration. On souhaite injecter perpendiculairement à la frontière horizontale supérieure du domaine un écoulement dont le champ de vitesse vaut :

$$\mathbf{V} = \begin{vmatrix} 0 \\ v_0(x) \end{vmatrix} \quad (3.18)$$

La frontière supérieure du domaine est située sur la droite $y_{jmax+1/2}$ pour tout x_i . En effet, nous allons voir qu'il est commode d'imposer la frontière sur la grille décalée où l'on calcule la vitesse normale à la frontière. De même, la frontière inférieure se situera sur la droite $y_{l/2}$ pour tout x_i , la frontière de gauche se situera sur la droite $x_{l/2}$ pour tout y_j , et la , la frontière de droite se situera sur la droite $x_{imax+1/2}$ pour tout y_j .
On s'intéresse maintenant à l'équation (3.12) au point d'injection :

$$v_{ijmax+\frac{1}{2}}^{n+1} = v_{ijmax+\frac{l}{2}}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} \Big|_{ijmax+\frac{l}{2}}^{n+1}$$

Cette relation peut également être discrétisée sous la forme suivante :

$$v_0(x_i) = v_{ijmax+\frac{l}{2}}^* - \frac{\Delta t}{\rho \Delta y} (p_{ijmax+l}^{n+1} - p_{ijmax}^{n+1}) \quad (3.19)$$

On voit donc apparaître deux conditions limites à priori inconnues dans la relation (3.19) à savoir $v_{ijmax+l/2}^*$ et $p_{ijmax+1}^{n+1}$, alors que p_{ijmax}^{n+1} est connue car elle est dans le domaine de calcul. En réalité, il existe donc une infinité de couples $v_{ijmax+l/2}^*$ et $p_{ijmax+1}^{n+1}$, qui respecte l'équation (3.19). On peut donc voir cette relation, comme une condition de **Neumann** sur la pression lorsque l'on impose une condition de **Dirichlet** quelconque sur la vitesse $v_{ijmax+l/2}^*$:

$$\frac{\partial p}{\partial y} \Big|_{ijmax+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{\rho}{\Delta t} (v_{ijmax+\frac{l}{2}}^* - v_0(x_i)) \quad (3.20)$$

Ainsi, en imposant une condition de **Dirichlet** quelconque sur $v_{ijmax+l/2}^*$ pour calculer le second membre de l'équation de Poisson, puis en résolvant l'équation de **Poisson** pour la pression avec la condition limite de **Neumann** (3.20), on peut imposer le profil $v_0(x_i)$ sur les frontières du domaine. Une simplification possible de cette démarche consiste à prendre :

$$v_{ijmax+\frac{l}{2}}^* = v_0(x_i) \quad (3.21)$$

d'où une relation particulièrement simple pour la condition limite de pression :

$$\frac{\partial p}{\partial y} \Big|_{ijmax+l/2}^{n+1} = 0 \quad (3.22)$$

On peut également imposer un profil de vitesse dont la composante tangente à la frontière n'est pas nulle :

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} u_0(x) \\ v_0(x) \end{pmatrix}$$

on peut reprendre le même raisonnement, avec une condition supplémentaire :

$$u_{i+1/2, j_{\max}+1}^{n+1} = u_0(x) \quad (3.23)$$

Car, contrairement à v^* , on n'a pas besoin de condition limites sur u^* si la frontière est horizontale.

3.3 Condition limite de paroi

On souhaite maintenant que la frontière horizontale supérieure du domaine soit une paroi. Donc les composantes u et v du champs de vitesse aux points indicés $(i, j_{\max}+1/2)$ doivent être nulles. En suivant la démarche adoptée au **paragraphe 3.2**, on peut donc en déduire les conditions limites suivantes :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial P}{\partial y} \right|_{ij_{\max}+1/2}^{n+1} &= 0 \\ v_{ij_{\max}+1/2}^* &= 0 \\ v_{ij_{\max}+1/2}^{n+1} &= 0 \\ u_{i+1/2, j_{\max}+1}^{n+1} &= -u_{i+1/2, j_{\max}}^{n+1} \end{aligned} \quad (3.24)$$

Ceci revient à imposer un écoulement à contre-courant pour forcer un point d'arrêt sur la paroi du domaine.

3.4 Condition limite « libre »

On a vu au paragraphe précédent que la méthode de projection permet d'imposer une condition limite de **Dirichlet** sur la vitesse à condition d'imposer une condition limite de **Neumann** sur la pression. Le problème des conditions limites libres est plus complexe puisqu'à priori on ne connaît pas la vitesse (de sortie ou d'entrée) du fluide sur cette frontière libre. De nombreux auteurs suggèrent l'utilisation d'algorithmes qui estiment la vitesse de sortie du fluide sur une frontière du domaine en fonction de la vitesse débitante

imposée sur la frontière opposée. Cette approche permet d'assurer la conservation du débit massique en résolvant une équation de convection pour estimer la vitesse de sortie

sur la frontière considérée (on parle de conditions limites convectives) (*Kim & al, 1985*), (*Ol'shanskii & al, 2000*).

Cette approche est efficace, mais elle présente à notre avis certains inconvénients :

- Tout d'abord elle paraît difficile à généraliser dans le cas où plusieurs frontières du domaine sont ouvertes, ce qui oblige soit à travailler avec des parois proches du phénomène que l'on étudie, soit à travailler sur des domaines très grands, ce qui dans les deux cas peut être contraignant.
- De plus la majorité des travaux connus sur ce type de conditions limites traitent d'écoulements monophasiques. Son extension aux écoulements diphasiques, notamment dans le cas de gouttes sortant du domaine semble délicate.
- Enfin, son utilisation dans le cas d'interfaces réactives (front de flamme ou gouttes s'évaporant) paraît également délicate puisque le débit sortant est modifié par le taux de réactivité (vitesse de propagation de la flamme ou vitesse de vaporisation) de l'interface.

Si cette approche est intéressante et rigoureuse, les défauts exposés ci-dessus nous ont conduit à tester d'autres méthodes plus robustes, de façon très « empirique ». Certains auteurs (*Nguyen & al, 2001*), (*Sussman & al, 1999*) suggèrent notamment d'utiliser une condition de *Dirichlet* homogène pour la pression sur les frontières libres du domaine. Dans les publications citées, aucune justification, ni référence permettent de justifier ce choix. De plus aucun détail n'est spécifié sur la condition limite que l'on doit imposer sur la vitesse intermédiaire V^* . Mais quelques tests préliminaires montrent qu'une telle condition sur la pression est naturellement adaptée au cas des frontières « libres », même si il est difficile de le justifier théoriquement.

Nous avons donc essayé différents types de conditions limites et avons retenu la démarche exposée ci-dessous, car elle est très robuste et elle assure la conservation de la masse à chaque instant du calcul.

On souhaite imposer cette condition sur la frontière horizontale inférieure de notre domaine de calcul, ce qui nous donne :

$$p_{i0}^{n+1} = 0 \quad (3.25)$$

Sur la vitesse intermédiaire, on impose une condition de dérivée nulle :

$$v_{i1/2}^* = v_{i3/2}^* \quad (3.26)$$

La condition limite sur la composante de vitesse orthogonale à la frontière libre peut alors être calculée par la relation suivante, qui impose la conservation de la masse sur la frontière du domaine considéré pour la vitesse au temps $n+1$:

$$v_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} = v_{i-\frac{3}{2}}^{n+1} + \frac{\Delta y}{\Delta x} (u_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - u_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}) \quad (3.27)$$

Cette vitesse peut également être calculée par la relation suivante :

$$v_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} = v_{i-\frac{1}{2}}^* - \frac{\Delta t}{\rho \Delta x} P_{i1}^{n+1} \quad (3.28)$$

La condition (3.27) est physiquement meilleure car elle impose la conservation de la masse sur les frontières du domaine. En revanche la condition (3.28) semble plus rigoureuse mathématiquement puisqu'elle découle du formalisme de la méthode de projection. Nous utiliserons toujours la condition (3.27), car elle est plus stable et physiquement justifiée.

Enfin, la condition limite imposée sur la composante de vitesse tangente à la frontière libre sera la suivante :

$$u_{i+\frac{1}{2}0}^{n+1} = u_{i+\frac{1}{2}1}^{n+1} \quad (3.29)$$

3.5 Écoulement derrière une marche

L'écoulement derrière une marche, *figure (3.7)* est un écoulement qui a été largement étudié expérimentalement (*Armaly & al, 1983*) et numériquement (*Kim & al, 1985*). Nous avons choisi d'étudier ce cas pour valider notre approche sur les conditions limites. Cette simulation est intéressante car 3 types de conditions limites sont imposés ; des conditions d'injection, des conditions de paroi et des conditions « libres ». De plus, on pourra comparer les résultats obtenus avec des résultats expérimentaux sur un écoulement qui reste bidimensionnel pour les nombres de **Reynolds** (**Re**) pas trop importants ($Re < 500$).

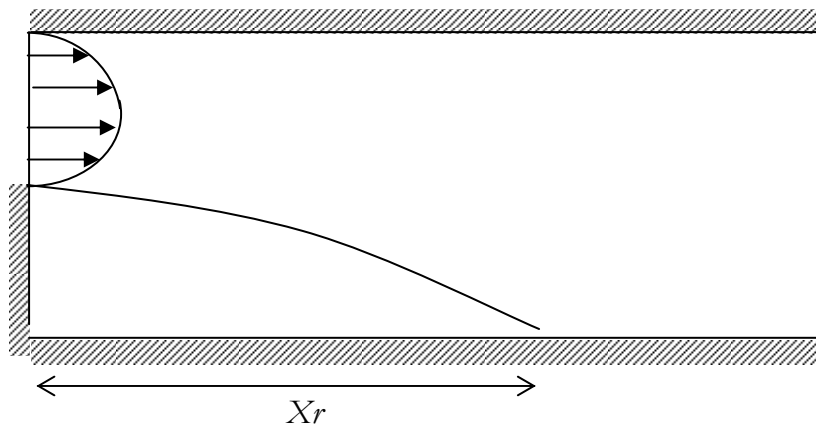


figure (3.7) : Configuration de la simulation

De plus dans cette configuration, la viscosité du fluide est un paramètre important, nous pourrions donc vérifier que notre discrétisation des termes visqueux est correcte. Les données de la simulation sont celles proposées dans (*Kim & al, 1985*), à savoir :

$$h = 0.00505m$$

$$lx = 2h$$

$$ly = 30h$$

$$\begin{cases} v(x, y = l_y) = U_0 \left(1 - \frac{4(x - 3h/4)^2}{h^2} \right) \\ u(x, y = l_y) = 0 \end{cases} \quad \text{pour} \quad h \leq x \leq 2h$$

$$Re = \frac{4\rho U_0 h}{3\mu}$$

$$\rho = 1.226 kg.m^{-3}$$

$$\mu = 1.78 \times 10^{-5} kg.m^{-1}.s^{-1}$$

A l'instant initial, les champs de vitesse et de pression sont nuls dans tout le domaine. La simulation est effectuée sur un maillage 101×101 . Même si cette simulation permet une comparaison quantitative immédiate avec des résultats expérimentaux, on s'intéresse dans un premier temps à l'évolution de la moyenne et de la valeur maximale de la valeur absolue de la divergence du champ de vitesse sur tout le domaine, pour vérifier le bon fonctionnement de nos conditions limites et nous assurer que la conservation de la masse est respectée même sur les bords du domaine.

Les calculs conduisent aux résultats suivants :

- A l'instant initial $|\nabla.V| = 2.38 . 10^{-5}$ et $|\nabla.V|_{\max} = 6.93 . 10^{-4}$
- Ensuite ces valeurs diminuent pendant une dizaine d'itérations puis se stabilisent vers des valeurs quasi-constantes, $|\nabla.V| \sim 3 . 10^{-9}$ et $|\nabla.V|_{\max} \sim 7 . 10^{-8}$

Comme précédemment ces valeurs dépendent de la précision que l'on a imposé sur la résolution de l'équation de **Poisson** (ici $\varepsilon = 10^{-6}$).

Lorsque le nombre de **Reynolds** est suffisamment faible l'écoulement reste laminaire, et bidimensionnel. On mesure la longueur de réattachement (changement de signe de la composante horizontale de vitesse) lorsque l'écoulement a atteint un état stationnaire (**figure 3.8**). La longueur de réattachement X_r (**figure 3.7**) dépend directement du nombre de **Reynolds**.

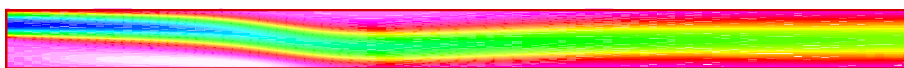


figure (3.8) : composante de vitesse horizontale pour un écoulement stationnaire ($Re=600$)

Sur la **figure (3.9)**, on a tracé l'évolution prédite par nos simulations de X_r/h en fonction de Re . Notre courbe est comparée aux valeurs expérimentales obtenues par (**Armaly & al, 1983**) et aux résultats numériques obtenus par (**Kim & al, 1985**).

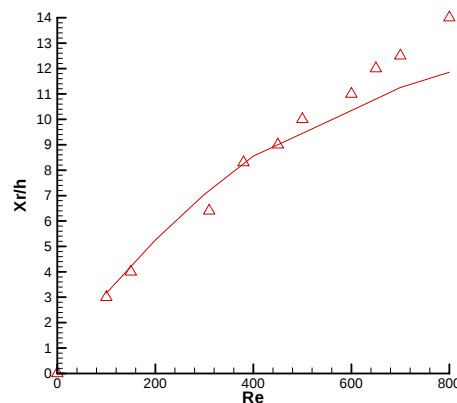


figure (3.9) : Evolution de la longueur de raccrochage en fonction du Reynold. — résultats obtenus numériquement, Δ données de (Armaly & al, 1983)

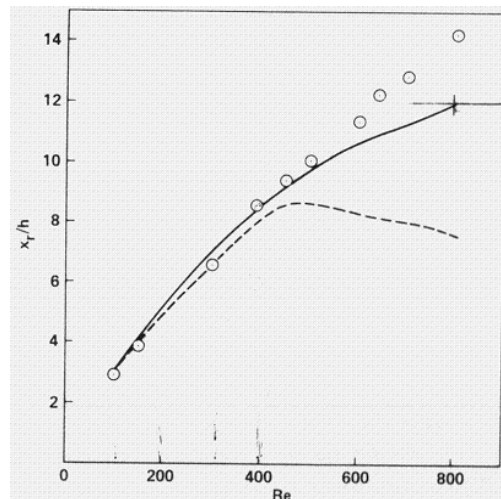


figure (3.10) : Evolution de la longueur de raccrochage en fonction du Reynold. $\circ$ données de (Armaly & al, 1983), — simulation (Kim & al, 1985), - - simulation Armaly

On retrouve des résultats identiques à ceux obtenus numériquement par (**Kim & al, 1985**). Ainsi, la dépendance de la longueur de réattachement avec le nombre de **Reynolds** est bien prédite par le code pour $Re < 500$. Pour des nombres de Reynolds plus élevés, on observe une différence entre les résultats expérimentaux et les simulations. Néanmoins selon les auteurs cette différence n'est pas engendrée par des erreurs numériques, car des études de convergence donnent des résultats similaires. Les auteurs expliquent cette différence par l'apparition de structures tri-dimensionnelles dans l'écoulement pour des $Re > 500$.

En conséquence, on peut conclure au bon fonctionnement de notre méthode de résolution et des différents types de conditions limites utilisées.

4. Résolution des équations axisymétriques

4.1 Intérêt de la formulation axisymétrique

La plupart des écoulements existants sont tri-dimensionnels et instationnaires (écoulements turbulents ou en transition vers la turbulence par exemple), c'est à dire que les grandeurs qui permettent de les caractériser varient suivant trois directions spatiales. La simulation directe de tels écoulements est possible, mais restent prohibitifs (en temps *CPU* et en stockage mémoire) en raison du grand nombre de degré de liberté de ces systèmes. Au contraire, la simulation d'écoulements bidimensionnels est plus accessible avec les moyens informatiques actuels.

Les écoulements axisymétriques sont également bidimensionnels et leur étude présente un intérêt certain car ils sont plus couramment rencontrés que des écoulements **2D** plan. On verra notamment dans les chapitres qui suivent qu'il existe une littérature importante sur plusieurs types d'écoulements diphasiques axisymétriques.

L'application de la méthode de projection exposée ci-dessus à la résolution des équations de **Navier-Stokes** axisymétriques s'est donc imposée comme indispensable. Elle permettra de comparer nos résultats de simulation à de nombreux résultats expérimentaux avec des contraintes sur les temps et les moyens de calcul bien inférieures à celles que l'on rencontre lorsque l'on étudie des écoulements **3D**. Notamment la dépendance entre la solution obtenue et la résolution fixée pourra être largement étudiée sur ce type d'écoulements.

4.2 Equations de Navier-Stokes axisymétriques

On rappelle les équations de **Navier-Stokes** dans un système de coordonnées axisymétriques (lorsque la vitesse azimuthale est nulle dans tout le domaine) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial P}{\rho \partial r} &= \nu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} - \frac{u_r}{r^2} \right) \\ \frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{\partial P}{\rho \partial z} &= \nu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) \\ \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \quad (3.30)$$

Si les termes convectifs sont résolus sous forme conservative, les équations deviennent alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_r}{\partial t} + \frac{\partial u_r^2}{\partial r} + \frac{\partial u_z u_r}{\partial z} + \frac{u_r^2}{r} + \frac{\partial P}{\rho \partial r} &= \nu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} - \frac{u_r}{r^2} \right) \\ \frac{\partial u_z}{\partial t} + \frac{\partial u_z u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z^2}{\partial z} + \frac{u_r u_z}{r} + \frac{\partial P}{\rho \partial z} &= \nu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) \\ \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \quad (3.31)$$

La méthode de projection s'applique sans difficulté à ce système d'équations. L'équation de **Poisson** devient alors :

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{\rho \nabla \cdot \mathbf{V}^*}{\Delta t}$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p^{n+1}}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 p^{n+1}}{\partial z^2} = \frac{\rho}{\Delta t} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial r u_r^*}{\partial r} + \frac{\partial u_z^*}{\partial z} \right) \quad (3.32)$$

La discrétisation de cette équation conduit au système linéaire suivant pour la pression :

$$\frac{r_{i+1/2} (p_{i+1j}^{n+1} - p_{ij}^{n+1}) - r_{i-1/2} (p_{ij}^{n+1} - p_{i-1j}^{n+1})}{r_i \Delta r^2} + \frac{p_{ij+1}^{n+1} - 2p_{ij}^{n+1} + p_{ij-1}^{n+1}}{\Delta z^2} = b_{ij} \quad (3.33)$$

$$b_{ij} = \frac{\rho}{\Delta t} \left(\frac{r_{i+1/2} u_{r,i+1/2j}^* - r_{i-1/2} u_{r,i-1/2j}^*}{r_i \Delta r} + \frac{u_{z,ij+1/2}^* - u_{z,ij-1/2}^*}{\Delta r} \right)$$

La matrice garde les mêmes propriétés que pour l'équation **2D** plan, mais les coefficients de la matrice varient en fonction de la coordonnée r_i , on pourra donc utiliser le même solveur que pour l'équation (3.13).

L'axe de symétrie est imposé au point $r_{1/2}=0$, pour éviter les divisions par zéro, et pour que la condition de **Neumann** sur la pression (3.34) soit imposée précisément sur l'axe de symétrie.

$$\left. \frac{\partial p}{\partial r} \right|_{1/2j}^{n+1} = 0 \quad (3.34)$$

5. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons pu vérifier le bon comportement du code développé sur différents cas-tests. Notamment différentes méthodes d'intégration temporelle et spatiale ont été utilisées et comparées. La discrétisation spatiale (**WENO 5** « modifié ») que nous avons choisi d'utiliser pour la suite de ce travail de thèse est à la fois précise et robuste, de plus elle peut être combinée à une intégration en temps rapide (**Adams-Bashforth**) tout en gardant une bonne précision.

Nous avons également testé avec succès le bon fonctionnement de différents types de conditions limites.

Le prochain chapitre traitera de l'utilisation des techniques décrites dans ce chapitre et dans le chapitre précédent pour la simulation d'écoulements diphasiques. Un premier test en coordonnées axisymétriques sera proposé.

Chapitre 4

Méthodes numériques pour la simulation d'écoulements diphasiques

1. Formalisme

1.1 Dérivation de l'équation d'évolution de l'interface entre deux fluides immiscibles sans échange de masse

Lorsque l'on souhaite modéliser un écoulement incompressible monophasique, la résolution des équations de **Navier-Stokes** avec l'équation de conservation de la masse forment un système d'équations aux dérivées partielles fermé, puisque l'on a autant d'inconnues que d'équations. Cependant dans le cas des écoulements diphasiques incompressibles, une équation supplémentaire est nécessaire pour prédire l'évolution spatio-temporelle du champ de masse volumique. L'incompressibilité de chacune des phases implique la divergence nulle du champ de vitesse dans tout le domaine. L'équation suivante peut alors être déduite du principe de conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \rho = 0 \quad (4.1)$$

Soit un domaine Ω contenant deux fluides immiscibles séparés par une interface Γ . On définit alors une fonction **Level Set** $\phi(\mathbf{x}, t)$ dont la courbe de niveau zéro représentera l'interface. Cette fonction sera toujours positive dans l'un des fluides et toujours négative dans l'autre. Le champ de masse volumique s'écrit alors :

$$\rho(\phi) = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)H(\phi) \quad (4.2)$$

En injectant (4.2) dans (4.1), on peut en déduire une équation d'évolution pour la variable $\phi(\mathbf{x}, t)$:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi \right) \delta(\phi) = 0 \quad (4.3)$$

Où $H(\phi)$ et $\delta(\phi)$ sont respectivement les distributions d'*Heaviside* et de *Dirac* centrées sur la courbe de niveau zéro de notre fonction *Level Set*.

On retrouve un équation équivalente à l'équation (2.2), que l'on avait établie à partir de considérations mathématiques. En généralisant cette équation à l'ensemble des lignes de niveau, on retrouve l'équation (2.5), qui va nous permettre de calculer l'évolution de la fonction $\phi(\mathbf{x}, t)$ dans l'ensemble du domaine.

Comme on l'a déjà souligné au chapitre 2, l'algorithme de réinitialisation (2.20), peut être ajouté au formalisme, car il ne modifie pas la position de la ligne de niveau zéro prédite par l'équation (4.3) ou (2.2).

Dans (Scardovelli & al, 1999), les auteurs détaillent trois formulations possibles pour inclure les forces de tension de surface. Les deux premières sont des formes globales des équations de *Navier-Stokes* dans lesquelles les forces de tension de surface sont introduites sous forme de terme source. Ces deux formulations ont été nommées par les auteurs ; *Whole-Domain Formulation* et *Whole-Domain Conservation Law Form*. La première est une formulation globale non-conservative et la deuxième une formulation globale conservative. La troisième formulation est une formulation non-conservative locale, puisque les forces de tension de surface sont introduites sous la forme d'une condition de saut pour la pression, les auteurs l'ont nommée *Jump-Condition Form*.

Nous allons maintenant étudier deux de ces formulations qui permettent de coupler les forces de tension de surface avec les équations de *Navier-Stokes*.

1.2 Expression des forces de tension de surface dans l'équation de Navier-Stokes : formulation globale non-conservative

Si l'on réalise un bilan de quantité de mouvement dans le domaine Ω , utilisé précédemment, on retrouve l'expression suivante :

$$\int_{\Omega} \rho(\phi) \frac{d\mathbf{V}}{dt} d\Omega = - \int_{\Omega} \nabla p d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\mu(\phi) \mathbf{D}) d\Omega - \oint_{\Gamma} \sigma \kappa \mathbf{n} dS + \int_{\Omega} \rho(\phi) \mathbf{g} d\Omega \quad (4.4)$$

D'après (2.6), on a :

$$\oint_{\Gamma} \sigma \kappa \mathbf{n} dS = \oint_{\Gamma} \sigma \kappa(\phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} dS$$

De plus on peut utiliser la propriété suivante (**Smereka**) :

$$\int g(x)\delta(f(x))dx = \frac{g(0)}{|f'(0)|}$$

où $f(x)$ est une fonction qui s'annule en 0. On peut généraliser cette relation en plusieurs dimensions, et l'appliquer à la fonction ϕ :

$$\int_{\Omega} g(\phi)\delta(\phi)d\Omega = \oint_{\Gamma} \frac{g(0)}{|\nabla\phi(0)|} dS \quad (4.5)$$

La courbure $\kappa(\phi)$ et le vecteur normal $\mathbf{n}(\phi)$ sont des propriétés physiques qui ne sont définies que sur la ligne de niveau zéro. Cependant en utilisant la relation (4.5), ces variables vont être étendues dans l'ensemble du domaine de calcul, on les calcule alors aisément en utilisant les équations (2.6) et (2.7). On en déduit cette relation permettant de passer d'une intégrale de surface à une intégrale de volume :

$$\oint_{\Gamma} \sigma\kappa(\phi) \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} dS = \int_{\Omega} \sigma\kappa(\phi) \nabla\phi \delta(\phi) d\Omega \quad (4.6)$$

On peut donc réécrire l'équation de **Navier-Stokes** sous une forme différentielle en utilisant la relation (4.6) pour calculer les forces de tension de surface sous forme d'intégrale volumique :

$$\rho(\phi) \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\phi) \mathbf{D}) - \sigma\kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla\phi + \rho(\phi) \mathbf{g} \quad (4.7)$$

Comme la masse volumique, le champ de viscosité (et toute autre propriété physique caractéristique d'une phase de l'écoulement) peut évoluer en fonction de la position de l'interface. On va donc utiliser une relation analogue à la relation (4.2) pour exprimer ces variations :

$$\mu(\phi) = \mu_1 + (\mu_2 - \mu_1)H(\phi) \quad (4.8)$$

1.3 Expression des forces de tension de surface dans l'équation de Navier-Stokes : formulation locale

Une autre formulation possible consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes dans chaque domaine fluide, et d'imposer entre chaque domaine les conditions de saut appropriées, données par les relations (1.5), (1.7) et (1.8).

Cette approche est particulièrement attractive, car sa discrétisation numérique est en général plus rigoureuse. Néanmoins, elle est moins répandue car peut-être plus difficile à mettre en œuvre. On peut cependant citer quelques auteurs qui utilisent cette approche (**Popinet, 2000**), (**Kang & al, 2000**).

Nous allons maintenant décrire deux méthodes numériques qui permettent de traiter les termes discontinus présents dans nos équations. La première, la plus courante de ces techniques, est la « **Delta Function Method** ». Dans cette technique l'interface est épaissie artificiellement pour prendre en compte les conditions de saut, elle est intéressante lorsqu'elle est associée à une formulation globale.

La deuxième méthode « **Ghost Fluid Method** » nécessite une formulation locale des discontinuités, qui sont traitées comme des conditions de saut raides. Cette formulation semble être physiquement et numériquement plus rigoureuse .

2. « **Delta Function Method** »

2.1 Lissage des discontinuités

Afin de pouvoir discrétiser les termes discontinus nous allons introduire des fonctions lissées pour approximer numériquement les distributions d'**Heaviside** et de **Dirac**.

$$H_{\varepsilon}(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \phi < -\varepsilon \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\phi}{\varepsilon} + \frac{\sin(\pi\phi/\varepsilon)}{\pi} \right) & \text{si } |\phi| \leq \varepsilon \\ 1 & \text{si } \phi > \varepsilon \end{cases} \quad (4.9)$$

$$\delta_{\varepsilon}(\phi) = \frac{dH_{\varepsilon}(\phi)}{d\phi} \quad (4.10)$$

Les sauts sont alors imposés sur une épaisseur fictive. Il est alors nécessaire que la fonction **Level Set** respecte la propriété de distance algébrique pour que l'épaisseur de l'interface soit constante. Si cette propriété est respectée, on peut remarquer d'après (4.9) que cette épaisseur vaut 2ε . On prendra généralement

$$\varepsilon = \alpha dx \quad \text{et} \quad 1 \leq \alpha \leq 2$$

L'algorithme de réinitialisation est alors indispensable pour assurer que l'épaisseur de l'interface soit constante dans le temps et dans l'espace. Il est souhaitable que cette épaisseur soit de l'ordre de 2 ou 3 mailles de calcul.

Lorsque l'on utilise cette formulation, on remarque alors que :

$$\nabla \cdot (\mu(\phi) \mathbf{D}) \neq \mu(\phi) \Delta V$$

car la viscosité varie dans l'épaisseur de l'interface, donc des dérivées spatiales de la viscosité vont apparaître dans le tenseur visqueux. On ne pourra donc plus simplifier l'expression des termes visqueux grâce à la condition de divergence nulle, comme c'est le cas pour des simulations incompressibles monophasiques. Ainsi, la plupart des auteurs tiennent compte des dérivées de la viscosité dans leur calcul (**Sussman & al, 1994**).

Cependant, cette démarche est discutable car la variation spatiale de μ en fonction de ϕ est artificielle et complètement dépendante du lissage utilisé. Ainsi les termes supplémentaires calculés dans les équations n'ont pas de justification physique. On peut d'ailleurs remarquer que si l'on suivait cette logique jusqu'au bout, on ne pourrait pas écrire la divergence nulle du champ de vitesse, car la masse volumique varie également dans l'épaisseur d'interface.

2.2 Méthode de projection et « *Delta Function Method* »

L'application de la méthode de projection à cette formulation ne pose pas de problème particulier :

$$\mathbf{V}^* = \mathbf{V}^n - \Delta t \left((\mathbf{V}^n \cdot \nabla) \mathbf{V}^n - \frac{\nabla \cdot (\mu(\phi) \mathbf{D})}{\rho(\phi)} + \frac{\sigma \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi}{\rho(\phi)} - \mathbf{g} \right) \quad (4.11)$$

L'équation pour la pression devient alors une équation de **Poisson** à coefficients variables (et discontinus) :

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla p^{n+1}}{\rho(\phi)} \right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{V}^*}{\Delta t} \quad (4.12)$$

Finalement, on en déduit le champ de vitesse à divergence nulle en utilisant l'équation suivante :

$$\mathbf{V}^{n+1} = \mathbf{V}^* - \Delta t \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho(\phi)} \quad (4.13)$$

2.3 L'équation de **Poisson** à coefficients non-constants

En utilisant la formulation décrite ci-dessus, on peut réécrire la discrétisation de l'équation de **Poisson** en tenant compte des variations de masse volumique quand on passe d'un fluide à un autre.

$$b_{ij} = \frac{1}{dt} \left(\left. \frac{\partial u^*}{\partial x} \right|_{ij} + \left. \frac{\partial v^*}{\partial y} \right|_{ij} \right)$$

$$\frac{1}{dx^2} \left(\frac{p_{i+1,j}^{n+1}}{\rho_{i+\frac{1}{2},j}} + \frac{p_{i-1,j}^{n+1}}{\rho_{i-\frac{1}{2},j}} + \frac{p_{ij+1}^{n+1}}{\rho_{ij+\frac{1}{2}}} + \frac{p_{ij-1}^{n+1}}{\rho_{ij-\frac{1}{2}}} - \left(\frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},j}} + \frac{1}{\rho_{i-\frac{1}{2},j}} + \frac{1}{\rho_{ij+\frac{1}{2}}} + \frac{1}{\rho_{ij-\frac{1}{2}}} \right) p_{ij}^{n+1} \right) = b_{ij} \quad (4.14)$$

Les sauts de masse volumique qui apparaîtront dans les diagonales de la matrice du système, vont influencer sur les performances des méthodes de résolution de système linéaires.

On dit que lorsque le saut est important la matrice est mal conditionnée. Beaucoup de méthodes deviennent inutilisables dans de telles configurations (*Gauss-Seidel*, Relaxation, transformée de *Fourier* rapide), d'autres méthodes (gradient conjugué) voient leurs performances chuter considérablement à moins que l'on utilise des techniques de préconditionnement (factorisation incomplète de *Cholesky*) de la matrice. Les méthodes multigrille déjà délicates à mettre en œuvre, peuvent fonctionner dans de telles configurations, à condition que certaines améliorations aient été apportées dans leur mise en œuvre (Approximation Discrète de *Galerkin*). Parmi les méthodes peu sensibles au mauvais conditionnement de la matrice, il semblerait que la méthode de gradient conjugué préconditionnée par une méthode multigrille soit l'une des plus rapides. Cette méthode a été développée et implantée dans nos codes de calculs en collaboration avec *Lucie Freret* lors d'un stage de *DESS* effectué au laboratoire pendant la durée de cette thèse (*Freret, 2003*).

3. Ghost Fluid Method

3.1 Introduction

Il existe une autre méthode qui permet de coupler des forces de tension de surface ou tout autre type de saut à travers une interface, sans qu'il soit nécessaire de lisser les discontinuités. Pour éviter ce lissage qui introduit une épaisseur d'interface fictive, et qui rend diffuse la position du front, (l'épaisseur réelle d'une interface liquide-gaz est de l'ordre de dizaine de nanomètres au maximum, de plus sa description ne peut être réalisée dans le cadre de la mécanique des fluides) (*Fedkiw & al, 1999*) ont imaginé une méthode numérique plus générale qui respecte le caractère discontinu de certaines variables physiques, en s'appuyant sur des considérations mathématiques concernant la différentiabilité de « fonctions » discontinues.

En effet, l'application de schémas numériques à des fonctions localement discontinues (ou non différentiables) pose certains problèmes, du fait des hypothèses de différentiabilité qui sont à l'origine de ces schémas.

Dans le cadre des méthodes numériques pour lois hyperboliques des schémas plus perfectionnés, dits « *Shock-Capturing* », permettent de décrire des surfaces de discontinuité, comme des ondes de choc, qui apparaissent spontanément dans le domaine de calcul, en évitant les erreurs numériques dispersives (oscillations parasites autour des surfaces de discontinuité). Ces méthodes introduisent implicitement de la dissipation numérique dans les zones où les gradients sont importants. Ainsi les discontinuités peuvent être décrites moyennant un lissage de leur profil.

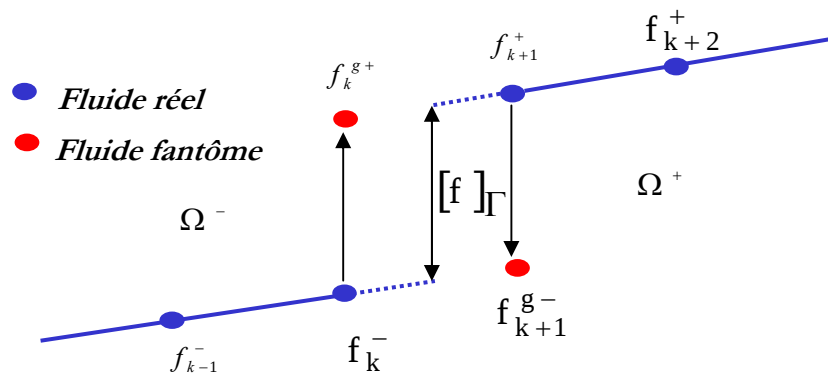
Dans le cas d'écoulements diphasiques incompressibles, le problème est différent. En effet, les surfaces de discontinuité n'apparaissent pas spontanément dans le calcul en fonction des caractéristiques locales de l'écoulement. Elles sont introduites explicitement

dans les équations, le déplacement de l'interface est calculé par un traitement spécial, et les conditions de saut doivent être imposées comme des contraintes supplémentaires qui dépendent des caractéristiques locales du front ; il est alors nécessaire d'utiliser une méthode de suivi d'interface. La subtilité du problème tient alors dans la technique que l'on utilisera pour imposer les sauts à travers l'interface. Dans l'approche continue présentée, précédemment les sauts sont lissés sur deux ou trois mailles, pour rendre continues et différentiables les variables discontinues que l'on a besoin de dériver. La force de tension de surface est introduite comme une force de volume qui n'est appliquée que sur l'épaisseur numérique de l'interface. Nous verrons plus loin dans les exemples que cette méthode est précise et robuste, mais qu'elle souffre de quelques défauts que l'on peut corriger en utilisant la ***Ghost Fluid Method***.

Cette méthode a été développée par (*Fedkiw & al , 1999*) , elle a ensuite été utilisée avec succès, dans le cas particulier d'équations de Poisson à coefficients non constants et à solutions discontinues dans (*Liu & al , 2000*), puis elle a été utilisée pour le calcul d'écoulements incompressibles diphasiques (*Kang & al , 2000*), puis réactifs (*Nguyen & al , 2001*). Son formalisme très général que nous allons maintenant exposer se couple très bien avec la méthode ***Level Set***, ce qui en fait un outil performant pour la simulation numérique.

3.2 Formalisme de base

Le principe de base de la ***Ghost Fluid Method*** repose sur le fait que l'on peut localiser précisément la surface de discontinuité dans le domaine de calcul, grâce au suivi d'interface, et que l'on impose explicitement la condition de saut. Il est alors possible de prolonger par continuité la variable discontinue avant de la dériver. Ceci nous permet d'imposer une condition de saut donnée, de façon très réaliste. La dérivation de la variable prolongée ne pose alors pas de problème puisque celle-ci a été rendue différentiable grâce au prolongement par continuité. Le schéma ci-dessous permet d'illustrer le principe de cette méthode.



Nous allons dans un premier temps exposer cette méthode sur un cas unidimensionnel, de type équation de la ***Laplace 1D***, dans un domaine Ω séparé par une interface Γ .

On distinguera alors deux sous-domaines Ω^+ et Ω , correspondant respectivement aux valeurs positives et négatives de la fonction **Level Set**.

$$\frac{d}{dx} \left(k(\phi) \frac{dT}{dx} \right) = 0 \quad (4.15)$$

La position de l'interface Γ sera repérée par une fonction **Level Set** ϕ statique. La variable étudiée $T(x)$ pourra être discontinue à la traversée de l'interface Γ , ainsi que sa dérivée et le coefficient de diffusion $k(\phi)$. Après discrétisation $T(x)$ sera repérée par un indice i , T_i . Les conditions limites sont les suivantes $T_0=0$ et $T_{nmax}=2$. Dans tous les tests qui suivront on prendra $nmax=100$.

Le domaine de calcul varie entre 0 et 1, et l'interface est localisée au centre de ce domaine.

1^{er} cas : $T(x)$ est continue, $k(\phi)$ est constant à travers l'interface

La discrétisation du problème est très simple :

$$\frac{(T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}))}{dx^2} = 0 \quad (4.16)$$

Le système résultant de cette discrétisation est un système linéaire dont la matrice caractéristique est tridiagonale, symétrique, définie positive. Le système peut donc être résolu rapidement en utilisant une factorisation de **Cholesky**.

La structure de la solution est très simple puisqu'il s'agit d'une droite dont la pente dépend des conditions limites de $T(x)$ et de la taille du domaine.

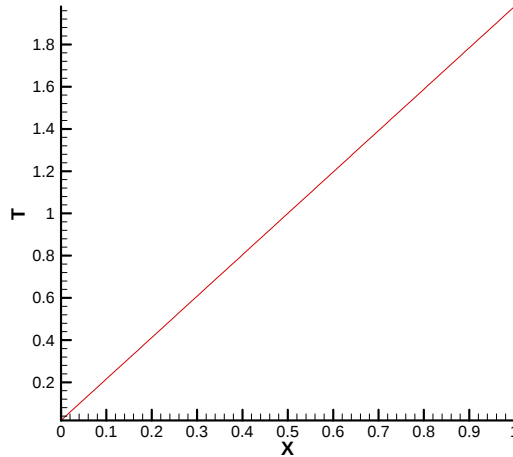


figure (4.1) : profil $T(x)$ dans le 1^{er} cas

2^{ème} cas : $T(x)$ est discontinue à travers l'interface, $k(\phi)$ est constant à travers l'interface

A la traversée de l'interface, $[T] = a_\Gamma = -1$. La discrétisation du système se fait alors différemment dans les domaines Ω^+ , Ω , et à la traversée de l'interface.

Le segment $[x_i, x_{i+1}]$ est traversé par l'interface, c'est-à-dire $\phi_i \leq 0$ et $\phi_{i+1} > 0$.

La discrétisation en i et $i+1$ s'écrit alors :

$$\frac{(T_{i+1}^+ - T_i^-)}{dx} - \frac{(T_i^- - T_{i-1}^-)}{dx} = 0$$

$$\frac{(T_{i+2}^+ - T_{i+1}^+)}{dx} - \frac{(T_{i+1}^+ - T_i^-)}{dx} = 0$$

L'exposant + ou - permet de savoir dans quel domaine on se situe. Cette discrétisation est trop grossière car elle est appliquée sur une variable discontinue, qui ne peut pas être dérivée avec des techniques aussi basiques sans que des erreurs numériques dispersives ne viennent parasiter le calcul. La ***Ghost Fluid Method*** permet une discrétisation plus fine :

$$\frac{(T_{i+1}^- - T_i^-)}{dx} - \frac{(T_i^- - T_{i-1}^-)}{dx} = 0$$

$$\frac{(T_{i+2}^+ - T_{i+1}^+)}{dx} - \frac{(T_{i+1}^+ - T_i^+)}{dx} = 0$$

Avec :

$$\begin{aligned} T_{i+1}^- &= T_{i+1}^+ - a_\Gamma \\ T_i^+ &= T_i^- + a_\Gamma \end{aligned}$$

Ainsi, lorsque l'on applique l'opération de dérivation discrète sur un segment traversé par l'interface, la variable discontinue est prolongée par continuité. Le système devient alors :

$$\frac{(T_{i+1}^+ - T_i^-)}{dx} - \frac{(T_i^- - T_{i-1}^-)}{dx} = \frac{a_\Gamma}{dx^2}$$

$$\frac{(T_{i+2}^+ - T_{i+1}^+)}{dx} - \frac{(T_{i+1}^+ - T_i^-)}{dx} = \frac{a_\Gamma}{dx^2}$$

En appliquant cette procédure, on obtient le résultat suivant :

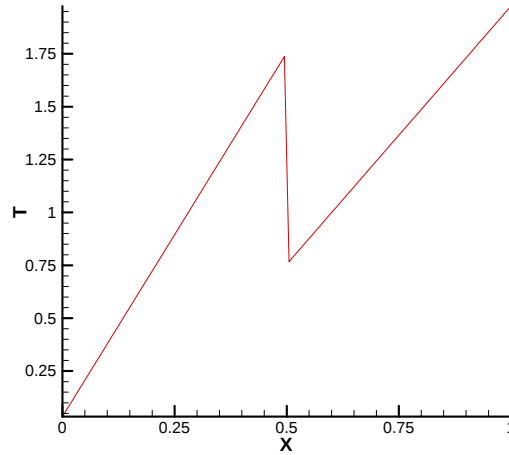


figure (4.2) : Profil $T(x)$ 2^{ème} cas

Le résultat obtenu est très satisfaisant, le caractère discontinu de la variable est bien pris en compte et cela sans aucun phénomène parasite.

3^{ème} cas : $T(x)$ est continue à travers l'interface, $k(\phi)$ est discontinu à travers l'interface, $k(\phi > 0) = 10$ et $k(\phi \leq 0) = 1$. La forme discrète de l'équation est alors :

$$\frac{\left(k_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{T_{i+1} - T_i}{dx} \right) - k_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{T_i - T_{i-1}}{dx} \right) \right)}{dx} = 0$$

Le segment $[x_i, x_{i+1}]$ étant traversé par l'interface sa discrétisation doit être effectuée avec plus d'attention.

$$k_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{T_{i+1} - T_i}{dx} \right) = k^+ \left(\frac{T_{i+1} - T_I}{(1-\theta)dx} \right) = k^- \left(\frac{T_I - T_i}{\theta dx} \right) \quad (4.17)$$

$$\theta = \frac{|\phi_i|}{|\phi_i| + |\phi_{i+1}|}$$

$$T_I = \frac{\theta k^+ T_{i+1} + (1-\theta) k^- T_i}{k^+ \theta + k^- (1-\theta)} \quad (4.18)$$

En injectant (4.18) dans (4.17), on obtient la relation suivante :

$$k_{i+\frac{1}{2}} = \frac{k^+ k^-}{k^+ \theta + (1-\theta) k^-} \quad (4.19)$$

En appliquant ce formalisme simple, mais précis car il utilise la localisation de l'interface à l'intérieur de la maille, on obtient le résultat suivant.

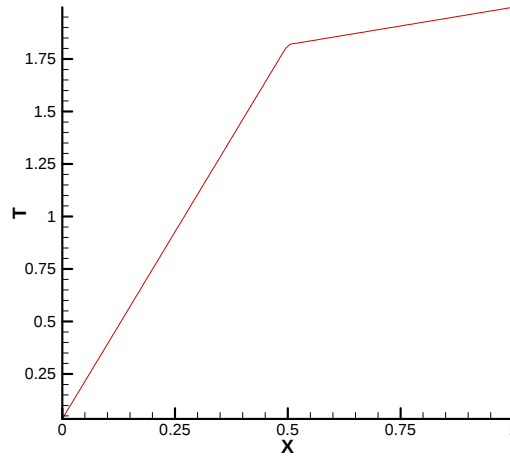


figure (4.3) : Profil $T(x)$ 3^{ème} cas

Ici encore ce formalisme donne un résultat tout a fait conforme à ce que l'on souhaitait calculer, sans aucun parasite numérique.

4^{ème} cas : $T(x)$ est discontinue à travers l'interface, $k(\phi)$ est discontinu à travers l'interface, $k(\phi > 0) = 10$ et $k(\phi \leq 0) = 1$. La discrétisation du système devient alors :

$$\frac{k_{i+\frac{1}{2}} \frac{(T_{i+1}^+ - T_i^-)}{dx} - k_{i-\frac{1}{2}} \frac{(T_i^- - T_{i-1}^-)}{dx}}{dx} = k_{i+\frac{1}{2}} \frac{a_\Gamma}{dx^2}$$

$$\frac{k_{i+\frac{3}{2}} \frac{(T_{i+2}^+ - T_{i+1}^+)}{dx} - k_{i+\frac{1}{2}} \frac{(T_{i+1}^+ - T_i^-)}{dx}}{dx} = k_{i+\frac{1}{2}} \frac{a_\Gamma}{dx^2}$$

Où $k_{i+1/2}$ est donné par la relation **(4.19)**. Le résultat est une combinaison des **figures (4.2)** et **(4.3)** :

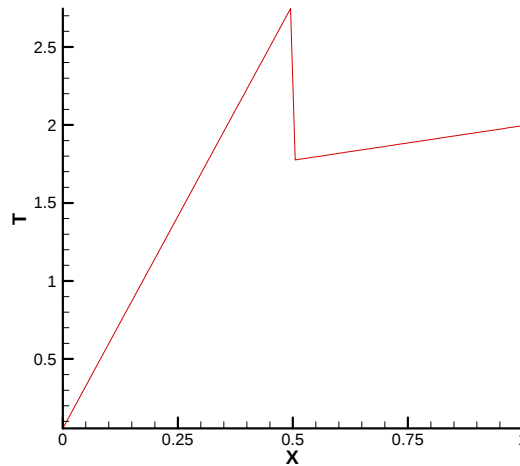


figure (4.4) : Profil $T(x)$ 4^{ème} cas

3.3 Généralisation de la *Ghost Fluid Method*

Nous allons maintenant reformuler l'algorithme de façon plus générale toujours dans le cas d'une équation de **Poisson**. De plus nous allons étendre le formalisme exposé ci-dessus au cas où l'on souhaite imposer une discontinuité sur les dérivées de la solution. Ensuite, nous en déduirons rapidement l'algorithme que l'on doit utiliser en **2D** et en **3D**. On considère une équation de **Poisson 1D** à coefficients non constants :

$$\frac{d}{dx} \left(k(\phi) \frac{dT}{dx} \right) = f(x)$$

Où $f(x)$ est une fonction quelconque. Le domaine de calcul est traversé par une interface Γ , avec les conditions de saut suivantes :

$$\begin{aligned} [T]_{\Gamma} &= a(x_{\Gamma}) \\ \left[k \frac{dT}{dx} \right]_{\Gamma} &= b(x_{\Gamma}) \\ k &= k^+ \text{ si } \phi > 0 \quad \text{et} \quad k = k^- \text{ si } \phi \leq 0 \end{aligned}$$

En suivant les principes énoncés au paragraphe précédent et développés dans (**Liu & al, 2000**), on obtient la discrétisation suivante :

$$\frac{\left(k_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{T_{i+1} - T_i}{dx} \right) - k_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{T_i - T_{i-1}}{dx} \right) \right)}{dx} = f_i + F^L + F^R$$

On teste la configuration de l'interface entre les points $[x_{i-1}, x_{i+1}]$. Si le segment $[x_i, x_{i+1}]$ ne contient pas l'interface, à savoir :

si $\phi_{i+1} > 0$ et $\phi_i > 0$:

$$\begin{aligned} F^L &= 0 \\ k &= k^+ \end{aligned}$$

ou si $\phi_{i+1} < 0$ et $\phi_i < 0$

$$\begin{aligned} F^L &= 0 \\ k &= k^- \end{aligned}$$

Sinon à partir de la distance à l'interface ϕ_i et ϕ_{i+1} on définit :

$$\begin{aligned} k_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{k^+ k^- (|\phi^-| + |\phi^+|)}{k^+ |\phi^-| + k^- |\phi^+|} \\ \theta &= \frac{|\phi_{i+1}|}{|\phi_{i+1}| + |\phi_i|} \end{aligned}$$

$$a_{\Gamma} = \frac{a_i |\phi_{i+1}| + a_{i+1} |\phi_i|}{|\phi_{i+1}| + |\phi_i|}$$

$$b_{\Gamma} = \frac{b_i |\phi_{i+1}| + b_{i+1} |\phi_i|}{|\phi_{i+1}| + |\phi_i|}$$

Où ϕ^+ désigne la valeur de ϕ positive et ϕ^- la valeur de ϕ négative.

si $\phi_{i+1} > 0$ et $\phi_i \leq 0$:

$$F^R = \frac{k_{i+\frac{1}{2}}^- a_{\Gamma}}{dx^2} + \frac{k_{i+\frac{1}{2}}^+ b_{\Gamma} \theta}{k^+ dx}$$

si $\phi_{i+1} \leq 0$ et $\phi_i > 0$:

$$F^R = -\frac{k_{i+\frac{1}{2}}^- a_{\Gamma}}{dx^2} - \frac{k_{i+\frac{1}{2}}^+ b_{\Gamma} \theta}{k^- dx}$$

On s'intéresse ensuite au segment $[x_{i-1}, x_i]$. De la même manière, on obtient :

si $\phi_{i-1} > 0$ et $\phi_i \leq 0$:

$$\begin{aligned} F^L &= 0 \\ k &= k^+ \end{aligned}$$

ou si $\phi_{i-1} \leq 0$ et $\phi_i > 0$

$$\begin{aligned} F^L &= 0 \\ k &= k^- \end{aligned}$$

Autrement, on définit :

$$k_{i-\frac{1}{2}} = \frac{k^+ k^- (|\phi^-| + |\phi^+|)}{k^+ |\phi^-| + k^- |\phi^+|}$$

$$\theta = \frac{|\phi_{i-1}|}{|\phi_{i-1}| + |\phi_i|}$$

$$a_{\Gamma} = \frac{a_i |\phi_{i-1}| + a_{i-1} |\phi_i|}{|\phi_{i-1}| + |\phi_i|}$$

$$b_{\Gamma} = \frac{b_i |\phi_{i-1}| + b_{i-1} |\phi_i|}{|\phi_{i-1}| + |\phi_i|}$$

si $\phi_{i-1} > 0$ et $\phi_i \leq 0$:

$$F^L = \frac{k_{i-\frac{1}{2}} a_{\Gamma}}{dx^2} - \frac{k_{i-\frac{1}{2}} b_{\Gamma} \theta}{k^+ dx}$$

si $\phi_{i-1} \leq 0$ et $\phi_i > 0$:

$$F^L = -\frac{k_{i-\frac{1}{2}} a_{\Gamma}}{dx^2} + \frac{k_{i-\frac{1}{2}} b_{\Gamma} \theta}{k^- dx}$$

3.4 Extension à une équation de *Poisson 2D*

Dans la suite de ce paragraphe, nous allons adopter la convention suivante pour alléger les équations.

$$\begin{aligned} T_x &= \frac{\partial T}{\partial x} \\ T_y &= \frac{\partial T}{\partial y} \\ T_n &= \mathbf{n} \cdot \nabla T = n_x \frac{\partial T}{\partial x} + n_y \frac{\partial T}{\partial y} \\ T_t &= \mathbf{t} \cdot \nabla T = n_y \frac{\partial T}{\partial x} - n_x \frac{\partial T}{\partial y} \end{aligned}$$

Où $\mathbf{n}$ et $\mathbf{t}$ sont respectivement le vecteur normal et le vecteur tangent à notre interface Γ .
Considérons maintenant une équation de *Poisson* à deux dimensions ;

$$(kT_x)_x + (kT_y)_y = f(\mathbf{x}) \quad (4.20)$$

On lui associe une fonction **Level Set** dont la ligne de niveau zéro définit une interface Γ , à la traversée de laquelle on a les conditions de saut suivantes :

$$[T]_{\Gamma} = a(x_{\Gamma}) \quad (4.21)$$

$$[kT_n]_{\Gamma} = b(x_{\Gamma}) \quad (4.22)$$

$$k = k^+ \text{ si } \phi > 0 \quad \text{et} \quad k = k^- \text{ si } \phi \leq 0$$

En remarquant que :

$$T_x = n_x T_n + n_y T_t$$

$$T_y = n_y T_n - n_x T_t$$

Puis en multipliant les relations ci-dessus par k et en imposant une opération de saut, on obtient les relations suivantes :

$$[kT_x]_{\Gamma} = n_x [kT_n]_{\Gamma} + n_y [kT_t]_{\Gamma}$$

$$[kT_y]_{\Gamma} = n_y [kT_n]_{\Gamma} - n_x [kT_t]_{\Gamma}$$

En remarquant que les sauts sont orientés dans la direction normale à l'interface et pas suivant la direction tangentielle à l'interface, on peut effectuer la simplification suivante :

$$[kT_x]_{\Gamma} = n_x [kT_n]_{\Gamma}$$

$$[kT_y]_{\Gamma} = n_y [kT_n]_{\Gamma}$$

Ces deux relations nous permettent d'imposer la condition de saut (4.22) en découplant les deux dimensions spatiales. En effet la condition de saut (4.22) devient :

$$[kT_x]_{\Gamma} = n_x b(x_{\Gamma})$$

$$[kT_y]_{\Gamma} = n_y b(x_{\Gamma})$$

Le système linéaire que l'on doit alors résoudre est :

$$\frac{\left(k_{i+1/2j} \left(\frac{T_{i+1j} - T_{ij}}{\Delta x} \right) - k_{i-1/2j} \left(\frac{T_{ij} - T_{i-1j}}{\Delta x} \right) \right)}{\Delta x} + \frac{\left(k_{ij+1/2} \left(\frac{T_{ij+1} - T_{ij}}{\Delta y} \right) - k_{ij-1/2} \left(\frac{T_{ij} - T_{ij-1}}{\Delta y} \right) \right)}{\Delta y} = f_{ij} + F^x + F^y$$

$$(4.23)$$

Le raisonnement utilisé précédemment sur le cas monodimensionnel peut être directement généralisé en **2D**. On aura selon (*Liu & al, 2000*) :

$$F^x = F^L + F^R$$

$$F^y = F^B + F^T$$

Quatre segments du maillage doivent être testés pour connaître la configuration de l'interface autour du point (i,j) . A partir de là on pourra estimer correctement les termes sources et les approximations que l'on doit imposer en ce point.

On s'intéresse au segment $[x_{i-1j}, x_{ij}]$:

si $\phi_{i-1j} > 0$ et $\phi_{ij} > 0$:

$$\begin{aligned} F^L &= 0 \\ k &= k^+ \end{aligned}$$

ou si $\phi_{i-1j} < 0$ et $\phi_{ij} < 0$

$$\begin{aligned} F^L &= 0 \\ k &= k^- \end{aligned}$$

Autrement, on définit :

$$\theta = \frac{|\phi_{i-1j}|}{|\phi_{ij}| + |\phi_{i-1j}|}$$

$$a_\Gamma = \frac{a_{ij}|\phi_{i-1j}| + a_{i-1j}|\phi_{ij}|}{|\phi_{ij}| + |\phi_{i-1j}|}$$

$$b_\Gamma = \frac{b_{ij}n_{xij}|\phi_{i-1j}| + b_{i-1j}n_{xi-1j}|\phi_{ij}|}{|\phi_{ij}| + |\phi_{i-1j}|}$$

$$k_{i-\frac{1}{2}j} = \frac{k^+k^- \left(|\phi^-| + |\phi^+| \right)}{k^+|\phi^-| + k^-|\phi^+|}$$

si $\phi_{i-1j} > 0$ et $\phi_{ij} \leq 0$:

$$F^L = \frac{k_{i-1/2j}a_\Gamma}{(\Delta x)^2} - \frac{k_{i-1/2j}b_\Gamma\theta}{k^+\Delta x}$$

Autrement si $\phi_{i-1j} \leq 0$ et $\phi_{ij} > 0$:

$$F^L = -\frac{k_{i-1/2j}a_\Gamma}{(\Delta x)^2} + \frac{k_{i-1/2j}b_\Gamma\theta}{k^-\Delta x}$$

On s'intéresse maintenant au segment $[x_{i-l_j}, x_{ij}]$:

si $\phi_{i+l_j} > 0$ et $\phi_{ij} > 0$:

$$\begin{aligned} F^R &= 0 \\ k &= k^+ \end{aligned}$$

ou si $\phi_{i+l_j} < 0$ et $\phi_{ij} < 0$

$$\begin{aligned} F^R &= 0 \\ k &= k^- \end{aligned}$$

Autrement, on définit :

$$\theta = \frac{|\phi_{i+1j}|}{|\phi_{ij}| + |\phi_{i+1j}|}$$

$$a_\Gamma = \frac{a_{ij}|\phi_{i+1j}| + a_{i+1j}|\phi_{ij}|}{|\phi_{ij}| + |\phi_{i+1j}|}$$

$$b_\Gamma = \frac{b_{ij}n_{xij}|\phi_{i+1j}| + b_{i+1j}n_{xi+1j}|\phi_{ij}|}{|\phi_{ij}| + |\phi_{i+1j}|}$$

$$k_{i+\frac{1}{2}j} = \frac{k^+k^- (|\phi^-| + |\phi^+|)}{k^+|\phi^-| + k^-|\phi^+|}$$

si $\phi_{i+l_j} > 0$ et $\phi_{ij} \leq 0$:

$$F^R = \frac{k_{i+1/2j}a_\Gamma}{(\Delta x)^2} + \frac{k_{i+1/2j}b_\Gamma\theta}{k^+\Delta x}$$

Autrement si $\phi_{i+l_j} \leq 0$ et $\phi_{ij} > 0$:

$$F^R = -\frac{k_{i+1/2j}a_\Gamma}{(\Delta x)^2} - \frac{k_{i+1/2j}b_\Gamma\theta}{k^-\Delta x}$$

La même procédure est maintenant applicable suivant l'autre direction spatiale :

On s'intéresse au segment $[x_{ij-1}, x_{ij}]$:

si $\phi_{ij-1} > 0$ et $\phi_{ij} > 0$:

$$\begin{aligned} F^B &= 0 \\ k &= k^+ \end{aligned}$$

ou si $\phi_{ij-1} < 0$ et $\phi_{ij} < 0$

$$\begin{aligned} F^B &= 0 \\ k &= k^- \end{aligned}$$

Autrement, on définit :

$$\theta = \frac{|\phi_{ij-1}|}{|\phi_{ij}| + |\phi_{ij-1}|}$$

$$a_\Gamma = \frac{a_{ij}|\phi_{ij-1}| + a_{ij-1}|\phi_{ij}|}{|\phi_{ij}| + |\phi_{ij-1}|}$$

$$b_\Gamma = \frac{b_{ij}n_{xij}|\phi_{ij-1}| + b_{ij-1}n_{xij-1}|\phi_{ij}|}{|\phi_{ij}| + |\phi_{ij-1}|}$$

$$k_{ij-\frac{1}{2}} = \frac{k^+k^- (|\phi^-| + |\phi^+|)}{k^+|\phi^-| + k^-|\phi^+|}$$

si $\phi_{ij-1} > 0$ et $\phi_{ij} \leq 0$:

$$F^B = \frac{k_{ij-1/2}a_\Gamma}{(\Delta y)^2} - \frac{k_{ij-1/2}b_\Gamma\theta}{k^+\Delta y}$$

Autrement si $\phi_{ij-1} \leq 0$ et $\phi_{ij} > 0$:

$$F^B = -\frac{k_{ij-1/2}a_\Gamma}{(\Delta y)^2} + \frac{k_{ij-1/2}b_\Gamma\theta}{k^-\Delta y}$$

On s'intéresse ensuite au segment $[x_{ij}, x_{ij+l}]$:

si $\phi_{ij+l} > 0$ et $\phi_{ij} > 0$:

$$\begin{aligned} F^T &= 0 \\ k &= k^+ \end{aligned}$$

ou si $\phi_{ij+l} < 0$ et $\phi_{ij} < 0$

$$\begin{aligned} F^T &= 0 \\ k &= k^- \end{aligned}$$

Autrement, on définit :

$$\theta = \frac{|\phi_{ij+1}|}{|\phi_{ij}| + |\phi_{ij+1}|}$$

$$a_\Gamma = \frac{a_{ij} |\phi_{ij+1}| + a_{ij+1} |\phi_{ij}|}{|\phi_{ij}| + |\phi_{ij+1}|}$$

$$b_\Gamma = \frac{b_{ij} n_{xij} |\phi_{ij+1}| + b_{ij+1} n_{xij+1} |\phi_{ij}|}{|\phi_{ij}| + |\phi_{ij+1}|}$$

$$k_{ij+\frac{1}{2}} = \frac{k^+ k^- (|\phi^-| + |\phi^+|)}{k^+ |\phi^-| + k^- |\phi^+|}$$

si $\phi_{ij+l} > 0$ et $\phi_{ij} \leq 0$:

$$F^T = \frac{k_{ij+1/2} a_\Gamma}{(\Delta y)^2} + \frac{k_{ij+1/2} b_\Gamma \theta}{k^+ \Delta y}$$

Autrement si $\phi_{ij+l} \leq 0$ et $\phi_{ij} > 0$:

$$F^T = -\frac{k_{ij+1/2} a_\Gamma}{(\Delta y)^2} - \frac{k_{ij+1/2} b_\Gamma \theta}{k^- \Delta y}$$

Ce formalisme peut être étendu de la même manière en **3D**.

4. Application de la *Ghost Fluid Method* aux écoulements diphasiques

4.1 Résolution de l'équation de *Poisson* pour la pression

On a vu au **chapitre 1** que les forces de tension de surface induisent une condition de saut sur la pression à la traversée de l'interface :

$$[p] = \sigma\kappa(\phi) + 2[\mu](\nabla u \cdot N, \nabla v \cdot N, \nabla w \cdot N) \cdot N \quad (4.24)$$

La procédure exposée ci-dessus est très bien adaptée pour résoudre l'équation de *Poisson* (4.12), puisque cela nous va permettre de prendre en compte le saut de densité (coefficient discontinu) et le saut de pression (discontinuité de la solution) à la traversée de l'interface.

4.2 Discontinuité du tenseur visqueux

Dans (*Kang & al, 2000*) les auteurs utilisent la *Ghost Fluid Method* pour simuler des écoulements diphasiques incompressibles. Ils proposent également d'utiliser cette méthode pour imposer la discontinuité du tenseur visqueux à la traversée de l'interface. La principale différence réside dans le fait que la résolution de la pression est implicite alors que la discrétisation temporelle des termes visqueux est explicite (dans notre cas). Cependant la discrétisation spatiale par la *Ghost Fluid Method* ne dépendant pas de la discrétisation temporelle, le formalisme exposé au paragraphe précédent peut être appliqué directement pour prendre en compte cette nouvelle discontinuité.

Cette procédure sera donc appliquée pour calculer les termes suivants :

$$\begin{aligned} & \left. \frac{(\mu u_x)_x + (\mu u_y)_y + (\mu u_z)_z}{\rho} \right|_{i+1/2, jk}^n \\ & \left. \frac{(\mu v_x)_x + (\mu v_y)_y + (\mu v_z)_z}{\rho} \right|_{ij+1/2, k}^n \\ & \left. \frac{(\mu w_x)_x + (\mu w_y)_y + (\mu w_z)_z}{\rho} \right|_{ijk+1/2}^n \end{aligned}$$

Sachant que chacune des composantes du tenseur visqueux est discontinue à la traversée de l'interface. A partir des relations (1.7) et (1.8), (*Kang & al, 2000*) dérivent les conditions de saut que l'on doit appliquer sur chaque composante du tenseur visqueux.

Le calcul pour y parvenir étant particulièrement long et complexe, nous nous contentons ici d'en présenter le résultat final, en laissant le soin au lecteur intéressé de se reporter à (*Kang & al, 2000*) :

$$\begin{pmatrix} [\mu u_x] & [\mu u_y] & [\mu u_z] \\ [\mu v_x] & [\mu v_y] & [\mu v_z] \\ [\mu w_x] & [\mu w_y] & [\mu w_z] \end{pmatrix} = [\mu] \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \\ \nabla w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \mathbf{t}_1 \\ \mathbf{t}_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \mathbf{t}_1 \\ \mathbf{t}_2 \end{pmatrix} + [\mu] \mathbf{n}^T \mathbf{n} \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \\ \nabla w \end{pmatrix} \mathbf{n}^T \mathbf{n} - [\mu] \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \mathbf{t}_1 \\ \mathbf{t}_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \mathbf{t}_1 \\ \mathbf{t}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \\ \nabla w \end{pmatrix} \mathbf{n}^T \mathbf{n} \quad (4.25)$$

A notre connaissance aucune autre étude numérique ne permet de prendre en compte ce saut, cependant nous avons pu observer dans nos simulations que l'influence de ce terme était assez minime sur les résultats obtenus.

4.3 Pas de temps adaptatif : critère sur la courbure

De nombreux auteurs (*Kang & al, 2000*), (*Sussman & al, 1998*) utilisent en plus des critères convectifs et diffusifs, un critère sur le pas de temps qui dépend de la courbure maximale de l'interface pendant une itération. Dans les calculs que nous avons réalisés nous avons pu vérifier que ce critère n'est pas nécessaire à la stabilité numérique du code au contraire du critère diffusif et du critère convectif. En revanche, il apparaît que pour une résolution fixée ce critère nous permette d'assurer la convergence en temps de nos calculs. Il est important de noter que suivant que l'on utilise la **Delta Function Method** ou la **Ghost Fluid Method**, les termes de tension de surface ne sont pas calculés de la même façon. En effet, dans la première approche les forces de tension de surface sont traitées de façon explicite dans le calcul de $\mathbf{V}^*$, il paraît donc assez logique d'utiliser une restriction temporelle sur ce terme pour assurer la stabilité du code. En revanche dans l'approche **Ghost Fluid**, les forces capillaires sont directement incorporées dans le champ de pression qui est calculé implicitement, une restriction temporelle sur les forces capillaires peut donc paraître ici superflue.

(*Kang & al, 2000*) propose le critère de temps suivant, basé sur la courbure :

$$Scfl = \sqrt{\frac{\sigma |\kappa|_{max}}{\min\{\rho^+, \rho^-\} \left(\min\{\Delta x, \Delta y, \Delta z\} \right)^2}} \quad (4.26)$$

Ce critère est ensuite couplé avec la relation (3.14) et les autres critères de stabilité :

$$\Delta t \leq \frac{1}{\left((Ccfl + Vcfl) + \sqrt{(Ccfl + Vcfl)^2 + 4Gcfl^2 + 4Scfl^2} \right)} \quad (4.27)$$

En réalité la pertinence de ce pas de temps réside plus dans son interprétation physique que dans sa justification du point de vue de l'analyse numérique. En effet, (*Popinet, 2000*) l'interprète comme «le pas de temps minimum nécessaire à la résolution temporelle des ondes capillaires de longueur d'onde de la taille d'une maille». Cette explication semble corroborer notre affirmation comme quoi ce pas de temps est un critère nécessaire à la convergence temporelle des calculs et non pas à la stabilité numérique. Dans la suite de cette étude, nous utiliserons systématiquement cette contrainte supplémentaire.

4.4 Quelques remarques sur les codes de calcul développés

A ce stade du manuscrit, il nous semble intéressant de faire un point sur les codes de calcul qui ont été développés et qui seront utilisés dans la suite de ce travail sur les écoulements diphasiques. Nous avons donc d'abord développé une version du code qui fonctionne en **2D** et en **2D** axisymétrique, puis nous avons développé une autre version pour les calculs **3D**. Pour ces deux versions plusieurs méthodes numériques peuvent être utilisées. Notamment pour la discrétisation des termes convectifs, on peut choisir d'utiliser le schéma **WENO 5** classique ou le schéma **WENO 5** «modifié». De même, les calculs peuvent être effectués avec **Delta Function Method** ou la **Ghost Fluid Method**. On peut également choisir le schéma d'intégration en temps entre un schéma d'**Euler**, un **RK2**, un **RK3**, ou une combinaison du schéma d'**Adams-Bashforth** pour la méthode de projection et le schéma **B.C.G.** pour la convection de ϕ . On peut remarquer que ces deux schémas sont formellement d'ordre 2, en revanche pour les combiner on est obligé de dégrader légèrement la précision du schéma **B.C.G.**. En effet, au lieu d'utiliser la relation suivante :

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \Delta t \left(V^{n+\frac{1}{2}} \cdot \nabla \right) \phi^{n+\frac{1}{2}}$$

comme le couplage avec la méthode de projection ne permet pas de connaître $V^{n+1/2}$, on utilisera :

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \Delta t (V^n \cdot \nabla) \phi^{n+\frac{1}{2}}$$

Ce raccourci revient à dégrader la précision du schéma néanmoins, les tests effectués avec cette méthode donnent des résultats comparables à ceux effectués avec un schéma **RK2** ou **RK3**, tout en apportant un gain en temps de calcul important. Les résultats présentés dans ce manuscrit ont été obtenus avec le **WENO 5** «modifié» pour les termes convectifs, et le schéma **B.C.G./ Adams-Bashforth** pour l'intégration temporelle. Comme on l'a déjà spécifié, l'algorithme de réinitialisation de la fonction distance est résolu avec un schéma **WENO 5** classique et un **RK2**.

Les codes développés ont été entièrement parallélisés en utilisant la bibliothèque **MPI** par **Lucie Freret** pendant son stage de **DESS**. Alors que le code a été originellement développé avec une méthode de Gradient Conjugué préconditionnée par une factorisation de Cholesky Incomplète (**ICCG**), pendant ce même stage, **Lucie Freret** a

programmé une méthode de résolution de systèmes linéaires pour améliorer la vitesse de résolution de l'équation de **Poisson**. Cette méthode, que nous avons déjà évoqué précédemment, est la Méthode de Gradient Conjugué préconditionnée par une méthode Multigrille (**MGCG**). Grâce à toutes ces améliorations, un gain important a été réalisé sur les temps de calcul, ce qui nous a permis d'effectuer des simulations tridimensionnelles complexes, qui auraient été hors de portée sur des calculateurs séquentiels.

5. Validation des codes « diphasiques »

5.1 Goutte statique

Le cas de la goutte statique permet de vérifier le bon comportement des méthodes numériques pour imposer une condition de saut à la traversée de l'interface. En effet dans ce cas, le champ de pression à l'intérieur de la goutte est connu puisqu'il est constant, et égal au saut de pression à la traversée de l'interface. En réalité, dans un tel cas, toutes les méthodes numériques calculent un champ de vitesse « plus ou moins faible » suivant la précision de la discrétisation. Ce champ de vitesse provient de la représentation d'une interface circulaire sur une grille cartésienne. En effet la répartition des termes sources qui permettent de calculer le champ de pression n'étant pas parfaitement circulaire, il en résulte un champ de pression symétrique par rapport aux axes du maillage, mais qui ne respecte pas exactement (suivant le maillage utilisé) la symétrie circulaire de l'interface **figure (4.5)**. On parle alors de courants parasites. Après avoir vérifié que la condition de saut sur la pression est bien respectée, il est particulièrement intéressant de comparer la **Delta Function Method** et la **Ghost Fluid Method** et d'étudier leurs propriétés de convergence face à ce « parasite » numérique. Les paramètres de la simulation sont les suivants :

$$l_x = 0.001m$$

$$l_y = l_x$$

$$R_G = \frac{l_x}{6}$$

$$\rho_1 = 1000kg.m^{-3}$$

$$\rho_2 = 1.226kg.m^{-3}$$

$$\mu_1 = 0.001137kg.m^{-1}.s^{-1}$$

$$\mu_2 = 1.78.10^{-5}kg.m^{-1}.s^{-1}$$

$$\sigma = 0.072kg.s^{-2}$$

Il n'y a pas de gravité, et dans un premier temps le calcul est réalisé en 2D plan. Les conditions limites sont toutes des conditions de paroi.

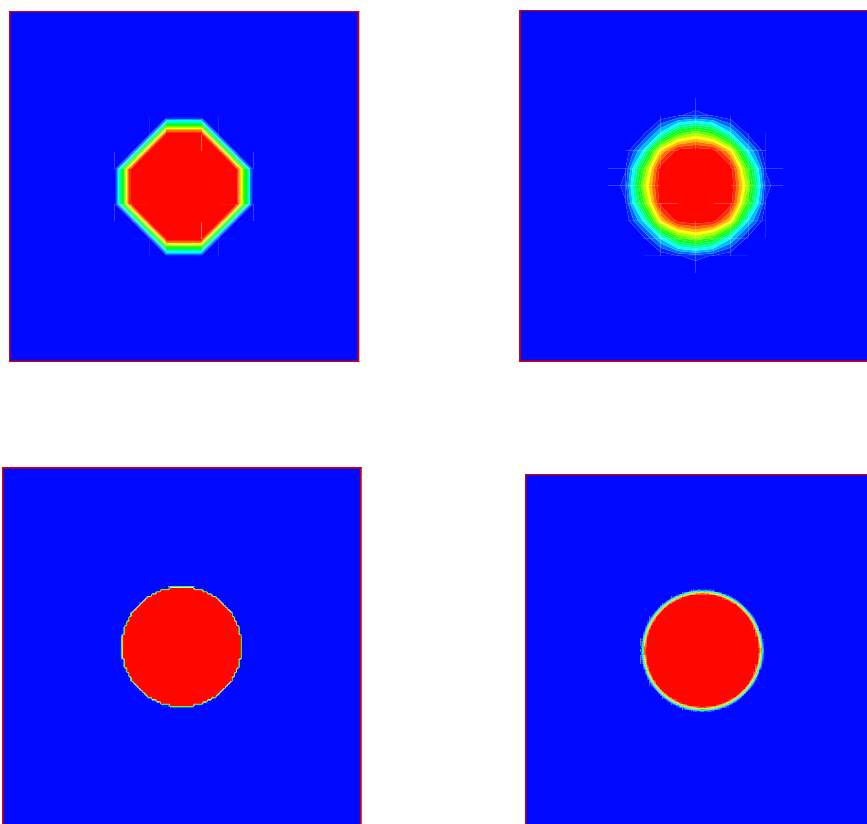
La différence de pression entre la goutte et l'extérieur s'exprime alors (dans le cas d'une goutte 2D) :

$$[p] = \frac{\sigma}{R_G}$$

La courbure de l'interface étant égale à 6000 m^{-1} , le saut de pression à la traversée de l'interface doit être égale à 432 Pa .

Maillage	$[p]$ <i>Ghost Fluid</i>	$\max\{ V \}$ <i>Ghost Fluid</i>	$[p]$ <i>Delta Function</i>	$\max\{ V \}$ <i>Delta Function</i>
20x20	436.3 Pa	$7.47 \cdot 10^{-5} \text{ m.s}^{-1}$	455.8 Pa	$3.08 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$
40x40	433.4 Pa	$2.27 \cdot 10^{-5} \text{ m.s}^{-1}$	437.5 Pa	$2.87 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$
80x80	432.2 Pa	$7.78 \cdot 10^{-6} \text{ m.s}^{-1}$	433.3 Pa	$1.95 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$
160x160	432.0 Pa	$2.24 \cdot 10^{-6} \text{ m.s}^{-1}$	432.3 Pa	$1.07 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$

Les résultats exposés dans le tableau ci-dessus mettent en évidence la supériorité de la **GFM** par rapport à la **DFM**. En effet la valeur de la pression dans la goutte est plus précise si l'on utilise la **GFM** plutôt que la **DFM**, de plus l'amplitude des courants parasites est beaucoup plus faible avec cette même méthode.



*figure (4. 5) : Champs de pression dans le domaine en haut (20x20)
en bas (160x160), à gauche GFM à droite DFM*

La **figure (4.5)** présente le champ de pression dans le domaine pour un maillage très grossier et un maillage fin. On peut ainsi visualiser l'épaississement de l'interface, lorsque l'on utilise la **D.F.M.** Dans (**Liu & al, 2000**) , les auteurs indiquent que leur méthode est d'ordre 1 en espace. La décroissance de l'erreur sur les courants parasites est plus rapide que celle que l'on obtiendrait avec une méthode d'ordre 1, mais tout de même moins rapide qu'avec une méthode d'ordre 2, on peut estimer grossièrement que la méthode est à peu près d'ordre 1.5. En revanche sur les résultats obtenus avec la **D.F.M.** la décroissance de l'erreur est beaucoup plus lente, et comme il est mentionné dans (**Liu & al, 2000**) cette méthode n'est pas d'ordre 1. On retrouve ici un problème déjà connu pour les méthodes **V.O.F.** , à savoir la faiblesse de la convergence spatiale (**Renardy & al, 2002**). Afin de poursuivre les validations des codes, on a effectué une série de tests similaires mais avec une goutte axisymétrique. L'une des frontières du domaine sera donc un axe de symétrie. Pour un calcul axisymétrique, le saut de pression est donné par :

$$[p] = \frac{2\sigma}{R_G}$$

Soit dans le cas étudié un saut de pression égale à 864 Pa.

Maillage	$[p]$ ghost fluid	$\max\{ V \}$ ghost fluid	$[p]$ delta function	$\max\{ V \}$ delta function
10x20	872.4 Pa	$1.23 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$	902.0 Pa	$4.73 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$
20x40	865.4 Pa	$4.20 \cdot 10^{-5} \text{ m.s}^{-1}$	874.2 Pa	$4.08 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$
40x80	864.5 Pa	$1.20 \cdot 10^{-5} \text{ m.s}^{-1}$	866.5 Pa	$2.87 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$
80x160	864.1 Pa	$3.08 \cdot 10^{-6} \text{ m.s}^{-1}$	864.6 Pa	$1.65 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$

On observe les mêmes tendances que sur le cas précédent. Au vu des résultats présentés ici, l'utilisation de la **G.F.M.** paraît dès à présent plus pertinente pour la suite de ce travail. Néanmoins, nous allons continuer à comparer ces deux méthodes sur les tests qui suivent.

5.2 Instabilité de Rayleigh-Taylor

L'instabilité de **Rayleigh-Taylor** est un cas classique pour valider un code de mécanique des fluides avec suivi d'interface. Cette instabilité est générée lorsqu'une couche d'un fluide « lourd » est placée au-dessus d'une couche d'un fluide plus « léger ». Les deux fluides sont immiscibles et si l'interface est légèrement perturbée, une instabilité de type **Rayleigh-Taylor** va se développer sous l'effet de la gravité. Ce cas-test a été proposée par (**Puckett & al, 1997**), pour tester une méthode **V.O.F.** Dans ce test la topologie de l'interface doit être conservée (pas de coalescence, ni de cassure d'interface). Il a également été utilisé par (**Popinet, 2000**) pour le cas d'une interface décrite par une méthode **lagrangienne** de type « chaîne de marqueurs ». Le principal intérêt est en particulier d'étudier la capacité de la méthode de suivi d'interface à simuler précisément la formation de ligaments. On s'intéressera notamment à deux phénomènes parasites récurrents ; la cassure artificielle des structures d'interface fines, et la perte de masse.

La configuration et les conditions initiales sont les suivantes :

$$\begin{aligned}
l_x &= 1m \\
l_y &= 4l_x \\
\rho_1 &= 1.225kg.m^{-3} \\
\rho_2 &= 0.1694kg.m^{-3} \\
\mu &= 0.00313kg.m^{-1}.s^{-1} \\
\phi(x, y) &= y - \frac{l_y}{2} - \eta_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{l_x}\right) \\
\eta_0 &= 0.05m
\end{aligned}$$

On impose des conditions limites périodiques sur les frontières verticales et des conditions limites de paroi sur les frontières horizontales.

Sur la **figure (4.6)**, on peut voir sur le graphique du haut les résultats obtenus avec une méthode **V.O.F.** (**Puckett & al, 1997**) avec un maillage (128x512), et en bas les résultats obtenus avec une méthode chaîne de marqueurs (**Popinet, 2000**) sur un maillage (64x256). Le meilleur comportement du solveur **lagrangien** est évident puisque les résultats obtenus sont très satisfaisant alors que la résolution est deux fois moins fine. En effet la solution obtenue avec la méthode **V.O.F.** est dégradée par des cassures artificielles du filament, alors que la solution obtenue avec la méthode des marqueurs permet de résoudre très finement et sans cassure le développement des filaments.

Sur la **figure (4.7)**, on présente les résultats que nous avons obtenus avec notre code pour le maillage (64x256) et le maillage (128x512). On constate sans surprise que la solution obtenue sur le maillage le plus grossier est dégradée par rapport à la solution obtenue par (**Popinet, 2000**) sur le même maillage, puisque comme pour les résultats obtenus avec une méthode **V.O.F.**, des cassures artificielles surviennent. En revanche sur le maillage plus fin, on obtient une solution beaucoup plus intéressante puisque les structures fines de l'interface sont décrites sans cassure artificielle.

La technique utilisée permet donc d'avoir une résolution légèrement meilleure pour décrire les filaments d'épaisseur très faible par rapport à une méthode **V.O.F.** classique. La technique **lagrangienne** est bien sûr plus précise, mais aussi beaucoup plus limitée puisque les changements topologiques ne peuvent être simulés implicitement par ce type d'approche.

Les estimations réalisées sur les pertes de masse montrent qu'elles sont négligeables, et ce quelque soit la résolution fixée (le calcul des pertes de masse est arrêté au temps $t = 0.9$ sec).

Résolution	32x128	64x256	128x512
Pertes de masse	0.61%	0.13%	-0.23%

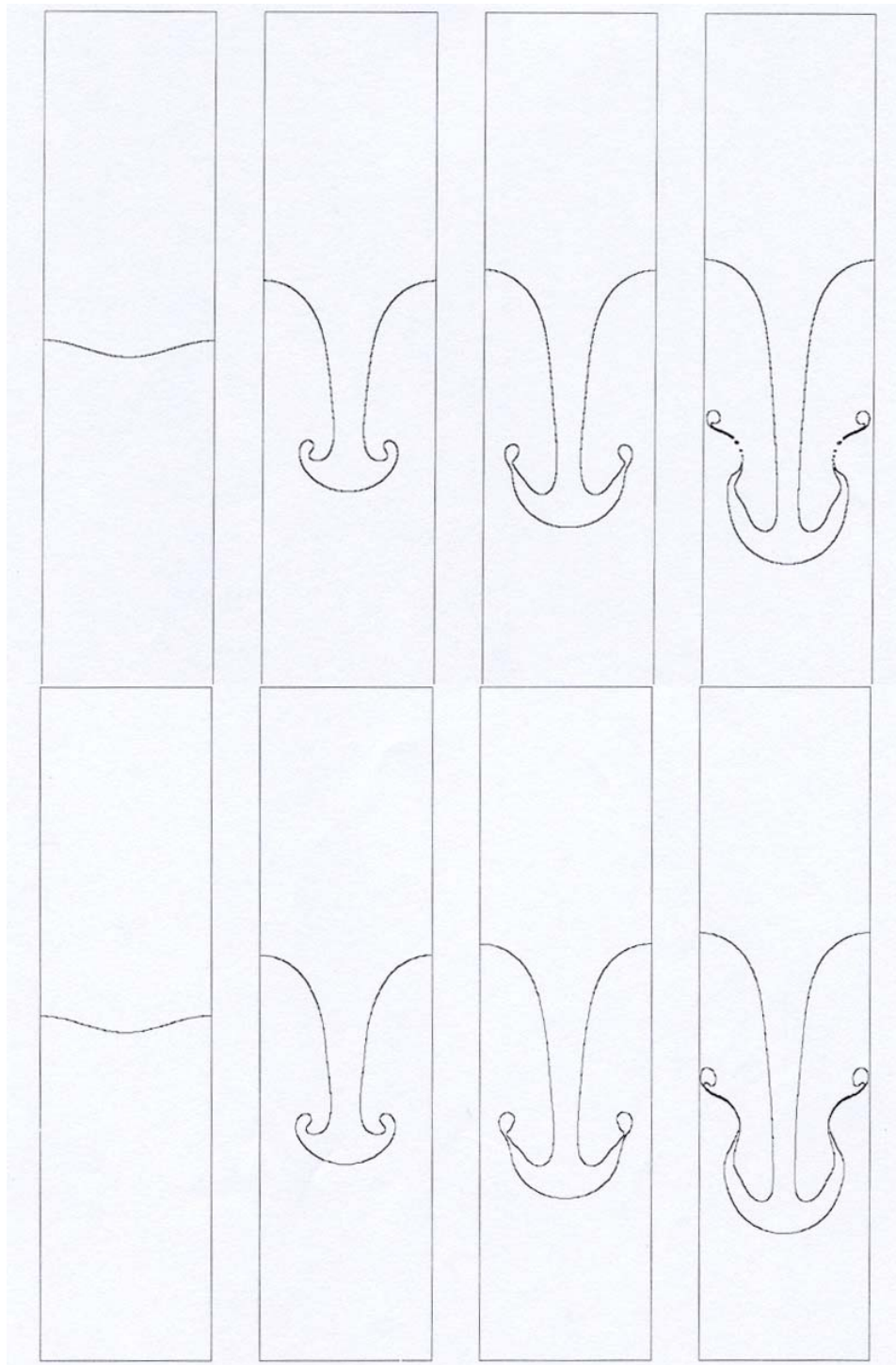


Figure (4.6) : Méthode VOF (en haut) d'après (Puckett & al, 1997) et Marqueur (en bas) d'après (Popinet, 2000) aux instants $t=0s$, $t=0.7s$, $t=0.8s$, $t=0.9s$

Nous avons également comparé les performances de la **Delta Function Method** et de la **Ghost Fluid Method** sur ce test. Cette comparaison nous a permis d'observer que les structures d'interface fines sont mieux prédites par la **Ghost Fluid Method**, puisque sur le maillage (128×512) des cassures du filament surviennent si l'on utilise la **Delta Function Method**. Ce résultat semble tout à fait cohérent, puisque le formalisme **Ghost Fluid** permet de traiter l'interface comme une vraie discontinuité. La localisation du front

dans le domaine étant moins diffuse, il est assez raisonnable de penser que l'écoulement calculé dans des membranes très fines sera plus réaliste.

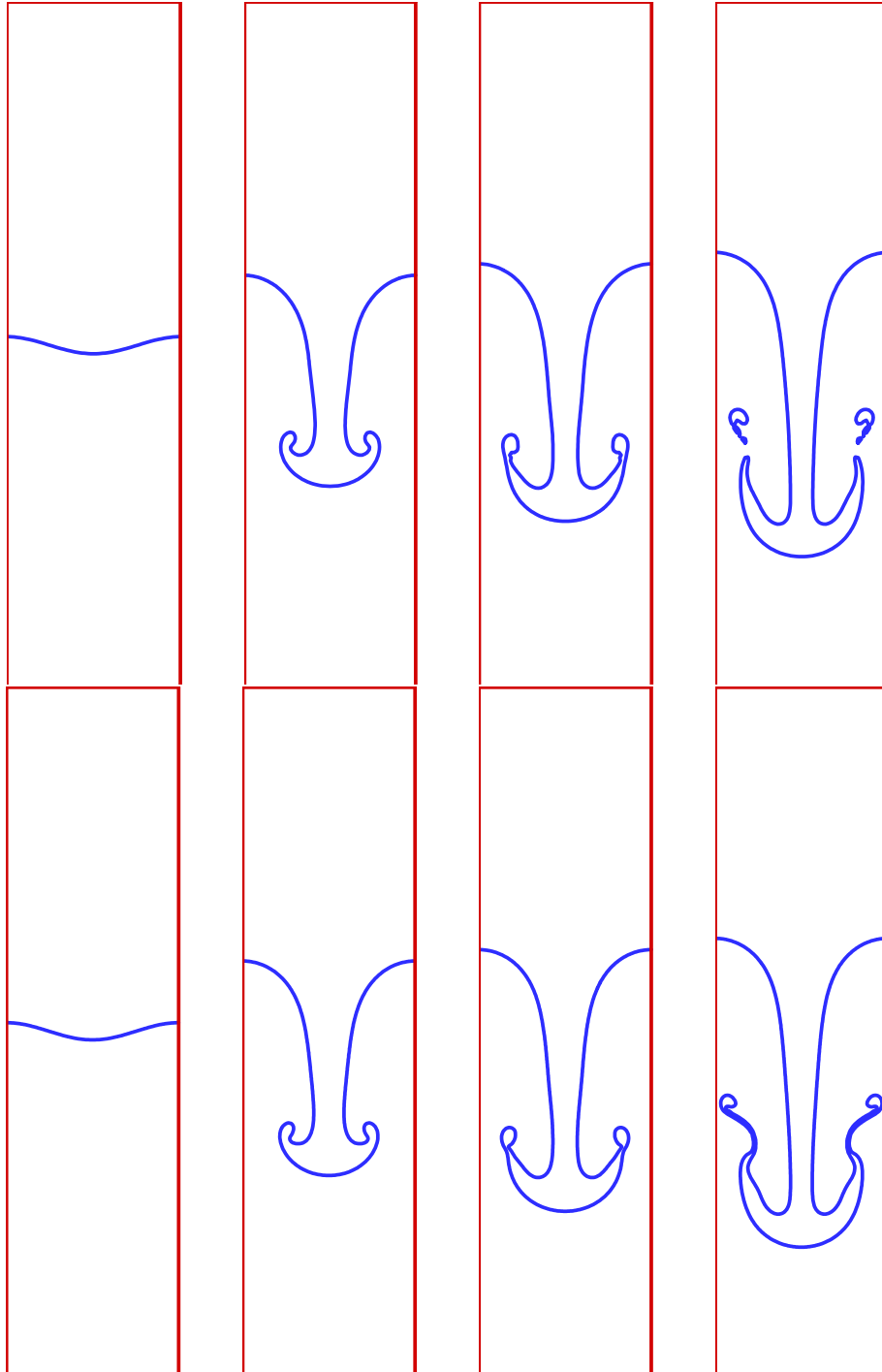


Figure (4.7) : Méthode Level set : en haut 64x256 et en bas 128x512 aux instants $t=0s$ $t=0.7s$, $t=0.8s$, $t=0.9s$

5.3 Coalescence de deux gouttes de mercure

Le dernier test de validation que nous avons effectué est la coalescence de deux gouttes de mercure. Dans sa thèse **Popinet** s'est inspiré d'une expérience de (**Menchaca-Roca & al, 1997**) pour proposer ce test. Le fort rapport de densité entre l'air et le mercure (≈ 10000), et la tension de surface élevée de l'interface air-mercure font de cette simulation, un test intéressant pour estimer la capacité du code à effectuer des calculs lorsque les sauts à la traversée de l'interface sont particulièrement contraignants. En effet, les méthodes **V.O.F.** sont connues pour développer des courants parasites, lorsque le rapport de densité et les effets de tension de surface sont forts. Dans sa thèse **Popinet** utilise une discrétisation compatible avec une méthode **lagrangienne**, qui à l'instar de la **Ghost Fluid Method** permet de traiter les sauts à la traversée de l'interface sans lisser les termes discontinus. Cette discrétisation d'ordre plus élevée que les méthodes classiques est beaucoup moins sensible aux courants parasites, et permet donc l'étude du comportement de l'interface entre deux fluides de densité très différentes. Le calcul est réalisé en **2D** axisymétrique.

Les deux gouttes sont posées, sans vitesse initiale, la coalescence survient naturellement car les deux interfaces se rejoignent au même point au centre du domaine. Le phénomène étudié étant symétrique, on peut diviser le domaine en deux, en imposant une condition de symétrie sur la frontière horizontale inférieure au point de jonction entre les deux gouttes. Les conditions limites verticales de gauche et horizontales en haut sont des conditions libres.

La configuration de la simulation est la suivante :

$$\begin{aligned}R_0 &= 0.0026m \\l_x &= 1.5R_0 \\l_y &= 2l_x \\\rho_1 &= 13600kg.m^{-3} \\\rho_2 &= 1.226kg.m^{-3} \\\mu_1 &= 0.001526kg.m^{-1}.s^{-1} \\\mu_2 &= 1.78.10^{-5}kg.m^{-1}.s^{-1} \\\sigma &= 0.435kg.s^{-2}\end{aligned}$$

On peut visualiser l'évolution de la surface en fonction du temps sur la **figure (4.8)**, l'intervalle de temps entre chaque zone est de *0.0035 seconde*. Les contours d'interface prédits par la simulation numérique effectuée par (**Popinet , 2000**) sont superposés sur les 8 premières images. L'accord avec l'expérience est bon sur les 5 premières images, puis la simulation prédit un comportement un peu différent de celui de l'expérience.

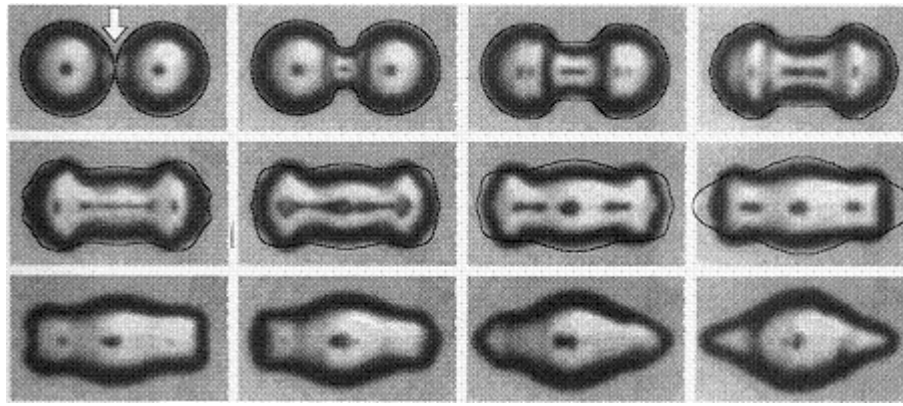


figure (4.8) : évolution temporelle de l'interface : comparaison simulation popinet /expérience (Menchaca-Roca & al, 1997)

Dans (Menchaca-Roca & al, 1997) les auteurs mesurent l'évolution temporelle du rayon au point de reconnexion. Sur la **figure (4. 9)**, nous pouvons visualiser les résultats obtenus par (Popinet , 2000) et les comparer avec les mesures de (Menchaca-Roca & al, 1997) sur cette mesure temporelle.

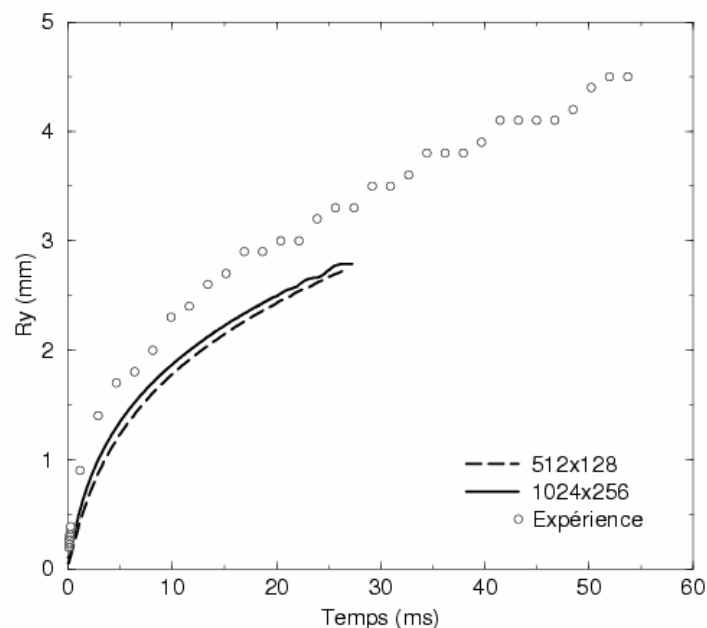


figure (4. 9) : évolution temporelle du rayon en fonction du temps comparaison expérience/ simulation Popinet

Même si qualitativement ces résultats sont cohérents, un désaccord non négligeable apparaît entre les résultats expérimentaux et les résultats de simulation de **Popinet**. Dans sa thèse **Popinet** explique ce désaccord par l'apparition de structures spatiales fortement dissipatives à des échelles inférieures à l'échelle du maillage utilisé dans ces simulations, et par le fait que les deux gouttes ne sont pas parfaitement sphériques car elles sont posées sur une surface..

Sur la **figure (4. 11)**, nous montrons les résultats que nous obtenons en suivant l'évolution temporelle du rayon sur l'axe de symétrie de la coalescence. Nous avons

comparé la **G.F.M.** et la **D.F.M.**, et une fois de plus nous avons obtenu des résultats meilleurs avec la **G.F.M.**, en effet sur la **figure (4. 11)** la courbe bleue (**G.F.M.**) est plus proche de la courbe expérimentale que la courbe rouge (**D.F.M.**). Les résultats présentés sur la **figure (4.11)** ont été réalisés sur un maillage 128x256.

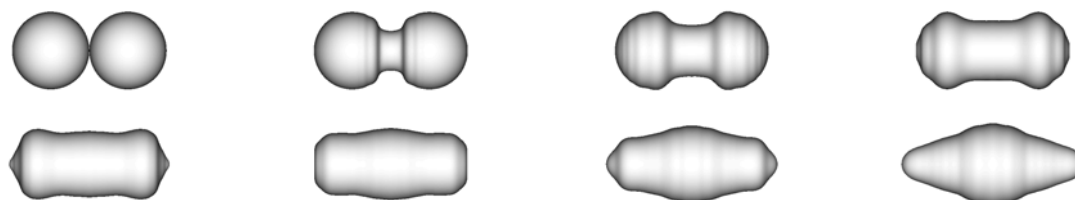


figure (4. 10) : simulation de l'évolution temporelle de l'interface

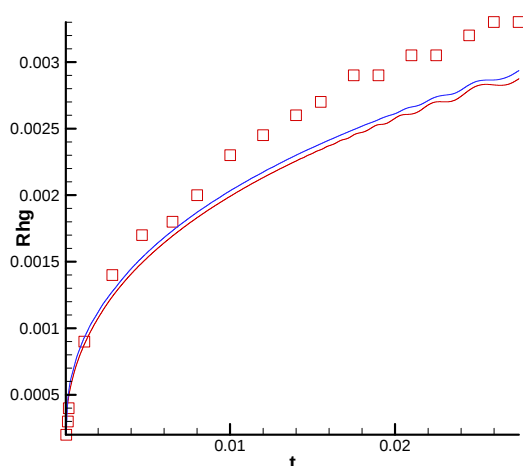


figure (4. 11) : évolution temporelle du rayon (mètre) en fonction du temps (sec) en bleu G.F.M., en rouge D.F.M.,  expérience Menchaca-Rocha

Nos résultats, **figures (4.10)** et **(4.11)** sont similaires à ceux obtenus par (**Popinet , 2000**). L'explication qui nous semble la plus crédible, pour expliquer le désaccord entre les simulations et l'expérience, est la dissymétrie des gouttes de mercure dans l'expérience car elles sont posées sur un support. Elles sont donc vraisemblablement déformées par la gravité.

Les pertes de masse ont été évaluées pour deux maillages différents, et nous avons pu constater qu'elles étaient négligeables :

Résolution	64x128	128x256
Pertes de masse	0.23%	-0.14%

5.4 Conclusions sur les résultats obtenus

Au vu des trois tests préliminaires réalisés la **G.F.M.** donne systématiquement des résultats supérieurs à la **D.F.M.** . De plus, bien que la **G.F.M.** soit une méthode plus complexe, plus difficile à implémenter et donc à priori plus lourde en temps de calcul, nous avons constaté que cette méthode était plus rapide que la **D.F.M.** en temps de calcul. Ceci s'explique par une convergence plus rapide de la méthode de résolution du système linéaire pour la pression, car on utilise une discrétisation des termes discontinus plus élaborée. Cette méthode de discrétisation semble donc être une avancée significative pour l'amélioration des simulations numériques directes d'écoulements diphasiques avec suivi d'interface.

Pour conclure, il est important de mentionner un dernier point ; le formalisme de la **G.F.M.** est très général et très rigoureux, il sera donc possible de l'utiliser pour imposer d'autres types de discontinuités à la traversée de l'interface. Nous verrons notamment au **chapitre 6** qui traite des « interfaces réactives » que certaines discontinuités ne peuvent être lissées, une méthode qui traite des sauts raides est alors requise.

Chapitre 5

Etudes numériques des collisions de gouttes

1. Introduction

1.1 Généralités sur le phénomène d'atomisation secondaire

Comme on l'a déjà souligné précédemment, le processus physique qui conduit à la formation d'un spray de gouttelettes à partir d'un noyau liquide continu, se décompose généralement de deux étapes distinctes. La première, l'atomisation primaire, est l'étape pendant laquelle la phase continue se déstabilise en produisant des gouttes de différentes tailles. La deuxième, l'atomisation secondaire, est une étape de transport du spray formé. Durant cette dernière étape la granulométrie du spray peut évoluer, en effet les gouttes formées pendant l'atomisation primaire peuvent être instables, si leur nombre de **Weber** est trop important par exemple. Pour des gouttes instables, différents modes de rupture peuvent survenir, conduisant alors à la cassure de ces « gouttes mères » en un plus ou moins grand nombre de « gouttes filles » suivant le nombre de **Weber** de la « goutte mère ».

Durant l'atomisation secondaire un autre processus physique peut influencer sur la granulométrie d'un spray suffisamment dense, il s'agit des collisions entre gouttes. En effet plus le spray est dense, plus la probabilité qu'une goutte rencontre une autre goutte sur sa trajectoire est élevée. Il semble alors important pour améliorer les prédictions sur la granulométrie de sprays denses, d'étudier plus finement le phénomène de collisions entre gouttelettes pour connaître le résultat de ces collisions.

Des études essentiellement empiriques ont été menées sur ces sujets. Ces études ont mis en évidence les différents modes de rupture possibles pour une goutte transportée et ont permis une classification des différents types de collisions de gouttes. Les corrélations

empiriques établies par ces études ont ainsi permis d'améliorer les prédictions des codes de calcul industriels.

Cependant considérant le grand nombre de paramètres physiques qui peuvent influencer sur de tels processus physiques, il semble intéressant d'utiliser une méthode de suivi d'interface qui permette d'étudier très finement ces phénomènes, afin de compléter les études expérimentales existantes et d'apporter des données supplémentaires qui pourraient être intéressantes pour la modélisation dans des codes industriels.

Nous allons nous concentrer ici sur les collisions de gouttes, même si des travaux étudiant la stabilité d'une goutte cisailée par un gaz sont envisageables, on notera par exemple (*Han & al, 1999*), qui utilisent une méthode de suivi d'interface de type « **Front-Tracking** » pour étudier la déformation d'une goutte en fonction de sa vitesse et des propriétés physiques des fluides.

1.2 Etudes expérimentales des collisions de gouttes

Les études expérimentales mettent en évidence différents comportements que l'on peut observer pendant une collision de gouttes. Ces études montrent que les principaux paramètres dont dépend la collision sont les suivants : le coefficient de tension de surface σ , la viscosité du liquide μ_l , la densité du liquide ρ_l , la vitesse relative entre les gouttes U_c , le paramètre d'impact I , et les diamètres des deux gouttes d_p et d_g , où l'indice p désigne la plus petite des deux gouttes et l'indice g la plus grande des deux gouttes. A partir de ces paramètres, la plupart des auteurs définissent quatre nombres adimensionnels susceptibles de caractériser les collisions de gouttes. Ces nombres sont les suivants :

$$We = \frac{\rho_l U_c^2 d_p}{\sigma} \quad Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma d_p}} \quad \Delta = \frac{d_p}{d_g} \quad I = \frac{2b}{d_p + d_g}$$

Où **We** est le nombre de **Weber**, **Oh** est le nombre d'**Ohnesorge**, Δ est le rapport des diamètres entre les gouttes. I le paramètre d'impact de la collision caractérise l'excentricité de la collision : b est la distance entre les deux lignes parallèles passant aux centres des gouttes dans la direction de la vitesse relative des deux gouttes. Ces quatre nombres adimensionnels ne tiennent pas compte des propriétés physiques du gaz ambiant. Pourtant dans (*Jiang & al, 1992*) , les auteurs ont montré expérimentalement que la viscosité et la densité du gaz pouvaient avoir une influence sur les collisions de gouttes.

La plupart des auteurs s'accordent pour discerner cinq régimes de collision différents :

- Coalescence après de faibles déformations **(a)**
- Rebond **(b)**
- Coalescence après d'importantes déformations **(c)**
- Coalescence suivi de séparation pour des collisions quasi-frontales **(d)**
- Coalescence suivi de séparation pour des collisions non-frontales **(e)**

Le régime **(a)** correspond au cas où l'énergie cinétique des gouttes est faible comparée à l'énergie de surface, par conséquent pendant la collision, la goutte résultante est peu déformée. Le régime **(b)** est plus difficile à appréhender : l'énergie cinétique des gouttes

est suffisamment importante pour déformer les gouttes avant le contact, pas assez forte pour éjecter le film de gaz emprisonné entre les interfaces suite à la déformation des gouttes. Les deux interfaces restent séparées par ce film de gaz mince qui empêche la coalescence et entraîne le rebond des deux gouttes. Ce régime particulier a été observé et expliqué dans (*Jiang & al, 1992*) pour des gouttes d'hydrocarbures. Cependant il semble qu'il n'ait jamais été observé pour des gouttes d'eau dans les conditions standards de température et de pression. Notons que dans (*Qian & al, 1997*), les auteurs mettent en évidence l'importance des propriétés physiques du gaz sur le régime de collision. Par exemple les auteurs montrent que le rebond devient possible avec des gouttes d'eau lorsque la densité du gaz est environ 10 fois supérieure à la densité de l'air dans les conditions de pression et de température standards.

Dans le régime **(c)** l'énergie cinétique de la goutte est suffisamment importante pour éjecter le film de gaz emprisonné entre les deux gouttes, la coalescence est alors observée, la goutte résultante oscille alors assez fortement sans toutefois se rompre.

Quand l'énergie cinétique de la goutte est plus forte, on observe le régime **(d)**, les oscillations de la goutte résultante sont plus fortes et conduisent à la rupture et à la formation éventuelle de satellites. Dans ce régime différents comportements peuvent être observés, et le nombre de satellites formés augmente avec le nombre de *Weber*.

Finalement, un cinquième régime peut être observé pour des collisions non-frontales, c'est-à-dire lorsque le paramètre d'impact n'est pas égal à 0. On peut noter que les trois premiers régimes peuvent être observés pour des collisions frontales ou non-frontales. En revanche le régime **(d)** est spécifique des collisions frontales, il est souvent appelé « *reflexive separation* ». Enfin le régime **(e)** est différent du régime **(d)** car les processus de rupture sont dus aux forces de cisaillement et non aux oscillations de la goutte, ce régime est aussi appelé « *shear separation* ».

1.3 Etudes numériques des collisions de gouttes

On peut citer parmi les études, traitant des collisions de gouttes grâce à une méthode numérique de suivi d'interface les travaux de (*Nobari & al, 1996*) et (*Rieber & al*). Les premiers utilisent une méthode *lagrangienne* de type *Front-Tracking* et les seconds une méthode *V.O.F.*

Les simulations de (*Nobari & al, 1996*) ont été réalisées pour des gouttes de tailles identiques avec un code axisymétrique, donc pour des collisions frontales. Le solveur *lagrangien* utilisé ne permettant pas de prendre en compte implicitement les changements topologiques, les auteurs fixent un temps arbitraire au bout duquel ils imposent la reconnexion des deux interfaces. Cette méthode peut donner des résultats réalistes, en bon accord avec l'expérience. Cependant les résultats de simulations s'avèrent très sensibles au temps arbitraire fixé, ce qui nuit à la prédictivité des simulations. Les auteurs ont proposé d'utiliser des modèles microscopiques pour prédire plus rigoureusement la dynamique de l'interface lorsque des changements topologiques vont ou peuvent survenir, cependant il n'existe pas à notre connaissance de travaux qui ont repris cette idée qui semble intéressante.

Dans (*Rieber & al*) , les auteurs utilisent une méthode *V.O.F.* qui permet d'effectuer implicitement des changements topologiques. Les auteurs effectuent leurs simulations en *3D* et obtiennent des résultats réalistes et en bon accord avec l'expérience pour des collisions à faible nombre de *Weber*. Dans la suite de ce chapitre nous allons nous

efforcer de mettre en évidence la capacité du code, développé pendant cette thèse, à simuler les différents types de collisions de gouttes observés expérimentalement. Les simulations seront effectuées avec le code **2D**-axisymétrique pour les collisions frontales et avec le code **3D** pour les collisions non-frontales, la méthode **Ghost Fluid** sera utilisée systématiquement.

Nous avons pu observer les régimes de collisions **(a)**, **(c)**, **(d)** et **(e)**. Nous verrons notamment plusieurs sous-régimes appartenant au régime **(d)** notamment pour des nombres de **Weber** assez élevés. Dans les méthodes « **Front Capturing** » les critères de cassure et de reconnexion d'interface sont numériques et donc liés à la taille de la maille. Des études de convergence fines sont donc nécessaires pour montrer que lorsque le maillage est suffisamment raffiné les changements topologiques sont indépendants de la taille de la maille, afin de prouver la validité des résultats présentés. A l'instant initial on impose la vitesse souhaitée dans la goutte et sur une maille autour. Cette condition initiale peut sembler assez grossière, mais les résultats obtenus sont peu sensibles car un champ de vitesse réaliste dans le gaz est rapidement obtenu grâce à la résolution de l'équation de **Poisson**.

Les propriétés physiques du liquide sont celles de l'éthanol, du glycol ou de l'eau et les propriétés physiques du gaz sont celles de l'air, à savoir :

	$\sigma \text{ (kg.s}^{-2}\text{)}$	$\rho \text{ (kg.m}^{-3}\text{)}$	$\mu \text{ (kg.m}^{-1}\text{.s}^{-1}\text{)}$
air	-	1.226	1.78 10 ⁻⁵
eau	0.072	1000	0.001137
éthanol	0.02275	791	0.0012
glycol	0.0477	1108.8	0.0199

Les valeurs de tension de surface sont valables pour une interface entre le liquide considéré et de l'air dans les conditions standards de température et de pression.

2. Résultats pour des collisions frontales ($I = 0$)

2.1 Régime (a) : coalescence après de faibles déformations

Le rayon des deux gouttes (d'éthanol) est de 200 μm , et la vitesse relative entre les deux gouttes vaut 0.4 m.s^{-1} , ce qui correspond à un **We** = 2.2 et à un **Oh** = 0.014.

On peut supposer que le plan perpendiculaire à la vitesse des gouttes passant par le point de contact entre les deux gouttes est un plan de symétrie. Cependant, nous n'utiliserons pas cette condition de symétrie supplémentaire dans cette simulation afin de vérifier que nos résultats respectent bien la symétrie des conditions initiales.

Les dimensions du domaine sont $l_r = 500 \mu\text{m}$ et $l_z = 1500 \mu\text{m}$. La simulation a été effectuée sur deux maillages différents (40 x 120 et 80 x 240) afin de vérifier la convergence spatiale des résultats, notamment dans les zones où des changements topologiques surviennent.

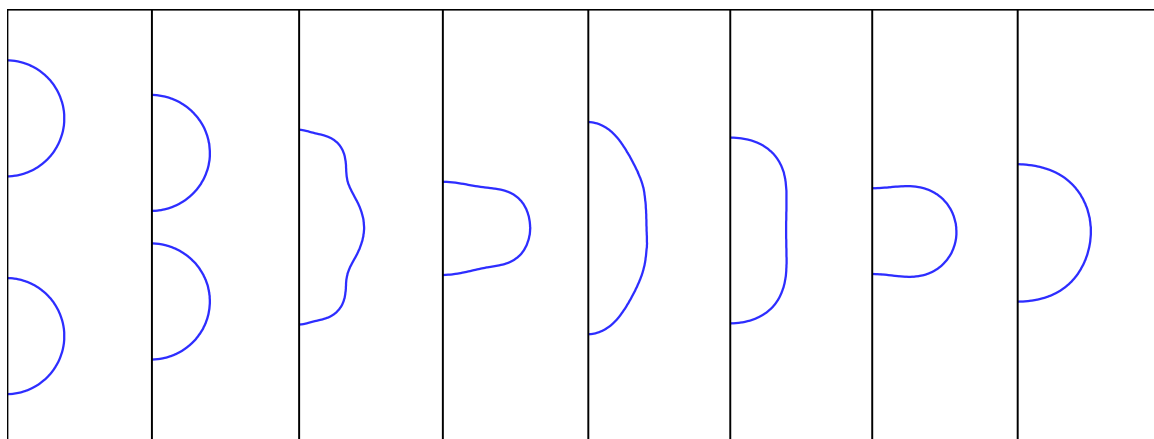


figure (5. 1) : Collision entre deux gouttes. $We = 2.2$. L'intervalle de temps entre les figures est 0.6 ms. (80x240)

Sur la **figure (5.1)**, on peut observer dans un plan l'évolution temporelle de l'interface avant et après la coalescence. Les deux gouttes coalescent, puis la goutte résultante oscille avec une énergie insuffisante pour conduire à la rupture en plusieurs satellites. Les résultats obtenus conservent la symétrie qui existe à l'instant initial entre les deux gouttes.

Nous avons comparé les profils d'interface aux mêmes instants (notamment au moment de la coalescence) pour deux maillages différents (40x120 et 80x240). les résultats obtenus, **figure (5.2)**, sont sensiblement équivalents ce qui nous permet de vérifier que notre calcul a convergé en espace.

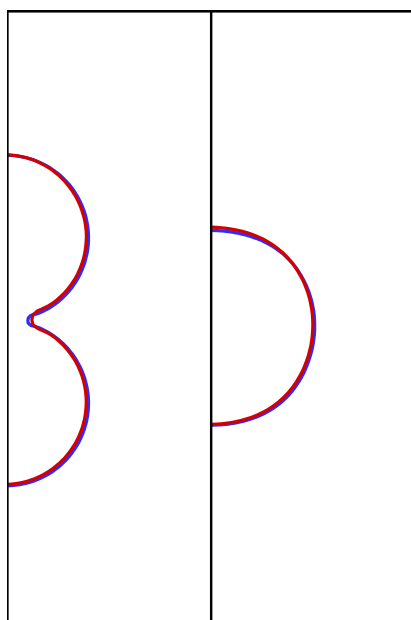


figure (5.2) : Comparaison de deux profils d'interface pour deux maillages différents (rouge 40x120, bleu 80x240)

Sur cette simulation avec le maillage (80x240), les pertes de masse entre l'instant initial et l'instant final ont été évaluées à 0.09 %.

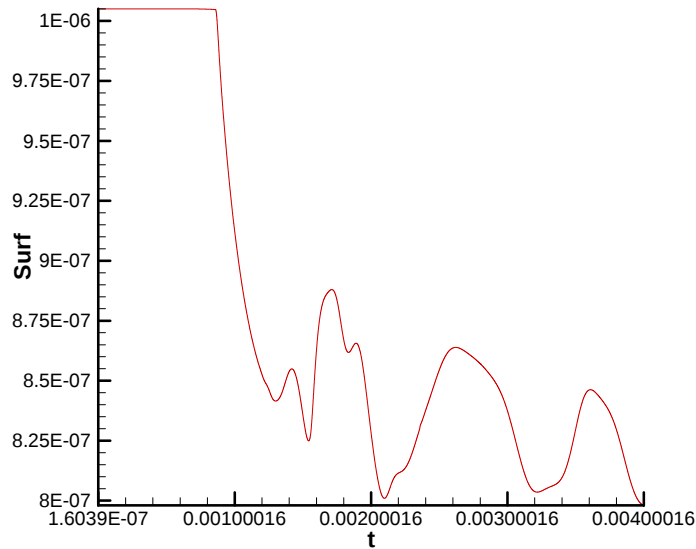


figure (5.3) : Evolution de la quantité de surface (m²) en fonction du temps (sec)

On peut visualiser sur la **figure (5.3)**, l'évolution de la quantité de surface en fonction du temps. Le plateau initial correspond aux instants antérieurs à la collision, on peut ensuite observer une diminution de la quantité de surface quand les gouttes ont coalescé et une alternance de maxima et de minima due aux oscillations de la goutte. L'effet dissipatif de la viscosité conduit à la diminution de l'amplitude des oscillations au cours du temps.

2.2 Régime (c) : coalescence après d'importantes déformations

Cette deuxième collision a été réalisée dans la même configuration que la précédente (toujours avec de l'éthanol), à l'exception de la vitesse relative initiale entre les deux gouttes qui vaut ici 1.1 m.s^{-1} , soit un $We = 16.8$ et un $Oh = 0.014$.

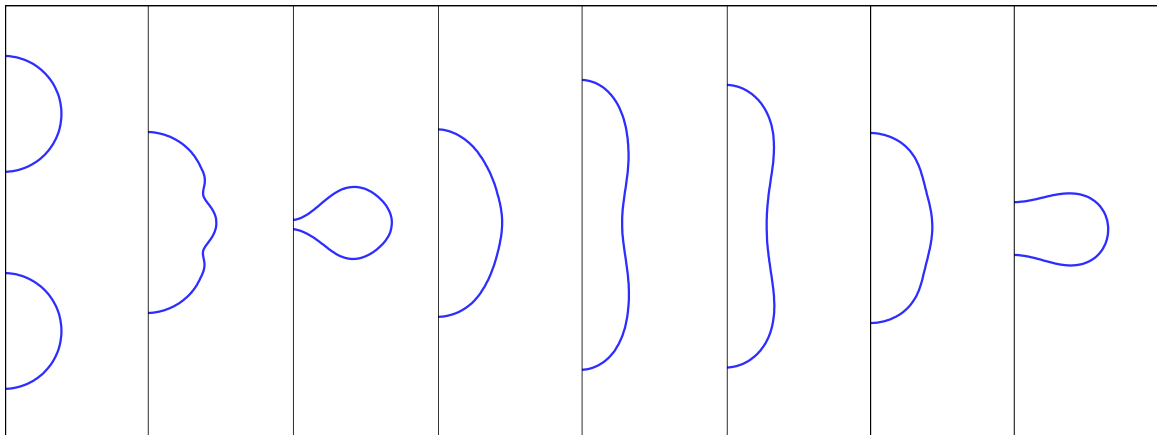


figure (5. 4) : Collision entre deux gouttes. $We = 16.8$. L'intervalle de temps entre les figures est 0.6 ms. (90x270)

La simulation a été effectuée sur deux maillages différents (60×180 et 90×270) afin de vérifier la convergence spatiale des résultats. On retrouve un comportement analogue à la collision précédente, avec des oscillations d'amplitude plus importantes. On observe notamment la formation d'une membrane de faible épaisseur au milieu de la goutte sur le troisième profil de la **figure (5.4)**. Cependant l'énergie cinétique initiale des gouttes n'est pas encore suffisante pour conduire à la rupture de la goutte résultante en plusieurs satellites.

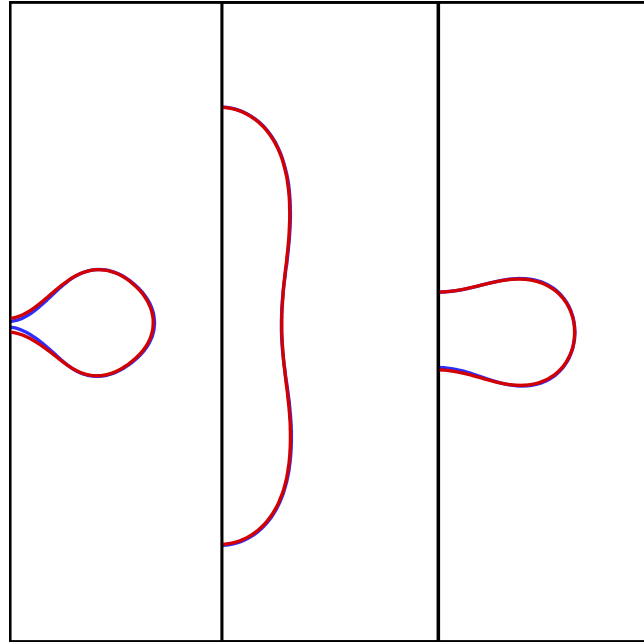


figure (5. 5) : Comparaison de trois profils d'interface pour deux maillages différents (rouge 60x180, bleu 90x270)

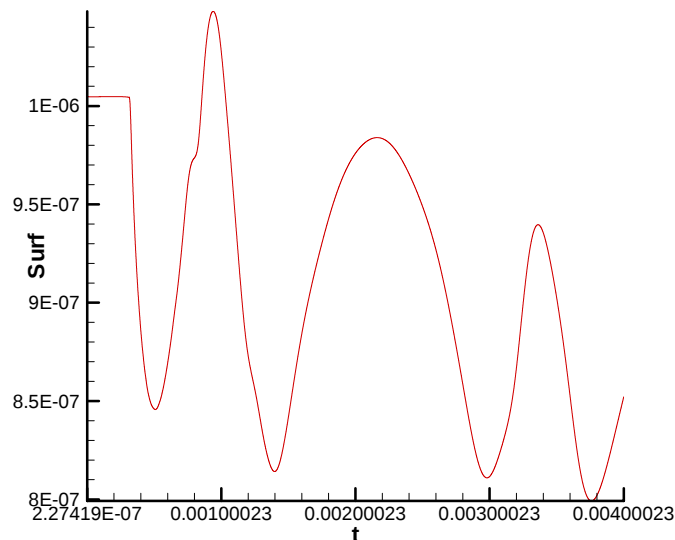


figure (5.6) : Evolution de la quantité de surface (m^2) en fonction du temps (sec)

Sur la **figure (5. 5)**, nous comparons les profils d'interface pour deux maillages différents aux instants $t = 0.96 \text{ ms}$, $t = 2 \text{ ms}$, $t = 3.36 \text{ ms}$. Les résultats de ce test de convergence sont globalement concluants, même si l'on observe un léger écart entre les premiers

profils calculés sur la **figure (5.5)**, cependant aux instants ultérieurs ce léger écart ne s'amplifie pas, il semble au contraire s'atténuer. Pour le maillage (90x270), on observe un gain de masse de 0.13 %, entre l'instant initial et l'instant final de la simulation. Le calcul respecte la symétrie par rapport au plan sur lequel s'effectue la collision. Par la suite lorsque cela sera possible nous imposerons donc une condition limite de symétrie, afin de restreindre la taille du domaine en ne simulant qu'une seule goutte.

La courbe, **figure (5.6)**, d'évolution de la quantité de surface en fonction du temps reflète bien le comportement observé. En effet l'amplitude des oscillations représentées sur cette courbe est plus forte que dans le cas précédent. On observe notamment que la quantité de surface est maximale au temps approximatif de 1 ms ce qui correspond à l'instant où l'on observe la formation d'une membrane de fine épaisseur. A cet instant la quantité de surface est supérieure à celle des gouttes initiales sphériques.

2.3 Régime (d) : Coalescence suivi de séparation pour des collisions frontales

Sur cette nouvelle collision, la taille du domaine a donc été divisée par deux en imposant une symétrie dans le plan de la collision. Les dimensions du domaine sont $l_r = 500 \mu m$ et $l_z = 1500 \mu m$.

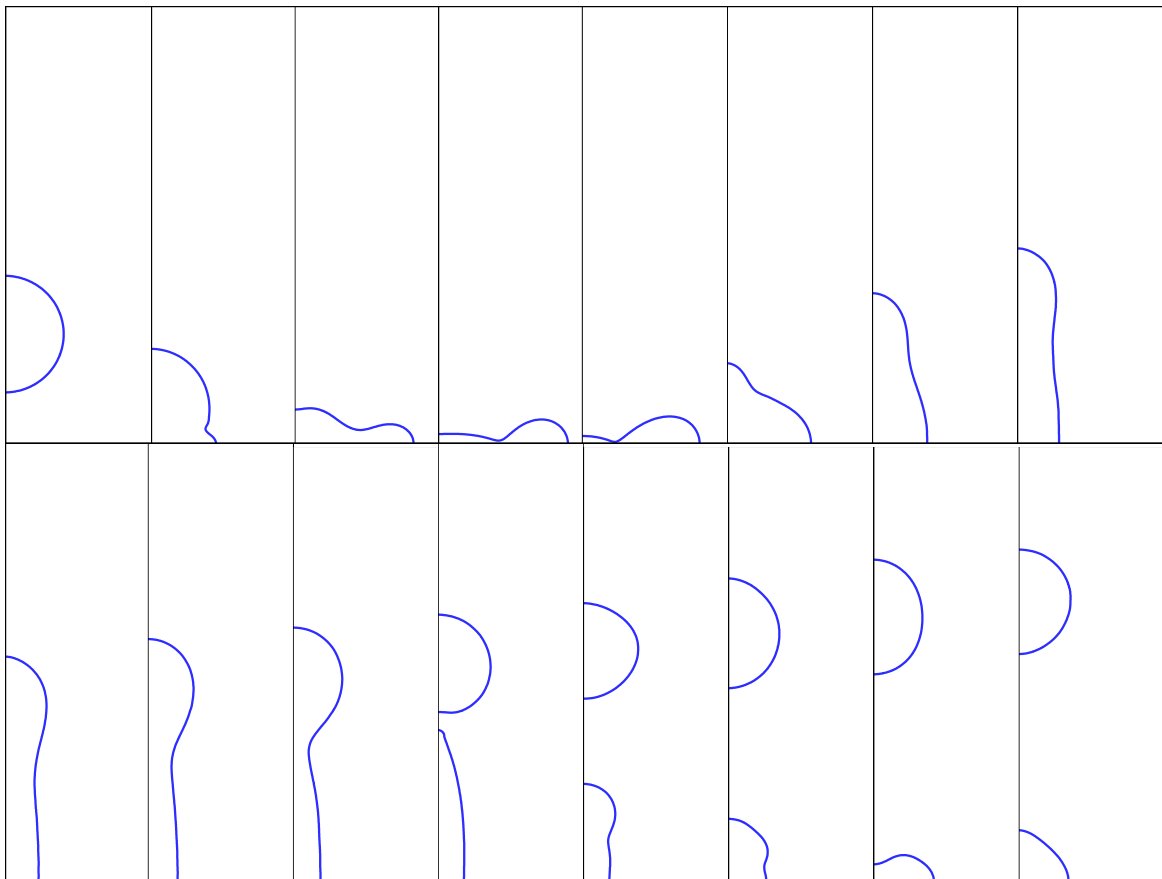


figure (5. 7) : Collision entre deux gouttes. $We = 61$. L'intervalle de temps entre les figures est 0.25 ms. (180x540)

La simulation a été effectuée sur deux maillages différents (90×270 et 180×540). La vitesse relative entre les deux gouttes est de 2.1 ms , soit un nombre de $We = 61$ et un nombre de $Oh = 0.014$. Les autres paramètres de la simulation sont inchangés.

Sur la **figure (5.7)**, on peut observer l'évolution de l'interface en fonction du temps. Après la coalescence des deux gouttes, l'interface prend la forme d'un anneau plein, la membrane déjà observée sur la collision **(c)** au centre de l'anneau est ici plus fine et plus étirée **figure (5.8)**.



Figure(5. 8): développement d'une membrane liquide fine pendant la coalescence

L'oscillation qui s'ensuit est suffisamment forte pour conduire à une séparation de la goutte résultante en trois gouttes, et donc à la création d'un satellite. Les pertes de masse ont été estimées à 0.71% sur le maillage (90×270).

Sur la **figure (5.9)**, on peut comparer les profils d'interface juste avant et juste après la formation des 3 gouttes pour les deux maillages utilisés. Ces profils sont sensiblement identiques. Ainsi, bien que le critère de rupture de l'interface soit numérique, pour une résolution suffisamment fine nos calculs convergent vers une solution physique même lorsque des changements topologiques surviennent.

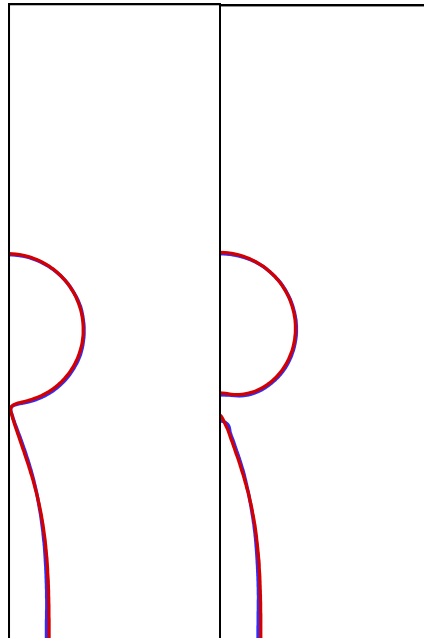


figure (5. 9) : Comparaison de deux profils d'interface pour deux maillages différents (rouge 90×270 , bleu 180×540)

Ces considérations sous-entendent que les phénomènes étudiés sont exclusivement régis par les lois de la mécanique des milieux continus. Certains auteurs estiment que des forces microscopiques de faible portée (de type force de *Van Der Waals*) peuvent avoir de l'influence sur le comportement des interfaces juste avant que des changements topologiques surviennent. Cette piste qui semble particulièrement difficile à explorer n'a pas été étudiée durant ce travail de thèse.

Si l'on s'intéresse à l'évolution de la surface totale en fonction du temps, *figure (5. 10)*, on peut remarquer que la courbe atteint son maximum à l'instant où la goutte résultante a pris la forme d'un anneau plein. Ensuite la courbe atteint un maximum secondaire au moment de la formation des trois gouttes, puis la courbe oscille légèrement autour d'une valeur finale d'équilibre, lorsque les trois gouttes sont formées.

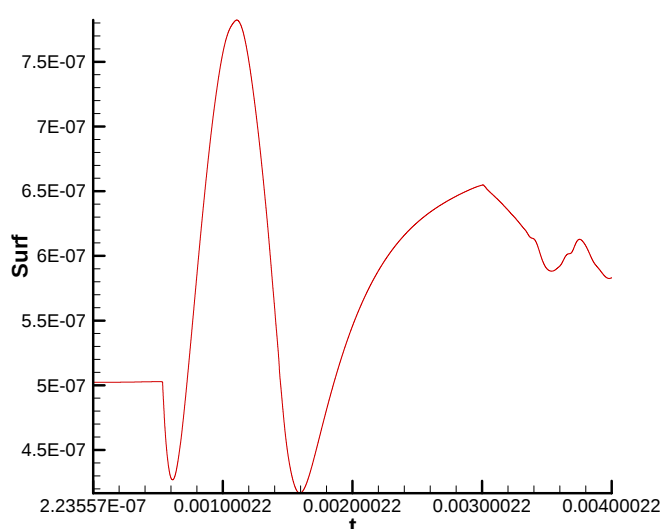


figure (5. 10) : Evolution de la quantité de surface en fonction du temps

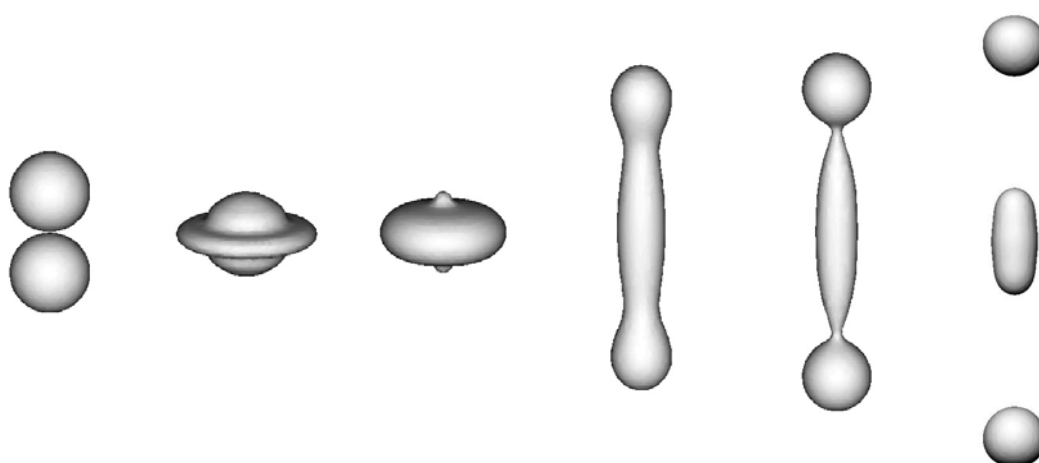


figure (5. 11) : Evolution de l'interface en fonction du temps

La surface finale est bien sûr plus importante que la surface initiale, puisque pour un volume égal, trois gouttes sphériques ont forcément une quantité de surface plus importante que deux gouttes sphériques.

2.4 Conclusion sur ces résultats préliminaires

Les résultats présentés dans ce paragraphe nous ont permis de mettre en évidence les bonnes propriétés de convergence en espace des méthodes numériques utilisées. Notamment, nous avons pu observer que les pertes (ou gains) de masse étaient négligeables sur ce type de simulations, et que pour une résolution suffisante les changements topologiques étaient indépendants du niveau de raffinement.

Une fois ces vérifications effectuées, nous pouvons maintenant étudier les prédictions du code et les comparer à des résultats expérimentaux.

3. Comparaisons expériences / simulations

Les résultats présentés dans le paragraphe précédent sont en bon accord avec les résultats expérimentaux de (*Ashgriz & al, 1990*) pour des gouttes d'eau, et les résultats d'*Estrade (1998)* pour des gouttes d'éthanol. En effet, pour des collisions frontales entre deux gouttes de tailles identiques, les auteurs estiment que l'on se trouve dans le régime de coalescence lorsque $We < 19$ (*Ashgriz & al, 1990*) ou $We < 31$ (*Estrade, 1998*). Par ailleurs les deux auteurs estiment que le régime de collision pour une collision frontale de deux gouttes identiques avec un $We = 61$ est le régime (*d*) avec création d'un seul satellite.

Dans la suite de ce chapitre, nous avons entrepris de comparer, dans la mesure du possible, nos résultats de simulation aux résultats expérimentaux. Pour cela, nous nous sommes fixés comme objectif d'effectuer plusieurs simulations qui mettent en évidence des comportements variés déjà observés expérimentalement. Les travaux de (*Ashgriz & al, 1990*) sont d'un grand intérêt car ils fournissent beaucoup d'images de qualité à travers lesquelles de nombreux comportements différents ont été observés.

En revanche, une comparaison quantitative stricte entre simulation et expérience n'est pas toujours possible, pour plusieurs raisons :

- Tout d'abord les conditions expérimentales ne sont pas toutes connues de façon suffisamment précises (c'est particulièrement vrai dans (*Ashgriz & al, 1990*)), car aucun nombre adimensionnel (*Re* ou *Oh*) ne permet de caractériser l'influence des termes visqueux. Pour nos simulations, on se place dans des conditions proches de celles de l'expérience, mais pas rigoureusement identiques.
- En plus de données expérimentales parfois incomplètes, il existe inévitablement des incertitudes de mesure (paramètre d'impact pas tout à fait égal à 0, incertitude sur la valeur de la tension de surface de l'eau.....).

- Les résultats que l'on obtient sont les solutions discrètes d'un système d'équations aux dérivées partielles. Ce système est censé régir les comportements physiques que l'on souhaite observer. Même si les études de convergence en espace et en temps montrent que les erreurs de discrétisation sont suffisamment faibles pour ne pas influencer sur la solution, la solution exacte du système considéré peut ne pas toujours correspondre exactement à la réalité observée. (limitation du modèle physique résolu)
- Les auteurs d'expériences à priori très proches trouvent parfois des résultats différents. Par exemple (*Ashgriz & al, 1990*) trouvent que pour des collisions frontales de deux gouttes identiques dans le régime **(d)**, le nombre de satellites formés est d'autant plus important que le **We** est grand. Pour les mêmes gammes de **We**, *Estrade* trouve toujours un seul satellite, mais qui est d'autant plus grand que le **We** est important. On a déjà remarqué précédemment, que ces mêmes auteurs trouvent des valeurs sensiblement différentes pour le nombre de **Weber** à partir duquel, on observe une transition entre le régime de collision **(c)** et le régime **(d)**.

Nos résultats de simulations nous ont permis d'observer des comportements très divers. Même si les conditions de la simulation ne correspondent pas toujours rigoureusement aux conditions expérimentales. Nous avons comparé les images obtenues par le calcul aux photos prises par (*Ashgriz & al, 1990*) pour mettre en valeur les similarités existantes entre nos résultats et des comportements observés expérimentalement.

Sur les 6 types de collisions présentés ici, 4 collisions sont des variantes qui peuvent être classées dans le régime de collision **(d)**. Les 5 premières simulations ont été réalisées dans une configuration **2D** axisymétrique, car le paramètre d'impact vaut 0. La 4^{ème} collision peut être classée dans le régime **(c)**. La 6^{ème} présentée appartient au régime **(e)** et a été réalisée dans une configuration **3D**, car le paramètre d'impact est différent de 0.

3.1 Régime (d) : séparation avec zéro satellite

Cette collision a été observée par (*Ashgriz & al, 1990*), pour une collision à **We**=23 entre deux gouttes d'eau identiques. Notons cependant que le paramètre d'impact, dans les images expérimentales est légèrement supérieur à 0 ($I=0.05$). Les résultats de simulation ont été obtenus avec des gouttes d'eau de rayon $R_G = 400 \mu m$, pour un **We** = 23 conformément à l'expérience. La vitesse relative des gouttes est $1.44 m.s^{-1}$, et **Oh** = 0.0047.

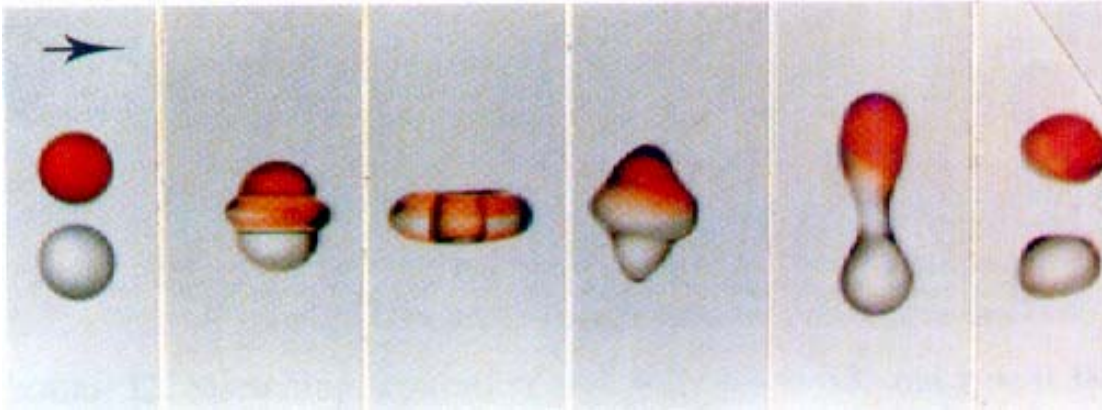


figure (5. 12) : séparation avec 0 satellite $We = 23$, d'après (Ashgriz & al, 1990)

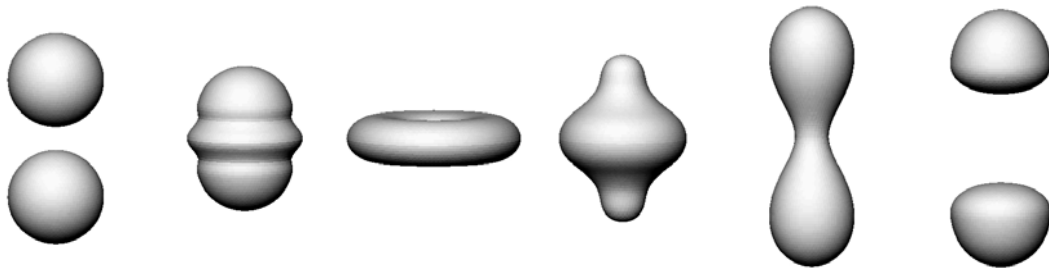


figure (5. 13) : simulation à $We=23$

L'accord entre la simulation et l'expérience est très bon. En effet, non seulement le résultat final prédit par la simulation est sensiblement le même que celui obtenu expérimentalement, de plus les comportements observés expérimentalement lors de cette collision sont reproduits très fidèlement par la simulation. La simulation a été effectuée sur un maillage (80x160).

3.2 Régime (d) : séparation avec un satellite

Cette collision a également été observée par (Ashgriz & al, 1990), pour une collision à $We=40$ entre deux gouttes d'eau identiques. Les résultats de simulation ont été obtenus avec des gouttes d'eau de rayon $R_G = 400 \mu m$, pour un $We = 40$ conformément à l'expérience. La vitesse relative des gouttes est $1.9 m.s^{-1}$, et $Oh = 0.0047$. La simulation a été effectuée sur un maillage (80x160).

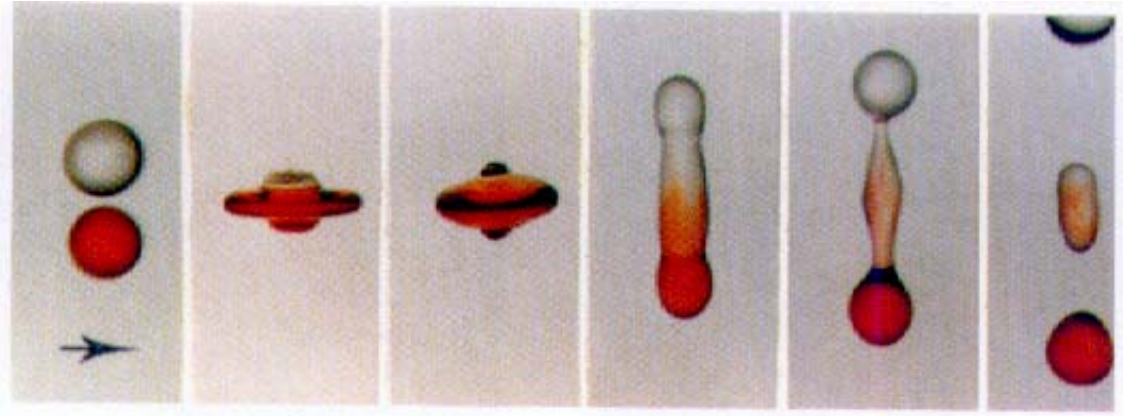


figure (5. 14) : séparation avec 1 satellite $We = 40$, d'après (Ashgriz & al, 1990)

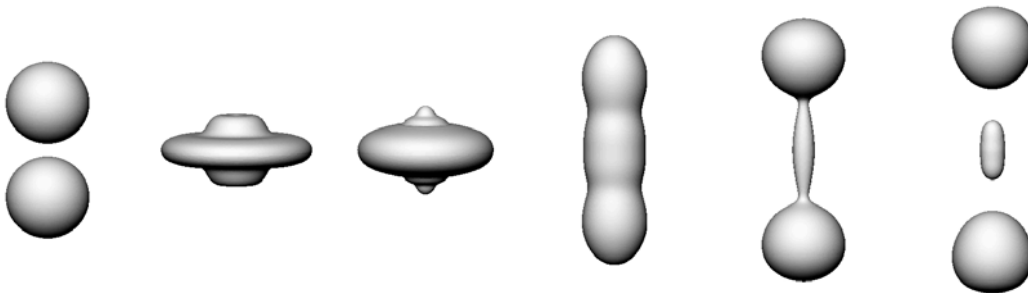


figure (5.15) : simulation à $We=40$

L'étude de cette collision révèle également un très bon accord entre la simulation et l'expérience.

La taille du satellite est légèrement sous-estimée par la simulation, mais d'un point de vue qualitatif, les comportements prédits par la simulation sont très proches de ceux observés expérimentalement.

3.3 Régime (d) : séparation avec zéro satellite pour deux gouttes de taille différentes

Cette troisième collision entre deux gouttes d'eau de taille différente a été observée par (Ashgriz & al, 1990), pour un $We=56$, avec un rapport de diamètres entre les deux gouttes de 0.5. Dans la simulation, $We=56$, la petite goutte a un rayon $R_p = 200 \mu m$ et la grande goutte un rayon $R_G = 400 \mu m$. La vitesse relative entre les gouttes vaut $V_{coll}=3.175 m.s^{-1}$, ($V_p = 0.75 V_{coll}$ et $V_G = 0.25 V_{coll}$) et $Oh = 0.0066$. La simulation a été effectuée sur un maillage (60x240).

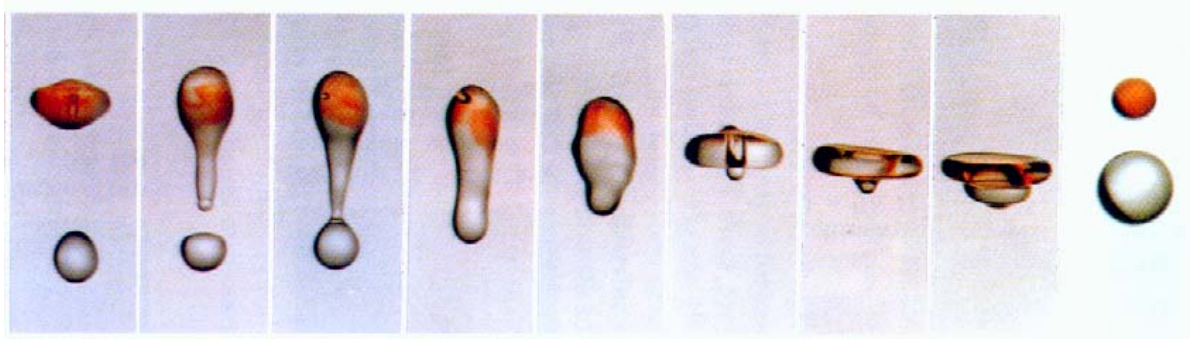


figure (5. 16) : séparation avec 0 satellite $We = 56$, d'après (Ashgriz & al, 1990)

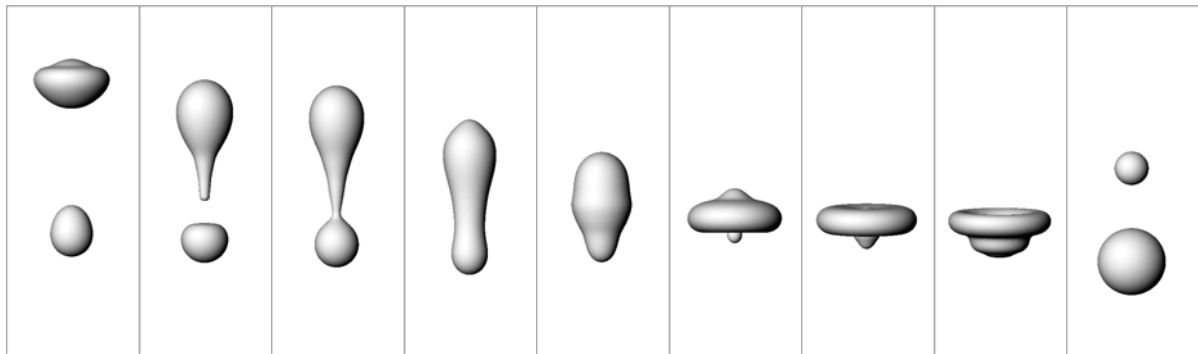


figure (5. 17) : simulation à $We=56$

Sur cette troisième collision, l'accord avec l'expérience est encore tout à fait remarquable sur l'ensemble des images.

3.4 Régime (c) : coalescence pour deux gouttes identiques à fort *Weber*

L'intérêt de cette collision est de mettre en évidence l'influence du nombre d'*Ohnesorge* sur le régime de collision. En effet, même si dans (Ashgriz & al, 1990), les auteurs ne tiennent pas compte de ce paramètre pour caractériser les collisions étudiées, d'autres études expérimentales ont mis en évidence l'importance de ce paramètre. Notamment, dans (Estrade, 1998), l'auteur observe que pour du glycol, les collisions frontales conduisent systématiquement à la coalescence des deux gouttes et ce même pour de forts *We* (dans cette étude expérimentale le plus fort *We* mesuré avec le glycol est 130). Nous avons donc simulé cette collision à fort *We* dans la configuration utilisée par (Estrade, 1990). A savoir deux gouttes de glycol de même rayon $R_G=120\ \mu m$, avec une vitesse relative de $4.83\ m.s^{-1}$, donc $We = 130$ et $Oh = 0.177$. Le maillage utilisé pour cette simulation est (80x160). Conformément aux observations expérimentales de (Estrade, 1998), cette collision aboutit à la coalescence des deux gouttes initiales avec de faibles oscillations de la goutte résultante, *figure (5.18)*.

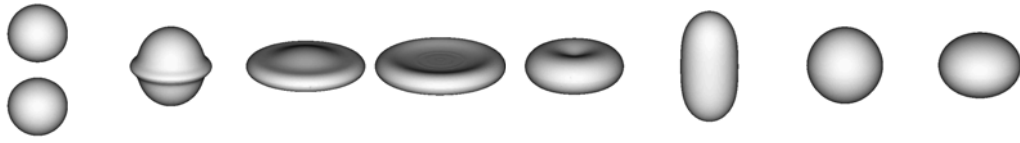


figure (5.18) : simulation à $We=130$, $Oh = 0.177$

3.5 Régime (d) : séparation avec 3 satellites

Nous avons ensuite effectué une simulation avec un $We = 125$ pour deux gouttes d'éthanol de même diamètre. Précédemment, nous avons déjà souligné le fait que (*Estrade, 1998*) et (*Ashgriz & al, 1990*) observaient des comportements différents pour des collisions frontales à fort We . Ainsi, selon (*Estrade, 1998*), en utilisant de l'éthanol, ce type de collisions conduit toujours à une séparation avec un seul satellite qui est d'autant plus gros que le We est élevé. Au contraire (*Ashgriz & al, 1990*) observe, avec de l'eau, que le nombre de satellites créés augmente quand le We augmente. Les auteurs travaillent avec deux liquides différents, et dans des gammes d' Oh également légèrement différentes. Il nous semble cependant que ces légères différences expérimentales ne sont pas suffisantes pour expliquer le décalage important entre les résultats expérimentaux de ces deux auteurs. Les paramètres de cette simulation sont les suivants, $R_G=200 \mu m$, avec une vitesse relative de $3.0 m.s^{-1}$, donc $We = 125$ et $Oh = 0.014$. On obtient les résultats suivants avec un maillage 150×600 :

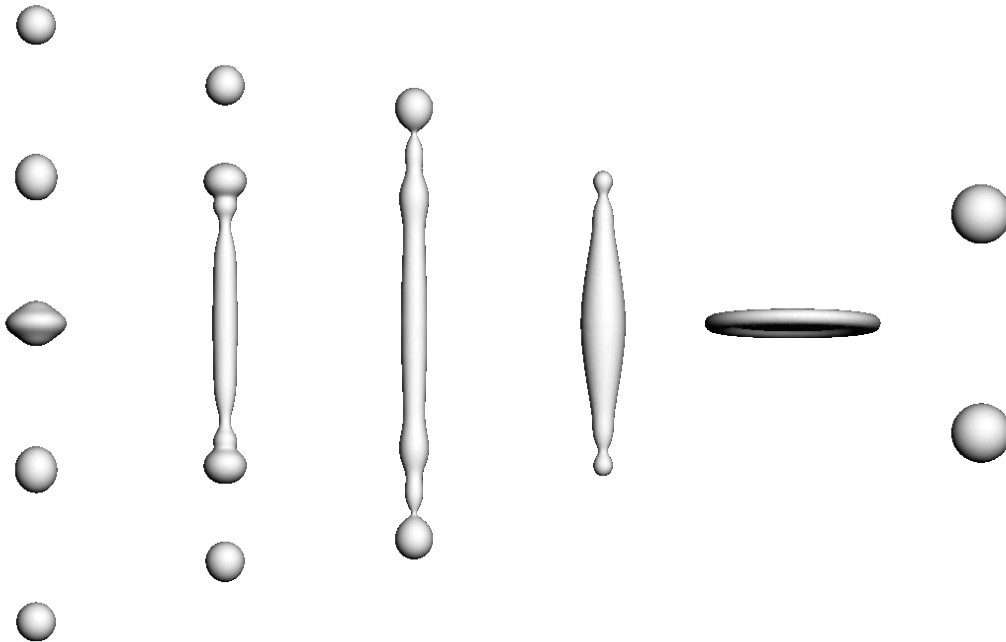
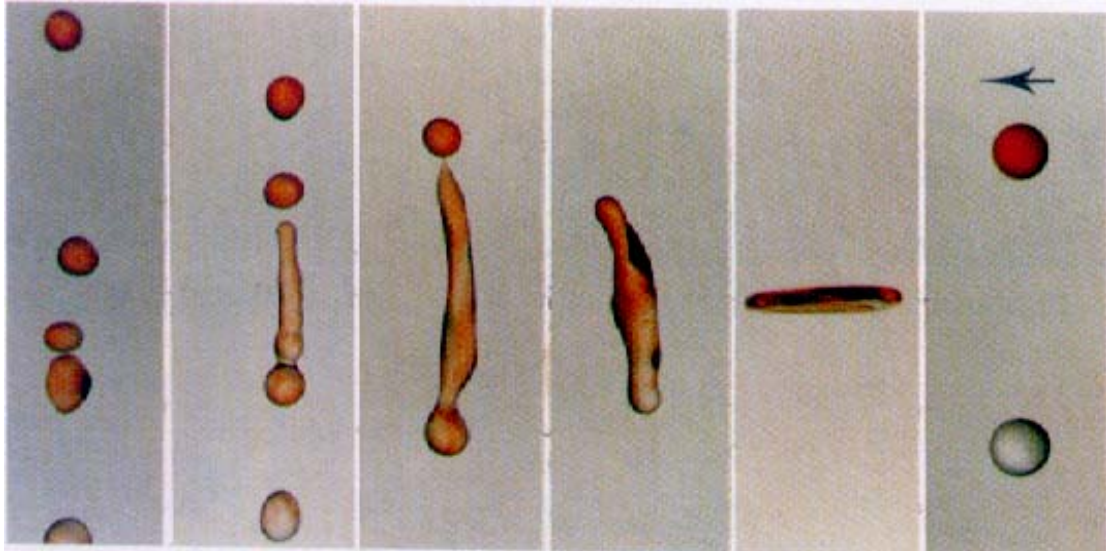


figure (5.19) : Evolution de l'interface en fonction du temps $We = 125$, $Oh = 0.014$

Sur cette collision nos résultats sont en désaccord avec les observations de (*Estrade, 1998*), puisque 3 satellites sont formés. En revanche le comportement simulé est très proche de mesures expérimentales réalisés par (*Ashgriz & al, 1990*), mais avec de l'eau et pour un $We = 96$ un peu plus faible. En effet, en comparant la *figure (5. 19)* avec la *figure (5. 20)*, nous pouvons observer les similarités existantes entre cette simulation et l'expérience.



*figure (5. 20) : séparation avec 3 satellites $We = 96$, d'après (*Ashgriz & al, 1990*)*

3.6 Régime (e) : Coalescence suivi de séparation pour des collisions non-frontales

Pour terminer cette étude nous avons effectué la simulation **3D** d'une collision entre deux gouttes d'éthanol de même diamètre, avec un paramètre d'impact différent de 0. Les paramètres de la simulation sont les suivants, $I = 0.5$, $R_G = 100 \mu m$, $V_{coll} = 2.94 m.s^{-1}$, $We = 60$, $Oh = 0.02$.

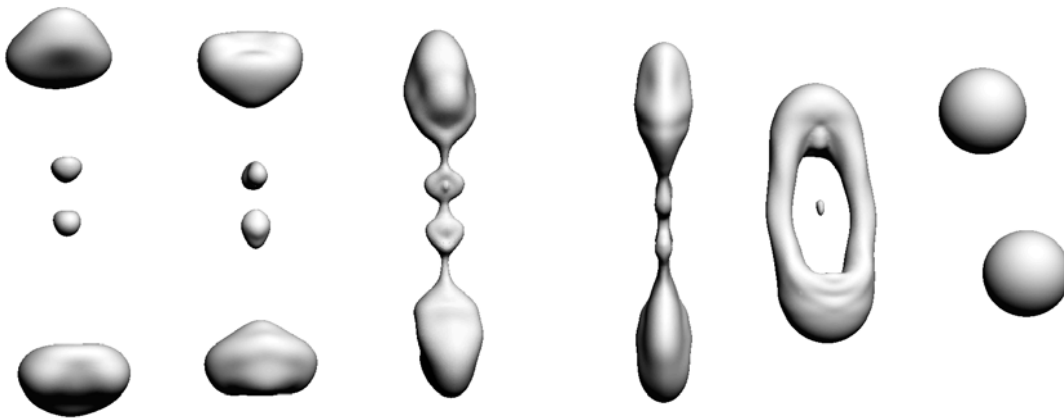


figure (5. 21) : Evolution de l'interface en fonction du temps $We = 60$, $I = 0.5$, $Oh = 0.02$

Le maillage est $64 \times 128 \times 256$, on impose un plan de symétrie suivant la direction parallèle au vecteur vitesse des gouttes. On peut visualiser la solution sur la **figure (5. 21)**.

Cette collision conduit à une séparation avec formation de deux satellites. Selon les corrélations fournies par (**Estrade, 1998**), la zone où l'on a effectué cette simulation correspond à une zone de transition entre un régime de séparation avec 1 satellite et un régime de séparation avec 3 satellites.

Dans (**Ashgriz & al, 1990**), les auteurs, **figure (5. 22)**, ont observé un régime de collision très proche de celui présenté sur la **figure (5. 21)**, mais dans des conditions légèrement différentes et avec de l'eau ($We = 83$, $I=0.43$).

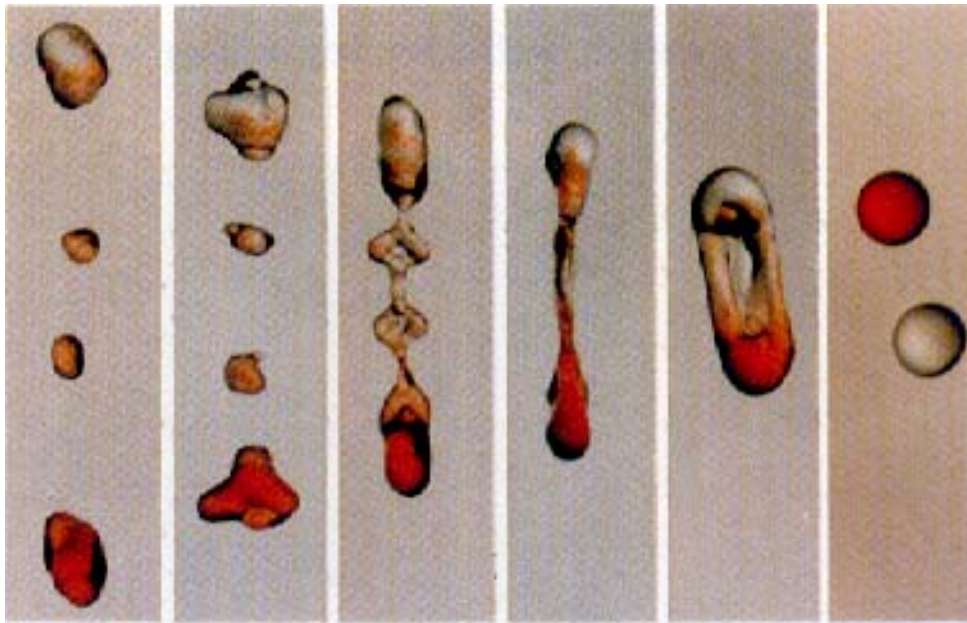


figure (5.22) : séparation avec 2 satellites $We = 83$, $I=0.43$, d'après (Ashgriz & al, 1990)

Sur la **figure (5.21)**, on peut voir que la fine membrane qui se développe entre les deux gouttes se perce, alors que sur la **figure (5.22)**, il semble que la membrane formée ne soit pas percée. Nous reviendrons plus loin sur ce phénomène dans la discussion des résultats.

4. Discussion des résultats

Les résultats présentés dans le **paragraphe 3** sont globalement très concluants. En effet de nombreux comportements physiques ont été mis en évidence. Notamment, les simulations effectuées sur les collisions présentées en (3.1), (3.2) et (3.3) reproduisent très bien les comportements observés par (**Ashgriz & al, 1990**) pour des We identiques . L'influence du nombre Oh sur le régime de collision a également été mise en évidence en (3.4), puisque conformément aux observations de (**Estrade, 1998**) les collisions frontales avec du glycol conduisent inévitablement à la coalescence sans séparation. Sur les collisions de gouttes d'éthanol, présentée en (3.5) et (3.6), les résultats diffèrent des observations de (**Estrade, 1998**), mais les comportements simulés sont très proches de

comportements physiques observés par (*Ashgriz & al, 1990*) dans des conditions assez proches. Toutes ces observations et celles effectuées en préliminaire au **paragraphe 3** nous permettent de conclure que les méthodes numériques utilisées sont prédictives pour l'étude des collisions de gouttes. Ainsi, contrairement à l'étude numérique de (*Tryggvason & al, 1996*), nos simulations ne dépendent d'aucun paramètre arbitraire qui pourrait nuire à la qualité des prédictions numériques. De plus, la méthode peut être utilisée sans restriction (à part pour les temps de calcul) en **3D**, et pour des collisions très diverses avec des nombres de **We** relativement élevés.

Il subsiste tout de même une question délicate concernant ce type d'études numériques, qui concerne la description des membranes qui peuvent se former à l'intérieur de l'anneau liquide pendant la coalescence. En effet nous pouvons voir sur la **figure (5.23)** que l'intérieur de l'anneau liquide est creux, car la membrane préalablement formée est percée. Dans (*Ashgriz & al, 1990*), les auteurs affirment n'avoir jamais observé ce phénomène. On peut supposer que cette rupture dans la topologie de l'interface peut être induite par la sous-résolution numérique des structures d'interface très fines. Cependant, sur des simulations **3D** qui sont encore très coûteuses, il est difficile (voir impossible) d'étudier systématiquement la convergence des calculs et de vérifier que, pour un maillage plus fin, cette membrane ne se brise plus.

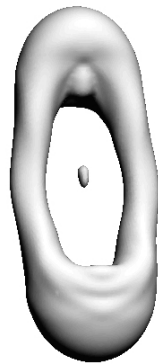


figure (5. 23) : Cassure de la membrane à l'intérieur de l'anneau liquide, collision (3.6)

Mais ce phénomène a également été observé dans des simulations **2D**-axisymétriques. Si parfois il s'avère qu'en raffinant le maillage, on parvient à décrire l'évolution complète de la membrane sans aucune cassure, il existe d'autres cas où cette cassure est systématiquement simulée, quel que soit le niveau de raffinement. Dans ces cas précis, on a d'ailleurs pu observer que l'instant et la localisation de la rupture de la membrane étaient toujours les mêmes, quel que soit le maillage utilisé. Il s'agit donc d'une solution qui a, à priori, convergé en temps et en espace, mais qui présente toujours la même cassure. Partant de ce constat, on peut douter que la sous-résolution numérique soit la seule cause possible de ce phénomène.

Nous avons également constaté que ces ruptures dans la topologie de l'interface étaient simulées pour des collisions avec des **We** assez faibles. Ainsi, dans les résultats présentés, deux autres simulations présentent ce type de cassure (quelle que soit la résolution utilisée), à savoir la collision **(3.1)** et **(3.2)**. On peut le visualiser sur la **figure (5. 24)** pour la collision **(3.1)**.

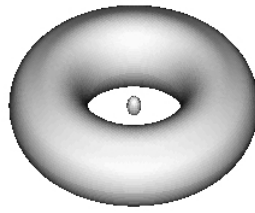


figure (5. 24) : Cassure de la membrane à l'intérieur de l'anneau liquide, collision (3.1) $We = 23$

En revanche pour les collisions (2.3) et (3.6), à des We beaucoup plus élevés, il est possible de simuler la formation de la membrane sans aucune cassure, et ce avec des maillages relativement modestes. Ce fait est assez surprenant, car sur ces deux simulations les membranes qui se développent sont plus étirées que sur les deux cas précédents, comme on peut le voir sur la *figure (5.24)* et sur la *figure (5.25)*.

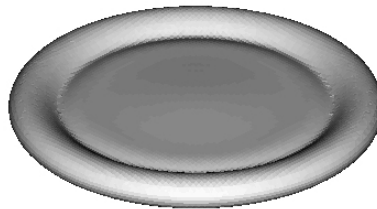


figure (5. 25) : membrane fine à l'intérieur de l'anneau liquide, collision (3.5), $We = 125$

Ce phénomène surprenant est difficile à expliquer, mais il semble cependant que même si une cassure de la membrane interne, peut survenir les résultats de simulations restent très proches des observations expérimentales.

Pour conclure cette étude nous avancerons deux hypothèses pour tenter d'expliquer cette différence de comportements des membranes fines entre les observations expérimentales et les simulations :

- La première est l'insuffisance du modèle physique « continu » pour décrire le comportement de membranes très fines. On peut en effet suggérer que des phénomènes moléculaires pourraient avoir une influence sur le comportement de membranes liquides très fines.
- La deuxième hypothèse possible est que les membranes peuvent se percer, mais que (Ashgriz & al, 1990) ne l'ont pas observé. En effet, si ils se sont focalisés sur des collisions frontales à fort We , ce phénomène ne survient pas. De plus, leur photographies expérimentales sur les collisions à faible We ne permettent pas de savoir si le cœur de l'anneau liquide est percé. Une étude expérimentale plus ciblée serait nécessaire pour s'assurer du bien-fondé (ou pas) de cette hypothèse.

Chapitre 6

Applications et perspectives des méthodes de suivi d'interface

1. Introduction

L'utilisation de méthodes de suivi d'interface combinées à des méthodes de résolution pour la simulation numérique directe (***DNS***) d'écoulements, permet d'envisager l'étude de processus physiques particulièrement complexes, dont l'intérêt scientifique et industriel est évident. Dans ce chapitre nous nous sommes plus particulièrement intéressés à trois types de phénomènes physiques pour lesquels une modélisation interfaciale est pertinente et semble prometteuse, à savoir :

- La cassure de jets liquide en gouttelettes
- La vaporisation de la phase liquide
- La propagation de flammes prémélangées

Ces différentes études présentent un intérêt industriel très important, car la maîtrise et la compréhension de ces processus physiques complexes sont essentielles, lorsque l'on souhaite optimiser la combustion dans la plupart des systèmes de propulsion. En effet les carburants utilisés dans l'automobile, l'aéronautique et même l'aérospatial sont toujours stockés sous forme liquide. Il est communément admis que la qualité de la combustion dépend fortement de la qualité du spray formé et par conséquent de la qualité de l'injection liquide. L'étape de vaporisation est également primordiale puisqu'elle permet la formation du mélange inflammable. Enfin dans certains types de moteur, les moteurs essence par exemple, le combustible est prémélangé avant l'allumage. Les méthodes de suivi d'interface peuvent alors être utilisées pour réaliser des modélisations de type front de flamme.

Ce chapitre a donc pour but d'étudier les potentialités des codes développés pour modéliser ces phénomènes plus complexes. Certaines limitations seront mises en évidence, et des solutions « originales » seront proposées et discutées, dans le but

d'apporter des améliorations importantes aux codes existants et aux méthodes de suivi d'interface en général.

2. Sur la rupture des jets liquides

2.1 Quelques généralités sur l'atomisation des jets liquides

Comme on l'a déjà précédemment indiqué, la formation d'un spray de gouttelettes à partir d'un jet liquide est un processus physique difficile à prédire, mais d'un intérêt capital pour l'optimisation des procédés de combustion. Dans le cas d'un jet liquide rond simple, les auteurs distinguent habituellement quatre régimes d'atomisation différents, en fonction de la vitesse débitante du jet. Ces quatre zones peuvent être mises en évidence lorsque l'on trace sur une courbe **figure (6.1)** la longueur de rupture moyenne du jet (obtenue expérimentalement) en fonction de la vitesse débitante du jet liquide.

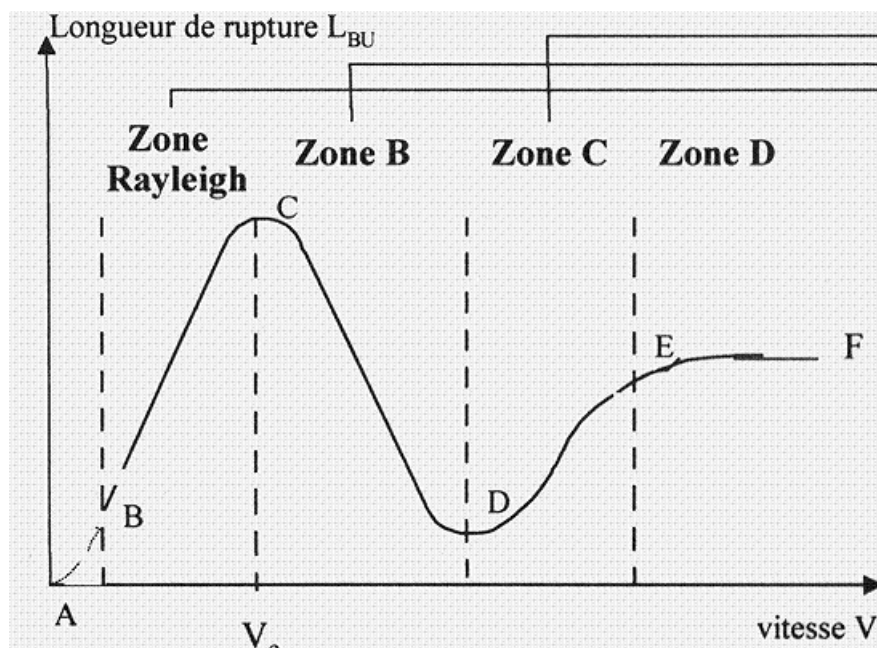


figure (6.1) : Diagramme de stabilité d'un jet d'après (Malot, 2001)

La première zone est souvent appelée « régime de **Rayleigh** », **figure (6.2)**. Dans ce régime une perturbation axisymétrique est spatialement amplifiée par les effets capillaires, conduisant à la cassure du jet en grosses gouttes. Ce type de cassure de jet peut être associé aux analyses de stabilité de **Rayleigh** et de **Weber** sur les instabilités capillaires des jets ronds.

Dans cette zone la longueur de rupture augmente avec la vitesse. Le processus de rupture étant uniquement piloté par les effets de tension de surface, l'augmentation de la vitesse a pour effet d'augmenter la vitesse à laquelle la perturbation est transportée, mais n'a aucun

effet sur le taux de croissance de l'instabilité. On comprend alors aisément pourquoi la longueur de rupture augmente avec la vitesse.

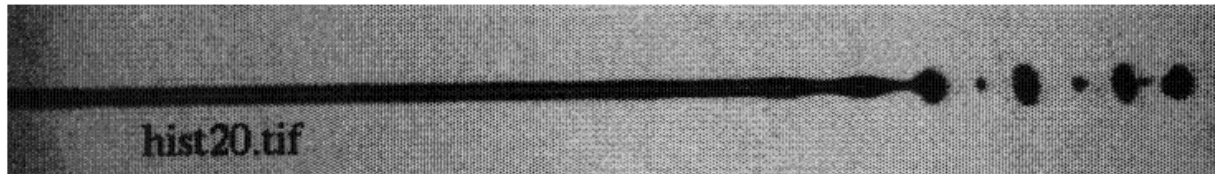


figure (6.2) : Photo d'un jet dans le régime de Rayleigh d'après (Leroux, 1996)

La deuxième zone est parfois nommée « **first wind induced** ». Dans cette zone la longueur de rupture décroît avec la vitesse, une instabilité de cisaillement de type **Kelvin-Helmoltz** est initiée. Le taux de croissance de ce type de perturbation augmente lorsque la vitesse augmente, ce qui explique que la longueur de rupture diminue lorsque la vitesse débitante du jet augmente. Les photos **figure (6.3)** présentent sur des jets dans ce mode de fonctionnement mettent en évidence le développement de perturbations non-symétriques caractéristiques des instabilités de cisaillement. Cependant le diamètre des gouttes créées par ce type de jets est assez important et du même ordre de grandeur que pour le jet de **Rayleigh**, à savoir de l'ordre du diamètre de l'injecteur. Dans cette zone il est clair que la rupture du jet est due à un couplage entre les instabilités capillaires et les instabilités de cisaillement.

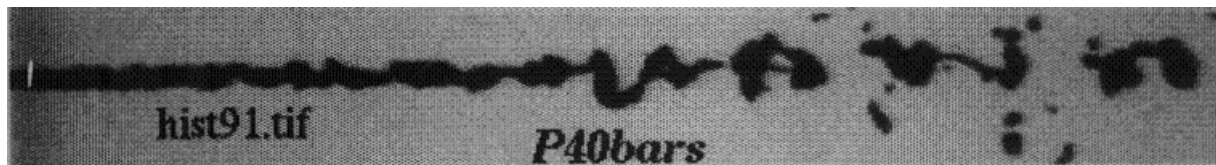


figure (6.3) : Photo d'un jet dans le régime de « first wind induced » d'après (Leroux, 1996)

Dans la troisième zone parfois nommée « **second wind induced** », la longueur de rupture réaugmente légèrement avec la vitesse débitante, néanmoins l'observation des photos met en évidence un régime de fonctionnement complètement différent du régime de **Rayleigh**, puisque des gouttes de petites tailles sont créées dès la sortie de l'injecteur, et la surface du cœur liquide est beaucoup plus torturée que dans les autres régimes. Ici l'écoulement considéré est incontestablement turbulent **figure (6.4)** ce qui permet d'expliquer la formation de gouttes de tailles très différentes dès la sortie de l'injecteur.

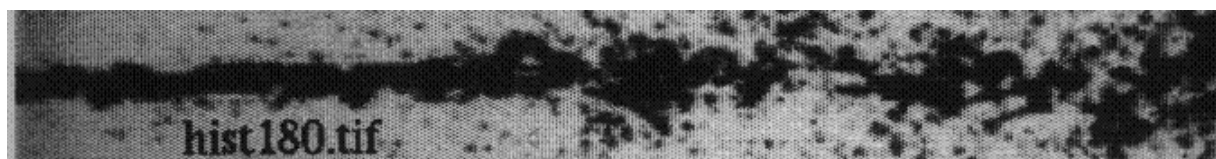


figure (6.4) : Photo d'un jet dans le régime de « second wind induced » d'après (Leroux, 1996)

Enfin, on peut distinguer un quatrième régime appelée « atomisation », dans cette zone la longueur de rupture peut continuer à augmenter légèrement, mais ce qui caractérise en particulier ce régime de fonctionnement c'est la création d'un brouillard de fines gouttelettes au détriment de plus grosses gouttes présentes dans les trois régimes précédents.



figure (6. 5) : Photo d'un jet dans le régime d'atomisation d'après (Leroux, 1996)

2.2 La théorie linéaire temporelle des instabilités capillaires

Rayleigh l'un des premiers à étudier la rupture de jets, effectue l'étude de stabilité d'un jet liquide cylindrique, incompressible, sans viscosité et immobile dans le vide (**Rayleigh, 1878**). Il définit un jet de rayon a déformée par une perturbation η de longueur d'onde λ (soit le nombre d'onde $k=2\pi/\lambda$). Les seules quantités physiques du système prisent en compte sont la masse volumique et la tension de surface.

Une fonction déplacement de la perturbation $\eta(x,t)$ est définie par rapport à la position initiale du jet. η_0 est l'amplitude initiale de la perturbation, w est le taux de croissance et k le nombre d'onde de la perturbation considérée :

$$\eta(x,t)=\eta_0 \exp(wt+ikx) \quad (6.1)$$

On peut voir dans cette relation que le taux de croissance de la perturbation w est associé à la variable temporelle t , on parlera donc d'une étude de stabilité temporelle.

En partant d'une hypothèse de faible perturbation, on peut simplifier les équations de **Navier-Stokes** et les résoudre, en tenant compte de la loi de **Laplace** et de la condition cinématique à l'interface, pour obtenir une relation entre le taux de croissance et le nombre d'onde (équation de dispersion) (**Rayleigh, 1878**).

$$\bar{w} = \sqrt{\frac{1}{F_1} (1 - \bar{k}^2)} \bar{k} \quad (6.2)$$

où :

$$\bar{k} = ka$$

F_l est un rapport de fonction de **Bessel**, $\bar{w}$ étant le taux de croissance adimensionnel :

$$\bar{w} = \frac{w}{\sqrt{\frac{\sigma}{a^3 \rho_L}}}.$$

Plusieurs dizaines d'années plus tard, **Weber** réalisa une étude qui permet de prendre en compte deux phénomènes physiques en plus, les forces visqueuses et les forces aérodynamiques (**Weber, 1931**), (**Sterling & al, 1975**). Il introduit ainsi la viscosité μ du liquide, une vitesse débitante V_0 , et la masse volumique du gaz. Le cheminement pour la résolution des équations est similaire à celui présenté pour la théorie de **Rayleigh**, et on obtient l'équation de dispersion suivante avec les termes supplémentaires, visqueux et aérodynamiques :

$$w^2 F_1 + w F_2 \frac{3\mu \bar{k}^2}{\rho_L a^2} = \frac{\sigma}{2\rho_L a^3} (1 - \bar{k}^2) \bar{k}^2 + \frac{\rho_G V_0^2}{2\rho_L a^2} \bar{k}^3 F_3 \quad (6.3)$$

où les F_i sont toujours des rapports de fonction de Bessel.

La théorie de **Weber** permet de déterminer le point critique de la courbe de stabilité **figure (6.1)** qui sépare la courbe de **Rayleigh** et la courbe de première action aérodynamique. En effet, pour de faibles vitesses débitantes le taux de croissance reste constant quand la vitesse croît. Le dernier terme de l'équation (6.3) est négligeable et donc seules les forces de tension de surface et visqueuse interviennent dans le calcul du taux de croissance. Ensuite quand la vitesse augmente, ce dernier terme commence à intervenir dans le calcul de w et le fait croître. Ainsi la longueur de rupture diminue à partir d'une vitesse critique.

2.3 Simulations temporelles d'une instabilité capillaire

A partir de l'équation (6.2), on peut tracer un diagramme de dispersion nous donnant le taux de croissance en fonction du nombre d'onde initial de la perturbation. Cette courbe théorique nous donne une base comparative intéressante pour tester les aptitudes de notre code à reproduire des résultats établis par la théorie des instabilités capillaires des jets axisymétriques. Nous allons donc dans un premier temps simuler le développement temporel de ce type d'instabilité. Cette étude nous permettra, pour une fréquence donnée, de déterminer le taux de croissance prédit par la simulation et de le comparer au taux de croissance théorique. Les simulations sont effectuées dans une configuration axisymétrique, avec des conditions limites périodiques sur les frontières perpendiculaires à l'axe du jet, une condition de symétrie sur l'axe du jet, et une condition « libre » pour l'autre frontière parallèle à l'axe du jet.

Cette étude nécessite d'effectuer une simulation pour chaque fréquence de déstabilisation testée. Les données initiales sont les suivantes :

$$\begin{aligned}
l_r &= 1mm \\
R_{jet} &= \frac{l_r}{3} \\
l_z &= \lambda \\
k &= \frac{2\pi}{\lambda} \\
\phi(r, z) &= R_{jet} - r + \eta_0 \cos\left(\frac{2\pi z}{\lambda}\right) \\
\eta_0 &= \Delta x
\end{aligned}$$

A l'instant initial, les vitesses sont nulles dans le gaz et dans le liquide. Le liquide est de l'eau, et le gaz est de l'air. On utilise 61 mailles pour discrétiser l_r , avec $\Delta r = \Delta z$, donc le nombre de mailles pour discrétiser l_z dépendra de cette longueur. Sur la **figure (6.6)**, on peut visualiser l'évolution temporelle de l'interface, simulée pour $\lambda = 4l_r$. Le mode excité étant instable, la simulation conduit à la cassure du jet en deux gouttes sur la longueur du domaine. On peut déduire de cette simulation, le taux de croissance de l'instabilité en utilisant la relation suivante **(6.1)** :

$$w^n = \frac{1}{\sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l R_{jet}^3}}} \frac{\ln\left(\frac{\eta_{max}^{n+1}}{\eta_{max}^{n-1}}\right)}{(t^{n+1} - t^{n-1})}$$

où η_{max} est la distance maximum entre le rayon du jet au repos et le rayon du jet perturbé à un instant donné. On peut voir sur la **figure (6. 7)**, l'évolution temporelle du taux de croissance. Contrairement aux hypothèses sous-jacentes à la théorie de **Rayleigh** (ou **Weber**), ce taux de croissance n'est pas constant dans le temps. En effet, il est initialement égal à zéro, puis il augmente progressivement vers une valeur asymptotique. Nous avons utilisé cette valeur asymptotique pour tracer le diagramme de dispersion prédit par la simulation, afin de le comparer avec le diagramme de dispersion théorique.

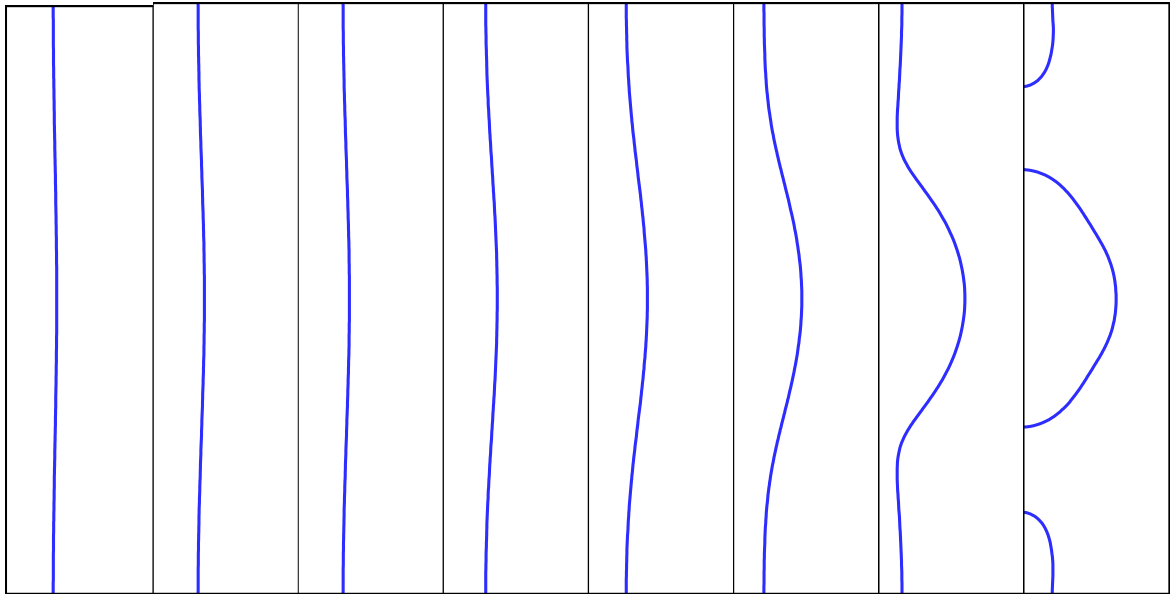


figure (6. 6) : Evolution temporelle de l'interface d'un jet liquide cylindrique pendant le développement d'une instabilité de Rayleigh

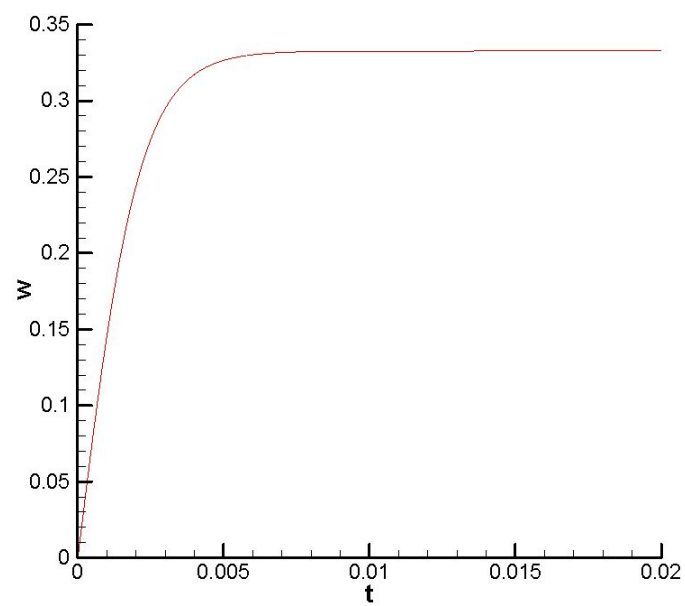


figure (6. 7) : Evolution temporelle du taux de croissance d'une instabilité de Rayleigh pour $k=0.7$

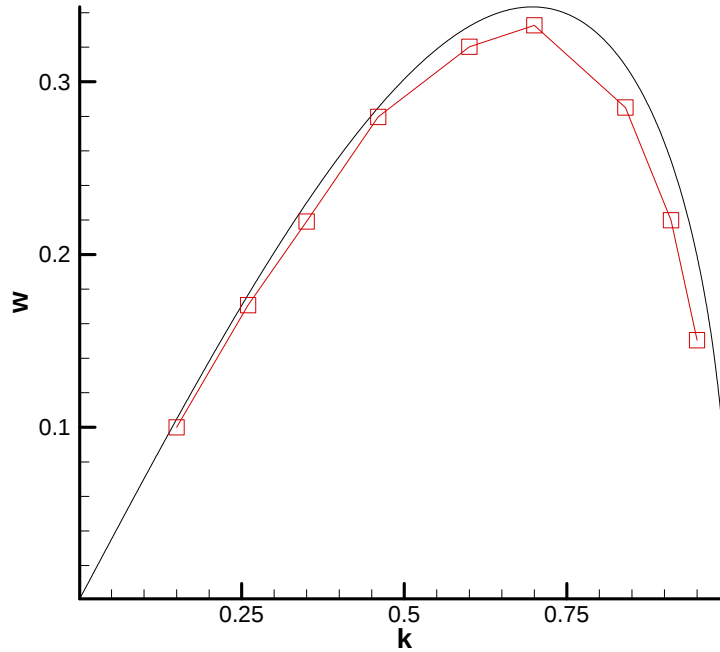


figure (6.8) : en noir diagramme de dispersion théorique (théorie de Weber), rouge diagramme de dispersion obtenue par la simulation

L'accord entre les valeurs prédites par la simulation et le diagramme théorique est assez bon, puisque la forme globale de la courbe est bien respectée. Notamment, pour un nombre d'onde adimensionnel $k=0.7$, on obtient le taux de croissance théorique maximum, et ce résultat est bien reproduit par la simulation. En revanche il existe de légères différences (de l'ordre de 5% au maximum) entre les valeurs théoriques du taux de croissance et les valeurs calculées par la simulation, qui sont systématiquement légèrement inférieures aux valeurs théoriques. L'une des raisons qui pourrait expliquer cet écart, est que contrairement à nos simulations, la théorie de **Weber** ne prend pas en compte l'influence de la viscosité du gaz.

2.4 Simulation spatiale d'une instabilité capillaire

Lorsque l'on travail sur le développement spatial d'une instabilité capillaire dans le régime de **Rayleigh**, on s'intéresse aux variations spatiales de l'amplitude de la perturbation. On associe donc à cette perturbation un taux de croissance spatial.

$$\eta(x,t) = \eta_0 \exp(i\omega t + kx)$$

Ce type de calcul est plus représentatif d'une configuration expérimentale qu'une étude temporelle, car on étudie réellement le développement de la perturbation pendant qu'elle se propage dans l'espace. Ainsi, la configuration d'une telle simulation correspond en fait à l'injection d'un jet liquide dans un gaz au repos.

Cette simulation peut être réalisée dans une configuration **2D** axisymétrique. Une condition limite de paroi est imposée au bord de la condition limite d'injection. Des conditions aux limites libres sont imposées sur la frontière parallèle à la frontière d'injection et sur la frontière parallèle à l'axe de symétrie. Les paramètres des fluides sont

ceux de l'eau et de l'air. Afin d'avoir une longueur de rupture plus faible, et donc un domaine réduit, nous imposons généralement une masse volumique du gaz plus élevée que dans des conditions à pression atmosphérique, ce qui expérimentalement revient à travailler à pression élevée dans le gaz.

Nous avons effectué une simulation dans la configuration suivante, qui a été étudiée expérimentalement dans (**Malot, 2001**) :

$$\begin{aligned} R_{inj} &= 170 \mu m \\ \rho_G &= 67.5 kg.m^{-3} \\ \sigma &= 0.070 kg.s^{-2} \\ V_D &= 3 m.s^{-1} \\ l_r &= 3 R_{inj} \\ l_z &= 64 l_r \end{aligned}$$

Où V_D est la vitesse débitante du jet liquide et R_{inj} le rayon d'injection, le profil de vitesse injecté étant un profil de **Poiseuille**. Le maillage utilisé est 64×4096 .

Au début de la simulation le jet liquide est dans une phase transitoire pendant laquelle sa longueur de rupture augmente avec le temps. Puis la longueur de rupture se stabilise autour d'une valeur moyenne (en temps). On peut observer sur la figure (6.9) le profil de l'interface à un instant donné. Sur cette figure le jet n'est plus en régime transitoire. Les résultats obtenus sont visuellement intéressants, on peut notamment observer sur le profil d'interface les perturbations amplifiées au fur et à mesure que l'on s'éloigne du point d'injection. Lorsque l'on atteint une certaine longueur en suivant l'axe du jet, ces perturbations ont été suffisamment amplifiées pour engendrer la formation de grosses gouttes. Cette longueur, appelée longueur de rupture du jet, fluctue en fonction du temps autour d'une valeur moyenne. Les comportements simulés sur la **figure (6.9)** sont proches des comportements expérimentaux observés dans (**Leroux & al, 1996**), **figure (6.2)**.



figure (6.9) : profil d'interface d'un jet dans le régime de Rayleigh

Nous allons maintenant effectuer une analyse plus quantitative de cette simulation. Les perturbations, que l'on peut observer sur la **figure (6.9)** sont apparues spontanément dans notre simulation, sans qu'aucun forçage n'ait été effectué. Bien qu'il soit difficile d'expliquer rigoureusement l'origine de ces perturbations « numériques », il semble judicieux d'étudier plus finement leur évolution en différents points du jet. Sur les **figures (6.10)** et **(6.11)**, on peut observer l'évolution du rayon du jet une maille après l'injection et 20 mailles après l'injection. Comme on peut le constater sur ces figures, ces perturbations sont de très faible amplitude en sortie de l'injecteur, de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres. Le signal, particulièrement bruité, peut-être comparé à un bruit blanc. L'amplitude des perturbations atteint la centaine de nanomètres 20 mailles plus loin, le

signal mesuré est beaucoup moins bruité, on peut constater un début de sélection de modes .

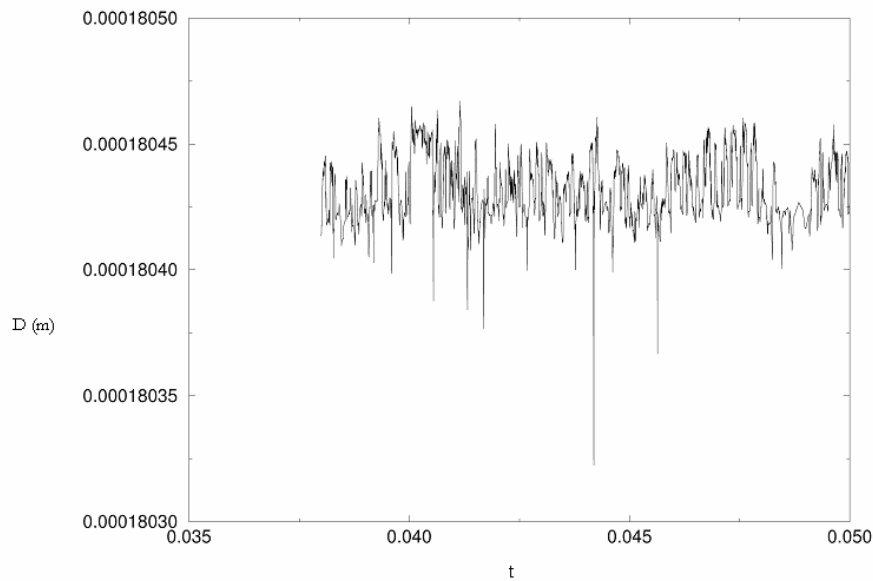


Figure (6.10) : variation du rayon (mètre) du jet sur la première maille de calcul en fonction du temps (sec).

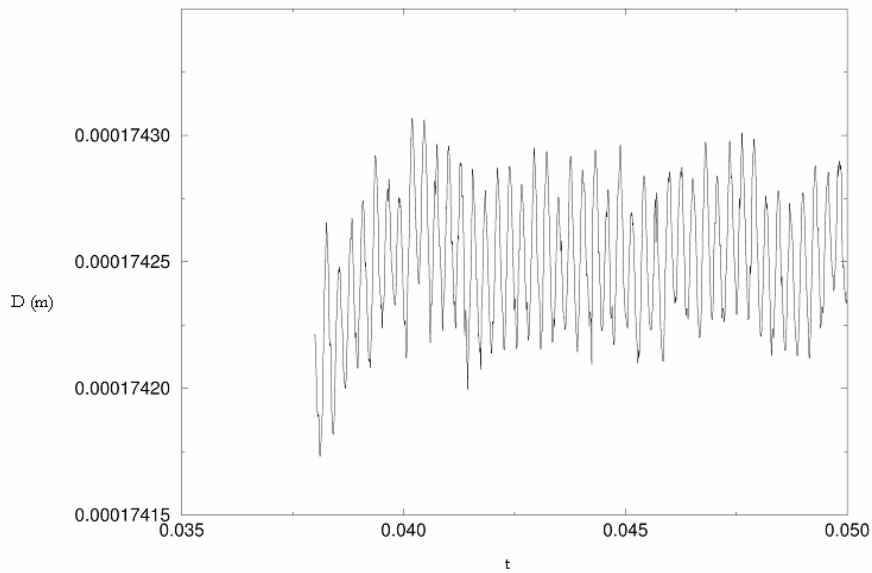


Figure (6.11) : variation du rayon (mètre) du jet 20 mailles après l'injection en fonction du temps (sec).

Sur la **figure (6. 12)**, on peut observer les oscillations spatiales du jet à un instant donné, dans une zone proche de la zone de rupture du jet. Cette figure permet de constater que conformément aux prédictions théoriques, il existe un mode d'oscillations privilégié. Nous allons donc caractériser ce mode d'oscillations, afin de le comparer aux prédictions

théoriques et aux observations expérimentales. En « mesurant » (numériquement) la longueur d'onde λ_{simu} sur la **figure (6.12)**, on peut en déduire le nombre d'onde correspondant en utilisant la relation suivante :

$$\bar{k}_{simu} = R_{inj} \frac{2\pi}{\lambda_{simu}}$$

Nos données numériques nous conduisent à la valeur suivante pour le nombre d'onde correspondant au mode d'oscillation observé **figure (6.12)** :

$$\bar{k}_{simu} = 1.30$$

Dans (**Lin & al, 1990**) , les auteurs ont développé une théorie spatiale linéaire pour le développement des instabilités capillaires dans les jets axisymétriques. Cette théorie spatiale tient compte de la masse volumique du gaz et du liquide, des forces aérodynamiques dans le jet liquide, de la viscosité du liquide et bien sûr de la tension de surface. L'utilisation de cette théorie dans une configuration identique à celle utilisée pour notre simulation conduit à la prédiction suivante pour le nombre d'onde optimal :

$$\bar{k}_{opt} = 1.28$$

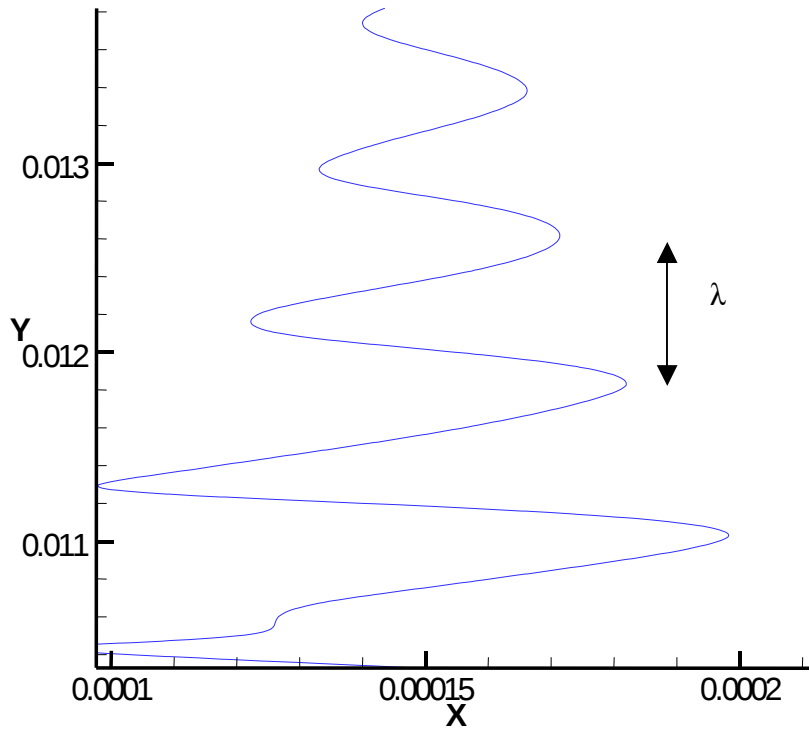
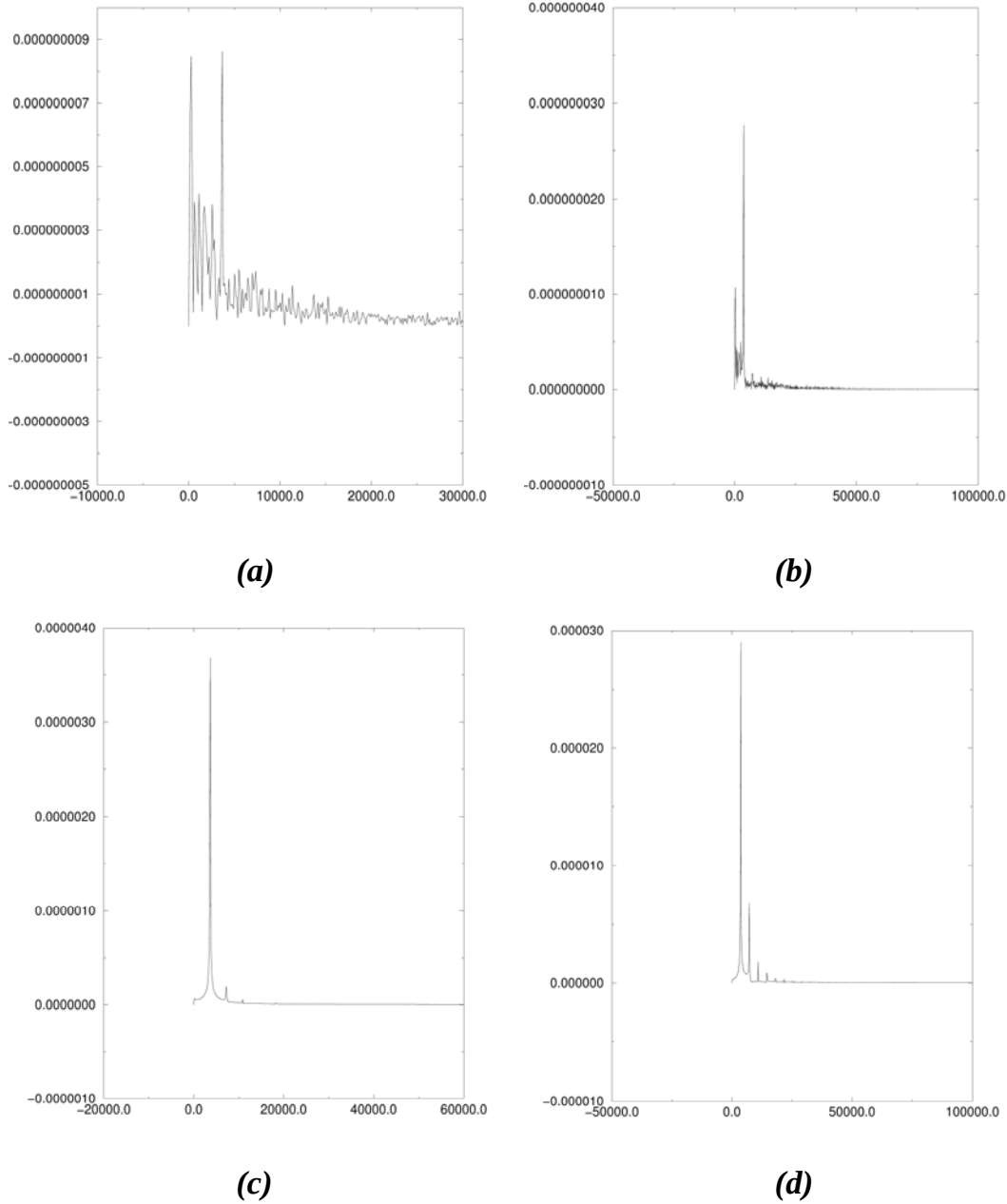


Figure (6.12) : profil d'interface obtenu numériquement à un instant donné (échelle dilatée suivant les X)

Cette étude rapide nous fournit une information précieuse sur la fiabilité du code utilisé, puisque le nombre d'onde sélectionné spontanément dans la simulation est très proche du nombre d'onde optimal prédit par la théorie. Faute de mesures expérimentales disponibles nous n'avons pas pu comparer ce nombre d'onde obtenu numériquement, à un nombre d'onde expérimental.



Figures (6. 13) (a ,b,c,d) : analyse spectrale des variations temporelles du rayon du jet à $d/R=0.5$ (a), $d/R=1$ (b), $d/R=6.5$ (c), et $d/R=30$ (d) : ordonnées intensité du pic/abscisse fréquence (Hz)

On peut associer à ce mode spatial un mode temporel, que l'on peut extraire, à plusieurs endroits du jet, en réalisant des *F.F.T. (Fast Fourier Transform) 1D* sur des séries temporelles similaires à celles présentées *figure (6.11)*. Nous avons donc mesuré

l'évolution temporelle du rayon du jet en différents points, afin d'en extraire les fréquences caractéristiques. Les résultats de cette analyse spectrale sont présentés sur les **figures (6.13) (a,b,c,d)**.

On appelle d_{buse} , la distance verticale entre le point de mesure et le point d'injection et α le rapport :

$$\alpha = \frac{d_{buse}}{R_{inj}}$$

Les **figures (6.13) (a,b,c,d)** correspondent respectivement aux valeurs de α suivantes ; 0.5, 1, 6.5, 30.

On peut remarquer sur ces figures que le spectre est d'autant plus « net », que l'on s'éloigne de l'injection. Cette analyse spectrale nous permet donc d'extraire une fréquence temporelle dominante dans le signal. En « mesurant » (numériquement) cette fréquence dominante, on obtient $f=3662 \text{ Hz}$. La mesure de cette fréquence temporelle associée au développement spatial de l'onde dominante va nous permettre de calculer la célérité de l'onde :

$$c = \lambda f = 3.01 \text{ m.s}^{-1}$$

Le résultat obtenu correspond à la vitesse débitante, ce qui est en accord avec les mesures expérimentales (**Sylvère, 1999**).

Cette étude, volontairement rapide, nous donne des informations particulièrement intéressantes sur les capacités du code à simuler des configurations plus complexes que les cas-tests académiques et des collisions de gouttes. On a notamment pu observer que les conditions limites de sortie sont numériquement stables même lorsque des gouttes sortent du domaine, tout en imposant correctement la condition de divergence nulle sur les frontières de sortie. L'injection du liquide autour d'une paroi (condition limite mixte injection/paroi) a également été réalisée correctement puisque à l'instant initial, dans le domaine complet, la valeur maximale de la norme de la divergence de la vitesse respecte la conservation de la masse (y compris sur le point de raccord entre la condition de paroi et la condition d'injection) :

- A l'instant initial $|\overline{\nabla.V}| = 3.10^{-3}$ et $|\nabla.V|_{\max} = 3.10^{-2}$
- Ensuite ces valeurs diminuent pendant une dizaine d'itérations puis se stabilisent vers des valeurs quasi-constantes, $|\overline{\nabla.V}| \sim 5.10^{-5}$ et $|\nabla.V|_{\max} \sim 5.10^{-4}$

Le fait de trouver un nombre d'onde spatial très proche de celui prédit par la théorie, lorsque l'on mesure numériquement la longueur d'onde des perturbations se développant sur le jet, est également un point important pour montrer la validité des simulations.

L'objectif que nous nous étions fixés lors des premières simulations numériques sur ce type de jet était de retrouver des résultats expérimentaux globaux et moyens, tels que la longueur de rupture. Pour cette variable, on obtient numériquement les mêmes ordres de grandeur que dans l'expérience. Cependant une analyse plus fine révèle des écarts pouvant

avoisiner les 30% sur la longueur de rupture, entre la simulation et l'expérience pour une configuration donnée (*Malot & al, 2001*).

Expérimentalement, ce paramètre n'a valeur de comparaison que lorsqu'il est utilisé pour l'étude d'un jet dans plusieurs régimes de vitesse afin de tracer un diagramme de stabilité *figure (6.1)*. Une comparaison expérimentale de la longueur de rupture, entre deux jets identiques (diamètre, vitesse débitante, liquide utilisé), peut donner des résultats différents à cause de conditions expérimentales (type d'injecteur, montage expérimental, environnement bruité) légèrement différentes. Ce type d'environnement étant exclu de nos simulations, la longueur de rupture ne peut servir que de paramètre qualitatif.

Cependant, dans les perspectives de cette simulation de rupture de jet, on pourrait réaliser une étude plus complète en s'intéressant à d'autres paramètres, tels que le taux de croissance de l'onde dominante, la relaxation du profil de vitesse prédit par la théorie, et des comportements particuliers rencontrés dans les expériences.

2.5 Atomisation des jets cisailés

L'un des enjeux essentiels sous-jacents aux travaux de recherche sur les méthodes de suivi d'interface en mécanique des fluides est d'étudier et de prédire le comportement de jets liquides (ou liquide-gaz par exemple ; jet coaxial, nappe plane, nappe annulaire) dans la zone d'atomisation primaire, pour des régimes de fonctionnement plus proches des applications industrielles (notamment les applications pour la combustion diphasique). Au paragraphe précédent, nous avons étudié le comportement d'un jet dans le régime *(a)* sur la *figure (6.1)*. Nous allons donc dans ce paragraphe nous intéresser à d'autres régimes d'atomisation.

La première difficulté qui se présente lorsque l'on étudie ce type de configuration est la nécessité d'avoir des mailles de calcul très fines par rapport au système global étudié. En effet, contrairement au régime de Rayleigh, les jets à plus grande vitesse ont la particularité de créer des gouttes de très petites tailles (par rapport aux dimensions de l'injecteur), et de développer des structures d'interface très fines. De plus les simulations ne peuvent être effectuées que dans une configuration **3D**, puisque les régimes d'atomisation à grande vitesse sont tous tridimensionnels.

La combinaison de ces deux contraintes nous permet déjà de constater que ce type d'applications ne sera envisageable qu'avec de gros moyens informatiques et des codes de calcul optimisés. Pendant le développement du code, l'optimisation du temps de calcul a toujours été pour nous un objectif important. En effet, nous avons systématiquement recherché les méthodes les plus rapides (à précision égale) que ce soit pour l'intégration en temps, ou pour la résolution du système linéaire. En combinant ces travaux avec une parallélisation complète des codes de calculs, nous avons donc pu aborder ce sujet très complexe, en utilisant les supercalculateurs parallèles disponibles au **CRIHAN** (**Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie**) et à l'**IDRIS** (**Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique**).

Cependant, le temps de calcul n'est pas la seule difficulté que l'on rencontre en effectuant de telles études. En effet ce sont des régimes pour lesquels l'écoulement est soit en transition vers la turbulence dans le domaine de calcul, soit déjà complètement turbulent dès la sortie de l'injecteur.

Ainsi, la génération de conditions limites d'injection turbulentes à l'entrée d'un domaine de calcul est un sujet qui reste encore très complexe et très « ouvert ». Dans le cadre de

cette thèse nous n'avons pas étudié ce problème, nous avons donc pris le parti d'étudier des systèmes d'injection, pour lesquels les écoulements sont laminaires en entrée de domaine. Un certain nombre d'études expérimentales sont disponibles sur ce type d'écoulements (*Marmottant, 2001*), (*Leroux, 1996*).

Etant donné la variété et la grande complexité du sujet, le but de ce paragraphe est de réaliser une étude de faisabilité (ou de non-faisabilité). Nous avons étudié deux systèmes pour des modes d'atomisation différents, les comparaisons sont strictement qualitatives et uniquement basées sur la comparaison entre des images expérimentales et des profils d'interface calculés. Les limitations du code sur ce type d'étude seront largement discutées et des améliorations « originales » seront proposées en perspective à cette étude.

Jet liquide dans le régime de rupture (b) : « first wind induced »

Cette simulation a été effectuée dans les configurations suivantes :

$$\begin{aligned}l_x &= 6R_{inj} \\l_y &= l_y \\l_z &= 16l_x \\R_{inj} &= 300\mu m \\V_D &= 5m.s^{-1} \\\rho_{Gaz} &= 98kg.m^{-3}\end{aligned}$$

A l'exception de la masse volumique du gaz, les propriétés physiques du gaz et du liquide sont celles de l'air et de l'eau dans les conditions standards. La surface d'injection est entourée d'une condition limite de paroi, et toutes les autres conditions limites sont libres. Le profil d'injection est un profil de *Poiseuille* avec une vitesse débitante V_D . Le maillage utilisé est $96 \times 96 \times 1536$.

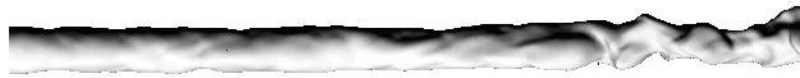
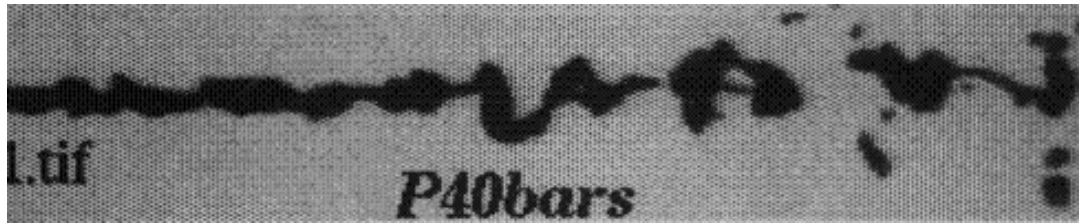


Figure (6. 14) : profil d'interface $0.25l_z < z < 0.5l_z$ à un instant donné



Figure (6. 15) : profil d'interface $0.5l_z < z < 0.75l_z$ à un instant donné



Zoom de la figure (6.3)

On peut observer sur les *figures (6. 14) et (6. 15)*, le profil d'interface sur deux zones différentes, à un instant donné. La ressemblance entre les profils calculés et les images expérimentales, *figure (6. 3)* pour les jets dans ce type de régime est évidente. Sur la *figure (6. 15)*, on peut observer l'endroit où le jet commence à se casser en gouttelettes. Notre objectif était de savoir si l'étude de ce type de jets était faisable : la simulation effectuée semble le prouver. Il est clair que la poursuite de cette étude peut être une perspective de ce travail. L'une des contraintes que l'on a rencontré lors de cette simulation est la nécessité d'imposer une longueur de domaine très grande par rapport au diamètre d'injection, car la longueur de rupture est relativement importante. Cette simulation a nécessité 14 millions de points de discrétisation.

Jet coaxial : jet liquide rond et jet gazeux annulaire

Nous avons ensuite tenté la simulation d'un jet coaxial, à savoir un jet rond liquide à faible vitesse entouré d'un jet gazeux annulaire. Cette simulation inspirée de la thèse de (*Marmottant, 2001*) a été motivée par le fait que les longueurs de rupture sur ce type de jet sont beaucoup plus faibles (relativement au diamètre d'injection) , que sur les jets ronds dans le régime (*b*).

Le schéma de principe du dispositif expérimental est donné sur la *figure (6.16)*. Dans notre simulation, les diamètres d'injection utilisés sont les mêmes que ceux de (*Marmottant, 2001*) .

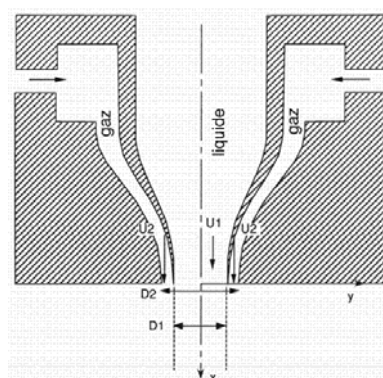


Figure (6. 16) : Dispositif expérimental utilisé par Marmottant

Les données de la simulation sont les suivantes :

$$\begin{aligned}
 R_{inj}^{liq} &= 0.004m \\
 R_{inj}^{gaz} &= 0.0057m \\
 l_x &= 4R_{inj}^{eau} \\
 l_y &= lx \\
 l_z &= 4l_x \\
 V_D^{liq} &= 3m.s^{-1} \\
 V_D^{gaz} &= 25m.s^{-1}
 \end{aligned}$$

Les conditions limites sont libres sur toutes les frontières du domaine, à l'exception bien sûr du plan d'injection. Les propriétés physiques du gaz et du liquide sont celles de l'eau et de l'air. Les profils de vitesse injectés sont laminaires. En effet dans (**Marmottant, 2001**) les expérimentateurs utilisent des injecteurs convergents qui permettent d'éviter la transition vers la turbulence des écoulements internes (malgré un nombre de **Re** ≈ 24000 , pour l'écoulement interne dans l'injecteur d'eau), car ils souhaitent observer un développement régulier des instabilités.

Ainsi, selon (**Marmottant, 2001**), le profil de vitesse du liquide est un profil de type **Poiseuille**, et le profil du gaz un profil de type « marche » (uniforme). Cette simulation a été réalisée sur un maillage $64 \times 64 \times 256$ avec les conditions initiales suivantes :

$$\begin{aligned}
 \phi(x, y, z) &= R_{inj}^{liq} - \sqrt{x^2 + y^2} \\
 u(x, y, z) &= 0 \\
 v(x, y, z) &= 0 \\
 w(x, y, z) &= \begin{cases} V_D^{liq} \left(1 - \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{R_{inj}^{liq}} \right) & \text{si } \sqrt{x^2 + y^2} < R_{inj}^{liq} \\ 0 & \text{si } \sqrt{x^2 + y^2} > R_{inj}^{liq} \end{cases}
 \end{aligned}$$

Les origines des axes (O, x) et (O, y) sont centrées sur la frontière d'injection.

On trouve en particulier ce type d'injection coaxial dans les moteurs fusée. Dans ces configurations, le jet central est un jet d'oxygène liquide et le jet gazeux est un jet d'hydrogène à très haute pression. Nous avons donc effectué deux simulations différentes pour deux masses volumiques du gaz. Dans la première, nous avons gardé la masse volumique de l'air ambiant pour comparer nos résultats aux mesures de (**Marmottant, 2001**) et dans la deuxième nous avons imposé une masse volumique 80 fois plus grandes, pour être plus proche des conditions dans les moteurs-fusée.

Nous ne pouvons présenter aucun résultat sur le cas effectué avec l'air dans les conditions standards, car le code est instable sur ce cas. Dans le deuxième cas le code reste stable, et on peut visualiser quelques profils d'interface sur la **figure (6.17)**.

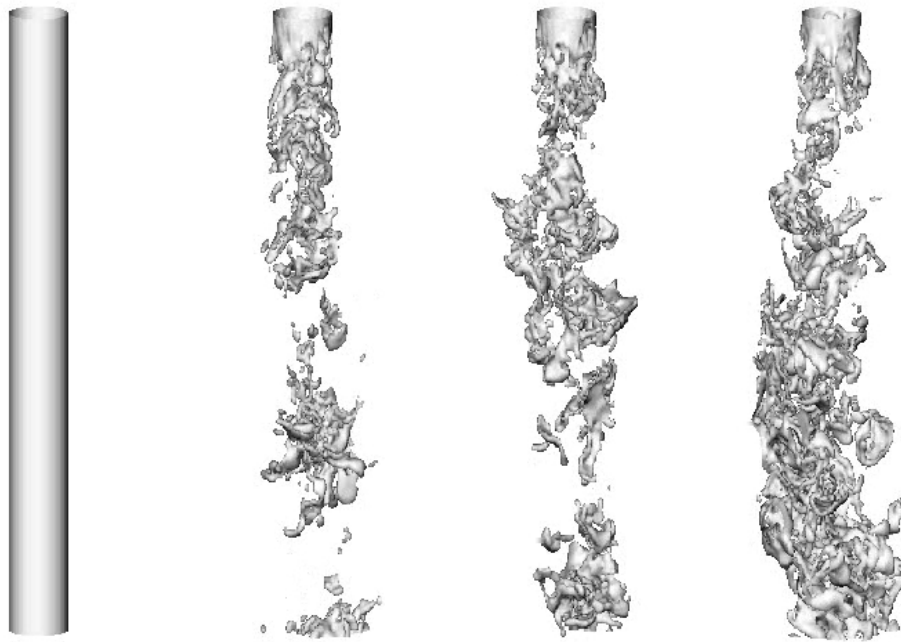


Figure (6.17) : profil d'interface pour le jet coaxial avec $\rho_G = 98 \text{ kg.m}^{-3}$ (maillage $64 \times 64 \times 256$)

La première image correspond à la condition initiale. Sur les images suivantes l'interface se déstabilise rapidement et se brise sous forme de paquets liquides. Dans (*Farago & al, 1992*), les auteurs ont observé un mode de cassure, **figure (6.18)**, qui semble s'approcher des profils d'interface que nous avons observé. Ils ont appelé ce mode « *super pulsating* », car on peut observer des « lachers » de gros paquets liquides.

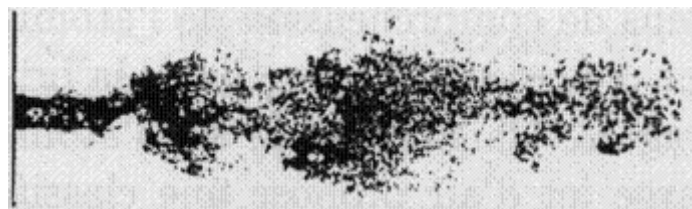


Figure (6.18) : modes de désintégration dit « *super pulsating* » d'après Farago & al

Cette simulation a également été réalisée avec un maillage plus important ($128 \times 128 \times 512$), nous avons utilisé une nouvelle méthode de représentation de l'interface, **figure (6.19)**, qui est plus réaliste, car elle permet d'observer des phénomènes de réflexion, de réfraction et de transparence à la traversée du milieu liquide. Ce mode de représentation n'a été appliquée que pour une image, sur un quart du domaine, car son utilisation est encore très coûteuse en temps de calcul et place mémoire. La topologie du jet simulé sur la **figure (6.19)** est très proche des images expérimentales, **figure (6.20)**, observées par (*Gicquel & al, 2001*), lors d'essai à haute pression dans le gaz, réalisé sur le banc *Mascotte* pour un jet coaxial.



Figure (6.19) : profil d'interface simulé en sortie proche de l'injecteur pour le jet coaxial avec $\rho_G = 98 \text{ kg.m}^{-3}$

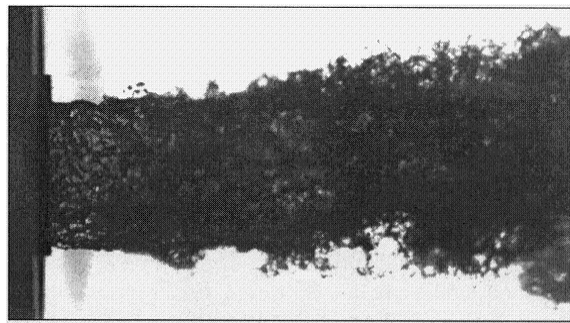


Figure (6.20) : photographie d'un jet liquide en sortie d'injecteur en conditions de combustion sur le banc Mascotte (Gicquel & al, 2001)

Nous n'irons pas plus loin dans les comparaisons qualitatives de ces images, car les conclusions que l'on peut tirer de ces essais sont déjà riches d'enseignements.

Conclusion sur cette étude de faisabilité

Les simulations effectuées sur les deux cas étudiés dans ce paragraphe nous ont permis d'étudier les capacités de notre code de simulation numérique à modéliser précisément des mouvements d'interface complexes couplés à des écoulements **3D** et fortement instationnaires. Si l'on s'en tient aux quelques comparaisons avec les photos expérimentales, on peut observer que notre code est capable de reproduire des comportements physiques complexes déjà observés dans l'expérience, sous condition de disposer de moyens informatiques conséquents. Une certaine faisabilité a donc été prouvée par cette étude rapide.

Il existe cependant deux défauts majeurs dans nos simulations, pour modéliser correctement ce type de comportements. Le premier est un problème récurrent à la méthode **Level Set**, c'est la non-conservation de la masse. En effet, lors de nos études sur les collisions de gouttes et sur quelques autres tests préliminaires, nous avons constaté que ces pertes de masse étaient négligeables. Cependant sur ces cas plus simples, nous disposons d'une résolution largement suffisante pour que les pertes de masse soient

négligeables. Les simulations présentées dans ce paragraphe nécessitent une résolution très fine en **3D** sur des domaines plus grands que ceux étudiés précédemment, dans ces conditions une certaine sous-résolution numérique est inévitable, car des structures d'interface très fines et très distordues apparaissent. Et lorsque notre fonction **Level Set** est sous-résolue des pertes ou des gains de masse importants peuvent être observés (voir cas-test serpent). Ainsi, même si des calculs précis de pertes ou de gains de masse deviennent difficiles sur ce genre de simulation, en regardant la quatrième image de la **figure (6.17)**, il semblerait qu'il y ait un gain de masse très (trop) important dans la phase liquide. La même simulation, réalisée en utilisant le schéma **WENO 5** classique au lieu du schéma **WENO 5** « modifié » pour la convection de ϕ , conduit à un résultat inverse puisque des pertes de masse très importantes surviennent. Nous avons déjà souligné ce problème au cours du **chapitre 2**, et proposé d'utiliser les travaux de (**Enright & al, 2002**) ou de (**Sussman & al, 2000**) pour résoudre ce problème épineux. Il semble que la méthode de (**Sussman & al, 2000**), qui combine les avantages de la méthode **Level Set** avec ce des méthodes **V.O.F.** soit une alternative très sérieuse à ce problème sur les pertes de masse.

Le deuxième défaut majeur que nous avons observé en effectuant nos simulations est que lorsque le rapport de masse volumique entre les deux phases est important et que le cisaillement est également important, le code est instable. Nous avons effectué de nombreuses simulations en **2D**, et en **3D**, dans d'autres configurations pour essayer de comprendre la cause de cette instabilité. Les observations que nous avons tirées de ces nombreux tests sur des cas instables sont les suivantes :

- Toutes les simulations instables présentent deux caractéristiques communes, le rapport des masses volumiques est élevé, les forces de cisaillement entre la phase liquide et la phase gazeuse sont également très importantes
- Cette instabilité survient même lorsque l'on annule la viscosité des fluides et la tension de surface (ce n'est donc pas un problème sur le calcul de la courbure de l'interface dans une topologie complexe).
- Cette instabilité est toujours déclenchée dans des zones où l'interface est fortement distordue, notamment dans des poches de gaz emprisonnées dans du liquide ou lorsque l'écoulement gazeux rapide s'engouffre dans des cols formés par des fragments liquides.
- L'explication classique qui consiste à incriminer des courants parasites générés par une discrétisation peu précises des discontinuités, n'est à notre avis pas justifiée car nous avons déjà montré que la **G.F.M.** était une technique précise pour prendre en compte ce type de discontinuités. Or cette technique plus précise n'apporte absolument aucune amélioration face à ce problème. En effet, nos tests nous ont permis de constater que sur ces cas instables la **G.F.M.** et la **D.F.M.** étaient aussi instables l'une que l'autre. En revanche, nous avons pu constater qu'au contraire l'apparition de ces instabilités pouvaient être favorisées par une résolution plus fine, ce qui semble aller contre cette idée de courants parasites du fait d'une discrétisation trop grossière. De plus, dans ce travail de thèse, nous avons pu constater que la méthode utilisée

était très précise même lorsque les rapports de masse volumique sont très importants (gouttes de mercure).

- Les fortes vitesses ne sont pas à mettre en cause car dans le cas monophasique, le code est stable pour des calculs à **Re** infini, même pour des conditions initiales discontinues (voir **Chapitre 3**). De plus, nous avons pu observer que pour des vitesses importantes dans les deux phases, avec des rapports de masse volumique très élevés, le code pouvait être stable à condition que le cisaillement soit faible (forte vitesse dans les deux phases, mais faible différentiel de vitesse).

Finalement, toutes ces constatations nous ont conduit à émettre une hypothèse basée sur la physique pour expliquer ce phénomène. Une interprétation est que, à notre avis, on ne peut plus négliger la compressibilité du gaz sur les jets diphasiques cisailés.

En effet, il nous semble qu'un gaz s'engouffrant dans des géométries d'interface complexes est confronté localement à des diminutions de section ou peut même se trouver confiner dans des poches fermées, ce qui peut entraver son avancée. La solution physique à ce type de configuration peut conduire à la montée en pression du gaz. Mais si le solveur utilisé est incompressible, la seule alternative est l'augmentation locale de la vitesse du gaz pour conserver le débit, le code risque alors de devenir sévèrement instable si cette augmentation est trop importante. Cette interprétation est cohérente avec toutes les observations effectuées au préalable. Il s'agit cependant d'une hypothèse car nous ne connaissons pas d'études expérimentales (ou numériques) qui permettraient de la confirmer (ou de la rejeter). Il existe cependant un fait connu de tous, puisqu'on peut le constater quotidiennement en ouvrant un robinet, en écoutant la pluie ou la mer ; les écoulements diphasiques peuvent être très bruyants, même à faible vitesse, en comparaison avec les écoulements monophasiques. Or à l'origine des ondes acoustiques, il y a toujours des phénomènes de compression locale d'un gaz....

3. Modélisation d'interfaces réactives

3.1 Equation de propagation et condition de saut pour des interfaces réactives

On a déjà défini, au **chapitre 1**, la notion d'interfaces réactives, comme une interface qui évolue à la vitesse du milieu dans lequel elle est plongée, plus une vitesse dite de « réaction ». L'équation de propagation de la ligne de niveau zéro s'écrit alors :

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{V} + \mathbf{V}_s) \cdot \nabla \phi \right) \delta(\phi) = 0 \quad (6.4)$$

où $\mathbf{V}_s$ est la vitesse de réaction de l'interface. Pour un champs de vitesse continu, on peut généraliser cette équation à l'ensemble des lignes de niveau :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{V}_{mil} + \mathbf{V}_s) \cdot \nabla \phi = 0 \quad (6.5)$$

Contrairement au cas non-réactif, la généralisation de l'équation (6.4) à (6.5) peut être difficile. En effet la vitesse de réaction de l'interface est une grandeur ponctuelle qui n'a de sens physique que lorsqu'elle est définie sur l'interface. L'extension de cette grandeur dans l'ensemble du domaine peut être problématique, notamment si la vitesse de réaction dépend de grandeurs qui subissent des discontinuités à la traversée de l'interface.

On a également vu au **chapitre 1**, qu'une interface réactive séparant deux fluides de densités différentes, induit une discontinuité de vitesse, donnée par la relation suivante (équivalente à (1.12) et (1.21)) :

$$[\mathbf{V}]_{\Gamma} = \dot{\omega}_{\text{reac}} \left[\frac{1}{\rho} \right]_{\Gamma} \mathbf{n} \quad (6.6)$$

où $\dot{\omega}_{\text{reac}}$ est la densité de débit massique par unité de surface dégagée par la réaction interfaciale. D'après (1.11) ou (1.20) :

$$\dot{\omega}_{\text{reac}} = -\rho_{\text{reac}} \mathbf{V}_s \cdot \mathbf{n} \quad (6.7)$$

où ρ_{reac} est la masse volumique de la phase réactive. Plusieurs auteurs se sont intéressés aux problèmes d'interfaces réactives, que ce soit pour étudier la propagation de front de flamme, l'ébullition ou la vaporisation.

On peut notamment citer les travaux de (Son & al, 1998) qui ont utilisé la méthode **Level Set** pour traiter des problèmes d'ébullition, (Welch & al, 2000) et (Juric & al, 1998) ont utilisé respectivement une méthode **V.O.F.** et une méthode **Front-Tracking** pour simuler également le comportement d'interface en ébullition. Dans sa thèse Calimez est le seul auteur, à notre connaissance, à avoir travaillé sur le couplage d'une méthode de suivi d'interface en l'occurrence la méthode **V.O.F.** pour simuler la vaporisation d'une interface.

De nombreuses publications sont parues sur le formalisme de la **G-equation** pour le suivi de front de flamme. (Nguyen & al, 2001), (Rhee & al, 1995) et (Qian & al, 1998) ont développé des techniques différentes qui couplent le suivi de l'interface, un solveur **Navier-Stokes**, et une méthode numérique permettant d'imposer la condition de saut (1.21) sur la vitesse du milieu fluide.

Tous les auteurs cités ci-dessus ont donc été confrontés à la difficulté d'imposer une discontinuité de vitesse à la traversée de l'interface. Nous allons donc dans la suite de ce paragraphe réaliser une brève revue de ces différents travaux, afin de sélectionner la méthode qui nous semble la plus fiable.

Dans (Son & al, 1998), (Welch & al, 2000), (Juric & al, 1998) et (Qian & al, 1998), les auteurs proposent des méthodes numériques inspirées de la **Delta Function Method**. Par exemple (Son & al, 1998) imposent un terme source surfacique dans l'équation de conservation de la masse, pour prendre en compte ce saut. Ce qui formellement peut se traduire par la relation suivante :

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = \dot{\omega}_{\text{reac}} \left[\frac{1}{\rho} \right]_{\Gamma} \delta(\phi) \quad (6.8)$$

Cette équation est ensuite utilisée dans la méthode de projection classique. Les auteurs utilisent alors les relations de la **Delta Function Method** classique, où la distribution de **Dirac** est approximée par la fonction lissée (4.9). Ainsi, le saut de vitesse est lissé sur deux ou trois mailles, à l'instar du saut de pression et de masse volumique. Dans (Fedkiw & al, 2001), les auteurs ont développé une version, adaptée à cette condition de saut, de la **Ghost Fluid Method**, car ils estiment que le lissage de la discontinuité de vitesse inhérent à la **Delta Function Method** introduit des erreurs numériques importantes dans l'estimation de la vitesse de propagation de l'interface. En effet, l'équation (6.5) peut être déduite de l'équation (6.4), seulement pour un champ de vitesse suffisamment continu. Si le champ de vitesse subit une discontinuité à la traversée de l'interface, il est alors nécessaire de construire un champ de vitesse fictif, en prolongeant par continuité le champ de vitesse de la phase réactive (le liquide ou les gaz frais) à l'intérieur de la phase inerte (la phase vapeur ou les gaz brûlés), et ensuite de résoudre l'équation (6.5) avec le champ de vitesse réel dans la phase réactive et le champ de vitesse fictif dans la phase inerte. Ainsi, selon (Fedkiw & al, 2001), on évite les erreurs introduites par l'épaississement artificiel de l'interface.

De leur côté (Calimez, 1998), (Rhee & a, 1995) proposent un formalisme original pour calculer le champ de vitesse discontinu. En effet, ils décomposent le champ de vitesse en plusieurs composantes, et ils supposent que la composante, V_{stef} , du champ de vitesse (connue sous le nom d'écoulement de **Stephan**) induite par la condition (6.6) est irrotationnelle. Cette dernière propriété implique l'existence d'une fonction potentielle φ telle que :

$$V_{stef} = \nabla \varphi \quad (6.9)$$

En utilisant les relations (6.8) et (6.9), on peut calculer φ en résolvant une équation de **Poisson** :

$$\Delta \varphi = \nabla \cdot V \quad (6.10)$$

Les deux auteurs proposent alors chacun une solution différente pour déterminer l'écoulement de **Stephan** autour d'une goutte.

Dans la méthode qu'il a proposée et utilisée, **Calimez** impose un terme source proportionnel au taux de vaporisation sur l'équation de continuité en chaque point du domaine gazeux. Cette méthode n'est justifiée que si l'écoulement considéré est confiné. Ainsi, si le liquide se vaporise dans une enceinte fermée, la phase gazeuse va monter en pression. Sa masse volumique va donc augmenter et l'équation de continuité ne sera plus une équation à divergence nulle. Comme le nombre de **Mach** de ce type d'écoulements reste très faible, on peut considérer que la masse volumique du gaz va varier en fonction du temps, mais restera uniforme dans l'espace. On formulera cette condition ainsi :

$$\nabla \cdot V_{gaz} = - \frac{1}{\rho_{gaz}(t)} \frac{d\rho_{gaz}(t)}{dt}$$

Où les variations temporelles de ρ_{gaz} dépendent du taux de réaction de l'interface. Cette condition peut ensuite être utilisée dans l'équation (6.10) pour calculer l'écoulement de

Stephan. La principale limitation de cette méthode vient de la nécessité de simuler des écoulements confinés pour qu'elle fonctionne. Le problème qui se pose alors est que la variation temporelle de pression (ou densité) calculée n'est correcte que si l'on a simulé la totalité du système physique confiné. En effet, même si la plupart des systèmes de combustion sont confinés, il est informatiquement prohibitif d'effectuer une simulation sur la totalité du système considéré, on se contente généralement de réaliser des simulations sur de petites portions à l'intérieur desquelles le comportement sera représentatif du comportement global, les frontières du domaine de calcul sont alors ouvertes (pas de variation temporelle de la pression thermodynamique et de la masse volumique).

De plus, si l'augmentation temporelle de la pression thermodynamique du gaz dans un milieu confiné est un paramètre important, lorsque l'on s'intéresse à la propagation d'une flamme, cette variation est en générale négligeable lorsqu'elle est engendrée par la vaporisation d'un liquide.

(*Rhee & al, 1995*) proposent une méthode qui peut être utilisée pour des écoulements « ouverts ». Ils résolvent une équation de la forme suivante pour calculer la fonction potentielle, à partir de laquelle on déterminera l'écoulement de **Stephan**.

$$\Delta\phi = \left[\frac{1}{\rho} \right]_{\Gamma} \dot{\omega}_{\text{reac}} \delta(\phi)$$

On peut cependant reprocher à leurs publications de donner très peu de détails sur les approximations numériques qu'ils utilisent pour estimer le terme source singulier de cette équation. De plus les résultats présentés dans (*Rhee & al, 1995*) ne permettent pas d'estimer la précision de la méthode utilisée pour décrire cette discontinuité.

On peut également regretter que (*Rhee & al, 1995*) et (*Calimez, 1998*) n'expliquent pas clairement comment l'écoulement de **Stephan** calculé par cette méthode est couplé aux autres parties du solveur **Navier-Stokes**.

Ainsi, bien que leur formalisme soit intéressant et attractif, nous n'utiliserons pas les méthodes proposées par ces auteurs pour déterminer l'écoulement de **Stephan** à la traversée d'une interface réactive, pour toutes les raisons exposées ci-dessus.

Nous allons donc décrire dans le prochain chapitre, la méthode numérique développée par (*Nguyen & al, 2001*), car elle est à notre avis la plus rigoureuse et la mieux adaptée à la démarche que nous avons mise en œuvre dans ce travail.

3.2 Discontinuité de vitesse à la traversée d'une interface réactive

Nous avons vu que la **Ghost Fluid Method** permet d'imposer précisément des conditions de saut raides à la traversée d'une interface, en prolongeant par continuité les variables discontinues sur lesquelles des opérateurs de dérivation sont appliqués. On a décrit dans le **chapitre 4** comment appliquer cette méthode sur la variable pression dynamique qui est discrétisée avec des schémas centrés utilisant un stencil à deux points. La vitesse étant discrétisée avec des schémas numériques beaucoup plus complexes

(Schémas **WENO 5** stencil à 7 points), une nouvelle procédure doit être utilisée. Pour appliquer des discontinuités sur des variables discrétisées par des schémas complexes, (**Nguyen & al, 2001**) ont introduit le concept de fluide « fantôme » (d'où le nom de **Ghost Fluid Method**). Le fluide « fantôme » est un prolongement d'une des deux phases à l'intérieur de l'autre. Ainsi lorsqu'une variable est discontinue à la traversée de l'interface, il existe pour chacun des deux fluides une extension de cette variable de l'autre côté de l'interface. Lorsque l'on calcule la dérivée d'une variable discontinue sur un stencil traversé par l'interface, on utilise les valeurs « fantômes » de cette variable pour les points situés de l'autre côté de l'interface (par rapport au point où l'on calcule la dérivée).

Dans le cas de la discontinuité de vitesse, on utilisera simplement les relations suivantes pour peupler les cellules fantômes :

$$\mathbf{V}_{inerte}^{Ghost} = \mathbf{V}_{réactif} - \dot{\omega}_{reac} \left[\frac{1}{\rho} \right]_{\Gamma} \mathbf{n} \quad (6.11)$$

$$\mathbf{V}_{réactif}^{Ghost} = \mathbf{V}_{inerte} + \dot{\omega}_{reac} \left[\frac{1}{\rho} \right]_{\Gamma} \mathbf{n} \quad (6.12)$$

Ces deux relations sont ensuite utilisées dans la méthode de projection pour déterminer dans tout le domaine un champ de vitesse $\mathbf{V}^*$ pour chaque fluide. On peut donc ensuite déterminer le second membre f de l'équation de **Poisson** pour la pression en utilisant l'une des deux relations suivantes.

Si le point considéré se trouve dans le domaine du fluide réactif :

$$f = \nabla \cdot \mathbf{V}_{réactif}^*$$

Si le point considéré se trouve dans le domaine du fluide inerte :

$$f = \nabla \cdot \mathbf{V}_{inerte}^*$$

On résout ensuite l'équation de **Poisson**, et on applique la méthode de projection habituelle. On avait remarqué précédemment que lorsque la vitesse du milieu était discontinue, la généralisation de (6.4) à (6.5) était plus délicate. On sait que la ligne de niveau zéro de ϕ doit évoluer avec la vitesse du fluide réactif sur l'interface. Le formalisme établi ci-dessus nous permet donc d'utiliser une relation plus rigoureuse pour remplacer (6.5) :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{V}_{réactif} + \mathbf{V}_s) \cdot \nabla \phi = 0 \quad (6.13)$$

Les valeurs « fantômes » de $\mathbf{V}_{réactif}$ seront alors utilisées pour convecter les lignes de niveau situées dans le fluide inerte.

3.3 Discontinuité de pression à la traversée d'une interface réactive

On a vu au **chapitre 1**, que selon (*Nguyen & al, 2001*), la pression était discontinue à la traversée d'une interface réactive (même sans tension de surface). Cette discontinuité est modélisée par la condition de saut suivante :

$$[p] = -(\dot{\omega}_{reac})^2 \left[\frac{1}{\rho} \right]_r$$

On utilisera la technique décrite dans le **chapitre 4**, pour imposer cette condition de saut. Dans le cas de la vaporisation de gouttes, cette condition sera ajoutée au saut de pression déjà calculé du fait des forces de tension de surface.

3.4 Extension d'une variable discontinue

Dans le paragraphe précédent, nous avons étudié une technique qui permet de généraliser l'équation (6.4) à l'équation (6.5), dans le cas où la vitesse du milieu était discontinue à la traversée de l'interface. Cependant on peut trouver des situations où la vitesse de réaction de l'interface V_s dépend de variables discontinues à la traversée de l'interface ou même de variables qui ne sont définies que d'un côté de l'interface. Il est alors nécessaire de réaliser une extension de la vitesse de réaction dans les parties du domaine où elle est mal calculée (discontinuité) ou pas calculée du tout (variables physiques non définies d'un côté de l'interface). Cette extension permettra la généralisation de l'équation (6.4) à l'équation (6.5). De plus, on a vu précédemment qu'il était parfois nécessaire de calculer une extension de chaque fluide de l'autre côté de l'interface, pour certaines variables physiques discontinues afin d'imposer les conditions de saut requises à la traversée de l'interface, en appliquant les opérateurs de dérivation discrets sur des variables prolongées par continuité. Dans certains cas le calcul de cette extension est immédiat, dans d'autres cas l'extension peut être plus difficile. Notamment, à l'instar de la vitesse de réaction, on peut se trouver dans des situations où le saut que l'on souhaite imposer dépend de variables physiques qui ne peuvent être calculées que d'un seul côté de l'interface.

Dans les deux cas exposés ci-dessus, il devient alors nécessaire d'utiliser une procédure plus sophistiquée pour effectuer une extension de la variable discontinue. Différents auteurs ont proposé une solution à ce problème (*Fedkiw & al, 1999*), (*Peng & al, 1999*). Il ressort de leurs travaux que dans la partie du domaine où l'on effectue l'extension, la variable étendue ψ doit respecter la relation suivante :

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \psi = 0 \quad (6.14)$$

Cette relation traduit le fait que la variable étendue doit être constante dans la direction normale à l'interface. On peut imposer cette condition en résolvant de façon itérative l'équation hyperbolique suivante (*Fedkiw & al, 1999*), (*Peng & al, 1999*) :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \pm \mathbf{n} \cdot \nabla \psi = 0 \quad (6.15)$$

puisque l'état stationnaire de (6.15) respecte la condition (6.14). L'équation (6.15) n'est pas sans rappeler l'équation de réinitialisation de la fonction distance (2.20). Ainsi, les techniques utilisées précédemment pour résoudre (2.20) peuvent être appliquées directement à la résolution numérique de l'équation (6.15). Dans la suite de ce chapitre, nous étudierons une situation où de telles méthodes semblent tout à fait adaptées.

3.5 Modélisation d'un front de flamme prémélangée par la *G-equation*

Nous avons déjà discuté au **chapitre 1**, la pertinence et les limitations d'un formalisme de type *G-equation* pour modéliser le comportement d'un front de flamme. Dans ce paragraphe, nous allons exposer les résultats obtenus en utilisant la *Ghost Fluid Method* proposée par (Nguyen & al, 2001) pour ce type de modélisation. L'intérêt principal de cette méthode est, comme on l'a déjà écrit, sa capacité à préserver numériquement le caractère discontinu des conditions de saut à la traversée de l'interface. Ainsi pour l'étude d'interfaces réactives la vitesse du front peut être calculée précisément, même si le champ de vitesse subit une discontinuité à la traversée du front. De plus, cette méthode peut être couplée à une méthode de projection pour la résolution des équations de *Navier-Stokes* incompressibles. Le premier cas étudié, nous permettra de valider notre code par rapport aux résultats de (Nguyen & al, 2001). Puis, nous utiliserons le formalisme exposé pour effectuer un essai de simulation de la propagation d'une flamme prémélangée, dans une configuration s'approchant des conditions expérimentales étudiées par (Lecordier, 1997), et représentative de la combustion du mélange dans un moteur essence. A ce stade du manuscrit, il est important de rappeler que cette étude, volontairement succincte, a pour but d'étudier la faisabilité de ce type de calcul, et de montrer les avantages d'un tel formalisme, tout en proposant des améliorations possibles pour augmenter le degré de prédictibilité de cette approche. Ainsi, les conclusions que l'on peut tirer des résultats que nous allons exposer ne peuvent être que qualitatives.

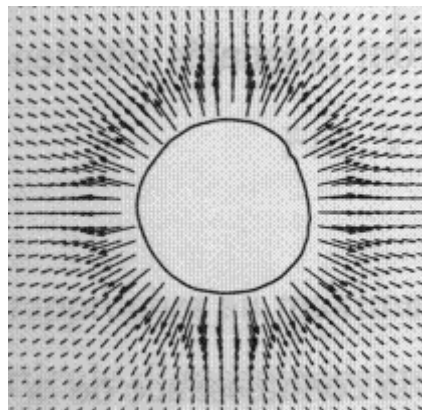


Figure (6.21) : visualisation de la discontinuité du champ de vitesse à la traversée d'un front de flamme, d'après Lecordier

Le premier cas étudié correspond à l'**exemple 7** étudié par (Nguyen & al, 2001). On s'intéresse au mouvement bidimensionnel de deux flammes circulaires centrées

respectivement en $(x,y)=(0.6,0.5)$ et en $(x,y)=(0.9,0.5)$, tel que leur rayon initial vaut $R_{initial} = 0.1$, dans un domaine dont les dimensions sont les suivantes $[0,1.5] \times [0,1]$. Les effets visqueux sont négligés, les gaz frais sont situés à l'extérieur des cercles et les gaz brûlés à l'intérieur. Pour calculer la vitesse de propagation du front de flamme **(1.19)**, on prendra les valeurs numériques suivantes ; $S^0=1$ et $L=-0.01$. On utilisera des conditions limites libres sur les quatre frontières du domaine. Le maillage utilisé est (60×90)

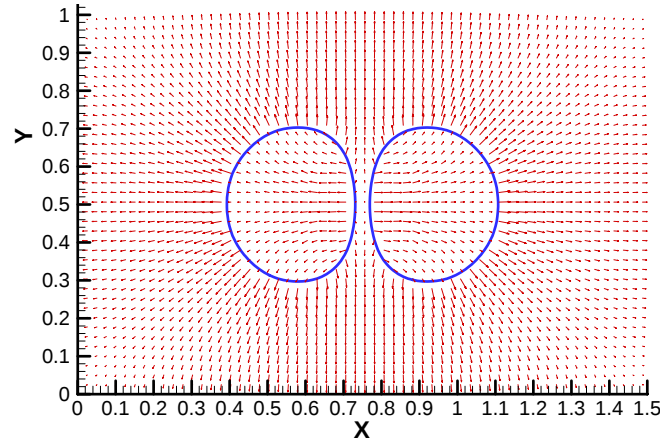


figure (6. 22) : Profil du front de flamme et champ de vitesse ($t=0.02$ sec)

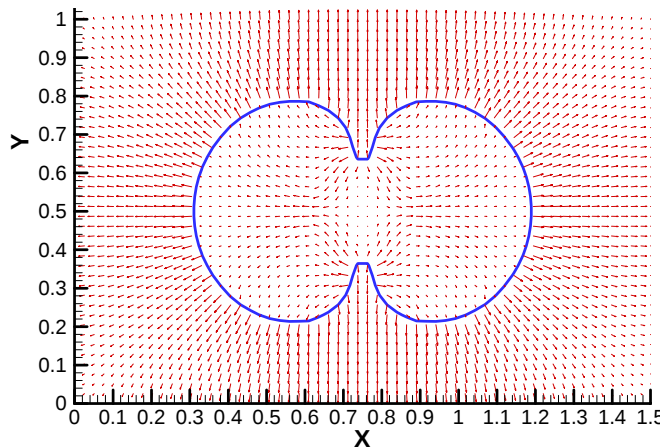


figure (6. 23) : Profil du front de flamme et champ de vitesse ($t=0.035$ sec)

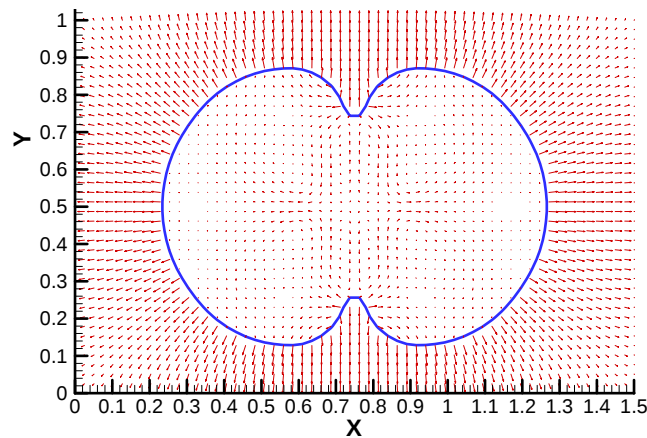


figure (6. 24) : Profil du front de flamme et champ de vitesse ($t=0.05$ sec)

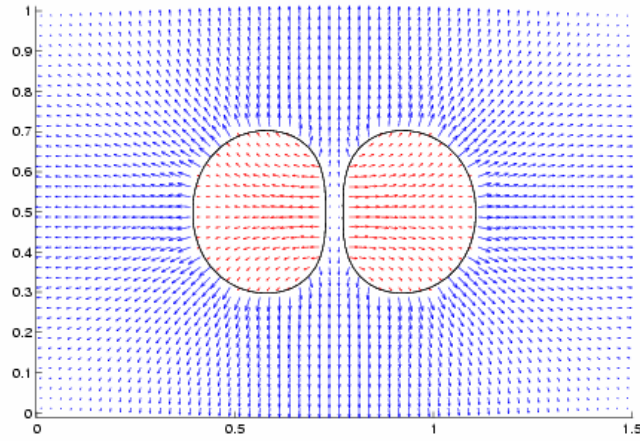


figure (6. 25) : Profil du front de flamme et champ de vitesse ($t=0.02\text{sec}$), selon (Nguyen & al , 2001)

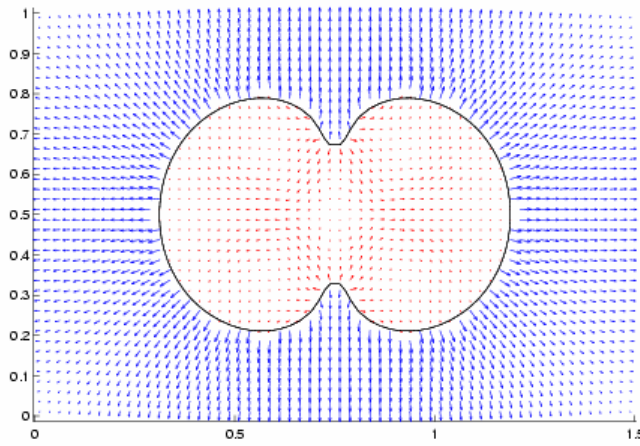


figure (6. 26) : Profil du front de flamme et champ de vitesse ($t=0.035\text{sec}$), selon (Nguyen & al , 2001)

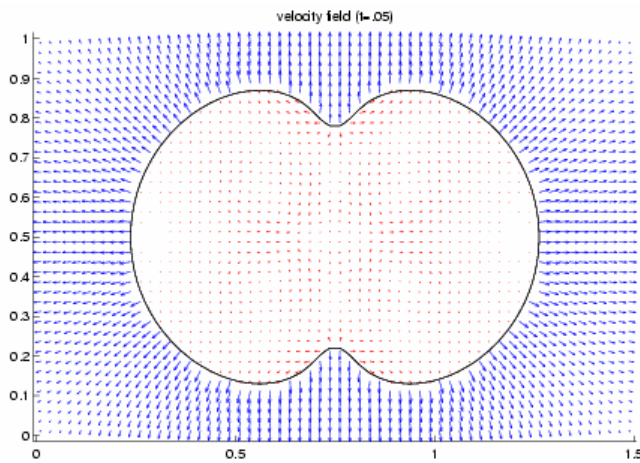


figure (6. 27) : Profil du front de flamme et champ de vitesse ($t=0.05\text{sec}$), selon (Nguyen & al , 2001)

Les résultats obtenus, les **figures (6. 22, 23, 24)**, sont similaires à ceux présentés par (**Nguyen & al, 2001**) sur les **figures (6. 25, 26, 27)**. Ce cas-test permet aussi de souligner l'aptitude de cette méthode à manipuler naturellement les changement dans la topologie de l'interface, ce qui permet de prouver la robustesse de cette méthode numérique.

Nous avons ensuite utilisé ce code pour étudier la propagation d'une flamme prémélangée dans un écoulement turbulent. Le champ turbulent initial sera défini à partir de la relation analytique suivante (**Denet, 1997**) :

$$u = -\sum_{k_i} A k_i^{-\frac{1}{3}} \cos(k_i x + \varphi_{ix}) \sin(k_i y + \varphi_{iy}) \quad (6.16.a)$$

$$v = \sum_{k_i} A k_i^{-\frac{1}{3}} \sin(k_i x + \varphi_{ix}) \cos(k_i y + \varphi_{iy}) \quad (6.16.b)$$

Où A contrôle l'amplitude du champs turbulent, les k_i sont les vecteurs d'ondes possibles du domaine, définies par la relation suivante $k_i = \frac{2\pi i}{L}$, i étant un entier défini par rapport au nombre de points utilisés dans la simulation, à savoir $imax = jmax = 2^i$, d'où la relation suivante ; $i = \frac{\ln(imax)}{\ln 2}$. φ_{ix} et φ_{iy} sont des fonctions de phase aléatoires.

Les expression **(6.16)** qui respectent l'équation de continuité permettent d'initialiser le calcul d'un écoulement turbulent homogène et isotrope (**THI**). Le principal avantage de cette condition initiale provient de la simplicité de sa mise en œuvre. On peut cependant lui reprocher de proposer un champ de vitesse initial un peu grossier. De plus cette technique ne peut pas être utilisée pour initialiser un champs de vitesse **3D** (l'équation de continuité ne serait plus respectée), ce qui est une restriction importante puisque tous les écoulement turbulents sont en réalité tridimensionnels. Ainsi, il existe d'autre techniques plus complexes qui permettent de générer des écoulement turbulents homogènes isotropes, on citera notamment les méthodes spectrales, qui à partir de l'expression analytique d'un spectre de turbulence, permettent de calculer un champ de vitesse respectant les propriétés du spectre de turbulence (**Lee & al, 1992**). Ces méthodes plus rigoureuses peuvent être généralisées en **3D**. Dans le cadre de ce travail de thèse, nous utiliserons cependant les expressions **(6.16)**, car nous le rappelons une fois de plus, nous sommes dans le cadre d'une étude de faisabilité. Ainsi, notre simulation sera effectuée en **2D**. Les autres données de la simulation sont les suivantes :

$$lx = 0.02m$$

$$ly = l_x$$

$$\rho_{reactif} = 1kg.m^{-3}$$

$$\rho_{inerte} = 0.5kg.m^{-3}$$

$$\nu = 1.78.10^{-5} m^2.s^{-1}$$

$$A = 15$$

$$S_0 = 1m.s^{-1}$$

$$L = 0.000015m$$

$$R_0 = lx / 64$$

Où R_0 est le rayon de la flamme à l'instant initial. Sur la **figure (6.28)**, on peut visualiser l'évolution temporelle du front de flamme, pour deux simulations sur la même configuration, mais pour des fonctions de phase φ_{ix} et φ_{iy} , choisies de façon aléatoire. Sur chacune des deux figures, on peut visualiser plusieurs lignes de niveau, correspondant à la localisation du front de flamme à différents instants (l'intervalle en temps entre deux lignes de niveau est $40 \mu sec$).

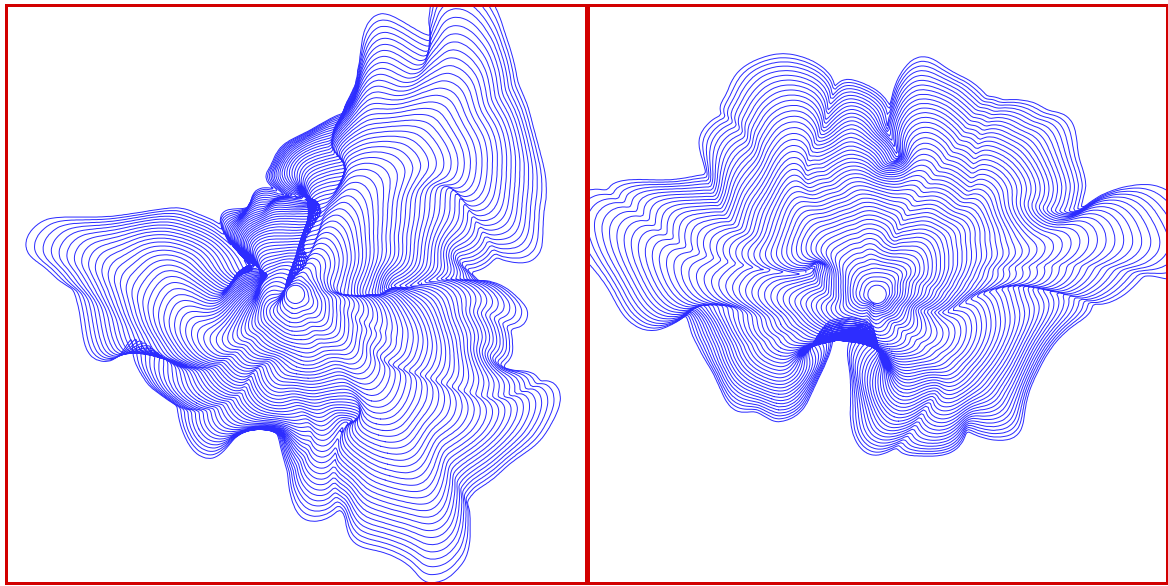


figure (6.28) : Evolution temporelle de 2 fronts de flamme différents ($\Delta t = 0.04 \text{ msec}$)

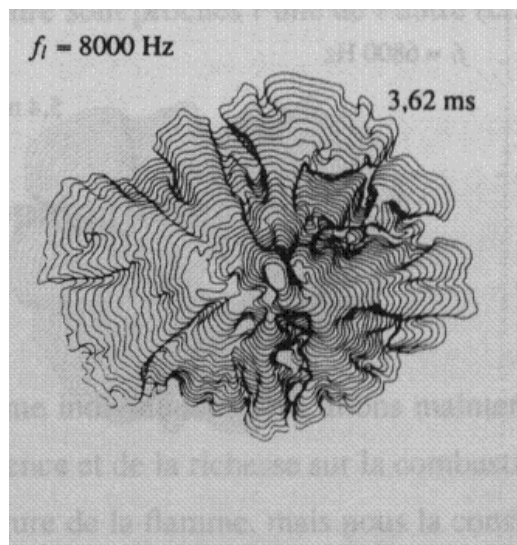


Figure (6.29) : Evolution temporelle d'un front de flamme dans un champ de vitesse turbulent, d'après (Lecordier, 1997)

Ces simulations mettent en évidence l'influence de la turbulence sur le plissement de la flamme. Les résultats de simulation obtenus sont en accord qualitatif avec les résultats expérimentaux présentés par **Lecordier**, sur la **figure (6. 29)**.

Ainsi bien que l'étude présentée dans ce paragraphe soit très partielle, il nous semble que l'outil développé est un outil intéressant pour la simulation de flammes prémélangées. Une suite possible à ce travail consisterait à effectuer des simulations tridimensionnelles dans un milieu confiné, en utilisant une configuration identique à celle utilisée par **Lecordier**, et en s'appuyant sur les mesures réalisées sur cette configuration, notamment la mesure de S^0 , L , et la mesure du saut de température à la traversée de la flamme (cette dernière donnée pourrait nous permettre de connaître le saut de masse volumique entre les gaz frais et les gaz brûlés). L'utilisation d'un solveur spectral pour générer un champ turbulent tridimensionnel pourrait également apporter des améliorations à notre champ de conditions initiales. Enfin, lorsque l'on travaille sur la propagation de flammes en milieu confiné, la pression thermodynamique du milieu fluide augmente entraînant une augmentation de la masse volumique des gaz. Il faut donc utiliser une méthode numérique capable de prendre en compte des variations temporelles (et éventuellement spatiales) de la masse volumique des gaz.

Pour poursuivre dans les perspectives, il nous paraît possible d'apporter des améliorations importantes à ce type de modèles, moyennant des études théoriques plus élaborées sur différents points, notamment il semblerait judicieux que l'évolution du front de flamme soit couplée avec un champ température et de fraction massique réaliste, ce qui imposerait de résoudre au moins deux équations supplémentaires avec les conditions de saut appropriées, et de connaître des relations théoriques permettant de calculer la vitesse de propagation du front de flamme à partir de la fraction massique et de la température locales. La ***Ghost Fluid Method*** pourrait alors être un outil précieux pour calculer précisément les conditions de saut souhaitées à la traversée du front de flamme. De telles couplages pourraient rendre ces simulations indépendantes de constantes déterminées par l'expérience, et donc plus prédictives.

3.6 Vaporisation d'un liquide

Le développement d'un code de suivi d'interface, capable de prendre en compte précisément la vaporisation de la phase liquide est un problème qui reste ouvert. (**Calimez, 1998**) établit, au début de son manuscrit, de façon très rigoureuse les conditions de saut qu'il est nécessaire d'imposer pour prendre en compte correctement la vaporisation. Néanmoins dans la suite, il utilise des hypothèses qui nous semble inappropriées pour prendre en compte la vaporisation de l'interface. L'auteur souligne d'ailleurs, que l'insuffisance du « ***modèle thermodynamique*** » qu'il utilise, et le problème de travailler avec des écoulements confinés dans de petits domaines (pas de conditions limites ouvertes), sont deux limitations importantes de son travail.

Il serait malhonnête de ne pas signaler qu'en 1998, à l'époque où il a soutenu sa thèse, **Calimez** n'a pas pu bénéficier des nombreux travaux qui ont été publiés ultérieurement, sur les techniques numériques capables de prendre en compte finement différents types de conditions de saut à la traversée d'une interface. Notamment, les premières publications sur la ***Ghost Fluid Method*** sont apparues en 1999. Encore à l'heure

actuelle, nous ne connaissons pas de méthodes numériques qui soient l'équivalent de la ***Ghost Fluid Method***, tant du point de vue de la précision numérique, que de l'efficacité. Ainsi, il nous semble important de souligner que l'apport de la ***GFM***, à la méthode ***Level Set*** est absolument essentiel, et en fait à notre avis la méthode numérique la plus adaptée à des développements futurs sur la vaporisation et la combustion. L'hypothèse, utilisée par ***Calímez***, d'une température spatialement constante peut être acceptable pour une goutte dont le nombre de Biot est faible :

$$Bi = \frac{hR}{\lambda} \ll 1 \quad (6.17)$$

où h est le coefficient de transferts thermiques convectifs autour de la goutte, R est le rayon de la goutte, et λ le coefficient de conductivité thermique du liquide. On peut noter que le coefficient h n'est pas une propriété physique intrinsèque à la goutte, mais un coefficient moyenné permettant d'évaluer les transferts thermiques dans la couche limite thermique autour d'un objet immergé dans un fluide en fonction de différents paramètres. L'évaluation de ce coefficient est essentiellement empirique, et dans la suite de travail nous n'utiliserons jamais ce coefficient, puisque nous déterminerons explicitement les profils de la couche limite thermique autour du liquide. Néanmoins, connaître même approximativement ce nombre peut permettre de négliger l'influence des gradients thermiques à l'intérieur de la goutte, si la condition (6.17) est respectée.

En revanche l'hypothèse d'une température temporellement constante dans la goutte et égale à la température d'ébullition, nous semble tout à fait inadaptée à l'étude de la vaporisation. En effet, cet hypothèse réaliste lorsque l'on étudie l'ébullition d'un liquide est fautive lorsque l'on s'intéresse à la vaporisation d'une goutte.

La nuance est importante, puisque le phénomène d'ébullition peut être observé lorsque l'on chauffe un corps liquide jusqu'à sa température d'ébullition, et que des bulles de vapeur de ce même corps se forment. C'est un phénomène diphasique, mais monocomposant. En revanche, la vaporisation d'un corps liquide survient lorsque ce corps est mis en contact avec un gaz constitué d'autres composants. La vaporisation de ce corps liquide survient alors systématiquement, même à des températures inférieures à la température d'ébullition du corps liquide (une température élevée dans le liquide aura tout de même pour effet d'accélérer la vaporisation). Ici le problème de transferts thermiques est couplé à un problème de diffusion des espèces chimiques. De nombreuses études expérimentales et numériques (***Nje-Nje , 2000***) ont mis en évidence qu'en général la température d'une goutte varie pendant qu'elle se vaporise jusqu'à ce qu'elle atteigne une température stable, toujours inférieure à la température d'ébullition du corps liquide. Ces études ont également mis en évidence le fait que très souvent les gouttes se refroidissent en se vaporisant. Ce phénomène peut sembler de prime abord assez paradoxal, mais peut s'expliquer si l'on considère les conditions de saut (1.15) et (1.18) :

$$\dot{\omega}_{vap} h_{lg} + [\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}]_{\Gamma} = 0 \quad (1.15)$$

$$\dot{\omega}_{vap} = \frac{[\rho D_m \nabla Y \cdot \mathbf{n}]_{\Gamma}}{1 - Y_{gaz}^{\Gamma}} \quad (1.18)$$

Ainsi, d'après **(1.18)** le débit massique local de vaporisation dépend du gradient d'espèces local autour de la goutte. La relation **(1.15)** peut s'écrire sous la forme suivante :

$$-\lambda_{liq} \nabla T_{liq} \big|_{\Gamma} \cdot \mathbf{n} = -\lambda_{gaz} \nabla T_{gaz} \big|_{\Gamma} \cdot \mathbf{n} + \dot{\omega}_{vap} h_{lg} \quad (6.18)$$

Cette équation met en compétition la contribution des transferts thermiques conductifs du gaz vers le liquide et la puissance absorbée par le liquide sous forme de chaleur latente. Si cette puissance absorbée par le changement d'état, qui va dépendre de la relation **(1.18)** est supérieure à l'énergie apportée par le gaz au liquide sous forme conductive, alors le gradient thermique interfacial à l'intérieur du liquide sera de sens opposé au gradient thermique interfacial à l'intérieur du gaz et la goutte va se refroidir pour compenser le déficit énergétique engendré par le changement d'état. Dans ces conditions qui sont courantes, on observe donc une diminution de la température de la goutte pendant son évaporation.

On a vu au premier chapitre que la vaporisation d'un liquide entraînait aussi une discontinuité de la vitesse à la traversée de l'interface donnée par la relation **(1.12)**. Nous utiliserons donc la technique développée par (*Nguyen & al, 2001*) et que nous avons décrit précédemment, pour imposer ce saut.

Parallèlement à l'évolution de l'interface, des méthodes numériques sont nécessaires pour résoudre les équations **(1.14)** et **(1.16)** :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) T = \frac{\nabla \cdot (\lambda \nabla T)}{\rho C_p} \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) Y = \frac{\nabla \cdot (\rho D_m \nabla Y)}{\rho} \quad (1.16)$$

en imposant correctement les conditions de saut **(1.15)** et **(1.18)**.

Pour un liquide monocomposant l'équation **(1.18)** devient :

$$\dot{\omega}_{vap} = \frac{\rho_{gaz} D_m \nabla Y \cdot \mathbf{n} \big|_{\Gamma}^{gaz}}{1 - Y_{gaz}^{\Gamma}} \quad (6.19)$$

car le gradient d'espèces dans un milieu monocomposant est nul par définition. Cette dernière relation **(6.19)** n'est bien sûr valable que sur l'interface, puisqu'elle est basée sur l'évaluation du gradient de fraction massique et de la fraction massique sur l'interface. On a vu précédemment **(1.11)** que l'on pouvait calculer la vitesse de régression de l'interface par rapport au débit de réaction :

$$\mathbf{V}_s = - \frac{\dot{\omega}_{vap} \cdot \mathbf{n}}{\rho_{reac}} \quad (6.20)$$

Cependant dans le cas de la vaporisation, la généralisation de l'équation (6.4) à l'ensemble des lignes de niveau (6.5) va être plus difficile. Ainsi, la fraction massique, ainsi que sa dérivée sont discontinues à la traversée de l'interface, rendant le calcul de (6.19) délicat dans l'ensemble du domaine. En effet, sur le côté liquide de l'interface la fraction massique vaut 1, alors que sur le côté vapeur de l'interface la fraction massique est inférieure à 1, et peut être calculée grâce à la pression de vapeur saturante. La pression de vapeur saturante est calculée grâce à la relation de Clausius-Clapeyron (valable tant qu'on est loin de l'état critique) :

$$p_{vap}^S = p_{atm} \exp \left(- \frac{h_{lg} m_{vap}}{R} \left(\frac{1}{T^S} - \frac{1}{T^B} \right) \right) \quad (6.21)$$

On peut alors en déduire la relation suivante, qui nous donne la fraction massique du gaz à l'interface :

$$Y_{vap}^S = \frac{p_{vap}^S m_{vap}}{p_{atm} m_{gaz}} \quad (6.22)$$

où p_{atm} est la pression atmosphérique et T^B est la température d'ébullition. T^S est la température sur l'interface, m_{vap} est la masse molaire de la vapeur, m_{gaz} est la masse molaire du gaz et R est la constante des gaz parfaits.

L'équation de diffusion des espèces ne doit être résolue que dans le domaine gazeux, puisque la fraction massique du liquide vaut toujours 1. L'interface représentera alors une « frontière immergée » du domaine de calcul, sur laquelle il sera nécessaire d'imposer une condition limite de **Dirichlet** pour la fraction massique. La résolution de ce problème de diffusion permettra d'imposer le flux de masse de liquide vaporisé dans le domaine gazeux.

Les résolutions de (6.5) et de (1.16) doivent donc être couplées avec une technique d'extension de la fraction massique gazeuse à l'intérieur du domaine liquide. Cette extension doit permettre de calculer un prolongement du champ de fraction massique gazeux qui soit continu et dont les dérivées soient également continues à la traversée de l'interface. A ces deux conditions, on pourra utiliser ce champ « **Ghost** » pour calculer le taux de vaporisation (6.19) et pour résoudre le problème de diffusion des espèces (1.16).

Nous avons utilisé, l'extension suivante du champ de fraction massique :

$$Y_{gaz}^{Ghost} = \frac{p_{vap}^{Ghost} m_{vap}}{p_{atm} m_{gaz}} \quad (6.23)$$

$$Y_{liq}^{Ghost} = 1 \quad (6.24)$$

avec :

$$p_{vap}^{Ghost} = p_{atm} \exp \left(- \frac{h_{lg} m_{vap}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^B} \right) \right) \quad (6.25)$$

En réalité cette extension est complètement liée aux propriétés du champ de température. Ainsi, le champ de température étant continu cette extension nous permet de calculer un champ de fraction massique continu. En revanche, d'après la relation (6.18) le gradient thermique est discontinu à la traversée de l'interface, l'extension proposée ne respectera donc pas la continuité de la dérivée à la traversée de l'interface. C'est bien sûr un problème important, et si nous avons choisi cette extension pour sa simplicité de mise en œuvre, il semble important d'utiliser de nouveaux algorithmes qui nous permettraient de respecter la continuité de la dérivée de la fraction massique entre le champ de fraction massique gazeux et son extension dans le liquide.

On peut notamment suggérer d'utiliser la technique proposée au **paragraphe (3.3)** pour répondre à cette attente. Cela nécessite d'imposer la condition suivante, pour la fraction massique « **Ghost** » dans le domaine liquide (6.14) :

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \nabla (\mathbf{n} \cdot \nabla Y_{liq}^{Ghost}) = & n_x^2 \frac{\partial^2 Y_{liq}^{Ghost}}{\partial x^2} + n_x \frac{\partial Y_{liq}^{Ghost}}{\partial x} \frac{\partial n_x}{\partial x} + 2n_x n_y \frac{\partial^2 Y_{liq}^{Ghost}}{\partial x \partial y} \\ & + n_x \frac{\partial Y_{liq}^{Ghost}}{\partial x} \frac{\partial n_y}{\partial x} + n_y \frac{\partial Y_{liq}^{Ghost}}{\partial x} \frac{\partial n_x}{\partial y} + n_y^2 \frac{\partial^2 Y_{liq}^{Ghost}}{\partial y^2} + n_y \frac{\partial Y_{liq}^{Ghost}}{\partial y} \frac{\partial n_y}{\partial y} \end{aligned} \quad (6.26)$$

Pour cela, nous pensons que la résolution itérative, (6.15), de l'équation suivante dans le domaine liquide permettrait d'aboutir, à un état stationnaire satisfaisant la condition (6.26) :

$$\frac{\partial Y_{liq}^{Ghost}}{\partial \tau} = \mathbf{n} \cdot \nabla (\mathbf{n} \cdot \nabla Y_{liq}^{Ghost}) \quad (6.27)$$

Dans le cadre de ce travail de thèse, nous n'avons pas implémenté la résolution de cette équation. Nous n'avons donc pas pu jugé de la pertinence de cet algorithme, qui nous semble cependant beaucoup plus rigoureux que l'extension proposée précédemment.

Finalement, la résolution de l'équation (1.14) doit être couplée avec la **Ghost Fluid Method** pour imposer la condition de saut (6.18) sur le gradient thermique. Il faut pour cela utiliser les techniques développées dans (Liu & al, 2000), (Kang & al, 2000) et décrites dans ce manuscrit pour imposer une discontinuité sur une dérivée et/ou sur un coefficient de transport (en l'occurrence λ).

Dans le cas que nous présentons, on suppose que la masse volumique du gaz est constante quelle que soit sa température et sa fraction massique. C'est une hypothèse forte puisqu'en réalité les gradients thermiques et d'espèces peuvent imposer des variations importantes de masse volumique. Cependant, l'intérêt de cette étude reste qualitatif, puisque nous nous proposons avant tout de comprendre les mécanismes de la vaporisation et de coupler les équations correspondantes avec une méthode de suivi d'interface. On a déjà souligné précédemment la nécessité d'améliorer la technique d'extension de la fraction massique. Une autre amélioration possible (mais certainement moins importante) serait de prendre en compte l'influence des effets thermiques et du mélange sur les variations de masse volumique du gaz. Nous allons, pour conclure ce paragraphe, exposer les résultats obtenus sur la simulation d'une goutte en mouvement se vaporisant dans un gaz chaud. Comme précédemment pour l'étude de flamme prémélangée, les résultats sont à considérer d'un point de vue strictement qualitatif. Cependant le modèle physique utilisé ici, nous semble assez satisfaisant, même si la

procédure numérique d'extension doit être développée pour améliorer la prédictivité du code. La simulation s'effectuera dans une géométrie axisymétrique, avec une condition limite axisymétrique et trois conditions limites « libres ». Les propriétés physiques sont celles de l'eau pour le liquide, et celles de l'air pour le gaz. Les données de la simulation sont les suivantes :

$$l_x = 0.5 \text{ mm}$$

$$l_y = 6l_x$$

$$\rho_{\text{gaz}} = 1.226 \text{ kg.m}^{-3}$$

$$\rho_{\text{liquide}} = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$$

$$\mu_{\text{gaz}} = 1.78.10^{-5} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$$

$$\mu_{\text{liq}} = 1.137.10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$$

$$\lambda_{\text{gaz}} = 0.026 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

$$\lambda_{\text{liq}} = 0.6 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

$$D_m = 4.10^{-5} \text{ s}^{-1}$$

$$C_p^{\text{gaz}} = 1000 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

$$C_p^{\text{liq}} = 4180 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

$$R_0 = 2l_x / 5$$

$$h_{\text{lg}} = 2.10^6 \text{ J.kg}^{-1}$$

La température initiale dans la goutte est de 353 K, la température initiale du gaz est 393 K, la vitesse initiale de la goutte est 3.5 m.s^{-1} . Sur les **figures (6.30) et (6.31)**, on peut observer l'évolution du champ de température, et du champ de fraction massique.

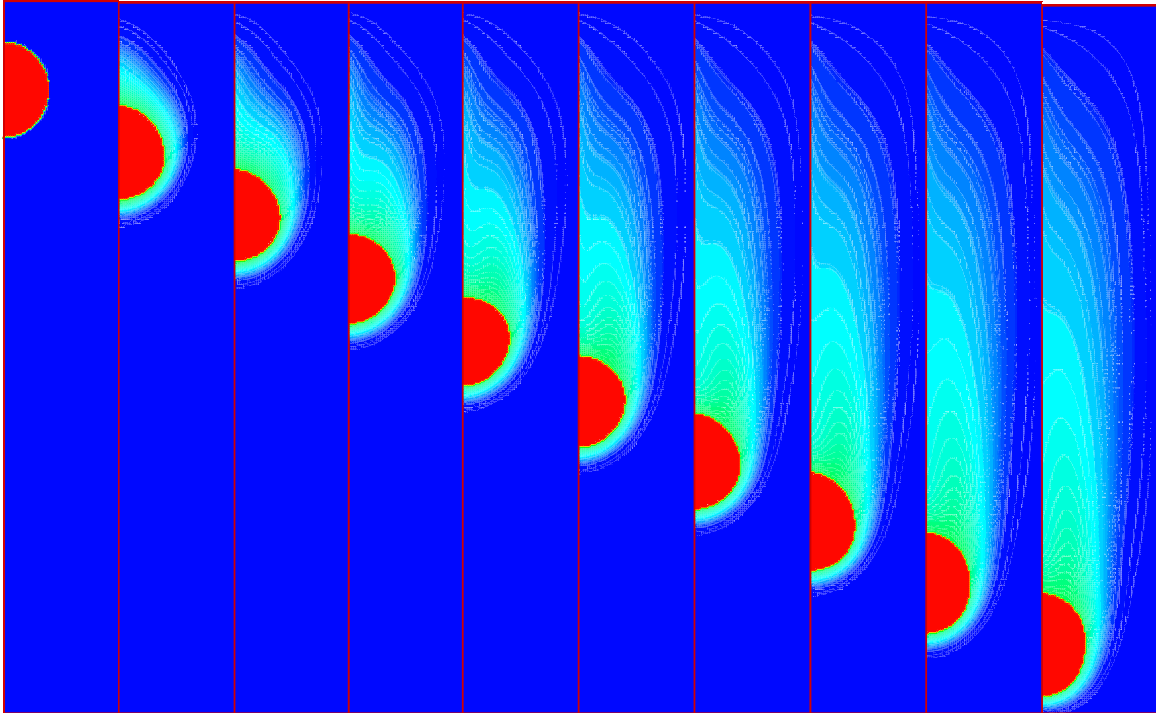


figure (6. 30) : Evolution temporelle de la fraction massique

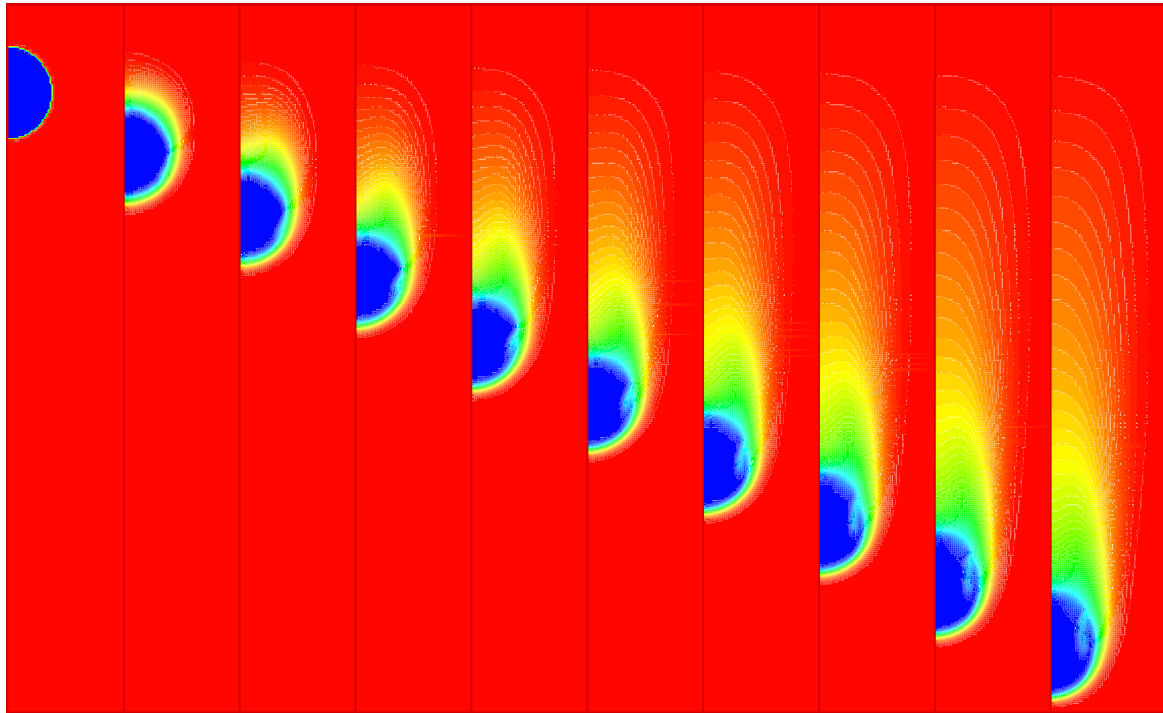


figure (6. 31) : Evolution temporelle de la température

Dans le cas d'une goutte statique, les résultats que l'on obtient avec notre technique de vaporisation, ne concorde avec les résultats que l'on obtient avec des modèles de vaporisation pour gouttes sphériques (modèles *1D*), (*Nje-Nje, 2000*). Il nous paraît probable que l'une des raisons principales de ce désaccord proviennent d'une mauvaise estimation du taux de vaporisation en chaque point de l'interface (qui est vraisemblablement largement sous-estimé). Des améliorations ont déjà été proposées précédemment pour améliorer les prédictions du code. Les résultats présentés sur les *figures (6.30)* et *(6.31)* permettent d'illustrer le potentiel de ce genre de techniques pour une modélisation fine des phénomènes de vaporisation d'interfaces géométriquement complexes, ou pour étudier la formation du mélange à partir d'un brouillard de gouttelettes. On peut notamment envisager d'étudier la vaporisation de la zone primaire d'un jet, ce qui est un défi particulièrement difficile tant du point de vue de la modélisation que de l'expérience.

3.7 Conclusion sur les interfaces réactives

Dans ce paragraphe sur les interfaces réactives, nous avons pu étudier la capacité des techniques numériques utilisées à prendre en compte d'autres types de condition de saut à la traversée de l'interface, afin de coupler l'approche hydrodynamique à des phénomènes thermodynamiques et chimiques. Nous avons pu voir que ce type de travaux restent encore largement inexploré, malgré l'intérêt scientifique important de telles études. Le couplage de la méthode Level Set avec la ***Ghost Fluid Method*** nous semble très prometteur pour parvenir à surmonter les difficultés numériques importantes que l'on rencontre dans ces configurations.

Conclusion Générale

Le développement de techniques numériques pour le suivi d'interface en mécanique des fluides est un sujet de recherche qui reste particulièrement ouvert. Ainsi, bien que des développements importants aient été accomplis, depuis les travaux pionniers de (*Harlow & al, 1965*) jusqu'aux techniques récentes les plus sophistiquées, des points durs subsistent. L'objectif de cette étude était d'acquérir un savoir-faire nouveau, dans le laboratoire où cette thèse a été effectuée, par l'intermédiaire du développement de codes de calcul, s'inspirant de techniques existantes choisies parmi celles qui nous semblaient les plus judicieuses. Les codes de calcul ont été ensuite utilisés pour effectuer une étude numérique détaillée sur les collisions de gouttes. Tout au long de cette étude, nous avons constamment choisi d'utiliser les méthodes les plus performantes, nous permettant d'envisager également d'autres applications plus complexes.

Après avoir rappelé les principes physiques fondamentaux qui régissent le comportement d'une interface dans un écoulement, nous avons séparé les interfaces inertes, des interfaces réactives, qui obéissent à des phénomènes physiques plus complexes. Les équations de conservation et les conditions de saut correspondantes, qui permettent de modéliser ces différents types d'interface ont alors été explicitées.

La méthode de suivi d'interface que nous utilisons, à savoir la méthode **Level Set** a été présentée. Différents schémas d'intégration en temps et en espace sont décrits et la précision de chacun de ces schémas est ensuite étudiée sur deux cas-tests classiques pour les méthodes de suivi d'interface, à savoir le cercle de *Zalezak* et le serpent. Les nombreux tests accomplis sur ces deux configurations nous permettent d'établir que la forme modifiée du schéma **WENO 5** proposée par (*Estivalezes, 2002*) pour le suivi d'interface est le schéma qui donne les meilleurs résultats parmi ceux que l'on a testé. L'utilisation de ce schéma permet notamment une amélioration importante de la résolution des structures d'interface fines, par rapport aux résultats de la littérature présentée par (*Rider & al, 1995*) et (*Enright & al, 2002*) avec des méthodes **Level Set** classique. Nous avons souligné la nécessité d'utiliser un algorithme de réinitialisation des lignes de niveau pour que la fonction ϕ conserve la propriété de distance algébrique à l'interface. Le bon fonctionnement de cet algorithme a ensuite été mis en évidence sur différentes configurations, même si des pertes/gains de masse plus importants sont observés lorsque cette méthode est utilisée. Après une brève revue des études existantes qui permettent d'améliorer cet inconvénient connu pour la méthode **Level Set**, il nous semble que les couplages de la méthode **Level Set**, avec une méthode lagrangienne ou une méthode **V.O.F.**, peuvent conduire à des méthodes conservatives en masse. En

perspective, nous proposons d'utiliser l'algorithme de (*Sussman & al, 2000*) qui nous semble plus proche de notre formalisme initial que la méthode *Particle level Set* (*Enright & al, 2002*).

La méthode d'intégration numérique des équations de *Navier-Stokes* monophasique incompressible qui a été développée durant cette thèse repose sur une méthode de projection classique (*Kim & al, 1985*). Ici encore différents schémas d'intégration temporelle et spatiale ont été proposés et testés sur le développement temporel d'une couche de cisaillement à *Reynolds* infini, pour des conditions initiales continues ou discontinues. Ce test nous a permis notamment de tester la stabilité et la précision des schémas convectifs. L'utilisation du schéma *WENO 5* « *modifié* » conduit à des simulations stables quel que soit le maillage utilisé, avec une dissipation numérique moindre. Notamment les résultats que nous présentons sont en très bon accord avec ceux obtenus par (*Bell & al, 1989*) avec un code qui est une référence sur ce type de simulations. Une intégration temporelle rapide et précise est également proposée. Une étude spécifique des différents types de conditions limites que nous utiliserons a été menée et la fiabilité de nos procédures a été testée sur une simulation d'écoulement stationnaire derrière une marche. Nos résultats comparés à une étude expérimentale et à une étude numérique, sont tout à fait satisfaisants.

Après ces validations de la méthode *level Set* et du solveur *Navier-Stokes* incompressible, le couplage des deux méthodes a été développé. Ce couplage peut être effectué en utilisant en utilisant deux méthodes différentes. La première la *Delta Function Method* consiste à lisser les conditions de saut à la traversée de l'interface en introduisant une épaisseur d'interface constante, la deuxième la *Ghost Fluid Method* permet d'imposer plus rigoureusement des conditions de saut raides en localisant précisément l'interface entre les mailles de calcul. Plusieurs cas-tests permettent de juger et de comparer l'efficacité et la robustesse de ces deux méthodes. Les résultats obtenus montrent que la *Ghost Fluid Method* donne systématiquement des résultats un peu plus précis que la *Delta Function Method*, même si cette dernière reste une méthode intéressante. Ces calculs ont mis en valeur les bonnes aptitudes des méthodes développées. Notamment on a pu vérifié les bonnes propriétés de convergence spatiale de la *Ghost Fluid Method* sur une goutte statique, la possibilité de simuler le développement de structures d'interface très fines (*Rayleigh-Taylor*), et la capacité des codes à simuler des écoulements diphasiques avec des rapports de masse volumique très importants (goutte de mercure). Sur ces cas les pertes de masse calculés sont toujours négligeables.

Une étude détaillée sur les collisions de gouttes a ensuite été présentée. Les trois premières simulations effectuées permettent d'observer 3 régimes de collision différents (allant de la coalescence sans déformation à la separation avec ou sans satellites). Des tests de convergence spatiale montrent que lorsque le maillage est suffisamment fin, la localisation et l'instant où surviennent les changements topologiques sont indépendants du maillage. Des collisions sont ensuite effectuées dans des conditions aussi proches que possible de l'expérience et comparées à des séquences d'images expérimentales. Les résultats obtenus sont très probants et montrent que la méthode est tout à fait prédictive

sur les cas considérés. Les pertes de masse calculées restent également négligeables sur ces simulations, à condition que le maillage soit suffisamment fin.

Dans une dernière partie, nous avons exploré les potentialités du code dans des configurations plus complexes. Trois types de phénomènes physiques pour lesquels le suivi d'interface semble être une modélisation prometteuse sont abordés. Nous avons en premier lieu abordé la rupture d'un jet en gouttes qui est à l'origine de la formation d'un spray. Dans un premier temps, des simulations temporelles et spatiales du développement d'instabilités capillaires ont été effectuées. Les simulations temporelles permettent de retrouver les taux de croissance prédits par la théorie. Les simulations spatiales, effectuées sans aucun forçage des fréquences, conduisent à la rupture du jet en gouttes avec une fréquence dominante très proche de la fréquence dominante prédite par la théorie spatiale de (*Lin & al, 1990*). Ces résultats concluants nous ont conduit à prolonger cette étude sur la faisabilité de simulations **3D** de jets cisailés. Même si des comportements intéressants ont pu être mis en évidence, les conclusions de cette étude de faisabilité sont plus contrastées. En effet, la principale difficulté que l'on rencontre ne vient pas des temps de calcul, car l'utilisation de supercalculateurs permet d'envisager des configurations très intéressantes, mais plutôt de l'apparition d'instabilités du code. Après avoir discuté de l'origine possible de cette instabilité, nous proposons en perspective à ce travail, de développer un modèle physique plus complet en prenant en compte la compressibilité du gaz. En effet, plusieurs arguments permettent d'étayer l'hypothèse que dans des configurations fortement cisailées la solution incompressible puisse devenir instable, même pour des nombres de **Mach** nettement inférieurs à 1. Le développement d'une méthode qui permette de conserver exactement la masse (*Sussman & al, 2000*) apparaît également comme une nécessité pour prolonger les études de rupture de jet.

Enfin, des études de faisabilité ont également été menées sur deux types d'interface réactives : les interfaces de type front de flamme prémélangé, et la vaporisation de liquide. Pour ces phénomènes nous mettons en évidence la nécessité d'utiliser une approche de type **Ghost Fluid Method**, pour traiter les conditions de saut supplémentaires qui apparaissent. Des résultats préliminaires sont présentés sans comparaison rigoureuse avec l'expérience ou la théorie, mais nous proposons cependant des perspectives de recherches pour finaliser ces développements très prometteurs.

Bibliographie

Achim P. , 1999 : Simulation de collisions ,coalescence et rupture de gouttes par une approche lagrangienne : application aux moteurs à propergol solide. *PhD thesis, Université de Rouen, CORIA*.

Armaly B.F. , Durst F. , Pereira J.C.F. , Schönung B. , 1983 : Experimental and theoretical investigation of backward-facing step flow. *J. Fluid Mech.* **127**, 473-496

Ashgriz N. , Poo J.Y. , 1990 : coalescence and separation in binary collisions of liquid drops. *J. Fluid Mech.* **221**, 183-204

Bassano E. , 2003 : Numerical simulation of thermo-solutal-capillary migration of a dissolving drop in a cavity. *Int. J. Meth. Fluids* **41**, 765-788.

Bell J., Colella P. , Glaz H. , 1989 : A second order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comp. Phys.* **85**, 257-283

Bell J., Marcus D.L. , 1992 : A second order projection method for variable-density flows. *J. Comp. Phys.* **101**, 334

Benkenida A. , Magnaudet J. , 2000 : A method for the simulation of two-phase flows without interface reconstruction. *C.R.Acad.Sci. Paris, t. 328, Série 2 b*, p25-32.

Berlemont A., Grancher M. S. and Gouesbet G. , 1990 : Particle lagrangian simulation in turbulent flows. *Int. J. Multiphase flow* **16(1)** :19-34

Brackbill J.U. , Kothe D. , Zemach C. , 1992 : A continuum method for modeling surface tension. *J. Comp. Phys.* **100**, 335-354

Calimez X. , 1998 : Simulation à petite échelle par une méthode V.O.F. d'écoulements diphasiques réactifs. *PhD thesis, Ecole Centrale Paris, EM2C*

Chang Y.C. , Hou T.Y. , Merriman B. , Osher S. , 1996 : A level set formulation of eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. *J. Comp. Phys.* **124**, 449-464

Denet B. , 1997 : A lagrangian method to simulate turbulent flames with reconnections. *Comb. Sci. and Tech.* , **123**, 247-260

Enright D. , Fedkiw R. , Ferziger J. , Mitchell I. , 2002 : A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *J. Comp. Phys.* **183**, 83-116

Estivalezes J.L. , 2002 : Une formulation conservative du schéma WENO pour améliorer la résolution de la méthode Level Set. *Communication interne, ONERA Toulouse*

Estrade J.P. , 1998 : Etude expérimentale et numérique de la collision de gouttelettes. *PhD thesis, ONERA Toulouse*

Fedkiw R. , Aslam T. , Merriman B. , Osher S., 1999 : A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (The Ghost Fluid Method). *J. Comp. Phys.* **152**, 457-492

Gicquel P. , Vingert L. , Lecourt R. , Barat M. , 2001 : Etude expérimentale des sprays cryotechniques dans des conditions sub et supercritique. *Dans Combustion dans les moteurs de fusées, Actes du colloque de synthèse du Groupe de Recherche CNES/CNRS/ONERA/SNECMA*, 350-369. Toulouse, Cité de l'espace, Cépaduès-Editions.

Frago Z. , Chigier N. , 1992 : Morphological classification of disintegration of round liquid jets in a coaxial air stream. *Atom. & Sprays* **2**, 137-153

Freret , 2003 : Développement et optimisation d'une méthode de type gradient conjugué multigrille en calcul parallèle et application à la méthode level set. *Rapport de stage DESS mathématiques appliquées, CORIA*

Gueyffier D., Li J. , Nadim A., Scardovelli S. et Zaleski S. 1999 : Volume of Fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *J. Comput. Phys.*, **152**, 423-456.

Han J. , Tryggvason G. , 1999 : Secondary break-up of axisymmetric liquid drops 1. Acceleration by a constant body force. *Physics of Fluids* **Vol 11**, Numb 12

Harlow F.H. , Welch J.E. , 1965 : Numerical calculation of Time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface. *The Physics of Fluids* **8**, 2182-2189

Jiang Y.J. , Umemura A. , Law C.K. , 1992 : An experimental investigation on the collision behaviour of hydrocarbon droplets. *J. Fluid Mech.* **234**, 171-190

Jiang G.S. , Shu C.W. , 1996 : Efficient implementation of weighted essentially non-oscillatory schemes. *J. Comp. Phys.* **126**, 202-228

Juric D. , Tryggvason G. , 1998 : Computations of boiling flows. *Int. J. Multiphase Flow*, **Vol 24**, No 3, 387-410

Kang M. , Fedkiw R. , Liu X.-D. , 2000 : boundary condition capturing method for multiphase incompressible flow. *J. Sci. Comput.* **15**, 323-360

Kim J. , Moin P. , 1985 : Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comp. Phys.* **59**, 308-323

Lafaurie B. , Nardone C. , Scardovelli R. , Zaleski S. , and Zanetti G. 1994 : Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *J. Comp. Phys.* **113**, 134-147.

Lecordier B. , 1997 : Etude de l'interaction de la propagation d'une flamme prémélangée avec le champ aérodynamique, par association de la tomographielaser et de la vélocimétrie par images de particules. *PhD thesis, Université de Rouen , CORIA*

Lee S. , Lele S. , Moin P. , 1992 : Simulation of spatially evolving turbulence and the applicability of Taylor's hypothesis in compressible flow. *Phys. Fluids A* **4** (7)

Leroux , 1996 : Stabilité d'un jet liquide cylindrique. Influence de fortes pressions ambiantes. *PhD thesis, Université de Rouen , CORIA*

LeVeque R.J. , 1992 : Numerical Methods for conservation laws. *Birkhauser, Basel*

Lin S.P. , Ibrahim E.A. , 1990 : Instability of a viscous liquid jet surrounded by a viscous gas in a vertical pipe. *J. Fluid Mech.* , **218** , 641-658

Liu X.D. , Osher S. , Chan T. , 1994 : Weighted essentially non-oscillatory schemes. *J. Comp. Phys.* **115**, 200-212

Liu X.-D. , Fedkiw R. , Kang M. , 2000 : A boundary condition capturing method for Poisson's equation on irregular domains. *J. Comp. Phys.* **160** , 151-178

Magnaudet J. , Rivero M. , Fabre J. , 1995 : Accelerated flows around a rigid sphere or a spherical bubble. Part 1 : Steady straining flow. *J. Fluid Mech.* **284**, 97-136

Malot H. , 200 : Etude des processus d'atomisation des jets liquides. Développement expérimental et analyse par le formalisme d'entropie maximum. *PhD thesis, Université de Rouen , CORIA*

Markstein G. , 1964 : Non-Steady flame propagation. *Pergamon*

Marmottant P. , 2001 : Atomisation d'un liquide par un courant gazeux. *PhD thesis, INP de Grenoble*

Menchaca-Roca A. , Huidobro F. , Martinez-Davalos A. , Michaelian K. , Perez A. , Rodriguez V. , Cárjan N. , 1997 : Coalescence and fragmentation of colliding mercury drops. *J. fluid Mech.* **346** , 291-318

Minion M. , Brown D. , 1997 : Performance of under-resolved two-dimensional incompressible flow simulations, 2. *J. Comp. Phys.* **138**, 734-765

Nguyen D. , Fedkiw R. , Kang M. , 2001 : A boundary condition capturing method for incompressible flame discontinuities. *J. Comp. Phys.* **172**, 71-98.

Nje-Nje , 2000 : Etude numérique de l'évaporation instationnaire d'un nuage de gouttes multicomposants. *PhD thesis, Université de Rouen, CORIA.*

Nobari M.R. , Jan Y.J. , Tryggvason G. , 1996 : Head-on collision of drops – a numerical investigation. *Physics of Fluids Vol 8, Numb 1*

Ol'shanskii M.A. , Staroverov V.M. , 2000 : On simulation of outflow boundary conditions in finite difference calculations for incompressible flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **33**, 499-534

Osher S. , Sethian J.A. , 1988 : Fronts propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J. Comp. Phys.* **79**, 12-49

Peng D. , Merriman B. , Osher S. , zhao H. , Kang M. , 1999 : A PDE-based fast local level set method. *J. Comp. Phys.* **155**, 410-438

Peyret R. , Taylor T.D. , 1983 : Computational method for fluid flow. *Springer Verlag*

Popinet S. , 2000 : Stabilité et formation de jets dans les bulles cavitantes : développement d'une méthode de chaîne de marqueurs adaptée au traitement numérique des équations de Navier-Stokes avec surface libre. *PhD thesis, Université Paris 6, Laboratoire de Modélisation en Mécanique*

Popinet S. , Zaleski S. , 1999 : A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **30**, 775-793

Puckett E.G. , Almgren A. , Bell J. , Marcus D. , Rider W. , 1997 : A high-order projection method for tracking interfaces in variable density incompressible flows. *J. Comp. Phys.* **130**, 269

Qian J. , Law C.K. , 1997 : Regimes of coalescence and separation in droplet collision. *J. Fluid Mech.* **331**, 59-80

Qian J. , Tryggvason G. , Law C.K. , 1998 : A front tracking method for the motion of premixed flames. *J. Comp. Phys.* **144**, 52-69

Rayleigh, Lord , 1878: *Proc. Lod. Math. Soc.* **10**, 4

Renardy Y. , Renardy M. , 2002 : PROST : A parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method. *J. Comp. Phys.* **183**, 400-421

Rhee C.W. , Talbot L. ,Sethian J.A. , 1995 : Dynamical behaviour of a premixed turbulent open V-flame. *J. Fluid Mech.* **300**, 87-115

Rider W. , Kothe D. , 1995 : Stretching and tearing interface tracking methods. In *12th AIAA CFD Conference*, 95-1717, AIAA.

Rieber M., Frohn A. : Navier-Stokes Simulation of droplet collision dynamics. *Proc. 7th Int. Symp. On Computational Fluid Dynamics, Beijing, China*, pp. 520-525

Sethian J.A. , 1984 : Turbulent combustion in open and closed vessels. *J. Comp. Phys.* **54**, 425-456

Sethian J.A. , 1996 : Level Set methods and fast marching methods. *Cambridge University Press*

Shu C.W. , Osher S. , 1989 : Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, 2. *J. Comp. Phys.* **83**, 32-78

Scardovelli R. , Zaleski S. , 1999 : Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **31**: 567 –603

Smereka : Level set methods for two-fluid flows. *Lecture notes from a short course given at INRIA*

Son G. , Dhir V.K. , 1998 : Numerical Simulation of film boiling near critical pressures with a level set method. *Journal Heat Transfer*, **120**

Sterling A.M. , Sleicher C.A. , 1975 : The instability of capillary jets. *J. Fluid Mech. , Vol 68*, part 3 , 477-495

Sussman M. , Smereka P. , Osher S. , 1994 : A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comp. Phys.* **114**, 146-159.

Sussman M. , Fatemi E. , Smereka P. , Osher S. , 1998 : An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computers & Fluids* 27, 5-6.

Sussman M. , Almgren A., Bell J. , Colella P. , Howell L. , Welcome M. , 1999 : An adaptive level set approach for incompressible two-phase flows. *J. Comp. Phys.* **148**, 81-124

Sussman M. , Puckett E.G. , 2000 : A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows. *J. Comp. Phys.* **162**, 301-337

Sylvere A. , 1999 : Etude expérimentale d'instabilités interfaciales d'un jet liquide par analyse d'image et transformée en ondelettes. *PhD thesis, Université de Rouen , CORIA*

Vincent S. , Caltagirone J.P. , 2000 : A one-cell local multigrid method for solving unsteady incompressible multiphase flow. *J. Comp. Phys.* **163**, 172-215

Weber C. , 1931 : *Z. angew. Math. Mech.* , **11** , 136

Welch S. , 1995 : Local Simulation of two-phase flows including interface tracking with mass transfer. *J. Comp. Phys.* **121**, 142-154.

Welch S. , Wilson J. , 2000 : A volume of fluid based method for fluid flows with phase change. *J. Comp. Phys.* **160**, 662-682.

Unverdi S. O. , Tryggvason G. , 1992 : A front-tracking method for viscous, incompressible multi-fluid flows. *J. Comp. Phys.* **100** , 25-37

Zhu J. , Sethian J. , 1992 : Projection methods coupled to level set interface techniques. *J. Comp. Phys.* **102**, 128-138

