



Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles. Application à la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux.

Frédéric Couderc

► To cite this version:

Frédéric Couderc. Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles. Application à la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux.. Dynamique des Fluides [physics.flu-dyn]. Ecole nationale supérieure de l'aéronautique et de l'espace, 2007. Français. NNT : . tel-00143709

HAL Id: tel-00143709

<https://theses.hal.science/tel-00143709>

Submitted on 26 Apr 2007

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.



Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial 4.0 International License

Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles. Application à la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux.

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 15/02/2007

pour l'obtention du

Doctorat de l'ENSAE - Toulouse
(Spécialité Dynamique des Fluides Numérique)

par

COUDERC Frédéric

Composition du jury

<i>Président :</i>	M. ZALESKI Stéphane	Professeur, LMM Paris VI
<i>Rapporteurs :</i>	M. BERLEMONT Alain M. CALTAGIRONE Jean-Paul	Directeur de Recherche, CORIA Rouen Professeur, ENSPCB Université Bordeaux I
<i>Examineurs :</i>	M. CARTELIER Alain M. ESTIVALEZES Jean-Luc	Directeur de Recherche, LEGI Grenoble Ingénieur de Recherche, ONERA Toulouse

Mis en page avec la classe thloria.

Remerciements

En tout premier lieu, je remercie chaleureusement mon directeur de thèse Jean-Luc Estivalezes. Il fut un précieux allié pour conduire mes travaux de recherche. Durant ces années d'apprentissage, il a remarquablement su faire passer ses messages et m'a bien guidé dans mes serpentements ... Mais au delà de l'aspect purement professionnel, l'amitié réciproque qui s'est nouée est certainement ce que je retiendrai le plus et qui restera comme le plus cher à mes yeux.

Je remercie également vivement mon "colocataire de bureau" Xavier Pialat. Nous nous sommes agréablement soutenu mutuellement et nos nombreuses discussions furent riches et pleines de passion quel que soit le sujet, qu'il soit scientifique, politique ou tout autre.

Je tiens à remercier l'ensemble des personnes que j'ai pu croiser à l'ONERA ou ailleurs, qu'ils soient chercheurs, ingénieurs, techniciens, doctorants, stagiaires ou tout autre, puisque j'ai connu une longue aventure au sein de cette maison. Je ne vais pas allonger une liste de nom pour la bonne et simple raison que je ne veux surtout pas oublier quelqu'un. Les personnes lisant ces quelques lignes et qui me sont chères ou pour qui j'ai de l'amitié se reconnaîtront d'elles-mêmes ...

J'ai également bien plus qu'une pensée pour ma compagne, Cécile, qui m'a soutenu au delà du supportable et cela malgré mes humeurs, surtout lors de la rédaction du présent mémoire. Je tiens également à saluer l'ensemble de mes amis sans qui la vie serait bien morose ... Enfin, je tiens à embrasser mes parents, Georges et Mireille.

*Je dédie cette thèse
à Cécile,
à mes parents, Georges et Mireille,
à tous mes amis ...*

Table des matières

Table des figures	xi
Introduction Générale	1
1 Motivations	1
1.1 Combustion dans les moteurs aérospatiaux	1
1.2 Autres problèmes	5
1.3 Objectif de la thèse	5
2 État de l'art	6
2.1 Désintégration "naturelle"	6
2.2 Désintégration assistée	8
3 L'outil numérique	18
3.1 Pourquoi un tel outil ?	18
3.2 Quelques exemples sur les mécanismes de brisure	20
4 Plan du mémoire	27

Partie I Développement d'un solveur DNS pour des écoulements diphasiques à phases non miscibles

Chapitre 1

Le modèle physique

1.1 Les équations de Navier-Stokes incompressibles	31
1.1.1 Définition de la particule fluide	31
1.1.2 Conservation de la masse	32

1.1.3	Conservation de la quantité de mouvement	32
1.1.4	Hypothèses sur les fluides	33
1.2	Les conditions de saut pour une interface de type fluide/fluide	34
1.2.1	Concept d'interface	34
1.2.2	Capillarité	34
1.2.3	Conditions de saut pour une interface en mouvement	35
1.3	Modèle final	36

Chapitre 2

Les méthodes de suivi d'interfaces

2.1	Introduction	39
2.1.1	Critères de qualité	39
2.1.2	Les classes de méthodes	40
2.2	Les méthodes lagrangiennes	41
2.2.1	Marqueurs de volume	41
2.2.2	Marqueurs de front	42
2.2.3	Adaptation de maillage	43
2.3	Les méthodes eulériennes	44
2.3.1	Méthode VOF	44
2.3.2	Méthode Level-Set	47
2.4	Choix de la méthode	47

Chapitre 3

La méthode Level-Set

3.1	La fonction Level-Set	50
3.1.1	Définition	50
3.1.2	Équation de transport	50
3.1.3	Propriétés	51
3.2	Résolution numérique de l'équation de transport	53
3.2.1	Introduction	53
3.2.2	Maillage et discrétisation	54
3.2.3	Approche non conservative : schéma RK3/Weno5/n	55
3.2.4	Approche conservative : schéma Rk3/Weno5/c	60
3.3	Redistanciation	64
3.3.1	Problématique	64
3.3.2	Équation de redistanciation	65
3.3.3	Résolution numérique	66

3.3.4	Exemple de redistanciation	68
3.4	Cas tests académiques	68
3.4.1	Disque de Zalesak	70
3.4.2	Serpentin	74
3.5	Conservation de la masse	76
3.5.1	Redistanciation sous contrainte	78
3.5.2	Couplage avec une méthode VOF	79
3.5.3	Couplage avec une méthode de suivi de marqueurs	80
3.5.4	Choix de contour	83

Chapitre 4

Traitement des conditions de saut

4.1	Présentation du problème	85
4.1.1	Introduction	85
4.1.2	Problématique numérique	86
4.1.3	L'équation de Poisson	87
4.2	La méthode CSF	88
4.2.1	Principe	88
4.2.2	Application aux équations de Navier-Stokes avec la méthode Level-Set	89
4.3	La méthode "Ghost-Fluid"	92
4.3.1	Principe	92
4.3.2	Application à l'équation de Poisson avec la méthode Level-Set	93

Chapitre 5

Résolution des Équations de Navier-Stokes

5.1	Méthode de projection	108
5.1.1	Principe de la méthode	108
5.1.2	Choix de la méthode	109
5.1.3	Traitement numérique	112
5.2	Couplage avec les conditions de saut à l'interface	116
5.2.1	Calcul des propriétés géométriques de l'interface	116
5.2.2	Méthode CSF	117
5.2.3	Méthode Ghost Fluid	117
5.3	Conditions aux frontières du domaine	121
5.3.1	Condition de glissement	122
5.3.2	Condition de non glissement	122
5.3.3	Condition périodique	123

5.3.4	Condition entrante	123
5.3.5	Condition sortante	124
5.4	Tests numériques du solveur monophasique	126
5.4.1	Translation de tourbillons	126
5.4.2	Couche de mélange	127
5.5	Solveur de Poisson MGCG	133
5.5.1	Problématique	133
5.5.2	Principe de la méthode MGCG	133
5.5.3	Mise en oeuvre	134
5.6	Parallélisation	135

Chapitre 6

Validation du solveur numérique

6.1	Bulle statique	138
6.2	Modes de vibration d'une goutte	145
6.3	Oscillation capillaire d'une onde de surface	151
6.4	Écoulement de Poiseuille diphasique	156
6.5	Instabilité de Rayleigh-Taylor	159
6.5.1	Cadre linéaire de l'instabilité	159
6.5.2	Cadre non linéaire de l'instabilité	161

Partie II Simulation de la désintégration assistée d'une nappe liquide par un courant gazeux

Chapitre 7

Instabilités longitudinales : simulations bidimensionnelles

7.1	Motivations	168
7.1.1	Configuration de la nappe liquide et simulation	168
7.1.2	Oscillation globale d'une nappe liquide	169
7.2	Mise en oeuvre des simulations	170
7.2.1	Préliminaires	170

7.2.2	Le profil de vitesse	170
7.2.3	Les paramètres physiques	173
7.3	Simulation référence : premières observations	175
7.3.1	Déstabilisation initiale de la nappe	175
7.3.2	Dynamique de l'écoulement en régime établi	178
7.3.3	Amplitude et fréquence de l'oscillation globale	181
7.4	Influence des paramètres amont	187
7.4.1	Les vitesses débitantes	187
7.4.2	L'épaisseur de la nappe	191
7.4.3	L'épaisseur de la couche limite gazeuse	196
7.4.4	Loi de comportement	197
Chapitre 8		
Formation de ligaments : simulations tridimensionnelles		
8.1	Simulations temporelles	202
8.1.1	Mise en oeuvre et motivations	202
8.1.2	Influence de l'écoulement gazeux	203
8.2	Une simulation spatiale	204
Conclusion et Perspectives		215
Bibliographie		219

Table des figures

1	Génération d'un spray à l'aide d'une simple bombe pressurisée.	1
2	Une chambre de combustion classique. Principaux phénomènes physiques étudiés à l'ONERA/DMAE/MH dont la désintégration d'un jet liquide faisant l'objet de ce mémoire.	2
3	Un injecteur pression classique. Génération d'un spray de gouttelettes.	3
4	(à gauche) principe de l'injection assistée; (à droite) un injecteur aéromécanique, le jet de liquide axisymétrique est creux et le cisaillement s'effectue des deux cotés.	4
5	Brisure de Rayleigh d'un jet liquide pour 3 fréquences d'excitation différentes. Apparition de petites gouttes satellites.	6
6	Les deux ondes de déformation pouvant croître à la surface d'une nappe liquide; (à gauche) le mode sinueux ou antisymétrique; (à droite) le mode variqueux, dilatationnel ou symétrique.	7
7	Un des résultats graphiques d'une étude de stabilité non linéaire réalisée par S.A.Jazayeri [32]	7
8	Schématisation de la mise en oeuvre expérimentale de la désintégration assistée d'une nappe de liquide par un courant gazeux de part et d'autre.	9
9	Les deux régimes de fonctionnement d'après les visualisations expérimentales de Stapper et Samuelsen [94]; (à gauche) régime nommé par les auteurs "cellular breakup"; (à droite) régime nommé par les auteurs "stretched streamwise ligament breakup"	10
10	Diagramme des fréquences d'oscillation globale d'une nappe de liquide cisailée en fonction des vitesses débitantes de liquide et de gaz obtenu à partir des expériences de N.Chigier et al. [50]	11
11	Expérience d'une nappe de liquide cisailée par un écoulement d'air porté à haute vitesse réalisée à l'ONERA par H.Carentz [9]. Le régime de désintégration correspond à la zone B définie par N.Chigier et al. [51]	12
12	Graphes répertoriant les mesures expérimentales réalisées par Lozano et al. [47]; (à gauche) Fréquence f de l'oscillation globale pour différentes vitesses de gaz et de liquide; (à droite) Même points de mesures que le graphe de gauche mais pour des grandeurs adimensionnelles : la fréquence réduite f^* pour le rapport des flux de quantités de mouvement M	13
13	Profil de vitesse considéré par Lozano et al. [47] pour réaliser une étude de stabilité linéaire. Les profils sont des polynômes du second ordre dont les coefficients sont calculés afin de respecter l'ensemble des conditions de saut à l'interface. Cette étude a pour objet de démontrer l'impact des couches limites dans le gaz.	15

14	L'un des résultats de l'étude de stabilité réalisée par Lozano et al. [47]. Il donne le taux de croissance de l'onde sinueuse en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs épaisseurs de couche limite δ ainsi que le cas inviscide. Les vitesses débitantes de gaz et de liquide sont fixées telles que $U_1 = 2m.s^{-1}$ et $U_g = 25m.s^{-1}$.	15
15	Prédictions numériques (théor.) de la fréquence d'oscillation globale en fonction de la vitesse débitante de liquide en comparaison de quelques points de mesure expérimentaux (exp.). Diagramme réalisé par Lozano et al. [47].	16
16	Formation de ligaments lors du cisaillement d'un jet cylindrique plein ; expérience réalisée par P.Marmottant et E.Villermaux [53]	17
17	Les trois outils à la disposition de l'industriel ou du chercheur pour l'étude de la dynamique des fluides	19
18	Graphes de l'évolution au cours des dernières années des performances cumulées des super calculateurs, et perspectives de développement (www.top500.org)	20
19	Simulation d'une instabilité de type Kelvin-Helmholtz avec une méthode Front-Tracking par G.Tryggvason et W.Tauber [109] ; ratio de densité de 10, le fluide lourd noté 1 étant situé en bas ; $Re_1 = 5000$ et $Re_2 = 1000$; (en haut) $We = 5$; (en bas) $We = 10$; (à gauche) l'interface et les contours de la fonction courant ; (à droite) l'interface et les contours du champ de vorticit�	22
20	Simulation d'une instabilité de type Kelvin-Helmholtz avec une méthode VOF par S.Zaleski et al. [116] ; pour le fluide lourd situé en bas, $Re = 1000$ et pour le fluide léger, $Re = 4000$; (en haut) $We = 500$; (en bas) $We = 4000$	22
21	Simulation d'une instabilité de Kelvin-Helmholtz avec une méthode VOF par J.Lie [42]	23
22	Simulation d'une instabilité de Kelvin-Helmholtz avec une méthode de Front-Tracking par G.Tryggvason et al. [107, 108]	23
23	Simulation bidimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide par E.Lopez-Pages [45]	25
24	Deux simulations réalisées par A.Berlemont et S.Tanguy de la rupture d'un jet liquide à l'aide des méthodes Level-Set et Ghost-Fluid ; (à gauche) un jet très rapide turbulent de diesel avec $\rho_l = 696 kg.m^{-3}$, $\rho_g = 25 kg.m^{-3}$, $V_l = 100 m.s^{-1}$, $V_g = 0 m.s^{-1}$, $u'/U = 0.05$ et un maillage $64 \times 64 \times 256$; (à droite) un jet d'eau swirl� avec $\rho_l = 1000 kg.m^{-3}$, $\rho_g = 1.3 kg.m^{-3}$, $V_{max} = 19 m.s^{-1}$ et un maillage $64 \times 64 \times 256$	26
1.1	G�om�trie de la surface de s�paration entre deux fluides (1) et (2) permettant de d�finir les rayons de courbure principaux	34
1.2	Repr�sentation graphique d'un profil de vitesse typique � la travers�e de l'interface en cons�quence du respect de l'�quilibre des forces visqueuses	36
1.3	Γ est l'interface de s�paration de deux sous-espaces quelconques Ω_1 et Ω_2 tel que $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Gamma$	36
2.1	Sch�matisation de la m�thode des marqueurs de volume MAC de Harlow et Welch [27]	41
2.2	Sch�matisation de la m�thode des marqueurs de front	42
2.3	Sch�matisation de la m�thode d'adaptation de maillage	43
2.4	Principe de la m�thode VOF ; (en haut) Interface r�elle et fonction couleur associ�e ; (en bas � gauche) classe de m�thodes SLIC pour reconstruire l'interface ; (en bas � droite) classe de m�thodes PLIC pour reconstruire l'interface	45

3.1	Définition "continue" de la fonction Level-Set permettant de localiser une interface Γ . Les iso contours définis par $\{ \mathbf{x} \mid \phi(\mathbf{x}) = d \}$ sont une conséquence de la définition de $\phi(\mathbf{x})$ comme la distance minimale signée de l'interface Γ au point $\mathbf{x}$.	51
3.2	Maillage associé à la discrétisation de l'équation de transport de la fonction Level-Set	54
3.3	Stencils de discrétisation pour l'élaboration des schémas ENO au 3ème ordre et Weno au 5ème ordre pour la formulation non conservative	57
3.4	Stencils de discrétisation pour l'élaboration des schémas ENO au 3ème ordre et Weno au 5ème ordre pour la formulation conservative	62
3.5	Exemple typique de l'évolution de quelques iso contours d'une Level-Set dans un champ de vitesse cisailant où l'iso contour particulier qu'est l'interface est en rouge; (à gauche) les iso contours initiaux tels qu'ils représentent bien l'ensemble des points à une certaine distance signée à l'interface; (à droite) les mêmes iso contours advectés par le champ de vitesse au bout d'un temps t de simulation . .	65
3.6	Exemple de redistanciation d'une interface circulaire perturbée par un signal Eq.(3.54); L'évolution du calcul va de haut en bas : initial, 16 itérations de redistance et 32 itérations de redistance; (à gauche) Iso contours de la Level-Set; (à droite) Iso contours de la courbure κ calculés avec le schéma Eq.(5.24,5.25). . . .	69
3.7	Cas test du disque de Zalesak avec le schéma Rk3/Weno5/c et un maillage 128^2 ; (à gauche) sans redistanciation; (à droite) avec redistanciation; (en rouge) la solution exacte; (en bleue) la solution numérique après un tour de rotation	71
3.8	Cas test du disque de Zalesak avec le schéma Rk3/Weno5/n et un maillage 128^2 ; (à gauche) sans redistanciation; (à droite) avec redistanciation; (en rouge) la solution exacte; (en bleue) la solution numérique après un tour de rotation	71
3.9	Cas test du disque de Zalesak pour différents maillages avec redistanciation : gris - 32^2 , bleue - 64^2 , vert - 128^2 , rouge - 256^2 , noir - solution exacte; (à gauche) avec le schéma Rk3/Weno5/n; (à droite) avec le schéma Rk3/Weno5/c; (la grille correspond à un maillage 128^2)	72
3.10	Cas test du disque de Zalesak après plusieurs tours de rotation pour un maillage 128^2 avec redistanciation : vert - 3 tours, bleue - 10 tours; (à gauche) avec le schéma Rk3/Weno5/n; (à droite) avec le schéma Rk3/Weno5/c	72
3.11	Cas test du serpent avec le schéma Rk3/Weno5/n pour un maillage 128^2 et pour un temps de simulation $t = 3$ s; (en rouge) la solution exacte; (en bleue) la solution numérique; (à gauche) sans redistanciation; (à droite) avec redistanciation	75
3.12	Cas test du serpent avec le schéma Rk3/Weno5/c pour un maillage 128^2 et pour un temps de simulation $t = 3$ s; (en rouge) la solution exacte; (en bleue) la solution numérique; (à gauche) sans redistanciation; (à droite) avec redistanciation	75
3.13	Évolution dans le temps de la surface du serpent sans redistance (les gradients correspondent au schéma Rk3/Weno5/n et les croix au schéma Rk3/Weno5/c) . .	77
3.14	Évolution dans le temps de la surface du serpent avec redistance (les gradients correspondent au schéma Rk3/Weno5/n et les croix au schéma Rk3/Weno5/c) . .	77
3.15	Initialisation des marqueurs de volume dans une bande de chaque côté de l'interface	81
3.16	Schématisme du calcul de la valeur de la Level-Set à partir de marqueurs de volume, les cercles représentant leur rayon fictif ayant pour valeur la distance à l'interface	81

4.1	Problématique numérique de la recherche de solutions discrètes discontinues à la traversée d'une interface pour un espace monodimensionnel. La solution continue est représentée par le trait plein tandis que les points représentent la solution discrète.	86
4.2	Solution en pression en appliquant la méthode CSF dans le cas d'une goutte statique avec $\epsilon = 2.5\Delta x$ et un maillage 16^2	91
4.3	Principe de la méthode Ghost Fluid	93
4.4	Représentation graphique de la construction des valeurs fantômes de la solution $u_k^+ \in \Omega^+$ et $u_{k+1}^- \in \Omega^-$	94
4.5	Représentation graphique de la définition de u_I permettant de discrétiser directement la condition de saut $\left[\beta(x) \frac{d}{dx} u(x) \right]_{\Gamma} = b(x)$	97
4.6	Solution en pression en appliquant la méthode Ghost-Fluid dans le cas d'une goutte statique et un maillage 16^2	106
5.1	Maillage décalé de type MAC	110
5.2	Schématisation de la position des variables suivant la frontière droite du domaine de calcul	121
5.3	Représentation de la solution $(\mathbf{u}, p)$ du problème de translation diagonale de tourbillons Eq.(5.48) aux temps $t = 0$ s (à gauche) et $t = 1.125$ s (à droite)	126
5.4	Simulation numérique de la double couche de mélange ($\rho = 30$ et $\delta = 0.05$) avec un maillage 256^2 . De gauche à droite et de haut en bas, les temps de simulation sont $t = 0.5, 1.0, 1.5$ et 2 s.	129
5.5	Perte en énergie cinétique au cours du temps ($\rho = 30$ et $\delta = 0.05$). (∇) Schéma Ab2/Weno5/n, (x) Schéma Ab2/Weno5/c.	130
5.6	Simulation numérique de la double couche de mélange ($\rho = 80$ et $\delta = 0.05$) avec un maillage 256^2 pour $t = 0.8$ s.	131
5.7	Perte en énergie cinétique au cours du temps ($\rho = 100$ et $\delta = 0.05$). (∇) Schéma Ab2/Weno5/n, (x) Schéma Ab2/Weno5/c.	132
5.8	(à gauche) Distribution de 9 processeurs sur une grille de calcul bidimensionnelle, les flèches représentent les communications associées (des communications supplémentaires sont à rajouter dans le cas de conditions périodiques); (à droite) Construction de 4 blocs de variables à communiquer aux processeurs voisins	136
6.1	Schématisation du cas de simulation de la bulle ou goutte statique et annotations associées	138
6.2	Cas de la goutte correspondant aux paramètres Eq.(6.2) : exemples typiques de courants parasites obtenus pour un maillage 32^2 et avec la méthode Ghost Fluid; le champ scalaire correspond à la vorticit��; (�� gauche) apr��s la premi��re it��ration; (�� droite) apr��s un long temps de simulation ($t = 1$ s)	140
6.3	Cas de la bulle identique �� la Fig.(6.2) avec inversion des annotations <i>int</i> et <i>ext</i> dans l'Eq.(6.2); (�� gauche) apr��s la premi��re it��ration; (�� droite) apr��s un long temps de simulation ($t = 1$ s)	140
6.4	��volution dans le temps de la norme L_2 des courants parasites en changeant un �� les param��tres Eq.(6.2). Maillage 32^2	143
6.5	Modes initiaux de d��formation pour les modes respectifs 2, 3, 4 et 5 de gauche �� droite et de haut en bas avec $\epsilon = 0.15$ Eq.(6.5) (la taille de boite repr��sent��e ici ne correspond pas �� celle utilis��e pour les simulations qui vont suivre)	145

6.6	Dissipation numérique et impact de la redistance lors de l'oscillation de la goutte déformée pour le mode 2 pour un maillage 32^2 et les paramètres Eq.(6.7); (en haut) $\epsilon = 0.02$; (en bas) $\epsilon = 0.15$	149
6.7	Dissipation numérique et impact de la redistance lors de l'oscillation de la goutte déformée pour le mode 4 pour un maillage 32^2 et les paramètres Eq.(6.7); (en haut) $\epsilon = 0.02$; (en bas) $\epsilon = 0.15$	150
6.8	Conditions initiales pour la simulation de l'oscillation amortie d'un onde de surface	151
6.9	Courbes obtenues lors de la simulation de l'oscillation d'une onde de surface en comparaison de la solution exacte de Prosperetti Eq.(6.10); (En haut) $\rho_l/\rho_g = 1$; (En bas) $\rho_l/\rho_g = 1000$	155
6.10	Schématisation du cas test de l'écoulement de Poiseuille diphasique. Le profil de vitesse représenté ici met en évidence l'existence d'une singularité à l'interface lorsque les fluides possèdent une viscosité dynamique différente.	156
6.11	Représentation graphique du calcul du profil du champ de vitesse pour un maillage 32^2 et les paramètres Eq.(6.18). La solution théorique est en trait plein noir tandis que les points rouges représentent la solution numérique calculée.	158
6.12	Simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Taux de croissance calculés en comparaison de la relation de dispersion théorique Eq.(6.19).	160
6.13	Simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor avec les paramètres Eq.(6.21) (Maillage 64×256 - Schéma Rk3/Weno5/n - 3 itérations de redistance).	162
6.14	Diverses simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor avec les paramètres Eq.(6.21) et un maillage 64×256 arrêtées au temps $t = 0.9$ s; (De gauche à droite) • Rk3/Weno5/n / 3 itérations de redistance / méthode CSF • Rk3/Weno5/c / 3 itérations de redistance • Rk3/Weno5/n / 1 itération de redistance • Rk3/Weno5/c / 1 itération de redistance.	163
7.1	Configuration des simulations. Profil de vitesse utilisé et grandeurs associées. . .	171
7.2	Les deux types de configuration expérimentale pour l'écoulement gazeux. L'une à gauche où l'écoulement d'air est confiné dans une veine d'injection tout comme le liquide, et une autre à droite où l'air ne fait que s'écouler autour de la veine d'injection de liquide.	172
7.3	Déformations initiales progressives de la nappe lors de la phase transitoire et champ de vorticité associé. Le pas de temps entre les images est constant.	176
7.4	Diffusion du profil de vitesse à l'interface pour un temps donné.	179
7.5	Rencontre des couches limites d'après L.Raynal [77].	179
7.6	Formation d'amas de liquide aux maximums d'amplitude de l'oscillation globale par création d'un flux massique local. Profil de vitesse dans l'amas pour deux instants différents.	180
7.7	Visualisation expérimentale du décollement de la couche limite gazeuse en aval du maximum d'amplitude de la nappe liquide (à la droite de la nappe liquide, la trace blanche au milieu de la photographie) issue de l'article de Lozano et al. [46].	181
7.8	Signaux issus de la mesure de la distance minimale entre la paroi haute du domaine de calcul et l'interface pour toutes les demi épaisseurs de nappe ($x/a = 1, 2, 3, \dots$).	182
7.9	Superposition des déformations de la nappe au cours du temps (Maillage 512^2).	183
7.10	Simulation spatiale bidimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide avec la configuration Fig.(7.1) et les paramètres Eq.(7.3). Déformations de l'interface et champ de vitesse pour 4 temps différents au sein d'une période d'oscillation globale (Maillage 256^2).	184

7.11	Simulation spatiale bidimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide avec la configuration Fig.(7.1) et les paramètres Eq.(7.3). Déformations de l'interface et champ de vortacité pour 4 temps différents au sein d'une période d'oscillation globale (Maillage 256^2).	185
7.12	Simulation spatiale bidimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide avec la configuration Fig.(7.1) et les paramètres Eq.(7.3). Déformations de l'interface et champ de pression pour 4 temps différents au sein d'une période d'oscillation globale (Maillage 256^2).	186
7.13	Fréquences d'oscillation de la nappe liquide en fonction de la vitesse débitante de gaz U_l pour différentes vitesses débitantes de liquide U_g . Les droites indiquent les lieux de transition entre les zones A,B et C telles que les ont définies Mansour et Chigier [50, 51]	188
7.14	Fréquences d'oscillation de la nappe liquide en fonction de la vitesse du gaz U_g pour différentes vitesses débitantes de liquide U_l . La droite représente la valeur moyenne.	189
7.15	Diagramme des fréquences d'oscillation de la nappe de liquide obtenu à partir des expériences de Lozano et al.	190
7.16	Fréquences d'oscillation de la nappe liquide en fonction de la demi épaisseur de la nappe a . Nous avons utilisé deux tailles de domaine différentes pour vérifier la tolérance du résultat vis à vis des conditions sortantes aux parois.	192
7.17	Fréquences d'oscillation de la nappe liquide en fonction de l'épaisseur de la couche limite gazeuse δ et de la hauteur entre les deux couches limites de gaz e	194
7.18	Fréquences d'oscillation de la nappe liquide en fonction de de la hauteur de la veine d'injection de gaz $d = 2\delta + e$	195
7.19	Répertorisation de l'ensemble des fréquences calculées de l'oscillation globale de la nappe liquide dans le système de coordonnées défini par les nombres adimensionnels M et f^* Eq.(7.12). Delta correspond aux calculs en faisant varier l'épaisseur de la couche limite gazeuse et D à la hauteur de veine.	199
8.1	Configuration initiale des simulations temporelles tridimensionnelles	202
8.2	Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 20 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Première partie) • Maillage $128 \times 128 \times 256$ •	205
8.3	Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 20 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Seconde partie) • Maillage $128 \times 128 \times 256$ •	206
8.4	Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 20 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Troisième et dernière partie) • Maillage $128 \times 128 \times 256$ •	207
8.5	Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 30 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Première partie) • Maillage $128 \times 128 \times 256$ •	208
8.6	Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 30 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Seconde partie) • Maillage $128 \times 128 \times 256$ •	209
8.7	Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 30 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Troisième et dernière partie) • Maillage $128 \times 128 \times 256$ •	210

8.8	Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 40 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Première partie) • Maillage 128x128x256	
	•	211
8.9	Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 40 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Seconde et dernière partie) • Maillage 128x128x256 •	
		212
8.10	Simulation spatiale tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide. On remarque la manifestation de l'oscillation globale et la formation d'un pseudo ligament • Maillage 128x128x256 •	
		213

Introduction Générale

La désintégration d'un jet liquide est le passage d'une masse importante et compacte de liquide à un ensemble de gouttes de tailles diverses. Lorsqu'elles sont suffisamment petites et donc très nombreuses, on obtient un brouillard de gouttes appelé spray (Fig.1), on parle alors d'atomisation. Améliorer la compréhension de la formation d'un spray présente de nombreux intérêts dans des disciplines diverses telles que la combustion dans les turboréacteurs et les moteurs-fusées, l'industrie pharmaceutique ou encore l'agriculture. Malgré des efforts importants de recherche, la prédiction de la granulométrie d'un spray, c'est à dire la distribution en taille et en vitesse des gouttes en fonction des conditions amont d'injection, reste très difficile. L'objet de ce mémoire de thèse est une étude de la pertinence de l'outil numérique pour décrire et étudier les mécanismes de désintégration d'un jet liquide. Nous nous intéresserons à la phase initiale du processus d'atomisation.



FIG. 1 – Génération d'un spray à l'aide d'une simple bombe pressurisée.

1 Motivations

1.1 Combustion dans les moteurs aérospatiaux

Enjeux environnementaux

Dans le secteur aérospatial, le développement des turboréacteurs et des moteurs-fusées a aujourd'hui une histoire longue de plusieurs décennies. Celle des moteurs automobiles est bien plus longue encore. Les technologies employées sont arrivées à une relative maturité en terme de rendement et de fiabilité. Cependant, l'explosion du trafic mondial exige de porter une attention beaucoup plus soutenue sur les émissions polluantes. Dans ce domaine, les objectifs européens sont très clairs : en ce qui concerne les turboréacteurs, les émissions d'oxydes d'azote NO_X et de

dioxydes de carbone CO_2 doivent être réduites respectivement de 80% et de 50%. Le challenge technologique est ambitieux mais bien nécessaire.

Défis technologiques et scientifiques

Afin de diminuer les émissions polluantes des turboréacteurs, il est nécessaire de maîtriser le mélange de combustible avant son inflammation. La réaction chimique de combustion engendre l'émission de composés chimiques polluants. Le taux de production de CO_2 ne peut être réduit que par une baisse des résidus de combustion, les imbrûlés. La solution la plus évidente est d'augmenter le taux de compression lors de la combustion. Parallèlement, une augmentation de la température favorise la formation d'oxydes d'azote NO_X . La température est spécialement importante lorsque l'on est proche de la "stoechiométrie", quand la quantité d'oxygène correspond exactement à la masse de combustible. Nous nous apercevons tout de suite de l'antagonisme : d'une part, il est nécessaire d'augmenter le taux de compression, et de l'autre, de diminuer la température.

Plusieurs solutions ont été avancées pour répondre à ce défi. La solution la plus répandue est de brûler directement un mélange pauvre. C'est la technologie LPP pour "Lean Premixed Prevaporized", un module de prémélange est placé en amont de la chambre de combustion. Cependant, lorsque le carburant est en faible quantité dans le mélange, nous sommes proche d'un seuil critique, impliquant des risques d'instinction, d'auto-allumage et de retour de flamme. La stabilité de la combustion dans le moteur est compromise. Une solution alternative a été introduite plus récemment, c'est l'injection multipoints.

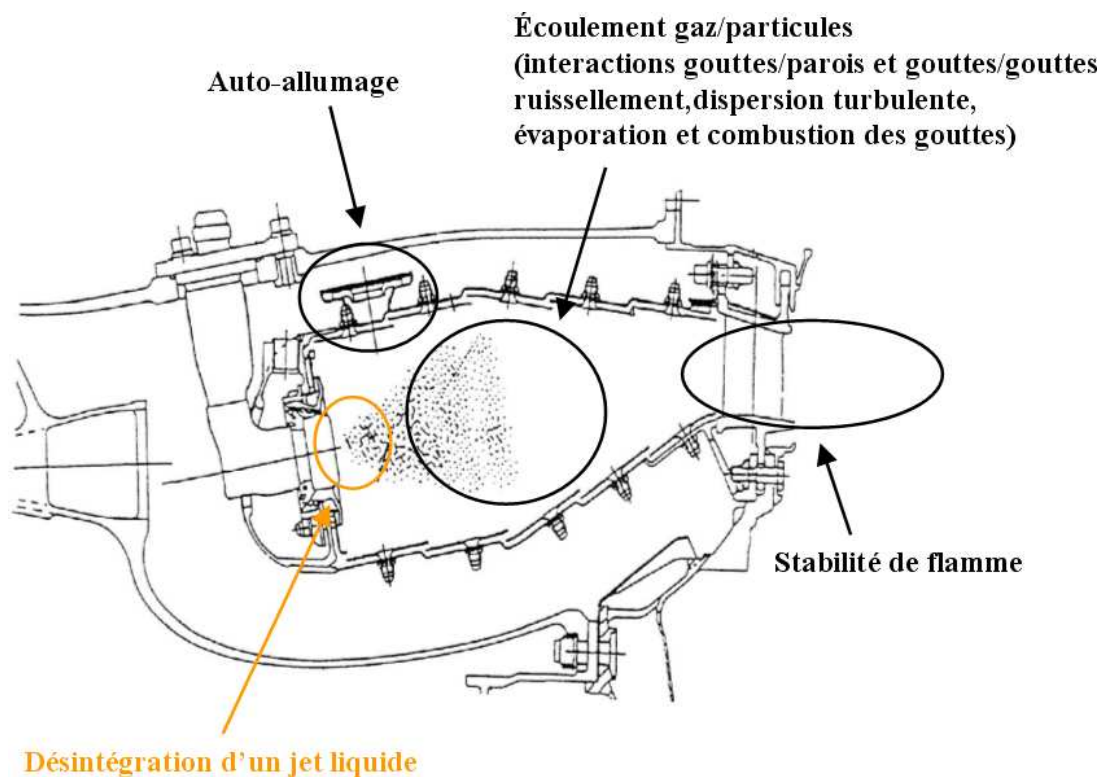


FIG. 2 – Une chambre de combustion classique. Principaux phénomènes physiques étudiés à l'ONERA/DMAE/MH dont la désintégration d'un jet liquide faisant l'objet de ce mémoire.

De manière générale, les principales difficultés rencontrées lors de la conception de moteurs aérospatiaux sont liées à la maîtrise du mélange entre kérosène et oxygène dans le cas des turbo-réacteurs, ou par exemple du couple H_2/LOX dans le cas des moteurs-fusées. Dans ce cadre, la maîtrise de la qualité de l'atomisation d'un jet de carburant est un des enjeux majeurs, et ceci pour des plages de fonctionnement moteur très variées. Si les recherches sur le transport et le mélange d'un spray dans un champ aérodynamique commencent à porter leurs fruits en terme de conception, notamment grâce à l'outil numérique, ce n'est pas vraiment le cas de celles sur la fragmentation d'un jet liquide. Des efforts conséquents sont à faire dans ce domaine. Il est facile de comprendre qu'en diminuant la taille des gouttes produites par l'atomisation d'un jet, on facilite la qualité du mélange, mais également la combustion de celui-ci dès lors que la surface de contact entre air et carburant augmente.

Dans ce cadre, le laboratoire ONERA/DMAE/MH dans lequel s'est déroulé cette thèse poursuit de nombreux programmes de recherche afin de modéliser les écoulements diphasiques dans des conditions proches de celles des foyers de turbomachines. Ils s'inscrivent aujourd'hui dans un programme beaucoup plus large faisant appel à une association entre divers instituts de recherche. Le programme INCA, Initiative en Combustion Avancée, regroupe en effet l'ONERA, différents laboratoires du CNRS et l'industriel SNECMA. Pour concevoir des propulseurs toujours de plus en plus compétitifs, les défis relevés par cette convention scientifique sont triples : une sécurité sans faille, un impact le plus faible possible sur l'environnement et un coût raisonnable. Les problèmes physiques posés par la combustion au sein des turbomachines ne manquent pas. Le laboratoire ONERA/DMAE/MH poursuit ses activités dans le but de répondre aux exigences de compréhension des phénomènes et de proposer des solutions.

L'injection assistée

Dans l'industrie, il existe plusieurs procédés pour générer un spray, nous en citerons deux : les injecteurs pression et les injecteurs aéromécaniques.

Concernant les injecteurs dit pression, l'injection à haute pression d'un jet liquide à travers un petit orifice suffit pour atomiser le jet (Fig. 3). Ces injecteurs sont simples de mise en oeuvre et peu onéreux. Cependant, la masse de liquide que l'on peut injecter reste limitée. D'autre part, il n'est pas toujours aisé d'obtenir des pressions élevées favorisant la qualité de l'atomisation en amont des systèmes utilisant ce procédé.



FIG. 3 – Un injecteur pression classique. Génération d'un spray de gouttelettes.

Au fil du temps, les turboréacteurs sont devenus de plus en plus puissants, et donc gourmand en carburant. Une technique ingénieuse a permis de répondre à l'exigence d'injecter du carburant avec un débit massique important tout en préservant une bonne qualité d'atomisation, ce sont les injecteurs aéromécaniques. La technique est simple et efficace : un écoulement d'air porté à haute vitesse vient cisailler le jet de liquide sur l'ensemble de sa surface (Fig.4). L'énergie cinétique élevée de l'écoulement d'air est transmise au liquide, ce qui a pour effet de le pulvériser sous l'action d'instabilités hydrodynamiques.

Une injection assistée permet dans l'absolu de pouvoir contrôler la pulvérisation du liquide dans des plages de fonctionnement variées, une pression élevée n'étant pas par exemple strictement nécessaire pour atomiser correctement le liquide. Si l'on se donne les conditions d'injection du carburant, ce contrôle peut se réaliser par l'intermédiaire des conditions d'injection du gaz cisailant comme sa vitesse. Or, de part l'observation expérimentale, il se trouve que la présence d'instabilités hydrodynamiques diverses et pas toujours bien déterminées complique sérieusement la compréhension des mécanismes de pulvérisation. Il existe en fonction des conditions amonts de nombreux régimes de désintégration, principalement pilotés par la vitesse de gaz, où la gamme des tailles de gouttes du spray final obtenu change dans des proportions conséquentes.

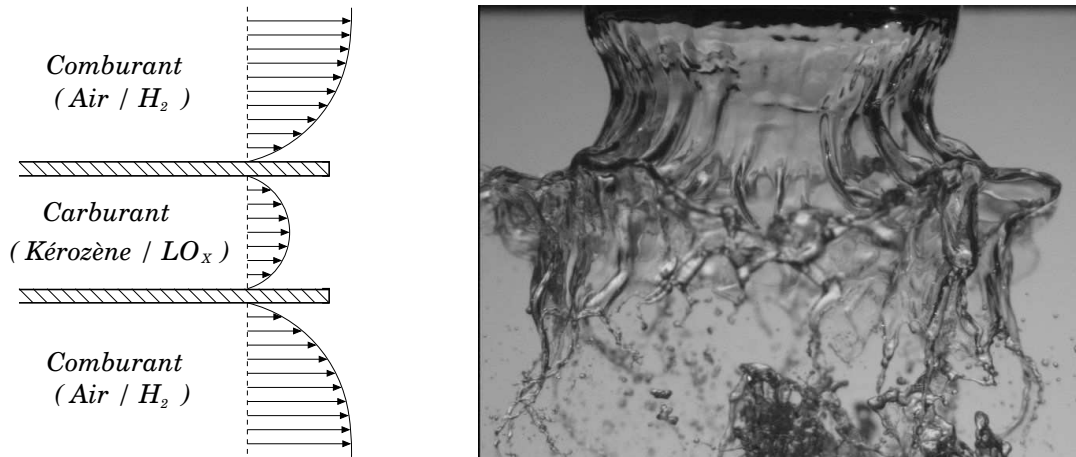


FIG. 4 – (à gauche) principe de l'injection assistée ; (à droite) un injecteur aéromécanique, le jet de liquide axisymétrique est creux et le cisaillement s'effectue des deux cotés.

Une caractérisation complète et fine des mécanismes de la désintégration d'un jet liquide pilotée par un écoulement gazeux cisailant est aujourd'hui nécessaire. Nous devons être capable de dégager des nombres adimensionnels suffisamment pertinents en vue de quantifier le début et la fin des régimes de désintégration, autrement dit de déterminer les points de fonctionnement où l'atomisation sera la meilleure. L'objectif que l'on pourrait qualifier d'ultime serait de fournir la granulométrie finale, la distribution en taille et en vitesse des gouttes finales, avec une marge d'erreur la plus petite possible, sans même réaliser d'expériences au préalable. Ceci afin de fournir par exemple une base de données initiales aux codes de simulation "fluide/particules" de manière à optimiser à moindre coût et dans un bref délai les chambres de combustion. De la réalisation d'un tel projet scientifique d'envergure pourrait déboucher l'accomplissement d'objectifs ambitieux en terme de diminution de la pollution, tout en augmentant le rendement et en diminuant la consommation des moteurs aérospatiaux. Ce projet peut s'étendre bien au delà de l'injecteur assisté à tout autre système d'injection, et bien sur s'inscrit plus généralement dans le cadre de la compréhension globale des mécanismes de fragmentation d'un liquide dans des conditions variées.

1.2 Autres problèmes

Il est évident que le principal objectif dans l'étude de la formation des aérosols est l'amélioration des performances de combustion d'un moteur, dans les secteurs aérospatial et automobile, une attention particulière étant portée sur la diminution des émissions polluantes. Toutefois, comme nous l'avons signalé en introduction, il existe un bon nombre d'autres secteurs où la maîtrise de la formation d'un spray présente un réel intérêt, ou plus généralement l'étude de la fragmentation d'un liquide :

- l'industrie pharmaceutique
- l'agriculture
- la peinture

Cela peut paraître surprenant au premier abord que l'étude de la formation des sprays puisse toucher ces secteurs. Cependant, il existe bel et bien un intérêt à optimiser la qualité de l'atomisation d'un jet liquide pour des raisons propres à chacun d'entre eux que l'on pourra facilement comprendre.

1.3 Objectif de la thèse

L'objectif de cette thèse est de développer un solveur numérique dans le but de simuler le phénomène de fragmentation d'un liquide, ou plus généralement tout écoulement gaz/liquide incompressible et isotherme. Une attention particulière sera portée sur l'injection assistée d'un jet liquide par un courant gazeux.

La résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles sera faite de façon directe, à l'aide d'un solveur de type DNS par le biais de la méthode de projection, sans modélisation de la turbulence. Les choix des hypothèses et des schémas numériques qui seront employés seront fait afin de respecter au mieux la physique complexe de brisure d'un jet liquide, particulièrement sous assistance d'un fort courant gazeux. L'hypothèse de non miscibilité des fluides implique le suivi numérique de la surface de séparation entre le gaz et le liquide. Le choix s'est porté sur la méthode naissante et prometteuse Level-Set. Cette interface est le lieu de discontinuités entre équilibre des forces de capillarité, de pression et de viscosité. La méthode Ghost-Fluid assure un traitement correct de ces discontinuités en préservant au niveau discret les conditions de saut. Les aptitudes de tels schémas numériques associées à un solveur DNS des équations de Navier-Stokes seront montrées à travers une batterie de cas tests académiques.

Dans un premier temps, le solveur numérique développé sera employé afin de retrouver par la voie numérique des résultats communs à l'ensemble des expériences réalisées sur la désintégration assistée d'une nappe de liquide par un courant gazeux. Cette première étape est nécessaire dans le sens où nous devons vérifier le bon comportement du code de simulation vis à vis de ce phénomène non trivial. Ce n'est que par la suite que nous pourrons étendre l'utilisation du code de simulation à un ensemble de cas de simulation où nous ferons varier quelques paramètres pertinents (les vitesses débitantes de gaz et de liquide, l'épaisseur de couche limite, l'épaisseur de la nappe liquide ...) afin de mesurer toute leur influence sur la désintégration du jet liquide sous assistance du courant gazeux. De cette étude paramétrique, nous pourrons dégager et proposer des nombres adimensionnels permettant de déterminer les caractéristiques de la désintégration.

2 État de l'art

2.1 Désintégration "naturelle"

La fragmentation d'un liquide est un phénomène que nous pouvons observer quotidiennement, l'étude de ses mécanismes a logiquement suscité un vif intérêt. Félix Savart fait figure de pionnier dans le domaine. En 1833, plusieurs de ses mémoires [81, 83, 82, 84] traitent de la formation et de la brisure de jets plans. Dans une première expérience [82, 84], un jet d'eau cylindrique vient impacter un disque circulaire placé perpendiculairement. Un système permet de faire osciller le disque dans l'axe du jet liquide permettant de sélectionner le mode de vibration. Dans une seconde expérience [83], la collision de deux jets forme une nappe liquide lorsque les vitesses sont identiques, et une cloche lorsqu'elles sont différentes. Il a observé la croissance dans le sens du jet d'ondulations à la surface de la nappe liquide, suffisamment importantes pour la briser. Il n'a pas toutefois découvert l'influence de la tension de surface sur les ondulations, ce qui a été réalisé des années plus tard par Plateau [68] (la tension de surface ayant été découverte par Laplace et Young [113] en 1805). En effet, sous certaines conditions, les ondulations ont pour effet de réduire la surface de la nappe, ce phénomène est favorisé par la tension de surface. Cette force a toujours pour effet de réduire au minimum la surface de liquide.

Rayleigh [76, 75] a par la suite mis en équations cet effet de la tension de surface sur les mécanismes de brisures d'un jet liquide. En considérant de petites perturbations sinusoïdales à la surface d'un cylindre liquide de rayon r_j , Rayleigh montre que l'onde dont le taux de croissance est le plus important a une longueur d'onde $\lambda = 9 r_j$. Si l'on considère que le jet se brise suivant cette longueur, la conservation de la masse nous indique que les gouttes résultantes ont un rayon $r_g = 1.89 r_j$. Son calcul corrèle à merveille avec ses expériences et celles de Savart mis à part la formation de petites gouttes satellites visibles sur la Fig(5).

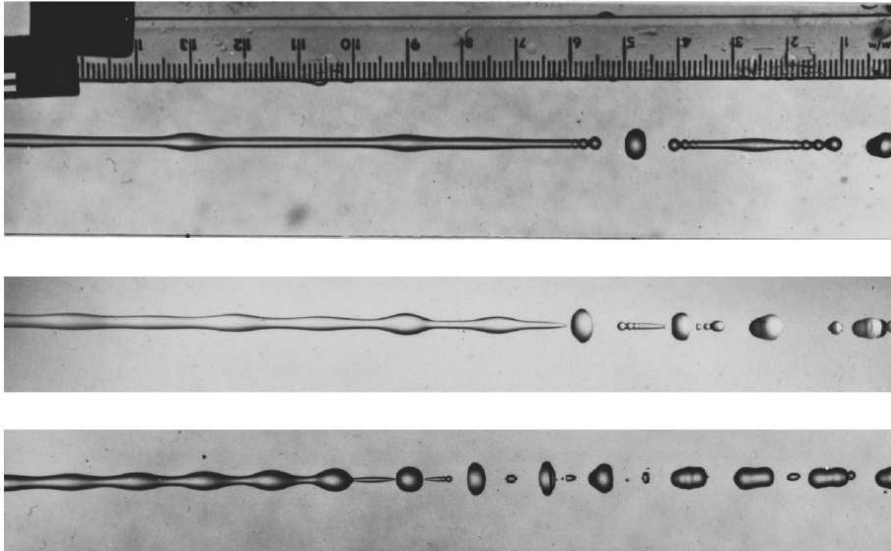


FIG. 5 – Brisure de Rayleigh d'un jet liquide pour 3 fréquences d'excitation différentes. Apparition de petites gouttes satellites.

Au début des années 50, Squire [93], York, Stubbs et Tek [112], Taylor [103] ainsi que Hagerty et Shea [26] ont initié les calculs de stabilité linéaire temporelle des équations de Navier-Stokes

incompressibles pour un espace bidimensionnel sur la configuration d'une nappe liquide non visqueuse dans de l'air au repos. Parallèlement, Hagerty et Shea [26] ont mené des expériences, ils ont ainsi pu observer visuellement le résultat de leur prédiction théorique : seulement deux modes d'oscillation peuvent croître à la surface d'une nappe liquide, le mode sinueux (antisymétrique) et le mode variqueux (dilatationnel ou symétrique) comme schématisé sur la Fig(6).

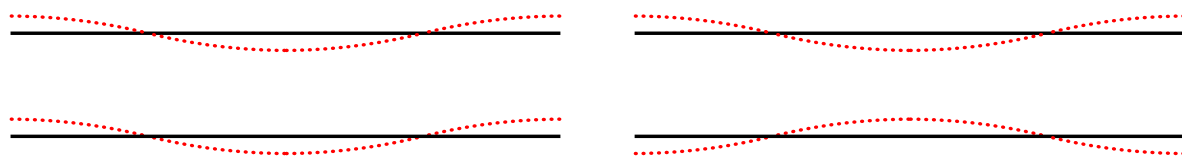


FIG. 6 – Les deux ondes de déformation pouvant croître à la surface d'une nappe liquide ; (à gauche) le mode sinueux ou antisymétrique ; (à droite) le mode variqueux, dilatationnel ou symétrique.

Toujours sur la configuration de la nappe, l'influence de la viscosité du liquide a été étudiée par de nombreux auteurs. On peut citer Crapper et Dombrowski [17], Li et Tankin [43] ou encore Ibrahim [31]. Les profils de vitesse considérés sont plus ou moins réalistes. La viscosité joue un rôle multiple dans les mécanismes d'instabilité. Son effet sur les modes sinueux et variqueux est étroitement lié au nombre de Weber. Par exemple, la viscosité conduit à un élargissement de la gamme des nombres d'ondes pour lesquels la nappe liquide est instable ("viscosity-enhanced").

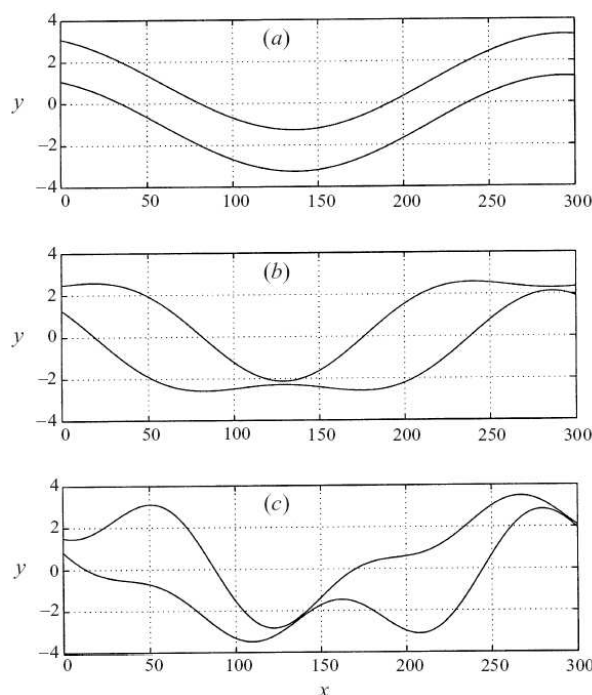


FIG. 7 – Un des résultats graphiques d'une étude de stabilité non linéaire réalisée par S.A.Jazayeri [32]

L'expérience met en évidence de fortes déformations de l'interface lorsqu'une nappe se met à osciller suivant un mode sinueux, la seule présence de cette onde ne peut expliquer les brisures de la nappe. Dans ce sens, des études de stabilité non linéaire ont été menées par Jazayeri et Li [32] ou Mehring et Sirignano [74]. Une des conclusions principales est que la nappe de liquide peut subir sous l'effet des harmoniques un pincement conséquent de son épaisseur, jusqu'à sa brisure. En particulier, le premier harmonique du fondamental sinueux est un mode variqueux pouvant provoquer ce pincement toutes les demi-longueurs du fondamental Fig.(7).

En conclusion, nous pouvons nous apercevoir que les mécanismes de désintégration d'un jet liquide dans de l'air au repos dépendent d'un nombre important de paramètres. Certaines propriétés physiques du liquide que sont la viscosité et la tension de surface ont une influence prépondérante. La croissance des ondes de perturbation peut être rapidement non linéaire, l'influence du gaz environnant peut être également déterminante.

2.2 Désintégration assistée

Influence du courant gazeux

Il faut remonter en 1939 avec Nukiyama et Tanasawa [59] pour trouver la première expérience sur la désintégration assistée d'un jet liquide. Dans leur expérience, un jet d'eau cylindrique plein est cisailé suivant son pourtour par un courant gazeux porté à haute vitesse. Il a été trouvé une forte dépendance de la taille des gouttes du spray obtenu avec la vitesse de cisaillement du gaz. Il s'en suit bien des années plus tard un bon nombre de nouvelles expériences afin de répondre à des besoins industriels, dont celles qui utilisent une configuration où le jet liquide est plan, celles de Rizk et Lefebvre [78] ou de Arai et Hahimoto [1]. Elles mettront en évidence les difficultés de relier la taille des gouttes avec les conditions de l'expérience. L'inclusion de la vitesse du gaz comme paramètre indépendant apparaît comme essentielle pour obtenir des corrélations expérimentales cohérentes, comme par exemple pour la longueur de rupture du jet ou pour le diamètre moyen de Sauter, le SMD. L'ensemble de ces travaux a été résumé par Lefebvre [39].

La présence de l'écoulement d'air change profondément la nature des mécanismes de désintégration. Les théories qui ont été développées en négligeant tout écoulement de gaz ne peuvent être appliquées à ce cas. En quelque sorte, le profil de vitesse a été inversé en comparaison du profil de vitesse d'un jet injecté dans de l'air au repos. Il a été prouvé que les déformations initiales du jet dépendent essentiellement du gaz. Les études de stabilité linéaire et non linéaire ont ainsi été reprises en prenant en compte cet effet de cisaillement du gaz [16, 2]. Tout comme le cas de la désintégration naturelle, on s'aperçoit rapidement que les effets de viscosité du gaz et du liquide, de la non linéarité des ondes de déformation, ne peuvent être négligés sous peine de s'écarter largement des observations et corrélations trouvées expérimentalement. L'une des rares choses qui ne change pas, c'est la forme des ondes de déformation qui se développent à la surface de la nappe, les ondes sinueuses et variqueuses Fig(6).

Configuration du jet plan

Introduction Pour simplifier à la fois l'observation, la mesure et la compréhension des mécanismes de désintégration d'un jet cisailé, la configuration de la nappe plane de liquide a été largement utilisée, autant pour l'expérience que pour les études de stabilité, et le sera encore à l'avenir. Le liquide est injecté entre les deux parois parallèles d'un injecteur comme sur la Fig.(8), tel que la dimension transverse à l'écoulement soit très largement supérieure à l'épaisseur entre les deux plans, c'est à dire l'épaisseur de la nappe liquide, dans le but d'éviter les effets de bord. Si les injecteurs commerciaux que l'on retrouve dans les moteurs aérospatiaux ont en général une

géométrie axisymétrique, il a été démontré que les mécanismes sont identiques pour les géométries plane et axisymétrique. La géométrie plane présente par contre l'avantage de simplifier la visualisation et l'accès aux mesures lors de la réalisation d'expériences. L'observation de l'évolution spatiale des ondes de déformation des deux interfaces liquide/gaz est directe. Il n'est pas rare de trouver d'autres configurations, comme le jet cylindrique plein, seulement cisailé suivant son pourtour, mais nous nous concentrerons quasi exclusivement sur la géométrie plane.

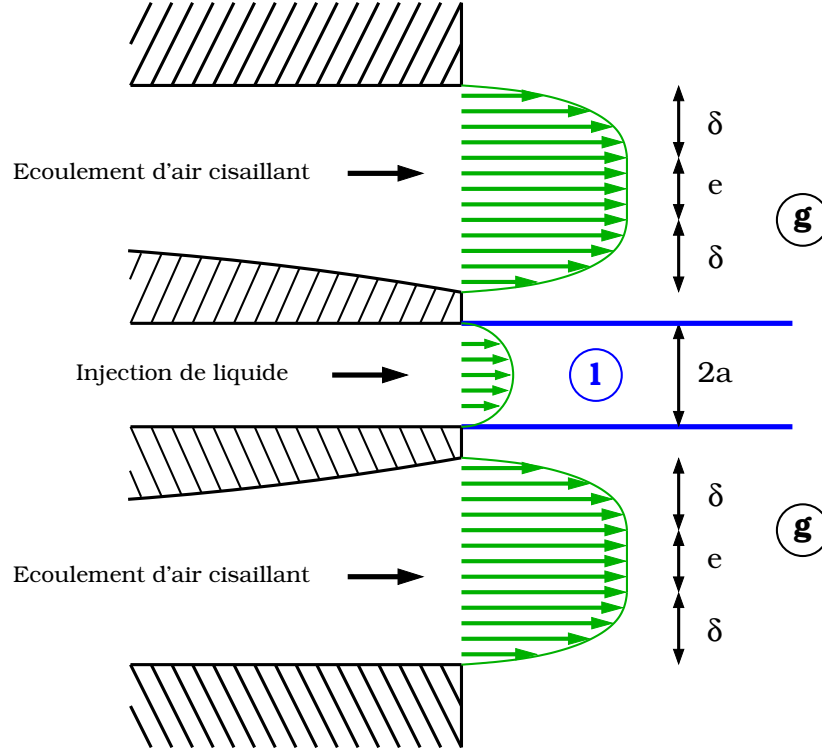


FIG. 8 – Schématisation de la mise en oeuvre expérimentale de la désintégration assistée d'une nappe de liquide par un courant gazeux de part et d'autre.

On trouve un bon nombre de travaux expérimentaux au début des années 90, dont ceux de Stapper et Samuelsen [94, 95] mais également de Chigier et al. [50, 51]. Ils apparaissent clairement dans la littérature comme les plus représentatifs et ils sont relativement précurseurs dans l'avancement de la compréhension des mécanismes. Partant du constat de la multi dépendance des mécanismes de désintégration aux nombreux paramètres d'une expérience donnée, ces travaux explorent les régimes de fonctionnement en fonction des paramètres tels que la tension de surface, les viscosités, l'épaisseur de la nappe de liquide mais surtout les vitesses de liquide et de gaz. Plusieurs liquides sont utilisés, de l'eau ou des alcools comme l'éthanol où l'éthylène, dans le but d'étudier les effets des propriétés du liquide, principalement le couple viscosité/tension de surface, sur les échelles caractéristiques de rupture du jet en temps et en espace et le diamètre moyen des gouttes obtenues après atomisation, le SMD. L'épaisseur de la nappe liquide est en général très mince, de $200\ \mu m$ à $1\ mm$. Les vitesses peuvent varier approximativement de 1 à $5\ m/s$ pour le liquide et de 15 à $60\ m/s$ pour le gaz, ce qui implique de larges gammes de fonctionnement.

Premières caractérisations Stapper et Samuelsen [94] ont dégagé deux régimes de fonctionnement d'après leurs visualisations expérimentales. Le premier, nommé "cellular breakup", est caractérisé par la présence conjuguée d'ondes de déformation longitudinales et transverses, elles possèdent des longueurs d'onde similaires. Plus précisément, la nappe se met à battre comme un drapeau au vent, provoquant dans le mouvement l'apparition d'ondes de surface transverses au sens de l'écoulement. La conjonction de ces deux ondes perpendiculaires implique l'apparition de ce que l'on peut qualifier de cellules de liquide, qui finissent par se briser rapidement. Le second mode, nommé "stretched streamwise ligament breakup", est caractérisé par une croissance beaucoup plus rapide des ondes transverses en comparaison de l'onde longitudinale, qui n'a manifestement pas le temps de se développer puisque la nappe se brise avant. La notion de battement de la nappe est beaucoup moins claire, la désintégration transverse intervient dès la sortie de l'injecteur. En fait, comme les auteurs le soulignent, ce mode apparaît pour de faibles vitesses de liquide, ce qui est pour le moins logique. Seulement, ils notent que l'une des différences essentielle entre les deux modes est que la brisure de la nappe intervient plutôt dans le sens transverse pour le mode cellulaire tandis que c'est l'inverse pour l'autre, mais cette conclusion apparaît comme bien floue. Dans les deux cas, l'addition d'une ondulation de surface transverse avec un écoulement gazeux cisailant à haute vitesse provoque, par le biais d'une instabilité de cisaillement de type Kelvin-Helmholtz, la création de ligaments par étirement aux sommets des vagues.

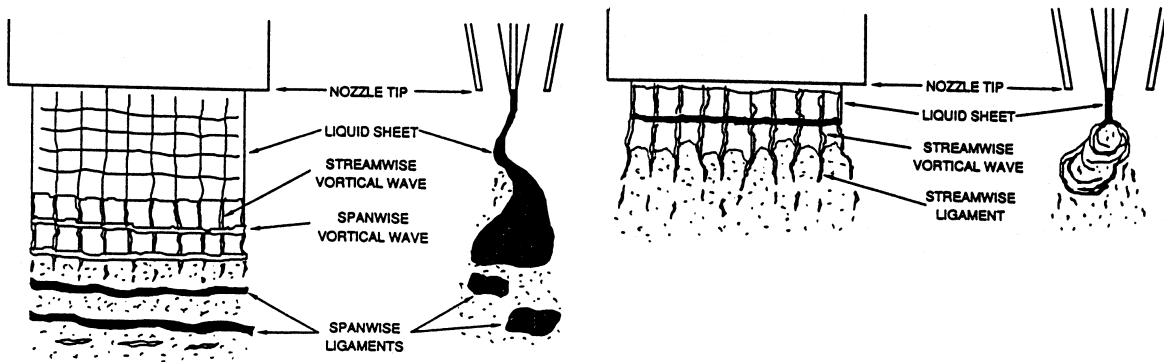


FIG. 9 – Les deux régimes de fonctionnement d'après les visualisations expérimentales de Stapper et Samuelsen [94] ; (à gauche) régime nommé par les auteurs "cellular breakup" ; (à droite) régime nommé par les auteurs "stretched streamwise ligament breakup"

Chigier et al. [50, 51] arrivent à des conclusions similaires selon leurs propres expériences alors que les conditions de l'expérience sont forcément différentes, au moins pour la géométrie et les dimensions de l'injecteur. La croissance du mode sinueux, entraînant le battement rapide et en phase des deux côtés de la nappe, est dominant vis à vis du mode variqueux. Cependant, ce régime n'existe plus pour des vitesses importantes de liquide, correspondant à un petit rapport des vitesses gaz/liquide, où ils notent que cette fois, c'est un pseudo mode variqueux qui devient dominant. Ils vont ainsi plus loin dans leurs investigations en réalisant un diagramme, avec en abscisse la vitesse du liquide et en ordonnée la fréquence du fondamental des vibrations de la nappe, où il est représenté trois zones correspondant à trois régimes de fonctionnement différents, les zones A, B et C. Pour une vitesse de gaz donnée et suffisante pour imprimer de grands mouvements à la nappe, on évoluera successivement des zones A,B et C en augmentant le débit

liquide. La zone A, correspondant à de faibles vitesses de liquide, peut ainsi être assimilée au mode que Samuelsen a qualifié "stretched streamwise ligament breakup". La zone B, correspond quant à elle au meilleur régime d'atomisation. Les déformations de la nappe sont importantes et rapides, l'angle de spray est large, résultant au final de petites gouttes. Le battement de la nappe n'existe plus dans la zone C, lorsque le rapport des vitesses gaz/liquide est petit.

Une étude de l'influence des propriétés du liquide a également été réalisée par les mêmes auteurs [23, 95]. La conclusion principale est que les bases des mécanismes de désintégration ne sont pas sensibles à ces paramètres, autrement dit le battement de la nappe, et que par contre les échelles caractéristiques de temps et d'espace le sont. Que ce soit l'angle de spray, la longueur de rupture ou même les longueurs d'onde de l'oscillation globale et de l'onde de déformation transverse, les propriétés physiques du liquide et du gaz ont une influence avérée. Il reste que ce sont les débits liquide et gazeux qui semblent piloter l'essentiel des mécanismes, plus précisément le rapport des vitesses gaz/liquide.

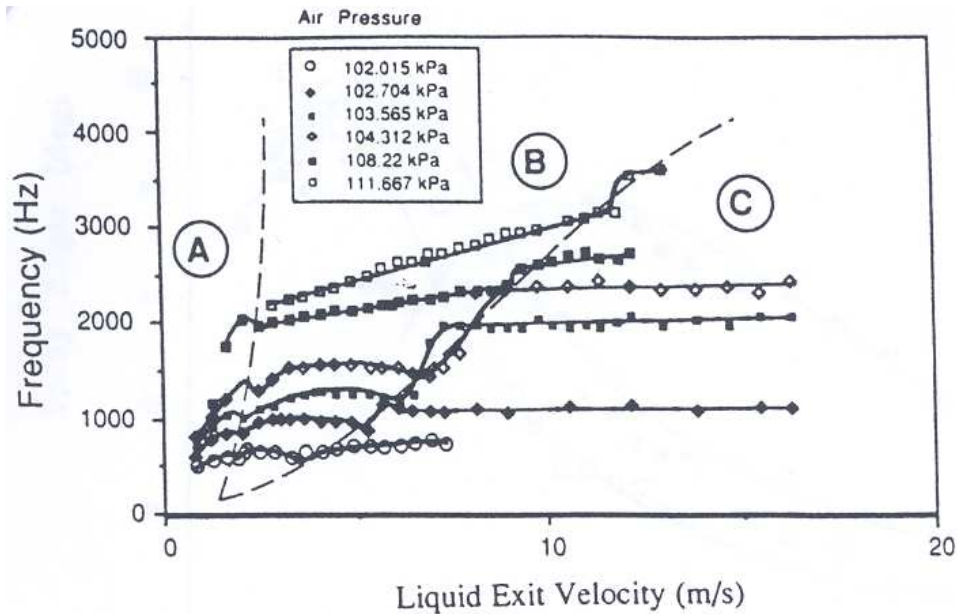


FIG. 10 – Diagramme des fréquences d'oscillation globale d'une nappe de liquide cisailée en fonction des vitesses débitantes de liquide et de gaz obtenu à partir des expériences de N.Chigier et al. [50]

Description des mécanismes de désintégration Afin de visualiser concrètement et d'expliquer plus en profondeur le régime correspondant à la zone B de Chigier, similaire au régime "cellular breakup" de Samuelsen, une photographie instantanée d'une expérience analogue à celles citées précédemment et réalisée en Thèse de doctorat par H.Carentz [9] à l'ONERA est présentée Fig(11). Dans un premier temps, le jet de liquide subit une instabilité de cisaillement de type Kelvin-Helmholtz provoquant la croissance rapide d'un mode sinueux, cette croissance étant tellement importante qu'elle provoque le battement de la nappe comme un drapeau au vent. Cette zone, couramment dénommée "atomisation primaire", correspond à l'initialisation du processus de désintégration. Nous pouvons remarquer sur la vue de côté que cette croissance se manifeste tout le long de l'atomisation du jet liquide, impliquant un lâché final intermittent de gouttes. Nous appellerons dorénavant ce phénomène l'oscillation globale de la nappe liquide.

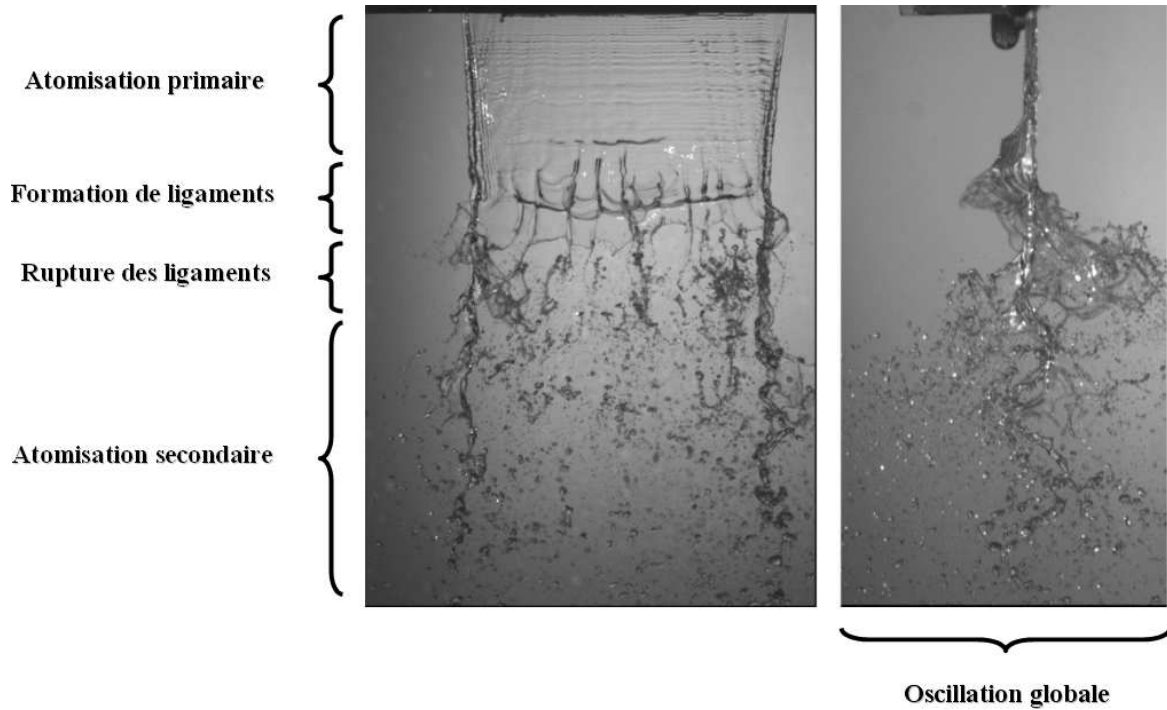


FIG. 11 – Expérience d’une nappe de liquide cisailée par un écoulement d’air porté à haute vitesse réalisée à l’ONERA par H.Carentz [9]. Le régime de désintégration correspond à la zone B définie par N.Chigier et al. [51]

Un peu plus en aval la zone d’atomisation primaire, le battement de la nappe est très certainement à l’origine de l’apparition d’ondes de déformation transverses au sens de l’écoulement. Sous l’action des forces aérodynamiques, ces ondes dégénèrent en ligaments régulièrement espacés dans la largeur de la nappe. Il a été établi une corrélation empirique [9] de la longueur d’onde qui varierait pour l’essentiel avec l’inverse de la fréquence de l’oscillation globale, les propriétés des fluides, comme la tension de surface, ayant également leur influence. La conjugaison de l’oscillation globale à l’onde transverse provoque la brisure de la nappe en paquets de liquide, sous forme de cellules. Enfin, dans un dernier temps, ces paquets de liquide subissent, toujours sous l’action de l’écoulement gazeux rapide, une seconde atomisation qualifiée de secondaire. La zone "d’atomisation secondaire" correspond au phénomène bien connu aujourd’hui de brisure de gouttes sous l’action d’un fort courant gazeux. il a été prouvé qu’elle dépend fortement du nombre de Weber aérodynamique, mesurant le rapport entre les forces de pression inertielles et la force capillaire.

Paramétrisation de l’oscillation globale L’une des premières corrélations mises en évidence par l’expérience est la dépendance linéaire de la fréquence de l’oscillation globale avec la vitesse du gaz. Cette variation linéaire est un fait aujourd’hui largement admis dans la communauté scientifique tant diverses expériences croisées ont toujours montré ce résultat. La dépendance vis à vis de la vitesse du liquide est quant à elle beaucoup plus faible. Par exemple, les expériences menées par Lozano et al. [47] illustrent ces dépendances en fonction des deux vitesses débitantes. Les résultats partiels sont répertoriés sur les graphes Fig.(12) pour différentes vitesses de gaz et de liquide.

Dans l’intention de dégager des nombres adimensionnels pertinents afin de caractériser le

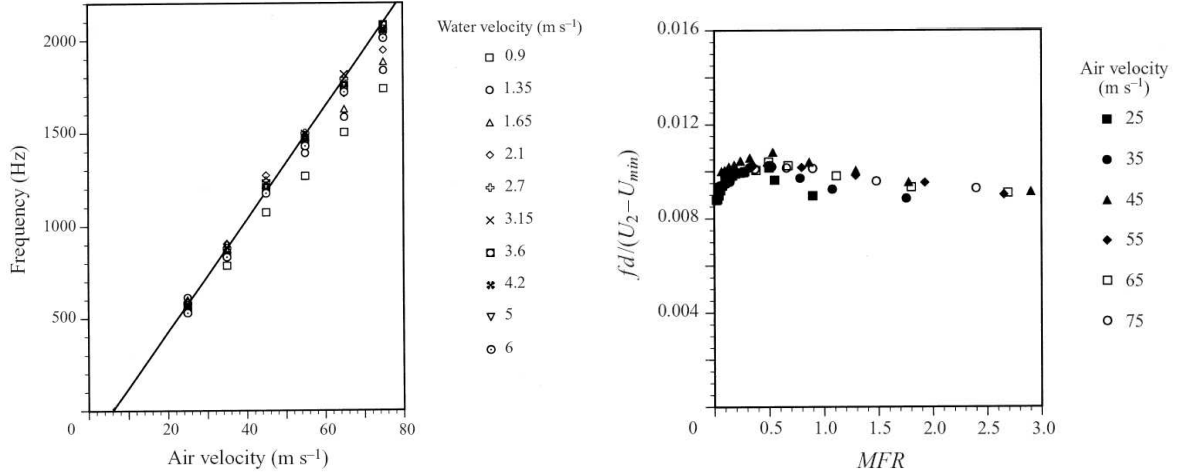


FIG. 12 – Graphes répertoriant les mesures expérimentales réalisées par Lozano et al. [47]; (à gauche) Fréquence f de l'oscillation globale pour différentes vitesses de gaz et de liquide; (à droite) Même points de mesures que le graphe de gauche mais pour des grandeurs adimensionnelles : la fréquence réduite f^* pour le rapport des flux de quantités de mouvement M

battement de la nappe, il a été établi [47, 9] que la fréquence réduite f^* de l'oscillation globale (similaire à un nombre de Strouhal) dépend fortement du rapport des flux de quantités de mouvement M Eq.(1). Cependant, l'expression de la fréquence réduite f^* diverge suivant les auteurs, Carentz [9] utilise la vitesse de liquide U_l dans la définition tandis que Lozano [47] utilise la vitesse du gaz U_g amputée d'une vitesse de gaz minimale U_{min} pour imprimer un battement à la nappe. Nous préférons ici la seconde expression qui non seulement est plus élégante mais semble mieux dimensionner le problème à la lecture du graphe de droite Fig.(12), répertoriant les mesures dans un système de coordonnées adimensionnalisées défini par le rapport des flux de quantité de mouvement M et la fréquence réduite f^* ,

$$M = \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l U_l^2} \quad (1)$$

$$f^* = \frac{f a}{U_g - U_{min}}$$

où a est l'épaisseur de la nappe liquide et U_{min} la vitesse de gaz minimale pour assurer l'existence du régime d'oscillation globale. La valeur de U_{min} dépend du débit liquide puisqu'elle est essentiellement dépendante du différentiel de vitesse entre le liquide et le gaz. On remarque immédiatement dans cette expression de la fréquence réduite l'influence de l'épaisseur de la nappe liquide sur la fréquence de l'oscillation globale. L'origine de cette dépendance est l'impact de la masse de liquide injectée sur l'oscillation de la nappe. Plus la nappe est épaisse plus elle est difficile à "bouger", car sa quantité de mouvement totale est plus importante, d'où la variation inverse de la fréquence avec l'épaisseur de la nappe liquide. Siegler et al. [9] ont réalisé une large

étude expérimentale sur ce sujet. Les auteurs y apportent une modification importante puisque la dépendance de la fréquence de l'oscillation globale avec l'inverse de l'épaisseur de la nappe liquide ne serait pas linéaire mais plutôt en racine carrée. Il est en toute logique proposé une modification de la définition de la fréquence réduite en introduisant la hauteur de la veine d'air de chaque côté de la nappe, que nous notons d ,

$$\begin{aligned} M &= \frac{\rho_g U_g^2 d}{\rho_l U_l^2 a} \\ f^* &= \frac{f \sqrt{a d}}{U_g - U_{min}} \end{aligned} \tag{2}$$

Cependant, les mêmes auteurs soulignent que la valeur de la fréquence réduite n'est pas identique en faisant varier la hauteur de veine d . Ceci montre que la hauteur de veine n'est pas la longueur caractéristique appropriée de l'écoulement d'air pour dimensionner le problème. En réalité, les couches limites qui se forment en aval sur les parois de l'injecteur ont une influence majeure sur la formation de l'onde primaire. La hauteur de veine ne peut caractériser correctement les couches limites d'air, la longueur de plaque est par exemple un paramètre beaucoup plus influent.

Influence de la couche limite Il est assez surprenant de trouver assez tardivement dans la littérature des études sur l'impact de la couche limite de gaz sur la naissance de l'instabilité sinueuse provoquant l'oscillation globale de la nappe. En effet, si l'on fait l'analogie avec les couches de mélanges monophasiques, les études devraient s'orienter naturellement sur une caractérisation complète de son influence. Il a en effet été prouvé dans le cas des couches de mélange monophasiques que l'épaisseur de vorticit  est le param tre le plus influent pour caract riser les  chelles des tourbillons qui se forment en aval de l'injection. Il est trop rare de trouver dans la litt rature scientifique lors de la pr sentation d'exp riences d'un jet liquide cisail  des mesures pr cises des profils de vitesse dans le gaz et le liquide, mais il est vrai que la dimension des  paisseurs, de l'ordre du millim tre, pose des probl mes de mesure. Nous pouvons toutefois trouver r cemment dans la litt rature quelques travaux originaux sur ce point. Ils traitent du sujet par une double approche, par l'exp rience et l' tude de stabilit . Les  tudes de Raynal [77], Lozano et al. [47] et de Marmottant [52, 53] tentent de faire la correspondance entre th orie de stabilit  et exp rience en prenant en compte un profil de vitesse r aliste avec inclusion de la viscosit  dans les  quations. Ces trois  tudes utilisent trois g om tries d'injection diff rentes, Lozano et al. la g om trie de la nappe liquide dont nous parlons jusqu'  pr sent, Raynal la g om trie d'une nappe liquide ruisselante suivant un plan fixe de l'un des c t s et enfin Marmottant la g om trie d'un jet cylindrique plein cisail  suivant son pourtour. Pour chacune des g om tries, il est conclu dans tous les cas que les  paisseurs des couches visqueuses de contact qui se forment en amont de l'injection par frottement sur les parois ont une influence majeure sur les  chelles des instabilit s. Sous peine de s' carter fortement de la r alit  des m canismes de d sint gration, ne pas les prendre en compte s'av re trop restrictif.

En se concentrant sur la configuration de la nappe liquide, il est donn  sur la Fig.(13) le profil de vitesse utilis  par Lozano et al. pour r aliser une  tude de stabilit  prenant en compte

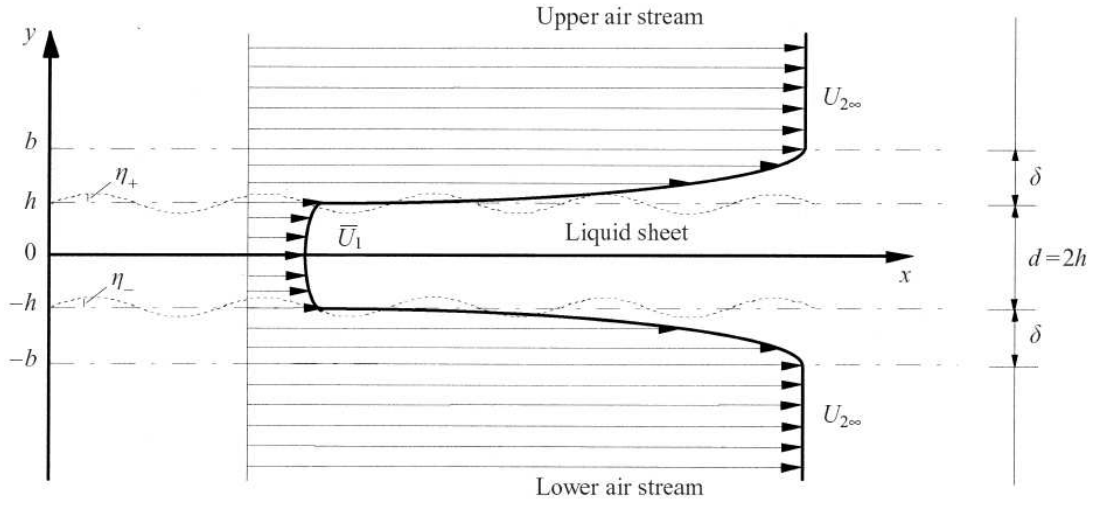


FIG. 13 – Profil de vitesse considéré par Lozano et al. [47] pour réaliser une étude de stabilité linéaire. Les profils sont des polynômes du second ordre dont les coefficients sont calculés afin de respecter l'ensemble des conditions de saut à l'interface. Cette étude a pour objet de démontrer l'impact des couches limites dans le gaz.

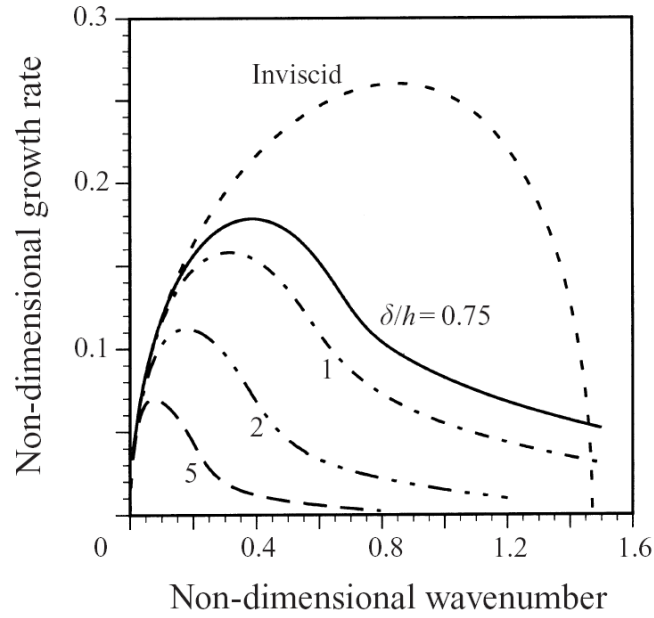


FIG. 14 – L'un des résultats de l'étude de stabilité réalisée par Lozano et al. [47]. Il donne le taux de croissance de l'onde sinusoïdale en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs épaisseurs de couche limite δ ainsi que le cas inviscide. Les vitesses débitantes de gaz et de liquide sont fixées telles que $U_1 = 2 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_g = 25 \text{ m.s}^{-1}$.

la viscosité et la formation des couches limites sur les parois de l'injecteur. Pour simplifier les calculs, des polynômes du second degré sont employés pour approcher les profils de vitesse non perturbés. Les coefficients des polynômes ont été calculés afin de respecter les conditions cinématique et dynamique à l'interface. L'un des résultats sur la Fig.(14) donne pour des quantités adimensionnalisées le taux de croissance de l'onde sinueuse en fonction de la longueur d'onde pour le cas inviscide et plusieurs épaisseurs de couche limite dans le gaz. Le résultat est suffisamment explicite pour comprendre toute l'influence de l'épaisseur de la couche limite sur les instabilités.

Il peut être observé qu'une augmentation de l'épaisseur de la couche limite provoque une diminution globale et importante du taux de croissance de l'onde primaire, ainsi qu'une diminution significative du nombre d'onde pour lequel le taux de croissance est maximum. Si l'on corrèle ce résultat avec la réalité expérimentale, où l'épaisseur de la couche limite est bien souvent de l'ordre de 5 demi épaisseurs de nappe voir plus, on comprend alors toute l'importance de la prise en compte des profils de vitesse dans le gaz et le liquide pour quantifier les instabilités qui croissent à la surface du liquide. Nous pouvons en conséquence en déduire que la valeur de la fréquence de l'oscillation globale, qui pilote les mécanismes de désintégration, est largement conditionnée par le déséquilibre des forces de surface qui s'exercent par le liquide et le gaz de chaque côté de la surface de la nappe. La force de cisaillement qu'exerce le gaz sur la surface de liquide dépend de la pente du profil de vitesse et de sa viscosité dynamique.

Dans un élan d'optimisme, nous pourrions émettre l'hypothèse qu'une telle étude de stabilité linéaire prenant en compte des profils de vitesse visqueux pourrait suffire à déterminer la fréquence de battement de la nappe dans des proportions raisonnables. Or, d'après les mêmes auteurs [47] comme le montre le graphe Fig.(15), les courbes obtenues expérimentalement sont bien différentes de celles issues de la théorie, même si la prédiction n'est pas aberrante (les fréquences prédites correspondent au taux de croissance maximum pour un couple de vitesse gaz/liquide tout en tenant compte de la variation de l'épaisseur de la couche limite dans le gaz suivant une loi $U_g^{-1/2}$). En conclusion, il nous reste bien du chemin à parcourir et il est certain que les études inviscides sont à totalement exclure.

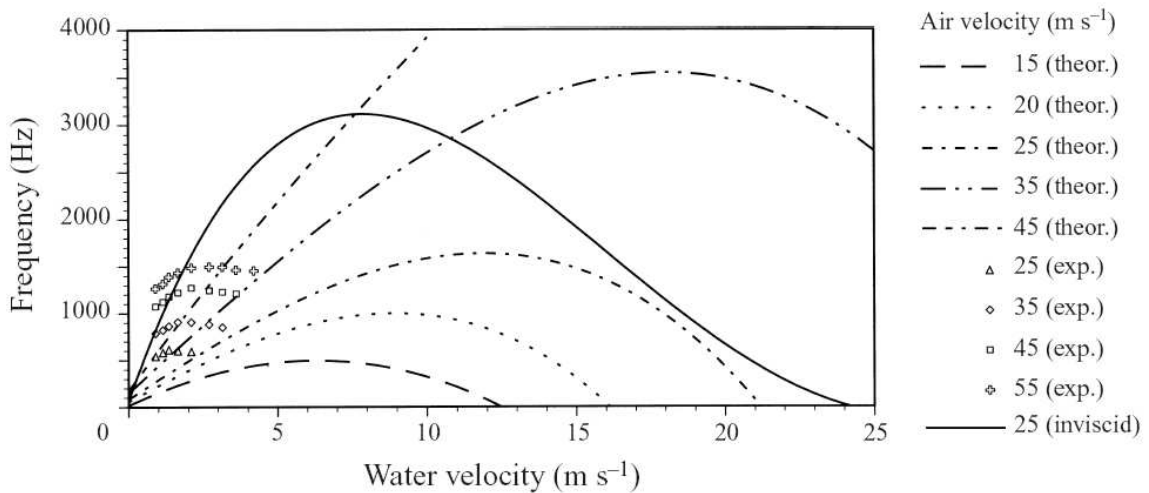


FIG. 15 – Prédictions numériques (théor.) de la fréquence d'oscillation globale en fonction de la vitesse débitante de liquide en comparaison de quelques points de mesure expérimentaux (exp.). Diagramme réalisé par Lozano et al. [47].

Formation des ligaments L'une des particularités des mécanismes de désintégration assistée d'un jet liquide est la formation quasi systématique de ligaments à la surface du jet. Ils peuvent être observés expérimentalement quelle que soit la géométrie de l'injecteur, sous forme plane, ronde ou creuse, à la condition d'un cisaillement suffisamment important de l'air environnant. Ces ligaments favorisent de façon conséquente la brisure du jet liquide. En effet, l'observation expérimentale nous indique qu'ils sont régulièrement espacés dans la direction transverse au sens de l'écoulement. En fait, les ligaments ne sont que la conséquence d'une dégénérescence d'une onde de déformation transverse sous l'effet d'une instabilité de type Rayleigh-Plateau. L'origine de cette onde de déformation transverse est encore aujourd'hui mal connue, elle résulte d'une modulation en épaisseur de la nappe liquide. Si l'on reprend le cas de la nappe liquide, H.Carentz [9] montre par exemple que si d'un côté l'oscillation globale provoque la brisure du jet dans la direction transverse, de l'autre côté les ligaments en font de même dans la direction longitudinale. Au final, la nappe se brise sous forme de cellules conformément aux observations de Stapper et Samuelsen [94]. Ces paquets subissent une atomisation secondaire un peu plus en aval toujours sous l'effet de l'air cisailant, d'où l'intérêt de connaître la taille de ces cellules. Il est donc nécessaire de caractériser l'espacement entre les ligaments en fonction des conditions amont.

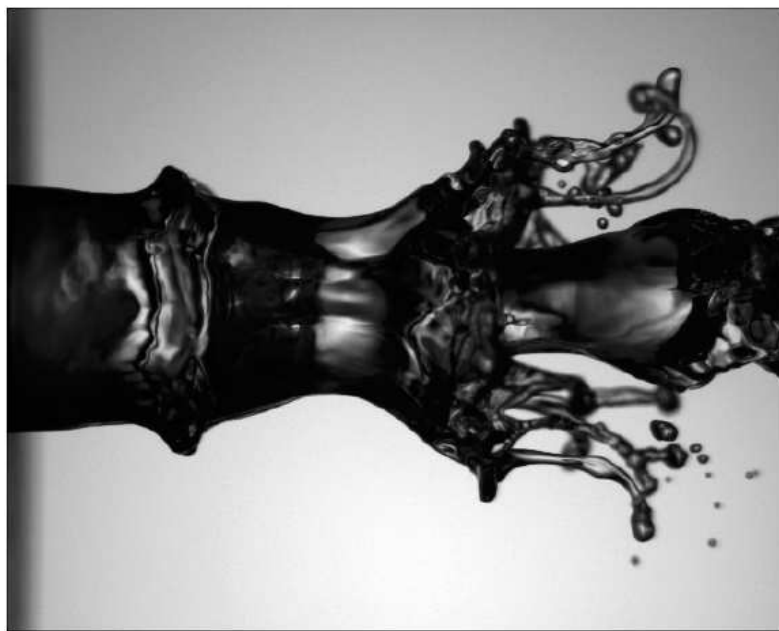


FIG. 16 – Formation de ligaments lors du cisaillement d'un jet cylindrique plein ; expérience réalisée par P.Marmottant et E.Villermaux [53]

Un certain nombre de résultats sont disponibles dans la littérature scientifique, accompagnés la plupart du temps de l'émission d'un certain nombre d'hypothèses sur l'explication de leur formation. Ils sont essentiellement issus d'une caractérisation expérimentale, mais également de quelques "tentatives" d'études de stabilité linéaire. La première constatation la plus évidente est que le nombre de ligaments augmente avec la vitesse de gaz, en étant toujours régulièrement espacés dans la direction transverse à l'écoulement. Il reste cependant à déterminer avec certitude dans quelle proportion, autrement dit de déterminer la puissance de variation de la longueur entre ligaments en fonction de l'inverse de la vitesse de gaz. Une telle mesure peut permettre de déterminer si l'origine de la modulation de l'épaisseur de la nappe liquide est liée à une déstabi-

sation transverse de l'instabilité primaire responsable de l'oscillation globale d'une nappe mince de liquide. Or, comme le montre P.Marmottant [52, 53], les puissances de variation des longueurs d'ondes de l'oscillation primaire et de l'instabilité transverse sont différentes. Ce résultat tend donc à prouver que la formation des ligaments est une conséquence de l'oscillation primaire par la manifestation d'une instabilité différente. Il a également été montré que la tension de surface a une influence avérée sur la longueur entre les ligaments, ce qui n'est pas vraiment le cas pour l'oscillation primaire. Cette dépendance vis à vis de la capillarité confirme que les instabilités longitudinales et transverses sont différentes.

Partant de cette constatation, Villermaux et al. [53] ont cherché à déterminer quel est le type d'instabilité qui se développe transversalement, provoquant ainsi une modulation du jet cisailé et la formation de ligaments, sachant qu'elle est forcément une conséquence de l'oscillation primaire due à une instabilité de cisaillement de type Kelvin-Helmholtz. Ils montrent que la vitesse de propagation des ondes à la surface du liquide est supérieure à la vitesse au centre du jet. Ce différentiel de vitesse provoque une accélération des particules fluides tantôt dirigée vers l'air et tantôt vers le liquide. La surface est donc potentiellement instable au sens de Rayleigh-Taylor, ce qui conduit à la formation d'ondes transverses. Cette démonstration est en accord avec la dépendance de l'onde transverse avec la tension de surface puisqu'elle est présente dans la relation de dispersion d'une instabilité de Rayleigh-Taylor. Elle est également en adéquation avec le fait que les ligaments ne se manifestent que pour de larges amplitudes de l'oscillation primaire. Les conclusions de thèse de N.Bremond [7] vont également dans ce sens alors qu'il a repris la configuration expérimentale de F.Savart. La collision normale d'un jet rond sur un cylindre solide pouvant osciller verticalement supprime tout effet de bord.

3 L'outil numérique

3.1 Pourquoi un tel outil ?

La CFD pour "Computational Fluid Dynamics" est l'application particulière de l'outil numérique à l'étude de la dynamique des fluides, qu'ils soient liquide ou gazeux, ou bien même les deux conjugués comme dans notre cas d'étude. Le champ d'investigation est ainsi au moins aussi vaste que celui de la mécanique des fluides elle-même. La manoeuvre consiste à trouver une solution discrète approchée aux équations de Navier-Stokes, avec éventuellement et même très certainement des hypothèses simplificatrices. En effet, l'outil mathématique n'est pas aujourd'hui en mesure de nous donner une solution analytique excepté des cas spéciaux et simplistes, les choses auraient été bien trop simples ... Autant la précision des données de mesures issues de l'expérience dépend de la qualité et de la technicité des outils utilisés, autant la précision d'une solution numérique dépend fortement de la qualité de la discrétisation, autrement dit de la qualité des schémas et méthodologies numériques utilisés dans le sens mathématique du terme.

L'étude des écoulements de fluides a longtemps été confinée à l'expérience et à l'analyse de stabilité. L'outil numérique apporte ainsi une troisième voie d'étude complémentaire. Si au début des années 80, ce domaine était quasi réservé à la recherche et peu au développement de solutions industrielles, la tendance a largement évolué avec l'arrivée de codes de simulation commerciaux comme FLUENT ou StarCD. La puissance des super calculateurs toujours de plus en plus importante est aussi un paramètre essentiel dans cette évolution. On obtiendra une solution discrète approchée d'autant plus précise que le maillage utilisé sera d'autant plus fin. Il est nécessaire d'avoir à l'esprit que doubler le nombre de cellules de discrétisation dans chaque direction revient à multiplier le nombre total de cellules par 2^3 . Les temps de calcul étant approximativement linéairement dépendant du nombre de cellules, ils peuvent devenir très rapidement extrêmement

coûteux. Or, l'évolution des puissances de calcul est telle aujourd'hui qu'elle est multipliée d'une décade tous les 4 ans Fig.(18). Une ère nouvelle pour la simulation numérique va certainement voir le jour dans un proche avenir. Les calculs tridimensionnels d'écoulements instationnaires commencent à être de l'ordre du réalisable avec des techniques numériques toujours de plus en plus sophistiquées.

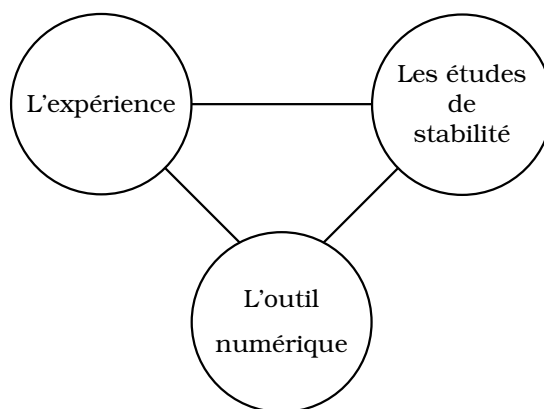


FIG. 17 – Les trois outils à la disposition de l'industriel ou du chercheur pour l'étude de la dynamique des fluides

Que ce soit les industriels, pour dimensionner de nouvelles technologies, ou les chercheurs, pour comprendre les mécanismes de la physique des écoulements, les trois outils que sont l'expérience, l'analyse de stabilité et l'outil numérique deviennent aujourd'hui tous nécessaires et complémentaires. Les besoins de finesse de compréhension toujours de plus en plus importants et les difficultés propres de mise en oeuvre de chacun des domaines expliquent que l'avenir de la recherche et du développement industriel réside dans la conjonction des trois axes d'étude. On éprouve dans certaines circonstances des difficultés à réaliser des expériences, elles sont même parfois impossibles. La réalisation d'une expérience peut se heurter à des problèmes d'échelle d'observation, d'accès aux mesures ou encore d'intrusion active sur l'écoulement d'instruments. Les analyses de stabilité sont quant à elles systématiquement limitées à des cas simplifiés d'étude en raison de la longueur et la lourdeur croissantes des équations avec la prise en compte de modèles plus réalistes. La prise en compte de la viscosité amène par exemple à la résolution des équations de Orr-Sommerfeld, qui ne possèdent pas de solution analytique. Ensuite, les études de stabilité sont valables uniquement pour de petites déformations d'un état de base et ne mettent en évidence que l'origine des instabilités et non leur évolution sur un temps long où les déformations sont très importantes et tortueuses. Elles occultent en quelque sorte une certaine vérité dans les mécanismes de la dynamique des fluides.

Le problème qui nous est posé, la désintégration assistée d'un jet liquide, illustre parfaitement la potentialité de la simulation numérique pour faire évoluer la compréhension des mécanismes de désintégration. On a pu voir qu'il est très difficile de réaliser une étude de stabilité pour la configuration d'une nappe de liquide cisailée ou pas tant les hypothèses sont souvent trop restrictives. La prise en compte des effets de capillarité, de viscosité et de non linéarité rendent difficile l'étude analytique des instabilités hydrodynamiques qui croissent à la surface d'un jet. Il n'est pas rare de faire appel à l'outil numérique pour obtenir la solution d'une étude de stabilité. Ensuite, l'expérience se heurte à des problèmes d'accès aux mesures dû à la présence éclatée de liquide interdisant l'utilisation de laser par exemple. Malgré tout, ces deux domaines ont fait avancer de manière spectaculaire la connaissance et la maîtrise des formations de sprays liquides



FIG. 18 – Graphe de l'évolution au cours des dernières années des performances cumulées des super calculateurs, et perspectives de développement (www.top500.org)

même si beaucoup de points restent obscurs. L'outil numérique peut amener une lumière nouvelle pour au moins trois raisons. La première est la prise en compte d'un minimum d'hypothèses. Sous réserve de la convergence du calcul, le résultat s'approchera grandement de la réalité. La deuxième raison est la souplesse d'utilisation d'un tel outil pour les paramètres initiaux de calculs, comme les propriétés physiques des fluides. Tout comme les études de stabilité, on peut accéder aisément à une étude paramétrique, et nous savons que les paramètres influents ne manquent pas pour l'atomisation assistée d'un jet liquide. Enfin, une fois la simulation obtenue et stockée en mémoire, et grâce à un logiciel de post-traitement performant, l'utilisateur aura un accès immédiat à toutes les visualisations et mesures voulues. Elles peuvent même être assez complexes, ou tout du moins impossibles à obtenir expérimentalement. En conclusion, la liberté est a priori totale, sous réserve de la convergence du calcul, donc de l'addition de schémas numériques de qualité avec des temps de calcul raisonnables.

3.2 Quelques exemples sur les mécanismes de brisure

Ce paragraphe a pour objectif de présenter brièvement quelques travaux numériques qui ont déjà été réalisés jusqu'à présent sur le thème de la désintégration d'un liquide. Le nombre de travaux que l'on peut trouver dans la littérature scientifique est assez exhaustif, particulièrement depuis l'arrivée sur le marché des codes de simulation commerciaux, et le développement massif de nouvelles techniques numériques prometteuses pour capter l'évolution spatio-temporelle de la surface de séparation entre un liquide et un gaz au début des années 80 : les méthodes numériques de suivi d'interface. Nous sommes par conséquent dans l'impossibilité de tous les citer mais nous tenterons d'illustrer la potentialité des simulations en donnant les plus représentatives d'entre-

eux. Les trois principales méthodes de suivi d'interface pour simuler le phénomène de brisure d'un jet liquide sont ici représentées : la méthode de Front-Tracking, la méthode VOF et la méthode Level-Set. Toutes ces méthodes sont présentées et critiquées dans le chapitre concerné dans ce mémoire de thèse. Nous n'effectuerons pas ici une comparaison des différentes méthodes mais nous nous concentrerons exclusivement sur l'intérêt de ce type de méthode numérique pour simuler les phénomènes de fragmentation d'un liquide. Nous présenterons également brièvement les quelques conclusions issues de ces simulations quant à la physique des instabilités de surface de séparation de type fluide/fluide.

Simulations de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz

Une bonne partie des études numériques concernant la désintégration d'un liquide sont des simulations bidimensionnelles de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz. Une surface initialement plane séparant deux fluides inviscides s'écoulant dans des directions opposées est instable au sens de l'analyse des modes normaux. Les simulations sont dites périodiques : suivant un domaine de calcul rectangulaire, les conditions aux limites droite et gauche traduisent la périodicité par translation de l'écoulement dans le sens horizontal. Cette situation est donc tout à fait adaptée pour perturber un écoulement de base par une onde dont la longueur est un multiple de la largeur de la boîte, comme on pourrait le faire lors d'une étude de stabilité.

L'écoulement de base varie suivant les auteurs : S.Zaleski et al. [116, 115] emploie une fonction *erfc* plus proche de la réalité en comparaison de la considération d'écoulements uniformes dans chacun des fluides comme le fait G.Tryggvason [109]. L'influence de la forme du profil de vitesse est évidemment importante dans le développement de l'instabilité, mais quel qu'il soit, les bases du mécanisme sont toujours les mêmes. Des deux travaux que nous venons de citer, les conclusions apportées sont similaires. Afin d'explicitier les bases du mécanisme de développement d'une instabilité de type Kelvin-Helmholtz, ils effectuent une étude paramétrique en faisant varier le rapport de densité, les Reynolds ainsi que le Weber pour des temps de simulation tels que l'instabilité soit dans une phase très fortement non linéaire. Premièrement, il est montré qu'un différentiel de densité et de viscosité cinématique entre les fluides provoque une disymétrisation rapide des écoulements dans chacun d'entre eux. La vorticit  qui est cr  e   l'interface est advect  e au sommet de la vague, vers le fluide le plus l  ger, avant qu'elle ne se d  place dans le creux. Ce ph  nom  ne est essentiellement pilot   par le nombre de Reynolds dans le fluide l  ger, m  me si la capillarit   a aussi son importance. Secondement, de part cet effet, des ligaments de fluide lourd peuvent  ventuellement se former si le Weber n'est pas trop petit, comme pour les simulations Fig.(19,20). Par la suite, la diffusion visqueuse du profil de vitesse cisailant et l'action de la capillarit   limitent la croissance de l'instabilit   jusqu'  m  me ramener le ligament vers le fluide lourd. La tension de surface d  termine la forme des ligaments et peut m  me provoquer sa brisure. Plus le Weber est important, plus le ligament sera fin.

Si ces simulations ont le m  rite de mettre en lumi  re la dynamique de l' coulement gazeux en interaction avec le d  veloppement rapide d'une forte courbure de l'interface, les ligaments qui se forment sont bien diff  rents de ceux que l'on peut observer lors de l'atomisation d'un jet liquide cisail  . En effet, comme nous l'avons expliqu  , ces ligaments sont issus d'une d  stabilisation transverse d'une instabilit   primaire. Ils sont arrach  s par le biais d'une instabilit   de type Savart-Plateau-Rayleigh, seules des simulations tridimensionnelles peuvent mettre   jour ce ph  nom  ne. Les simulations pr  sent  es Fig.(21,22) illustrent ce ph  nom  ne ligamentaire alors que l'on retrouve la "plissure" similaire   ce que nous avons appel   ligaments pour les simulations bidimensionnelles.

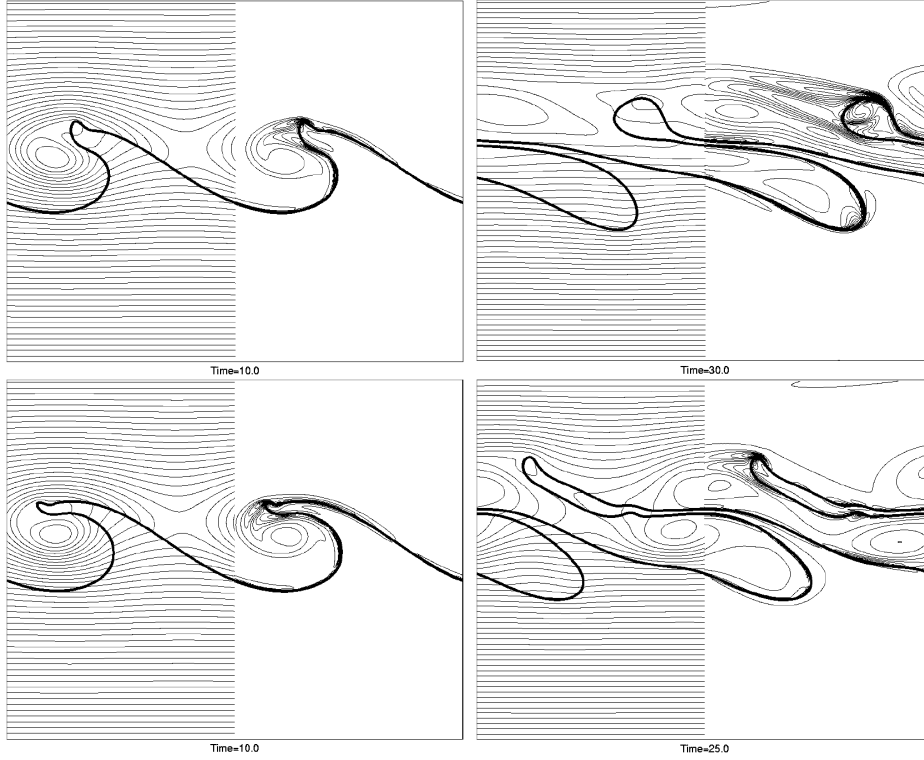


FIG. 19 – Simulation d’une instabilité de type Kelvin-Helmholtz avec une méthode Front-Tracking par G.Tryggvason et W.Tauber [109]; ratio de densité de 10, le fluide lourd noté 1 étant situé en bas; $Re_1 = 5000$ et $Re_2 = 1000$; (en haut) $We = 5$; (en bas) $We = 10$; (à gauche) l’interface et les contours de la fonction courant; (à droite) l’interface et les contours du champ de vorticit 

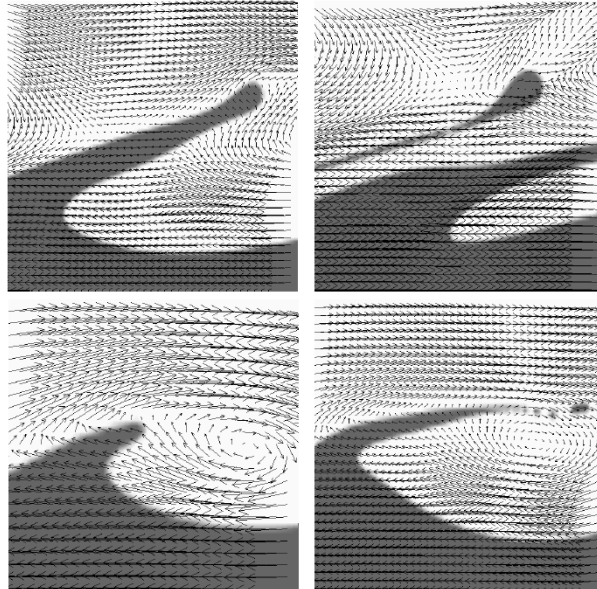


FIG. 20 – Simulation d’une instabilité de type Kelvin-Helmholtz avec une m thode VOF par S.Zaleski et al. [116]; pour le fluide lourd situ  en bas, $Re = 1000$ et pour le fluide l ger, $Re = 4000$; (en haut) $We = 500$; (en bas) $We = 4000$

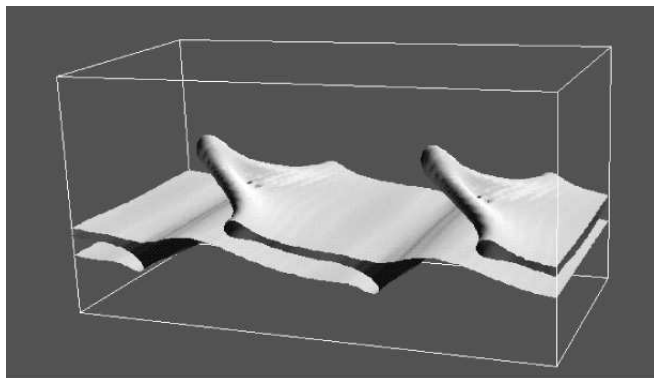


FIG. 21 – Simulation d’une instabilité de Kelvin-Helmholtz avec une méthode VOF par J.Lie [42]

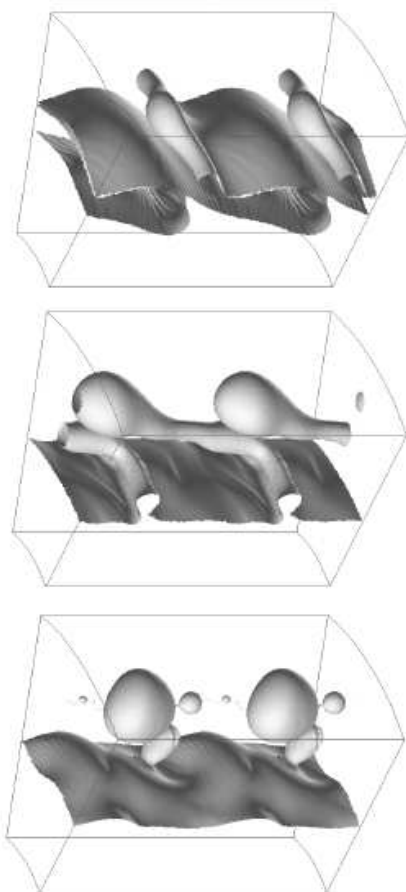


FIG. 22 – Simulation d’une instabilité de Kelvin-Helmholtz avec une méthode de Front-Tracking par G.Tryggvason et al. [107, 108]

Simulations de la désintégration assistée d'une nappe mince liquide

Les travaux numériques de E.Lopez-Pages et al. [45] sont bien plus intéressants quant à l'étude des mécanismes de désintégration d'un jet liquide en comparaison des simulations de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz. Ils ont directement réalisé des simulations bidimensionnelles spatiales de la désintégration assistée d'une nappe mince de liquide par deux courants gazeux de part et d'autre, la configuration de calcul ayant été conçue telle qu'elle soit la plus réaliste possible. Malgré le caractère tridimensionnel des déformations clairement observé expérimentalement, ces simulations rendent compte d'une certaine réalité des phénomènes en mettant en évidence les instabilités longitudinales responsables de l'oscillation globale de la nappe de liquide. Elles permettent d'accéder à la dynamique de l'écoulement gazeux cisaillant qui est en forte interaction avec les larges déformations de la nappe, ce qui est difficile à réaliser expérimentalement du fait de la difficulté d'utiliser les instruments de mesure traditionnels à cause de la présence éclatée de liquide. Il est donné Fig.(23) un exemple de simulation où l'on s'aperçoit qu'il est considéré une large épaisseur de séparation entre les écoulements gazeux et liquide en sortie de l'injecteur virtuel. La conséquence est la création rapide de vorticités de part et d'autre de la nappe juste au niveau de la sortie de l'injecteur par décollement de la couche limite gazeuse. Il est proposé une étude de l'impact de cette vorticités sur la fréquence de battement de la nappe.

En l'absence de liquide, en remplaçant celui-ci par de l'air, il est montré que l'écoulement gazeux provoque par le biais d'une instabilité de cisaillement similaire à la formation des allées de Von-Karman derrière un cylindre l'apparition de structures tourbillonnaires dont la fréquence est bien supérieure à celles de battement d'une nappe de liquide dans les mêmes conditions. Cela montre le caractère couplé entre les battements de la nappe et la dynamique tourbillonnaire de l'écoulement gazeux. Les rôles dans le développement de l'instabilité primaire de paramètres comme les nombres de Reynolds du gaz et du liquide, l'épaisseur de la plaque de séparation entre le liquide et le gaz ou la tension de surface sont étudiés en faisant varier chacun d'entre eux.

Autres simulations

Le laboratoire du CORIA à Rouen est très actif pour développer des méthodes de suivi d'interface afin de simuler la désintégration assistée d'un jet liquide, ou plus généralement tout phénomène de rupture de jet, dans des conditions turbulentes ou d'interface réactive vis à vis de la thermique. Il a été développé au sein de ce laboratoire des codes de simulation bidimensionnel, tridimensionnel et axisymétrique similaires à celui présenté dans ce mémoire. Basé sur les méthodes Level-Set/Ghost-Fluid, ce code a permis de simuler avec succès la coalescence et rupture de gouttes [101] en les comparant à des expériences (http://www.coria.fr/article.php?id_article=180).

Il est présenté par ailleurs sur la Fig.(24) deux simulations toujours réalisées avec le même code du CORIA Rouen (http://www.coria.fr/article.php?id_article=181). Les deux premières images à gauche représentent la simulation de la rupture d'un jet très rapide turbulent de diesel s'apparentant à un injecteur pression. Il est absolument nécessaire pour une telle configuration de prendre en compte un profil de vitesse turbulent. La seconde image à droite représente la simulation de la rupture d'un jet d'eau rond swirlé. Ces deux simulations montrent très bien toute la potentialité d'un tel code de calcul quant à la simulation de la désintégration d'un jet liquide assistée ou pas.

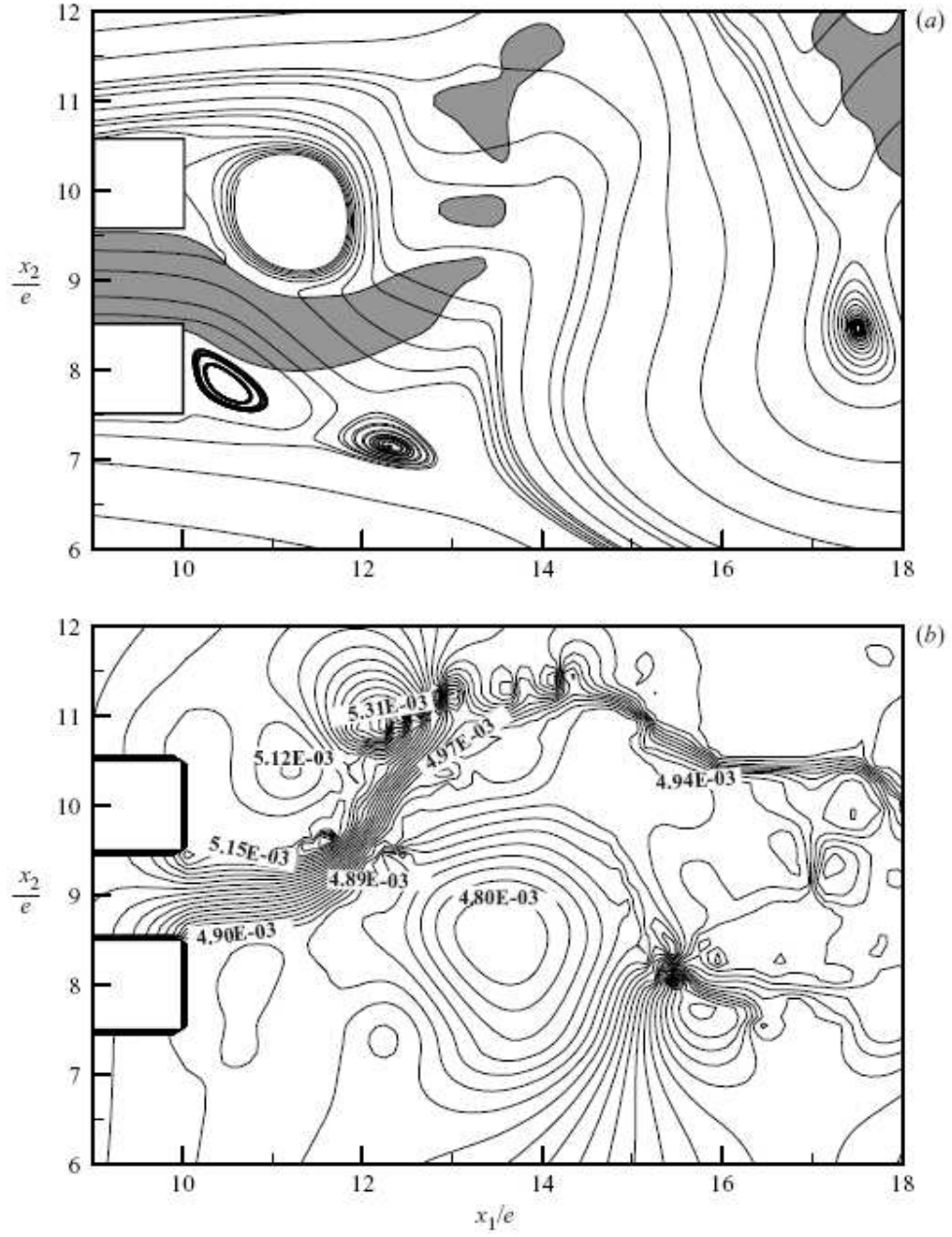


FIG. 23 – Simulation bidimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide par E.Lopez-Pages [45]



FIG. 24 – Deux simulations réalisées par A.Berlemont et S.Tanguy de la rupture d'un jet liquide à l'aide des méthodes Level-Set et Ghost-Fluid; (à gauche) un jet très rapide turbulent de diesel avec $\rho_l = 696 \text{ kg.m}^{-3}$, $\rho_g = 25 \text{ kg.m}^{-3}$, $V_l = 100 \text{ m.s}^{-1}$, $V_g = 0 \text{ m.s}^{-1}$, $u'/U = 0.05$ et un maillage $64 \times 64 \times 256$; (à droite) un jet d'eau swirlé avec $\rho_l = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$, $\rho_g = 1.3 \text{ kg.m}^{-3}$, $V_{max} = 19 \text{ m.s}^{-1}$ et un maillage $64 \times 64 \times 256$.

4 Plan du mémoire

Le mémoire est logiquement divisé en deux grandes parties : une première sur le développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements diphasiques à phases non miscibles et une seconde concernant l'application du code développé à la simulation de la désintégration assistée d'une nappe liquide par un courant gazeux de part et d'autre. Chacune de ces deux parties s'adresse à un public pouvant être différent l'un de l'autre, la première partie pouvant très bien s'adresser à des numériciens ne connaissant rien ou presque de la phénoménologie de fragmentation d'un liquide et inversement la seconde partie à des expérimentateurs ne s'intéressant pas à la CFD. Elles peuvent se lire de façon indépendante.

La première partie commence par la présentation dans un chapitre du modèle physique utilisé pour simuler la désintégration assistée d'une nappe liquide par un courant gazeux. Il y est fait un certain nombre d'hypothèses sur les fluides que nous justifions.

Le modèle employé nécessite l'utilisation d'une méthode de suivi d'interface à travers laquelle la solution discrète respecte des conditions de saut. Il existe beaucoup de méthodes et nous répertorions et critiquons les principales d'entre elles dans un chapitre afin de justifier le choix final de la méthode Level-Set.

Dans un nouveau chapitre, la méthode Level Set est exposée en détails dont l'implémentation numérique associée à la résolution de l'équation de transport hyperbolique et l'équation de redistanciation de type Hamilton-Jacobi. Il est mesuré et critiqué à travers la réalisation des cas tests les performances de la méthode de suivi d'interface développée. Nous passons également en revue les méthodes permettant d'assurer la conservation de la masse non intrinsèque à la méthode Level Set.

Le traitement numérique de conditions de saut à la traversée d'une interface fait l'objet du chapitre suivant. Il y est présenté en longueur les méthodes CSF et Ghost Fluid avec l'implémentation numérique associée.

Un cinquième chapitre commence par la présentation d'une méthode de projection permettant la résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles monophasiques, les performances du solveur obtenu sont évaluées. Nous montrons par la suite comment y greffer le traitement des conditions de saut à la traversée de l'interface capturée par la Level-Set à l'aide des méthodes CSF et Ghost Fluid. La méthode MGCG d'inversion de matrice et la parallélisation du code de calcul nécessaires à la rapidité des simulations sont également exposées.

Le dernier chapitre de la première partie répertorie un grand nombre de cas tests de validation du solveur développé. Ce nombre volontairement important est relié à l'idée de fournir une base de données afin que le lecteur puisse effectuer des comparaisons avec son propre code de simulation, en rapport avec les techniques numériques qui ont été utilisées ici.

Conformément aux visualisations expérimentales de la désintégration assistée d'une nappe de liquide, notre application numérique se divise en deux parties dans deux chapitres différents : un premier concernant les instabilités longitudinales responsables de l'oscillation globale de la nappe liquide et un second concernant les instabilités transverses responsables de la formation de ligaments à la surface de la nappe.

Les conclusions et perspectives issues de la présente étude sont formulées dans un dernier chapitre.

Première partie

Développement d'un solveur DNS pour des écoulements diphasiques à phases non miscibles

Chapitre 1

Le modèle physique

Sommaire

1.1 Les équations de Navier-Stokes incompressibles	31
1.1.1 Définition de la particule fluide	31
1.1.2 Conservation de la masse	32
1.1.3 Conservation de la quantité de mouvement	32
1.1.4 Hypothèses sur les fluides	33
1.2 Les conditions de saut pour une interface de type fluide/fluide	34
1.2.1 Concept d'interface	34
1.2.2 Capillarité	34
1.2.3 Conditions de saut pour une interface en mouvement	35
1.3 Modèle final	36

Nous allons exposer au travers de ce chapitre le modèle physique qui a été employé afin de simuler le phénomène de désintégration assistée d'un jet liquide. Ce modèle devra bien évidemment respecter au mieux la physique du mécanisme en tenant compte rigoureusement des principaux phénomènes physiques responsables de l'atomisation. La surface de séparation liquide/gaz est par exemple le siège de forces diverses comme la force capillaire. Cette force joue un rôle important voir majeur dans les mécanismes de désintégration d'un jet liquide. Les propriétés thermodynamiques mais également de viscosité des fluides considérés ont une influence non négligeable sur ces mécanismes. Cependant, il est bien nécessaire de faire quelques hypothèses, dans le cas contraire, le modèle serait d'une telle complexité qu'il nous serait très difficile de trouver une solution numérique.

1.1 Les équations de Navier-Stokes incompressibles

1.1.1 Définition de la particule fluide

L'écoulement que l'on veut étudier est constitué de gaz et de liquide. Pour ces deux états thermodynamiques, la matière est constituée dans la majorité des cas de molécules identiques, avec plus ou moins de cohérence dans les liaisons intermoléculaires. La particularité de ces deux états est que le milieu matériel peut se déformer de façon importante sans perte de cohésion, il s'écoule en tendant à occuper le maximum de place. Nous ne ferons pas de distinction particulière entre un liquide et un gaz, et adapterons la définition plus générale de fluide. Ainsi, un fluide est un corps simple, composé d'une assemblée de molécules identiques, en phase liquide ou gazeuse.

Pour étudier l'écoulement d'un fluide, il se pose un problème d'échelle d'observation. En effet, à l'échelle microscopique, celle de l'atome, on ne peut ignorer les fortes fluctuations des propriétés physiques d'un fluide d'un point à l'autre de l'espace. Il en va de même pour les vitesses des molécules. Si on se place à une échelle supérieure, une approche macroscopique nous permet de considérer des volumes locaux d'étude contenant un très grand nombre de molécules, où l'ensemble des fonctions de l'écoulement évoluent lentement avec l'espace, elles sont moyennées sur un grand nombre de molécules. Les mouvements individuels des molécules sont ainsi ignorés pour plutôt s'intéresser au mouvement d'ensemble.

La particule fluide se définit comme un élément de fluide dont le volume est suffisamment grand pour contenir un très grand nombre de molécules, et suffisamment petit devant les dimensions caractéristiques de l'écoulement. Lorsque le modèle de particule fluide est applicable, il est possible de décrire le fluide comme un milieu continu. On considère que la matière est continûment répartie, ce qui permet de définir une valeur locale pour les fonctions de l'écoulement. Nous considérerons que nous sommes toujours dans ce cas dans le reste de ce mémoire.

1.1.2 Conservation de la masse

En adoptant le modèle de particule fluide, les champs des fonctions de l'écoulement peuvent s'exprimer comme une fonction des variables d'espace et du temps $(\mathbf{x}, t)$. C'est la description eulérienne et c'est celle que nous adopterons.

Considérons à un instant t un élément de fluide quelconque, de volume V et de surface S , contenant un ensemble fini de particules fluides, fixe par rapport au système de coordonnées utilisé. En l'absence de réaction chimique, la variation par unité de temps de sa masse totale est opposée au flux sortant à la surface S . Soit,

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho \, dV = - \iint_S \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dS \quad (1.1)$$

Où $\mathbf{n}$ est le vecteur normal unitaire à la surface S et orienté vers l'extérieur. En appliquant le théorème d'Ostrogradski au membre de droite, nous obtenons,

$$\iiint_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) dV = 0 \quad (1.2)$$

Le volume V étant quelconque et le milieu continu, nous obtenons l'équation locale de la conservation de la masse,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1.3)$$

1.1.3 Conservation de la quantité de mouvement

De la même manière, on considère un élément de fluide de volume V et de surface S , à la différence que l'élément suit ses déplacements. On peut appliquer la relation fondamentale de la dynamique qui nous dit que la variation temporelle de la quantité de mouvement de l'élément de fluide est égale à la somme des forces qui s'exercent sur cet élément,

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho \mathbf{u} \, dV = \iiint_V \rho \mathbf{f} \, dV + \iint_S \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} \, dS \quad (1.4)$$

Le tenseur $\mathbf{T}$ prend en compte l'ensemble des forces de surface tandis que les forces de volume, comme la gravité, sont prises en compte par la fonction vectorielle $\mathbf{f}$. La dérivée lagrangienne est calculée dans un référentiel qui suit le mouvement de l'élément de fluide. Pour revenir à une description eulérienne, on utilise la définition de la dérivée particulaire,

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \quad (1.5)$$

En appliquant le théorème d'Ostrogradski et le concept de milieu continu, de la même manière que pour la conservation de la masse, nous obtenons l'équation locale de la conservation de la quantité de mouvement,

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \mathbf{f} \quad (1.6)$$

1.1.4 Hypothèses sur les fluides

Nous venons d'écrire les deux lois de conservation qui définissent les équations de Navier-Stokes sous leur forme la plus générale. Pour l'écoulement que l'on veut étudier, la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux, nous pouvons faire quelques hypothèses simplificatrices. Tout d'abord, que ce soit dans le gaz ou le liquide, nous pouvons considérer que les fluides sont incompressibles. La masse volumique est donc constante. Cette hypothèse se justifie par le fait que les vitesses locales de l'écoulement sont toujours largement inférieures à la vitesse du son. Cependant, nous pouvons émettre des doutes sur la réalité d'une telle hypothèse lorsque du liquide emprisonne du gaz. Une telle situation mérite certainement de plus amples investigations sur la validité du modèle. L'Eq. (1.3) peut se réécrire sous la forme simplifiée,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.7)$$

Ensuite, il est nécessaire d'exprimer le tenseur des contraintes $\mathbf{T}$, tenseur exprimant les forces de surface s'exerçant sur l'élément de fluide. Dans un fluide en mouvement, on distingue deux types de forces : une contrainte isotrope due à la pression du fluide, identique à la pression au sens thermodynamique du terme, et une contrainte anisotrope due à la viscosité du fluide. Cela revient à écrire la composante $\mathbf{T}_{ij}$ du tenseur comme suit,

$$\mathbf{T}_{ij} = -p \delta_{ij} + \mathbf{D}_{ij} \quad (1.8)$$

Nous nous plaçons dans l'hypothèse des fluides qualifiés de newtoniens, où les composantes du tenseur des contraintes visqueuses $\mathbf{D}_{ij}$ dépendent linéairement des valeurs instantanées des déformations $\mathbf{e}_{ij}$. Si l'on suppose la non compressibilité des fluides comme nous l'avons fait précédemment, l'expression des composantes du tenseur des contraintes de déformation visqueuses se réduit à,

$$\mathbf{D}_{ij} = 2 \mu \mathbf{e}_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.9)$$

1.2 Les conditions de saut pour une interface de type fluide/fluide

Les équations locales de conservation suffisent à déterminer le mouvement d'un fluide. Cependant, il nous faut encore écrire les conditions aux limites du problème et en particulier modéliser la physique de la zone de séparation entre deux fluides.

1.2.1 Concept d'interface

Nous faisons l'hypothèse de fluides immiscibles, c'est à dire que les fluides ne se mélangent pas. Dans ce cas, la zone de séparation se réduit à une zone de très faible épaisseur, de l'ordre de l'échelle de l'atome. Cette épaisseur est largement négligeable, d'autant plus que l'on travaille sous l'hypothèse de la particule fluide. La zone de séparation se résume alors à une surface à travers laquelle les propriétés des fluides changent brutalement. Mathématiquement, on appelle cette surface de séparation une interface. Pour un espace d'étude de dimension $n+1$, une interface est un objet de dimension n qui délimite l'espace en un nombre fini de sous-espaces. En utilisant ce concept d'interface, il nous est plus aisé d'exprimer les variations qui existent dans la zone de séparation entre deux fluides sous la forme de conditions de saut. Il nous reste maintenant à déterminer ces conditions de saut.

1.2.2 Capillarité

Les molécules d'un fluide exercent les unes sur les autres des forces de type Van Der Waals pour assurer la cohésion du milieu. Les forces exercées par chaque molécule sont équilibrées par celles des molécules voisines. Chaque fluide possède sa propre énergie associée aux liaisons moléculaires. Lorsqu'on introduit une interface entre deux fluides, l'équilibre est rompu dans la direction de l'interface. Ce phénomène explique l'existence d'une force de surface pour assurer l'équilibre énergétique de cohésion moléculaire. Cette force de surface porte plusieurs noms : la force capillaire, la tension de surface ou encore la tension superficielle.

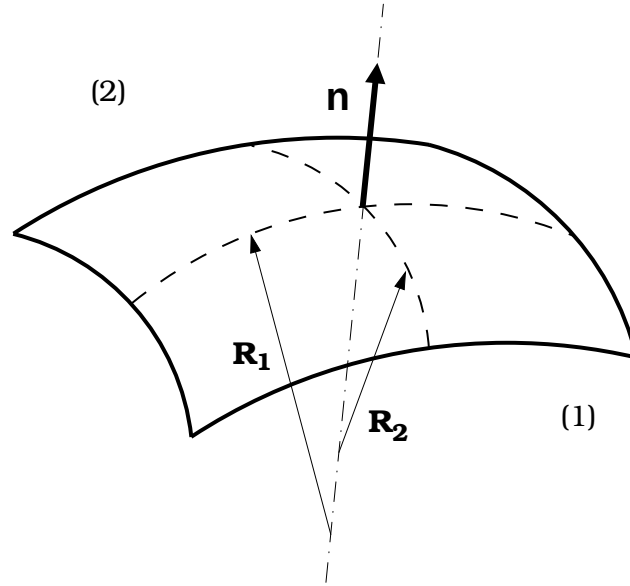


FIG. 1.1 – Géométrie de la surface de séparation entre deux fluides (1) et (2) permettant de définir les rayons de courbure principaux

Cette force a pour effet de minimiser l'aire de l'interface afin de minimiser le déficit énergétique. En l'absence de gravité, la forme sphérique d'une goutte est ainsi la surface minimale pour un volume de liquide donné. Si l'on considère une surface de séparation quelconque, la loi de Laplace s'écrit :

$$p_1 - p_2 = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = \sigma \kappa \quad (1.10)$$

où R_1 et R_2 sont les rayons de courbure principaux en un point considéré sur la surface Fig.(1.1), κ la courbure associée et σ le coefficient de tension de surface, dont la valeur est directement reliée à la différence énergétique des liaisons intermoléculaires entre deux fluides. Cette loi traduit le fait que pour rétablir l'équilibre des forces, il existe une surpression du côté de la concavité de la surface, la tension de surface étant dans le sens opposé. Une goutte ou une bulle sont en surpression par rapport à l'environnement extérieur.

1.2.3 Conditions de saut pour une interface en mouvement

Lorsqu'une interface de type fluide/fluide est en mouvement, les conditions de saut diffèrent de la loi de Laplace car l'on doit tenir compte de l'action des forces surfaciques visqueuses dépendantes dans l'hypothèse des fluides newtoniens des contraintes de déformation. Le tenseur des contraintes $\mathbf{T}$ exprime l'ensemble des forces surfaciques,

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot [\mathbf{T}] \cdot \mathbf{n} &= \sigma \kappa \\ \mathbf{t} \cdot [\mathbf{T}] \cdot \mathbf{n} &= 0 \end{aligned} \quad (1.11)$$

où $[T] = T_1 - T_2$ exprime le saut entre les fluides numérotés (1) et (2), la normale $\mathbf{n}$ étant orientée de (1) vers (2) Fig.(1.2). Dans le cas des fluides réels, les contraintes de viscosité interdisent le glissement d'un fluide par rapport à l'autre,

$$[\mathbf{u}] = \mathbf{0} \quad (1.12)$$

il est à noter la conséquence de la condition d'équilibre de la contrainte tangentielle s'exerçant sur l'interface. Dans le cas particulier de la Fig.(1.2) où la vitesse est localement parallèle à la tangente à l'interface et fonction de la normale, l'équilibre des forces visqueuses à l'interface s'exprime par la condition suivante,

$$\mu_1 \frac{\partial (\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{t})}{\partial n} = \mu_2 \frac{\partial (\mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{t})}{\partial n} \quad (1.13)$$

Comme il est schématisé sur la Fig(1.2), elle se traduit par une discontinuité sur la dérivée du profil de vitesse à la traversée de l'interface.

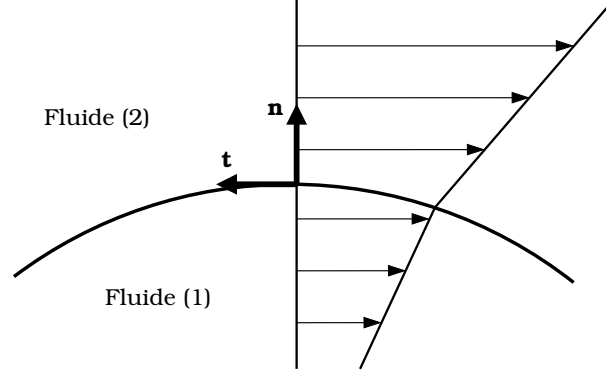


FIG. 1.2 – Représentation graphique d'un profil de vitesse typique à la traversée de l'interface en conséquence du respect de l'équilibre des forces visqueuses

1.3 Modèle final

On considère un espace de calcul $\Omega \in \mathbb{R}^{2,3}$, union de deux sous-espaces quelconques Ω_1 et Ω_2 tel que Γ soit l'interface de séparation Fig(1.3). Chacun des sous-espaces est associé à un fluide dont les propriétés physiques respectives varient d'un espace à l'autre. On note ainsi ρ_i la masse volumique et μ_i la viscosité dynamique avec $i = 1, 2$. Comme présenté au paragraphe 1.2.1, l'hypothèse d'immiscibilité des fluides nous permet bien de concevoir cette interface, surface de séparation infiniment mince entre deux fluides. On a ainsi la possibilité de considérer des conditions de saut à travers celle-ci.

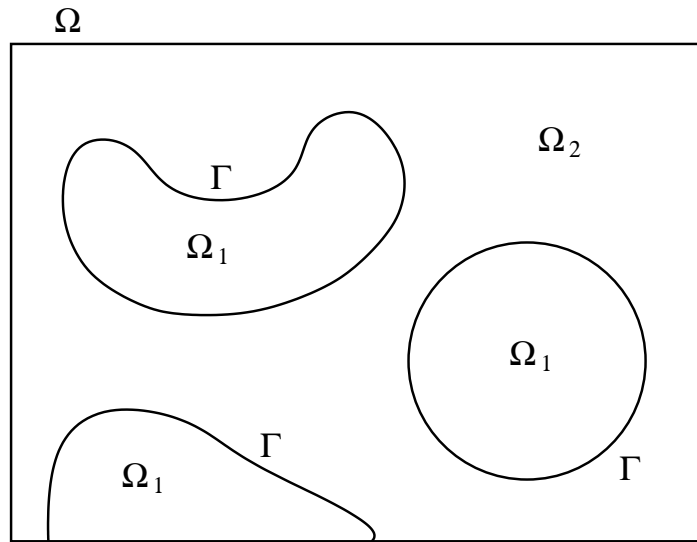


FIG. 1.3 – Γ est l'interface de séparation de deux sous-espaces quelconques Ω_1 et Ω_2 tel que $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Gamma$

Les fluides sont considérés comme newtonien, à l'intérieur de chaque sous domaine propre Ω_i , le couple $(\mathbf{u}_i, p_i)$ est solution des équations de Navier-Stokes incompressibles¹,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u}_i &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial t} + (\mathbf{u}_i \cdot \nabla) \mathbf{u}_i &= -\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i + \frac{\mu_i}{\rho_i} \nabla \cdot (\nabla \mathbf{u}_i + (\nabla \mathbf{u}_i)^t) + \mathbf{f}_i \end{aligned} \quad (1.14)$$

À la traversée de l'interface Γ , les mêmes couples $(\mathbf{u}_i, p_i)$ respectent des conditions de saut en conséquence des effets de capillarité et de viscosité,

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot [p \mathbf{I} - \mu (\nabla \mathbf{u}_i + (\nabla \mathbf{u}_i)^t)] \cdot \mathbf{n} &= \sigma \kappa \\ \mathbf{t} \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u}_i + (\nabla \mathbf{u}_i)^t)] \cdot \mathbf{n} &= 0 \end{aligned} \quad (1.15)$$

Avec respect de l'interdiction de glissement d'un fluide par rapport à l'autre,

$$[\mathbf{u}] = 0 \quad (1.16)$$

Sous réserve de résoudre correctement ce problème numériquement, le modèle construit est tel qu'une solution convergente sera réaliste vis à vis du phénomène de désintégration d'un jet liquide. Ce modèle restera suffisamment acceptable lorsque les vitesses ne seront pas trop importantes, bien en dessous de la vitesse du son dans chacun des deux fluides. Cependant, comme nous l'avons déjà noté, on peut émettre un doute quant à la validité du modèle lors de la situation bien particulière où le liquide emprisonne du gaz vis à vis de l'hypothèse d'incompressibilité du gaz mais ce n'est jamais le cas pour l'ensemble des simulations présentées dans ce mémoire.

Le modèle de résolution numérique qui sera adopté est un modèle dit à un fluide, où la solution dans chaque fluide n'est pas recherchée de manière indépendante mais bien de façon couplée. Le concept d'interface et de conditions de saut doit rester strict, ce qui interdit toute diffusion numérique importante de l'interface. Nous devons en conséquence la suivre, c'est l'objet du chapitre suivant, exposant les diverses méthodes de suivi d'interface.

¹ $\mathbf{f}_i$ est une force de volume qui peut être a priori quelconque même si elle représente souvent l'effet de la gravité

Chapitre 2

Les méthodes de suivi d’interfaces

Sommaire

2.1 Introduction	39
2.1.1 Critères de qualité	39
2.1.2 Les classes de méthodes	40
2.2 Les méthodes lagrangiennes	41
2.2.1 Marqueurs de volume	41
2.2.2 Marqueurs de front	42
2.2.3 Adaptation de maillage	43
2.3 Les méthodes eulériennes	44
2.3.1 Méthode VOF	44
2.3.2 Méthode Level-Set	47
2.4 Choix de la méthode	47

Une interface est une variété délimitant un espace en un nombre fini de sous-espaces de même dimension comme représenté sur la Fig.(1.3). A travers cette interface, la solution du problème recherchée respecte dans la majorité des cas des conditions de saut. Un front de flamme ou une onde de choc peuvent être assimilés par exemple à une interface si l’on suppose que les changements physiques d’un espace à l’autre se font suivant une épaisseur infiniment fine. Les problèmes avec interface sont donc nombreux et pas seulement en mécanique des fluides, on peut par exemple citer le traitement de l’image qui fait largement appel à ce concept. Ainsi, les domaines d’application des méthodes de suivi d’interface sont vastes et variés, elles ont logiquement suscitées un vif intérêt. Depuis les travaux originaux et précurseurs de Harlow et Welsch [27] datant du milieu des années 60, un nombre conséquent de méthodes ont été développées. Nous allons présenter dans ce chapitre les principales d’entre elles et nous verrons qu’elles possèdent toutes un agrément particulier et nous justifierons l’utilisation de l’une d’entre elles.

2.1 Introduction

2.1.1 Critères de qualité

Avant de présenter les principales méthodes de suivi d’interface, nous allons exposer les multiples problèmes auxquels nous sommes confronté lorsqu’on cherche à localiser et à suivre une interface sur un maillage quelconque [35].

- En tout premier lieu, l'interface est totalement arbitraire, sa topologie peut être plus ou moins complexe. Une méthode doit posséder la faculté de localiser le plus finement possible l'interface sur un maillage quelconque donné, et en particulier en dessous de l'échelle de la maille car c'est à cette échelle que se mesure la qualité d'une méthode. Cette capacité est fondamentale pour imposer précisément à une solution discrète des conditions de saut sur la grille de calcul.
- Non seulement l'interface peut avoir une topologie complexe, mais elle peut être également en mouvement. La nécessité de la suivre dans le temps est le caractère qui pose le plus de difficultés. En effet, cette dynamique implique que sous certaines conditions l'interface peut subir dans le temps de multiples connexions et ruptures, le nombre de sous-espaces peut très largement évoluer au cours du temps. La gestion de ces phénomènes n'est pas évidente à réaliser et nécessite dans la majorité des cas l'emploi d'une méthode dite eulérienne comme nous le verrons par la suite.
- Une autre conséquence directe et purement numérique du suivi de l'interface est la conservation de la masse. Si l'on commet des erreurs sur le mouvement local de l'interface, les répercussions peuvent être globales puisque l'on peut perdre ou gagner sur la taille initiale d'un sous-espace qui théoriquement doit rester fixe.
- Ensuite, nous devons pouvoir calculer le plus facilement et le plus précisément possible les propriétés géométriques de l'interface, comme la normale ou la courbure. Le calcul de ces propriétés est dans bien des cas indispensable voir fondamental, comme lorsqu'on veut imposer une condition de saut suivant la normale à l'interface.
- Enfin, la méthodologie, qui est généralement initialement développée pour un espace bi-dimensionnel, doit être facilement extensible au cas tridimensionnel, ce qui est loin d'être toujours le cas.
- Nous pouvons également rapidement évoquer la capacité de garder strict le concept d'interface (pas de diffusion de celle-ci), la capacité de s'adapter facilement à tout type de maillage, la possibilité de pouvoir localiser et suivre plus de deux fluides sans complications majeures, d'être facilement implémentable pour les novices et d'être performante en terme de coût de calcul, ou encore pour finir le potentiel de la méthode quant à de futures extensions au modèle et améliorations de la performance.

Pour les écoulements diphasiques, il est important de souligner le caractère rétroactif de l'interface et des conditions de saut associées sur l'écoulement. De la qualité du suivi de l'interface et de la capacité à imposer le plus finement possible les conditions de saut dépendra la qualité de la simulation de l'écoulement diphasique, donc de l'ensemble des critères que nous venons d'exposer.

2.1.2 Les classes de méthodes

On distingue deux grandes classes de méthodes pour la capture spatio-temporelle des interfaces, les méthodes dites lagrangiennes, et les méthodes dites eulériennes ².

Pour les méthodes lagrangiennes, des marqueurs ou particules sans masse sont advectés passivement par le champ de vitesse local suivant l'équation suivante,

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{u}_i \quad (2.1)$$

²On ne les classifie pas toujours de la façon qui est présentée

où $\mathbf{x}_i$ est le vecteur définissant la position du i ème marqueur et $\mathbf{u}_i$ la vitesse de l'écoulement en ce même point (vitesse qui est interpolée sur un maillage). Ces marqueurs servent à la localisation de l'interface et la manière dont est réalisée cette opération distingue les méthodes appartenant à cette classe. Grossièrement, soit ils indiquent la présence ou non d'un fluide au point $\mathbf{x}_i$, soit une chaîne les reliant l'un à l'autre par des droites ou des morceaux de courbes définit l'interface elle-même. L'interface est dans ce cas explicitement capturée.

Pour les méthodes eulériennes, plutôt que de transporter des marqueurs, on s'intéresse à une quantité scalaire discrète. De la même manière, ce scalaire est transporté par le champ de vitesse local. La capture est cette fois implicite puisque l'interface est reconstruite à partir de ce scalaire. Nous allons voir de quelle manière nous pouvons définir une telle quantité scalaire.

2.2 Les méthodes lagrangiennes

2.2.1 Marqueurs de volume

Dans le milieu des années 60, Harlow et Welsch [27] ont introduit pour la toute première fois une méthode capable de suivre dans le temps une interface, c'est la méthode MAC pour "Marker and Cells" ³. La méthode était limitée aux écoulements à surface libre, ce qui limite le champ d'investigation au mouvement d'une seule phase, le mouvement de la seconde étant considéré comme négligeable. Cependant, le concept était tout à fait novateur.

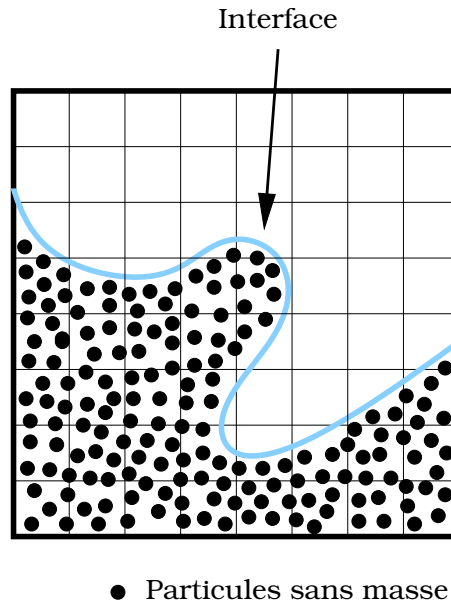


FIG. 2.1 – Schématisation de la méthode des marqueurs de volume MAC de Harlow et Welch [27]

Une grille fixe est utilisée pour simuler le mouvement d'un fluide qui n'en occupe qu'une partie, partie délimitée par la surface libre. Des marqueurs sont distribués uniformément dans la phase dont l'on veut suivre le mouvement comme sur la Fig.(2.1). Ces marqueurs sont transportés par le champ de vitesse local interpolé suivant l'Eq.(2.1). La localisation de l'interface sur la grille

³Il existe souvent une confusion dans la littérature entre la méthode MAC pour "Marker and Cells" et le maillage MAC

est limitée à la présence ou non de marqueurs d'une cellule à l'autre du maillage. L'extension de cette méthode MAC aux écoulements diphasiques a été réalisée par Daly [19]. Il a ainsi pu simuler l'instabilité de Rayleigh-Taylor, simulation que nous avons réalisée et que nous verrons un peu plus tard dans ce mémoire.

La gestion dans le temps des ruptures et reconnections de l'interface est correcte avec cette méthode, tout comme la conservation de la masse. Cependant, elle nécessite un très grand nombre de marqueurs en comparaison du nombre de points de discrétisation du champ hydrodynamique, ce qui peut être pénalisant en terme de temps de calcul (le stockage en mémoire étant tout de même aujourd'hui moins gênant que le temps de calcul). Ils doivent cependant être régulièrement redistribués pour assurer un minimum d'homogénéité, c'est là où commence les difficultés. Il n'est pas du tout rare que l'écoulement tende à fortement concentrer les marqueurs, ou au contraire à les disperser en des zones bien précises. Enfin, le principal inconvénient de cette méthode est de taille puisque la localisation de l'interface n'est pas connue avec précision, l'accès aux propriétés géométriques locales de l'interface est plus que délicat. La qualité de la discrétisation des sauts à l'interface en est forcément affectée. En conclusion, si le concept était novateur, cette méthode est aujourd'hui quasiment obsolète car elle est peu performante sur bien des points.

2.2.2 Marqueurs de front

Après avoir développé l'extension de la méthode MAC pour traiter les écoulements diphasiques, Daly [20] a continué ses travaux imaginatifs en proposant de distribuer les marqueurs non pas dans le fluide mais sur l'interface elle-même. Les marqueurs sont ici connectés entre eux par des segments de droite ou des polynômes dits "splines" qui peuvent être de degré plus ou moins important en fonction de la finesse de description que l'on désire. Ils forment ainsi une ou des chaînes de marqueurs qui peuvent être fermées ou pas, comme schématisé Fig.(2.2).

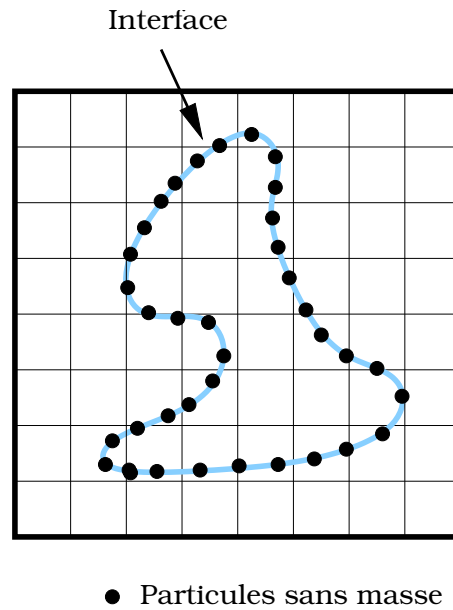


FIG. 2.2 – Schématisation de la méthode des marqueurs de front

L'énorme avantage de cette méthode est que la position de l'interface est connue instantanément et avec précision puisque bien en dessous de l'échelle de la maille associée au champ hydrodynamique. La finesse de la localisation de l'interface sur un maillage qui peut être tout

à fait quelconque permet ainsi de construire une discrétisation précise des conditions de saut à l'interface.

Cette technique pose malheureusement plusieurs problèmes. Tout comme les marqueurs de volume, une redistribution régulière est nécessaire afin d'assurer une bonne répartition en chaque instant des marqueurs sur l'interface. Le problème le plus épineux reste que les connexions et ruptures de l'interface ne se font pas naturellement et nécessitent l'intervention d'algorithmes complexes, coûteux et relativement arbitraires.

Enfin, l'extension au cas tridimensionnel n'est pas immédiate. Partant du constat que les marqueurs connectés entre eux constituent un maillage de l'interface indépendant de celui du champ hydrodynamique, Tryggvason et al. [110] ont développé une méthode de marqueurs de front dans le cas tridimensionnel. Les marqueurs ne sont plus connectés par des polynômes mais définissent un maillage bidimensionnel constitué de triangles.

2.2.3 Adaptation de maillage

Dans le cas des marqueurs de front, les marqueurs distribués sur l'interface définissent un maillage qui diffère de celui du champ hydrodynamique. Il peut paraître judicieux de faire coïncider les deux maillages [49]. Les sauts à l'interface coïncideraient ainsi avec les frontières de la maille. Les valeurs discrètes de la solution recherchée sont définies directement sur l'interface, permettant une prise en compte très précise des conditions de sauts.

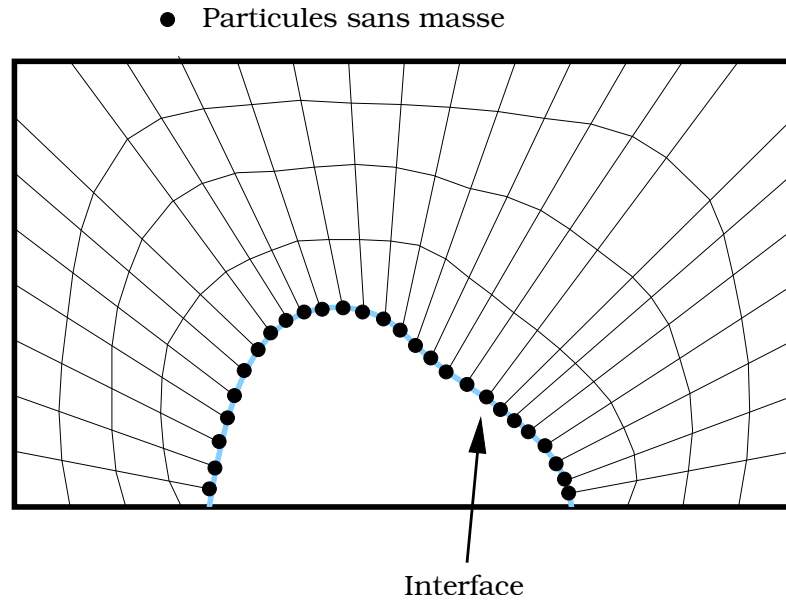


FIG. 2.3 – Schématisation de la méthode d'adaptation de maillage

Cependant, l'interface étant en mouvement, il est nécessaire d'utiliser un maillage mobile, ce qui peut s'avérer complexe et coûteux, spécialement lorsque l'interface subit des déformations importantes. De plus, on garde l'inconvénient des marqueurs de front, pour ne pas dire les amplifier bien plus encore, de gestion de l'homogénéité de répartition des marqueurs sur l'interface (et donc des points du maillage hydrodynamique) ainsi que de gestion des ruptures et connexions.

2.3 Les méthodes eulériennes

2.3.1 Méthode VOF

La méthode VOF pour "Volume of Fluid" est la première méthode de suivi d'interface utilisant le concept de transport d'un champ scalaire qui ait été développée. Durant la fin des années 70 et le début des années 80, une série de travaux pionniers a jeté les bases de la méthode. On peut notamment citer les travaux de DeBar [21], Noh et Woodward [58] ou Hirt et Nichols [30]. De nombreuses améliorations ont depuis été apportées, une large synthèse a été réalisée par Pilliod et Puckett [67]. L'idée originale et fondatrice est d'utiliser un champ scalaire dans le but d'assurer convenablement et sans complications majeures le traitement des ruptures et connexions de l'interface. Un scalaire est capable de respecter facilement cette propriété du fait de sa nature implicite vis à vis de l'interface.

La fonction couleur

Il est possible de définir de façon triviale une fonction caractéristique continue afin de déterminer la position d'une interface dans le temps. Dans le cas de méthode VOF, elle est définie comme suit : elle vaut 1 dans un fluide et 0 dans l'autre, nous la noterons χ . Tout comme les marqueurs, elle est advectée passivement par le champ de vitesse local, elle est solution d'une équation de transport équivalente à l'équation de conservation de la masse,

$$\partial_t \chi + \mathbf{u} \cdot \nabla \chi = 0 \quad (2.2)$$

Le lieu de la discontinuité détermine la position de l'interface. Si l'on considère un maillage cartésien uniforme bidimensionnel de pas Δx et Δy , nous pouvons définir l'équivalent discret de la fonction caractéristique χ que nous noterons C pour fonction couleur tel que,

$$C_{i,j} = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \iint_{(i,j)} \chi(x, y) \, dx \, dy \quad (2.3)$$

Si le champ de vitesse est à divergence nulle, nous obtenons immédiatement la formulation conservative de l'équation de transport de la fonction couleur,

$$\partial_t C_{i,j} + \nabla \cdot (\mathbf{u} C_{i,j}) = 0 \quad (2.4)$$

Lorsque l'interface coupe une cellule, la valeur de $C_{i,j}$ est telle que $0 < C_{i,j} < 1$. En haut de la Fig.(2.4) est donné un exemple de fonction couleur, elle correspond à une interface représentant une portion de cercle. L'Eq.(2.4) de transport de la fonction couleur est une loi de conservation hyperbolique, on peut se référer au vaste nombre de schémas qui ont été développés pour discrétiser ce type d'équation. En particulier, une discrétisation conservative de l'équation permet d'assurer la conservation de la masse, sous réserve d'imposer la contrainte $0 < C_{i,j} < 1$.

Toutefois, dans la majorité des cas, l'Eq.(2.4) n'est pas discrétisée directement car la fonction couleur est discontinue et le traitement numérique de l'advection d'une discontinuité est un problème délicat en plus des problèmes éventuels de conservation de la masse. Sous l'effet de la diffusion numérique, la discontinuité se lisse avec le temps. Pour contourner ce problème, on

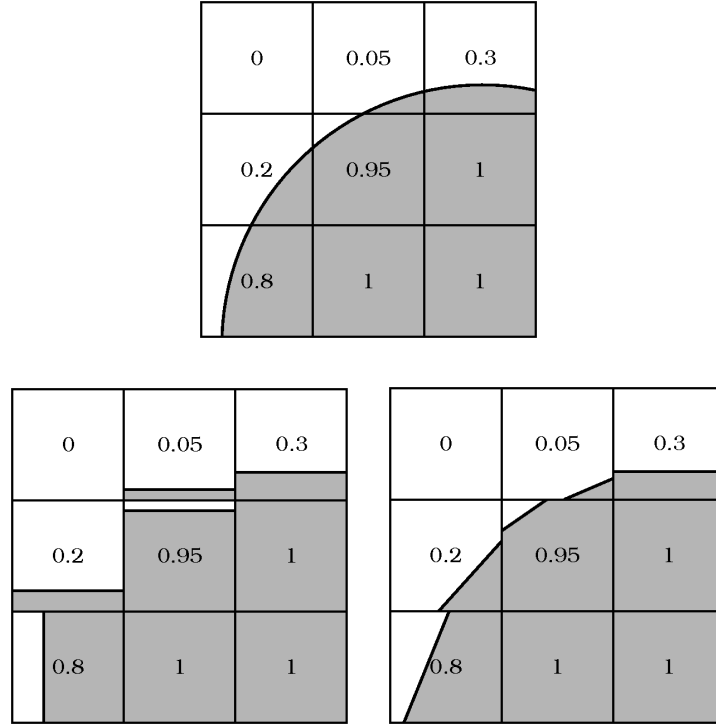


FIG. 2.4 – Principe de la méthode VOF ; (en haut) Interface réelle et fonction couleur associée ; (en bas à gauche) classe de méthodes SLIC pour reconstruire l'interface ; (en bas à droite) classe de méthodes PLIC pour reconstruire l'interface

préfère souvent reconstruire l'interface afin de construire des flux numériques grâce à des considérations géométriques locales assurant ainsi la conservation de la masse. Au delà de ce choix, il est de toute manière nécessaire dans bien des situations de calculer la normale à l'interface pour appliquer des conditions de saut dans le système de coordonnées associé. Les algorithmes de reconstruction approchent l'interface de manière linéaire, à l'intérieur de chaque cellule. L'interface est représentée par un segment de droite, ces algorithmes sont donc équivalents à trouver la normale. On s'assure dans tous les cas que le volume défini par le segment de droite correspond au volume donné par la fonction couleur. Les algorithmes de reconstruction de l'interface ont fait l'objet d'améliorations successives au fil des deux dernières décennies de développement des méthodes VOF. Les algorithmes initiaux étaient relativement rudimentaires, comme la méthode SLIC [58], les plus récents sont plus sophistiqués et beaucoup plus précis, comme la méthode ELVIRA [66]. De la qualité de la reconstruction associée à une discrétisation conservative de l'équation d'advection dépendra la qualité de la méthode.

Les algorithmes de reconstruction

Pour la classe de méthodes SLIC pour "Simple Line Interface Calculation", l'interface est reconstruite dans chaque cellule par un segment de droite parallèle à l'une des directions du maillage comme en bas à gauche de la Fig.(2.4). Il existe plusieurs variantes qui peuvent dépendre du nombre de cellules voisines que l'on utilise dans les opérateurs de différenciation, Noh et Woodward [58] utilisent un bloc 3x1 tandis que Chorin [12] un bloc 3x3.

La méthode SLIC s'avère malheureusement insuffisante dans la pratique, il est préférable de représenter l'interface par un segment de droite non nécessairement parallèle au maillage,

comme en bas à droite de la Fig.(2.4), en étroite relation avec le calcul la normale à l'interface. C'est ce que l'on appelle la classe de méthodes PLIC, elle sont utilisées dans les solveurs VOF modernes. Il existe un grand nombre d'algorithmes permettant de déterminer la pente du segment de droite. Elles utilisent toutes un bloc 3x3 de cellules voisines pour déterminer la normale en son centre. Pour la méthode "center of mass", de Saltzman [80], on détermine le centre de masse en considérant que les fluides ont une densité respective de 0 et de 1, la normale n pointe du centre de la cellule vers le centre de masse. Parker et Young [63] utilisent directement le gradient de la fonction couleur pour déterminer la normale tel que $n \propto \nabla C$. Les méthodes LVIRA [73] et ELVIRA [66] sont plus originales, une norme de l'erreur, en général L_2 , entre la fonction couleur et l'interface reconstruite est minimisée. Il est démontré que la méthode ELVIRA est strictement du second ordre pour la reconstruction de l'interface, à la différence des autres qui sont seulement au premier ordre. Cependant, la méthode de Young et Parker est dans la pratique plus précise sur un maillage grossier.

Les algorithmes d'advection

Une fois que l'interface est reconstruite à partir de la fonction taux de présence, il est nécessaire de modéliser le transport de l'interface par un algorithme d'advection. Il existe à cet effet plusieurs techniques. La première et la plus simple est de découpler le calcul des flux issus de l'équation d'advection de la fonction couleur Eq.2.4,

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{i-\frac{1}{2},j}^n - F_{i+\frac{1}{2},j}^n \right) + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(G_{i,j-\frac{1}{2}}^n - G_{i,j+\frac{1}{2}}^n \right) \quad (2.5)$$

où $F_{i+\frac{1}{2},j}^n = (Cu)_{i+\frac{1}{2},j}^n$ dénote le flux dans la direction x et $G_{i,j+\frac{1}{2}}^n = (Cv)_{i,j+\frac{1}{2}}^n$ le flux dans la direction y . Le calcul de ces flux est réalisé par interpolation géométrique à l'aide de la fonction couleur et de la reconstruction de l'interface par l'une des méthodes présentées dans le dernier paragraphe. Une telle procédure permet d'assurer la conservation de la masse explicitement, représentant ainsi son principal intérêt.

Si la technique de découplage des flux donnent des résultats satisfaisants, elle peut dans certaines situations distordre l'interface (les phénomènes de "push-pull" et "staircase"). Il est dans ce cas préférable d'utiliser un algorithme où le calcul des flux n'est plus dissocié en tenant compte des flux diagonaux.

Conclusion

En résumé, la méthode VOF permet de gérer naturellement les changements de topologie de l'interface, les ruptures et connexions. Sous quelques réserves préliminaires, la résolution numérique de l'équation d'advection possède la propriété très intéressante de conserver la masse. Cependant, même si les algorithmes de reconstruction peuvent s'avérer efficaces pour calculer la normale et assurer la conservation de la masse, la position de l'interface n'est pas connue de manière très précise. Cela peut être pénalisant lorsqu'on couple la méthode à un solveur des équations de Navier-Stokes et qu'on cherche à discrétiser les conditions de saut. On peut également souligner que le passage d'un espace bidimensionnel à un espace tridimensionnel n'est pas immédiat, la géométrie de la reconstruction de l'interface n'étant plus la même. Il reste que la méthode est relativement peu coûteuse et massivement parallélisable.

2.3.2 Méthode Level-Set

La méthode Level-Set a été originellement développée par Osher et Sethian [62] pour capter les mouvements d'une interface dont la vitesse est dépendante de la courbure locale. Partant du constat que la méthode VOF-SLIC était déficiente pour calculer correctement la courbure, ils ont développé une nouvelle classe d'algorithmes appelée PSC pour "Propagating Surface under Courbature". Partant de considérations géométriques, on remarque que représenter une interface par une ligne de niveau d'une fonction peut être intéressant pour calculer facilement cette courbure (c'est à dire une ligne tel que pour tout point (x, y) de la ligne $\phi(x, y) = c$). C'est ainsi qu'on définit la fonction Level-Set pour localiser l'interface, par la ligne de niveau zéro d'une fonction a priori quelconque $\phi(x, y)$. En général, pour les points n'appartenant pas à l'interface, la Level-Set est définie telle qu'elle soit hyper régulière, c'est à dire telle que $\|\nabla\phi\| = 1$ équivalent à la définition d'une fonction distance. L'ensemble des lignes de niveau qui composent la Level-Set sont advectées de la même manière par le champ de vitesse local, ce qui revient à formuler l'équation de transport suivante,

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\phi = 0 \quad (2.6)$$

La définition mathématique de la Level-Set est élégante mais ce n'est pas pour autant qu'elle a connu un succès immédiat pour les écoulements diphasiques. Cela est dû au fait que la méthode nécessite l'utilisation d'un algorithme dit de redistanciation. Il est en effet nécessaire d'utiliser un tel algorithme afin de garder la propriété de fonction distance d'un pas de temps à l'autre car cette propriété est perdue lorsqu'on advecte la Level-Set sauf cas particulier, et ce phénomène n'est certainement pas numérique mais bien mathématique. En plus des erreurs de discrétisation de l'équation d'advection, l'algorithme de redistanciation engendre des pertes de masse par déplacement artificiel de l'interface et une diffusion numérique accrue, ce qui constitue un défaut majeur de la méthode. Aujourd'hui, l'utilisation de schémas d'ordre élevé résout en parti ce problème. Pour plus de détails, le chapitre suivant est entièrement consacré à cette méthode.

2.4 Choix de la méthode

Afin de simuler la désintégration assistée d'un jet liquide, il est évident que seules les méthodes eulériennes peuvent être employées. Elles sont les seules à posséder la capacité de gérer naturellement les changements de topologie. Notre choix s'est porté sur la méthode Level-Set pour l'élégance mathématique de sa définition. Elle ne nécessite pas de reconstruction de l'interface, la localisation de l'interface en dessous de l'échelle de la maille est de bonne facture, et permet surtout un accès direct et précis aux propriétés géométriques de l'interface. En outre, il semble que cette méthode possède plus de potentialité en terme d'extensions possibles, d'améliorations et de perspectives.

Chapitre 3

La méthode Level-Set

Sommaire

3.1 La fonction Level-Set	50
3.1.1 Définition	50
3.1.2 Équation de transport	50
3.1.3 Propriétés	51
3.2 Résolution numérique de l'équation de transport	53
3.2.1 Introduction	53
3.2.2 Maillage et discrétisation	54
3.2.3 Approche non conservative : schéma RK3/Weno5/n	55
3.2.4 Approche conservative : schéma Rk3/Weno5/c	60
3.3 Redistanciation	64
3.3.1 Problématique	64
3.3.2 Équation de redistanciation	65
3.3.3 Résolution numérique	66
3.3.4 Exemple de redistanciation	68
3.4 Cas tests académiques	68
3.4.1 Disque de Zalesak	70
3.4.2 Serpentin	74
3.5 Conservation de la masse	76
3.5.1 Redistanciation sous contrainte	78
3.5.2 Couplage avec une méthode VOF	79
3.5.3 Couplage avec une méthode de suivi de marqueurs	80
3.5.4 Choix de contour	83

Nous venons d'exposer les raisons qui ont motivées le choix de la méthode Level-Set pour capter l'évolution spatio-temporelle d'une interface. Elles s'articulent essentiellement autour de l'élégance mathématique de la définition du scalaire et des perspectives d'avenir de la méthode en comparaison de la méthode VOF, qui est pourtant plus populaire mais qui du coup a reçu bien plus d'améliorations. Dans ce nouveau chapitre, nous allons désormais exposer la méthode en détails et surtout présenter l'implémentation numérique associée à l'équation de transport, équation de type hyperbolique linéaire.

La méthode possède l'avantage de définir une fonction scalaire régulière à travers l'interface, ce qui a priori facilite le traitement numérique du transport puisqu'on s'affranchit d'une discontinuité à l'interface. Cependant, nous verrons que l'altération de la propriété intrinsèque de

distance signée au cours du temps altère les performances de la méthode. La précision, la stabilité et la robustesse des schémas numériques employés pour discrétiser l'équation de transport mais aussi l'équation de redistanciation sont cruciales sous peine d'obtenir une conservation de la masse inacceptable.

3.1 La fonction Level-Set

3.1.1 Définition

Pour un point donné $\mathbf{x}$ d'un espace d'étude quelconque, la valeur de la Level-Set en ce point $\phi(\mathbf{x})$ se définit comme la distance normale minimale signée à l'interface Γ , le signe dépendant du sous domaine dans lequel on se trouve, comme schématisé sur la Fig(3.1).

La fonction Level-Set peut être perçue comme une variété infinie d'iso contours, un iso contour étant défini par l'ensemble des points à une certaine distance d de l'interface. Lorsque la distance d est nulle, l'iso contour est l'interface elle-même $\Gamma = \{ \mathbf{x} \mid \phi(\mathbf{x}) = 0 \}$. La Level-Set possède ainsi une dimension supplémentaire en comparaison de celle de l'interface, ce qui n'est pas dénué d'intérêts comme nous allons le voir.

Soulignons qu'en réalité, cette définition n'est qu'un cas bien particulier. Définir une fonction ϕ telle que,

$$\begin{cases} \Gamma = \{ \mathbf{x} \mid \phi(\mathbf{x}) = 0 \} \\ \forall \mathbf{x} \in \Omega^+, \phi(\mathbf{x}) > 0 \\ \forall \mathbf{x} \in \Omega^-, \phi(\mathbf{x}) < 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

suffit à définir une Level-Set, nous ne sommes absolument pas dans l'obligation de la définir comme la distance signée à l'interface [61], une infinité de fonctions peuvent très bien faire l'affaire si on y trouve son intérêt. Si nous utilisons la fonction distance signée, c'est qu'elle est la fonction la plus régulière qui soit, facilitant ainsi les calculs et permettant d'éviter un maximum les problèmes de stabilité numérique.

3.1.2 Équation de transport

Intéressons nous maintenant à l'équation de transport associée à la méthode pour capturer l'évolution spatio-temporelle d'une interface. On considère un champ de vitesse $\mathbf{u}$ défini sur l'ensemble du domaine d'étude. Dans ce chapitre, il sera considéré dans un premier temps comme stationnaire. Dans la suite de ce mémoire, celui-ci sera évidemment solution des équations de Navier-Stokes.

Dans notre modèle, l'interface est advectée de manière passive, chaque point $\mathbf{x}$ de l'interface est animé de la vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{x})$. Si l'on suppose que l'ensemble des iso contours de la fonction Level-Set sont advectés de la même manière, on obtient,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (3.2)$$

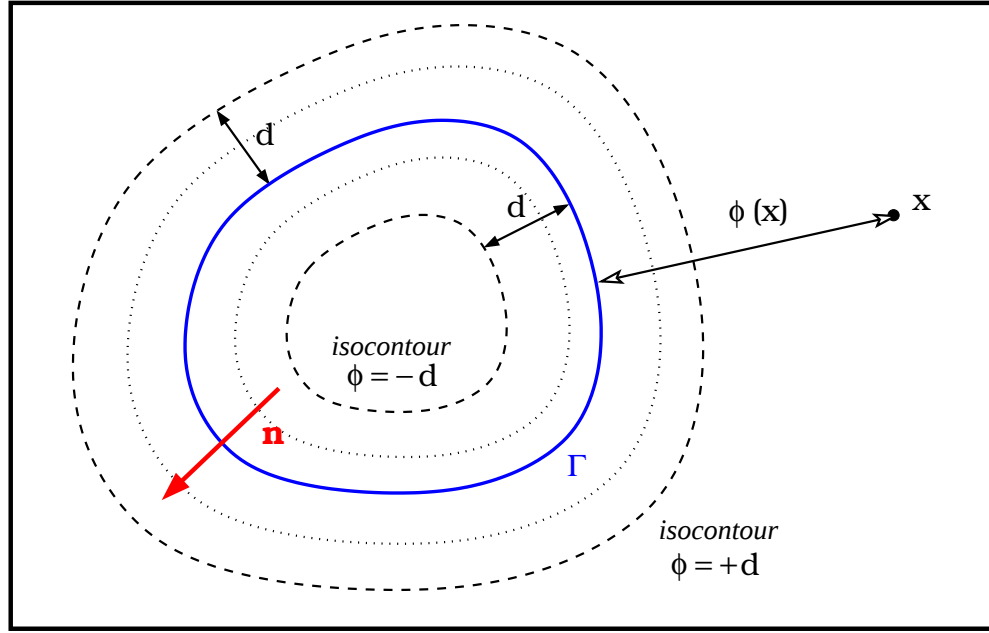


FIG. 3.1 – Définition "continue" de la fonction Level-Set permettant de localiser une interface Γ . Les iso contours définis par $\{ \mathbf{x} \mid \phi(\mathbf{x}) = d \}$ sont une conséquence de la définition de $\phi(\mathbf{x})$ comme la distance minimale signée de l'interface Γ au point $\mathbf{x}$

C'est l'équation classique de transport d'un champ scalaire dans un champ de vitesse $\mathbf{u}$ écrite avec une vision eulérienne. Si le champ de vitesse est à divergence nulle, ce qui est le cas pour notre modèle, cette équation peut se réécrire sous une forme conservative,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi) = 0 \quad (3.3)$$

Nous allons voir que cette formulation peut présenter un avantage dans le traitement numérique de l'équation en terme grossier de conservation de l'énergie. Il est à noter que nous reconnaissons sous cette forme une loi de conservation hyperbolique.

3.1.3 Propriétés

L'idée directrice de la définition de la fonction Level-Set était l'accès direct aux caractéristiques géométriques locales de l'interface [62], il s'avère que ce n'est pas la seule propriété intéressante :

- La localisation de l'interface est directement connue sans une quelconque reconstruction préalable. Le caractère continu de la définition en est la raison, on ne s'intéresse pas dans un premier temps à l'aspect discret du problème. Cependant, lorsque la fonction Level-Set est discrétisée sur un maillage donné, il est bien nécessaire d'extraire l'iso contour particulier qu'est l'interface. Cette opération peut se réaliser relativement aisément, et surtout, elle n'est pas forcément nécessaire au calcul des propriétés géométriques locales de l'interface.

- En effet, la normale $\mathbf{n}$ et la courbure κ peuvent être directement calculées par les formules suivantes,

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|} \quad (3.4)$$

$$\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|} \right) \quad (3.5)$$

La normale s'orientant dans le sens positif des contours comme schématisé sur la Fig.(3.1). Le calcul de la normale est rendu facile grâce à la propriété distance de la Level-Set, grâce à la dimension supplémentaire qu'elle possède en comparaison de celle de l'interface. Mais au delà de l'accès direct à l'information, on peut souligner la qualité des calculs de la normale et de la courbure lorsqu'on utilise ces formules avec des discrétisations standards, les cas tests allant dans ce sens.

- Ainsi définie, La Level-Set est une fonction hyper régulière puisque pour un espace continu,

$$\forall \mathbf{x}, \quad \|\nabla\phi(\mathbf{x})\| = 1 \quad (3.6)$$

Ceci est encore une conséquence directe de la propriété distance. Le fait de signer la distance permet de s'affranchir d'une discontinuité de la Level-Set à la traversée de l'interface. Cette propriété est très intéressante d'un point de vu numérique lorsqu'on désire transporter un champ scalaire. Il est toujours délicat de transporter un scalaire discontinu pour des raisons de précision, de stabilité et de diffusion des schémas numériques. C'est sans aucun doute l'un des problèmes majeurs en mécanique des fluides numériques. Toutefois, la dynamique de l'interface peut amener au niveau discret des discontinuités locales de la fonction, lorsque se forme par exemple des angles ou des filaments. En situation de sous résolution, lorsque la Level-Set possède une forte courbure locale, la propriété d'hyper régularité de la Level-Set au niveau discret peut être perdu. Nous allons voir les conséquences numériques lorsqu'on cherche à capturer les mouvements de l'interface.

- La fonction Level-Set gère très bien les ruptures et reconnections de l'interface. Cette constatation est issue de la pratique numérique, et en particulier de simulations diphasiques que l'on a pu comparer avec des résultats directement issus de l'expérience permettant ainsi de valider la méthode. Il faut savoir aussi que l'algorithme de redistance que nous appliquons pour des raisons que nous verrons un peu plus loin joue son aussi rôle dans cette propriété de la méthode. La réalité théorique d'une telle propriété est plus floue en

regardant de près. Cependant, le fait que l'interface soit capturée de manière eulérienne et la nature de fonction distance signée expliquent cette propriété de la méthode Level-Set.

- Enfin, toujours de par la définition de fonction distance signée, la méthode Level-Set est on ne peut plus facilement applicable à des problèmes dont la dimension est supérieure à deux. La transposition d'un problème bidimensionnel à un problème tridimensionnel est immédiate et sans complication dans le traitement numérique. La simplicité de mise en oeuvre de la méthode en fait tout son charme.

3.2 Résolution numérique de l'équation de transport

A présent, nous allons exposer les schémas numériques qui ont été employés afin de trouver une solution discrète à l'équation de transport de la fonction Level-Set (3.2,3.3), équation hyperbolique linéaire de premier ordre.

3.2.1 Introduction

L'expérience numérique pratique montre que les schémas de discrétisation de l'équation de transport doivent absolument posséder un ordre de convergence suffisamment élevé sous peine d'obtenir des résultats inacceptables, autant pour la partie temporelle que pour la partie convective. S.Tanguy [101] a réalisé une étude à ce sujet en montrant que même des schémas d'ordre 2 comme les schémas de Bell,Collela et Glaz [3] ou d'Adams-Bashford sont insuffisants. Il est également souhaitable que les schémas soient peu diffusifs, pas ou très peu dispersifs et extrêmement robustes pour faire face aux situations de sous résolution de la Level-Set vis à vis de l'interface à localiser et éventuellement aux formations de singularités. De nos jours, c'est lors de ces situations de sous résolution que se mesure la qualité d'une méthode de suivi d'interface. Plus simplement et plus généralement, nous devons faire face à toute situation où les gradients discrets locaux de la Level-Set peuvent être importants, même si une très bonne précision des schémas reste l'essentiel de ce que nous recherchons puisque la Level-Set reste une fonction hyper régulière dans un cadre continu.

La solution la plus répandue dans la communauté scientifique pour évaluer les dérivées spatiales de la Level-Set est d'utiliser des schémas initialement développés pour simuler la propagation d'ondes de choc dans les milieux fluides et donc spécialement conçus pour répondre à ce type d'exigence, c'est à dire réaliser ce délicat compromis entre très grande précision, peu de diffusion, pas de dispersion et une bonne robustesse. Suite aux travaux originaux et précurseurs de Harten et al. [28], c'est dans ce sens que Osher, Shu et Jiang entre autres ont mis au point au fil des années [87] deux classes de schémas qui sont respectivement si l'on suit l'histoire de leur développement les classes ENO pour "Essentially Non-Oscillatory" [90, 91] et Weno pour "Weighted Essentially Non-Oscillatory" [44, 89]. On parle de classe car ces schémas peuvent être écrit avec des ordres de convergence plus ou moins élevés en fonction du nombre de points discrets que l'on utilise autour du point discret où l'on cherche à évaluer une dérivée, ce que l'on appelle communément le stencil. Il est connu que plus le nombre de points discrets dans le stencil sera grand, plus l'ordre de convergence de l'interpolation des dérivées spatiales de la solution discrète sera important par le biais de l'utilisation de polynômes ou de fonctions plus simples à la condition que celle-ci soit suffisamment régulière. L'idée de base de la classe de schémas ENO est alors de choisir en suivant un algorithme prédéfini le stencil où la solution discrète est la plus régulière possible parmi un certain nombre de candidats acceptables afin d'évaluer au mieux une dérivée discrète à l'aide d'un polynôme de Lagrange, spécialement lorsque la solution présente

des sauts. Pour la classe de schémas Weno, on utilise plutôt une combinaison convexe des stencils acceptables en les pondérant en fonction de la régularité de la solution ce qui augmente encore l'ordre de la méthode en comparaison de la classe ENO. Cette manipulation des stencils de discrétisation permet d'obtenir des schémas d'ordre élevé tout en se préservant d'une diffusion trop importante et de problèmes de stabilité au sens dispersif. En effet, en conjonction avec un schéma de discrétisation temporel stable au sens TVD, comme les schémas Runge-Kutta, on s'assure de la non dispersion du schéma de discrétisation de l'équation de transport de la Level-Set.

3.2.2 Maillage et discrétisation

Par soucis de simplicité de mise en oeuvre des schémas numériques, nous avons opté pour un maillage cartésien uniforme. Afin de discrétiser l'espace d'étude $\Omega^2 = [x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}]$, on définit les cellules de contrôle $\Omega_{i,j}$ par,

$$\Omega_{i,j} = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \times [y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}] \quad , \quad 1 \leq i \leq n_x, 1 \leq j \leq n_y \quad (3.7)$$

Les pas d'espace respectifs Δx_i et Δy_j sont supposés constants,

$$\Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}} = \Delta x \quad , \quad \Delta y_j = y_{j+\frac{1}{2}} - y_{j-\frac{1}{2}} = \Delta y \quad (3.8)$$

Le centre des cellules est repéré par le couple (x_i, y_j) tel que,

$$x_i = \frac{1}{2} \left(x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}} \right) \quad , \quad y_j = \frac{1}{2} \left(y_{j-\frac{1}{2}} + y_{j+\frac{1}{2}} \right) \quad (3.9)$$

La valeur discrète de la Level-Set $\phi_{i,j}$ est définie au centre de la cellule $\Omega_{i,j}$ comme sur la Fig.(3.2).

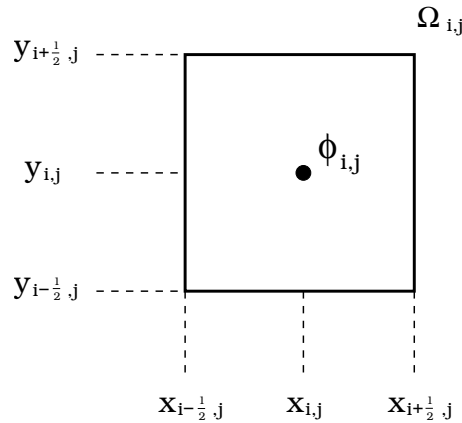


FIG. 3.2 – Maillage associé à la discrétisation de l'équation de transport de la fonction Level-Set

Deux approches différentes sont considérées ici pour discrétiser l'équation de transport de la Level-Set : une approche non conservative basée sur une discrétisation différences finies de l'équation (3.2) et une approche conservative basée cette fois ci sur une discrétisation volumes finis de l'équation (3.3). Si on applique strictement les mêmes schémas pour les deux approches : le schéma Runge-Kutta au 3ème ordre pour la partie temporelle et Weno ("Weighted Essentially

Non-Oscillatory") au 5ème ordre pour la partie spatiale par le biais d'une méthode de type "up-winding", les deux schémas finaux diffèrent dans le traitement spatial puisque l'on applique pas le schéma Weno à la même variable discrète comme nous allons le voir. Ces deux approches donnent naissance à deux schémas que nous nommons respectivement Rk3/Weno5/n et Rk3/Weno5/c relativement aux approches non conservative et conservative.

3.2.3 Approche non conservative : schéma RK3/Weno5/n

Introduction

Nous utilisons ici une approche aux différences finies pour trouver une solution numérique approchée de l'équation aux dérivées partielles hyperbolique linéaire au premier ordre (3.2). Pour un instant $t^n = n\Delta t^n$, la valeur discrète recherchée est directement définie au centre de la cellule $\Omega_{i,j}$ par,

$$\phi_{i,j}^n \approx \phi(x_i, y_j, t^n) \quad (3.10)$$

Il en est de même pour la vitesse $\mathbf{u}$ qui est stationnaire et connue analytiquement dans ce chapitre tel que $u_{i,j} = u(x_i, y_j)$ ⁴. Une discrétisation différences finies est basée sur une expansion en série de Taylor de la solution discrète suivant les pas temporel et spatial. La méthode la plus simple et la plus naturelle pour discrétiser en temps une équation d'advection est la méthode d'Euler dans sa version explicite ("forward Euler"). Étant donné la solution approchée discrète à l'instant t^n , on cherche la solution à l'instant t^{n+1} suivant le schéma de discrétisation,

$$\frac{\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n}{\Delta t} + u_{i,j} (\phi_x)_{i,j}^n + v_{i,j} (\phi_y)_{i,j}^n \approx 0 \quad (3.11)$$

Il reste alors à discrétiser la partie convective de l'équation, c'est à dire les variations spatiales ϕ . Une discrétisation centrée de l'opérateur gradient est connue pour générer un schéma instable. En s'appuyant sur la méthode des caractéristiques, il est possible de décentrer la discrétisation. Si $u_{i,j} > 0$, alors ϕ évolue de la gauche vers la droite, ce qui implique de regarder à gauche du point $x_{i,j}$. De manière similaire, si $u_{i,j} < 0$, on regarde à droite du point $x_{i,j}$. On construit ainsi une discrétisation décentrée de $(\phi_x)_{i,j}^n$, le décentrement dépendant du signe de $u_{i,j}$,

$$\begin{cases} \text{si } u_{i,j} > 0 & , \quad (\phi_x)_{i,j}^n \approx D_x^- \phi_{i,j}^n = \frac{\phi_{i,j}^n - \phi_{i-1,j}^n}{\Delta x} \\ \text{si } u_{i,j} < 0 & , \quad (\phi_x)_{i,j}^n \approx D_x^+ \phi_{i,j}^n = \frac{\phi_{i+1,j}^n - \phi_{i,j}^n}{\Delta x} \end{cases} \quad (3.12)$$

⁴Le maillage MAC utilisé plus tard pour trouver une solution des équations de Navier-Stokes nous oblige à interpoler la vitesse par une demi somme. Il est possible d'utiliser une interpolation plus précise [18] mais il nous semble que les erreurs des schémas majorient l'erreur d'interpolation.

Ce schéma, communément appelé "upwinding scheme", s'applique direction par direction. Le traitement de $(\phi_y)_{i,j}^n$ s'effectue de la même manière en fonction du signe de $v_{i,j}$,

$$\begin{cases} \text{si } v_{i,j} > 0 & , \quad (\phi_y)_{i,j}^n \approx D_y^- \phi_{i,j}^n = \frac{\phi_{i,j}^n - \phi_{i,j-1}^n}{\Delta y} \\ \text{si } v_{i,j} < 0 & , \quad (\phi_y)_{i,j}^n \approx D_y^+ \phi_{i,j}^n = \frac{\phi_{i,j+1}^n - \phi_{i,j}^n}{\Delta y} \end{cases} \quad (3.13)$$

La combinaison d'un avancement en temps de type Euler explicite avec un schéma upwinding est consistant, les erreurs d'approximation convergent vers zéro si $\Delta x \rightarrow 0$ et $\Delta t \rightarrow 0$. La convergence est obtenue si et seulement si le schéma est stable. Cette stabilité est obtenue suivant la condition dite CFL (condition de Courant-Friedrechs-Lewy). Dans chaque direction du maillage, les ondes numériques de vitesses respectives $\Delta x/\Delta t$ et $\Delta y/\Delta t$ ne doivent pas aller aussi vite que les ondes physiques de vitesse respectives $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$,

$$\Delta t < \min \left(\frac{\Delta x}{|\mathbf{u}|} , \frac{\Delta y}{|\mathbf{v}|} \right) \quad (3.14)$$

Nous obtenons ainsi une discrétisation convergente de l'équation (3.2) sous la condition (3.14) avec des schémas d'ordre un en temps et en espace. Ce schéma est connu pour sa très grande stabilité. Cependant, l'ordre premier de discrétisation spatiale de $\nabla \phi^n$ implique des erreurs d'approximation d'ordre deux tel que :

$$u_{i,j} D_x^\pm \phi_{i,j}^n + v_{i,j} D_y^\pm \phi_{i,j}^n = \epsilon \Delta \phi_{i,j}^n + O(\max(\Delta x^2, \Delta y^2)) \quad , \quad \epsilon \propto \Delta x \quad (3.15)$$

Cette approximation a pour conséquence une diffusion artificielle de la solution, le Laplacien étant un opérateur de diffusion. Cette diffusion est importante puisque la viscosité numérique ϵ est de l'ordre de l'échelle de la maille. Elle implique une perte d'information sur les mouvements de l'interface. C'est à ce niveau que l'application du schéma Weno5 prend toute son importance pour calculer avec une plus grande précision les variations spatiales de ϕ , c'est à dire concrètement $D_x^- \phi_{i,j}^n$, $D_x^+ \phi_{i,j}^n$, $D_y^- \phi_{i,j}^n$ et $D_y^+ \phi_{i,j}^n$.

Intégration spatiale : schéma Weno5

Le schéma Weno au 5ème ordre s'appuie sur deux stencils de six points discrets biaisés à gauche et à droite pour évaluer au mieux les dérivées décentrées $D_x^- \phi_{i,j}^n$ et $D_x^+ \phi_{i,j}^n$ comme sur la Fig.(3.3).

Pour trouver une approximation des dérivées décentrées $D_x^\pm \phi_{i,j}^n$, le schéma ENO au 3ème ordre consiste à choisir en suivant un algorithme que nous ne présenterons pas ici l'une des approximations suivantes en référence aux stencils de discrétisation notés 0,1 et 2 sur la Fig.(3.3),

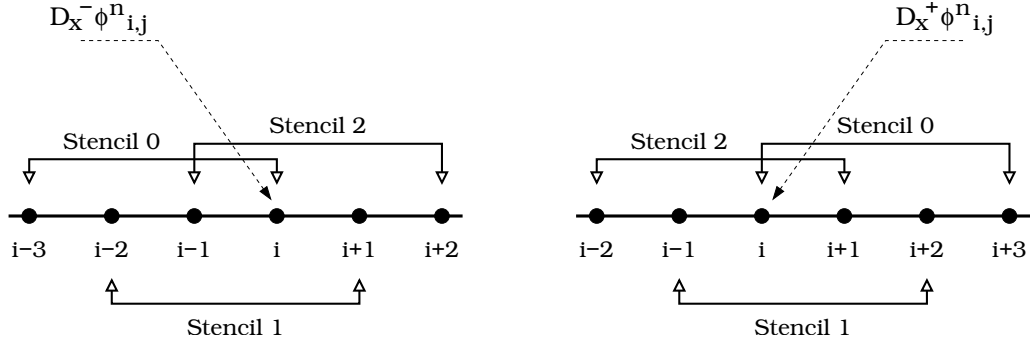


FIG. 3.3 – Stencils de discrétisation pour l'élaboration des schémas ENO au 3ème ordre et Weno au 5ème ordre pour la formulation non conservative

$$\begin{aligned}
 D_x^\pm \phi_{i,j}^{n,0} &= \frac{1}{3} q_1^\pm - \frac{7}{6} q_2^\pm + \frac{11}{6} q_3^\pm \\
 D_x^\pm \phi_{i,j}^{n,1} &= -\frac{1}{6} q_2^\pm + \frac{5}{6} q_3^\pm + \frac{1}{3} q_4^\pm \\
 D_x^\pm \phi_{i,j}^{n,2} &= \frac{1}{3} q_3^\pm + \frac{5}{6} q_4^\pm - \frac{1}{6} q_5^\pm
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

où les termes $q^\pm$ sont les suivants,

$$\begin{aligned}
 q_1^- &= \left(\frac{\phi_{i-2,j}^n - \phi_{i-3,j}^n}{\Delta x} \right) , \quad q_2^- = \left(\frac{\phi_{i-1,j}^n - \phi_{i-2,j}^n}{\Delta x} \right) , \quad q_3^- = \left(\frac{\phi_{i,j}^n - \phi_{i-1,j}^n}{\Delta x} \right) \\
 q_4^- &= \left(\frac{\phi_{i+1,j}^n - \phi_{i,j}^n}{\Delta x} \right) , \quad q_5^- = \left(\frac{\phi_{i+2,j}^n - \phi_{i+1,j}^n}{\Delta x} \right)
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

et,

$$\begin{aligned}
 q_1^+ &= \left(\frac{\phi_{i+3,j}^n - \phi_{i+2,j}^n}{\Delta x} \right) , \quad q_2^+ = \left(\frac{\phi_{i+2,j}^n - \phi_{i+1,j}^n}{\Delta x} \right) , \quad q_3^+ = \left(\frac{\phi_{i+1,j}^n - \phi_{i,j}^n}{\Delta x} \right) \\
 q_4^+ &= \left(\frac{\phi_{i,j}^n - \phi_{i-1,j}^n}{\Delta x} \right) , \quad q_5^+ = \left(\frac{\phi_{i-1,j}^n - \phi_{i-2,j}^n}{\Delta x} \right)
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Tandis que le schéma Weno au 5ème ordre est une combinaison convexe de ces trois expressions de la dérivée pour les stencils 0,1 et 2,

$$D_x^\pm \phi_{i,j}^n = \omega_0^\pm D_x^\pm \phi_{i,j}^{n,0} + \omega_1^\pm D_x^\pm \phi_{i,j}^{n,1} + \omega_2^\pm D_x^\pm \phi_{i,j}^{n,2} \quad (3.19)$$

où les pondérations ω_0 , ω_1 et ω_2 sont calculées de la manière suivante,

$$\begin{aligned} \omega_0^\pm &= \frac{\alpha_0^\pm}{\alpha_0^\pm + \alpha_1^\pm + \alpha_2^\pm} \\ \omega_1^\pm &= \frac{\alpha_1^\pm}{\alpha_0^\pm + \alpha_1^\pm + \alpha_2^\pm} \\ \omega_2^\pm &= \frac{\alpha_2^\pm}{\alpha_0^\pm + \alpha_1^\pm + \alpha_2^\pm} \end{aligned} \quad (3.20)$$

tel que la pondération soit consistante $\omega_0 + \omega_1 + \omega_2 = 1$ et avec,

$$\begin{aligned} \alpha_0^\pm &= \frac{1}{10} \left(\frac{1}{\epsilon + IS_0^\pm} \right)^2 \\ \alpha_1^\pm &= \frac{6}{10} \left(\frac{1}{\epsilon + IS_1^\pm} \right)^2 \\ \alpha_2^\pm &= \frac{3}{10} \left(\frac{1}{\epsilon + IS_2^\pm} \right)^2 \end{aligned} \quad (3.21)$$

où ϵ généralement fixé à 10^{-6} permet d'éviter que le dénominateur soit nul et où les $IS^\pm$ dénotent l'indicateur de régularité,

$$\begin{aligned} IS_0^\pm &= \frac{13}{12} (q_1^\pm - 2q_2^\pm + q_3^\pm)^2 + \frac{1}{4} (q_1^\pm - 4q_2^\pm + 3q_3^\pm)^2 \\ IS_1^\pm &= \frac{13}{12} (q_2^\pm - 2q_4^\pm + q_4^\pm)^2 + \frac{1}{4} (q_2^\pm - q_4^\pm)^2 \\ IS_2^\pm &= \frac{13}{12} (q_3^\pm - 2q_4^\pm + q_5^\pm)^2 + \frac{1}{4} (3q_3^\pm - 4q_4^\pm + q_5^\pm)^2 \end{aligned} \quad (3.22)$$

La procédure numérique est strictement la même pour déterminer les dérivées décentrées $D_y^- \phi_{i,j}^n$ et $D_y^+ \phi_{i,j}^n$, elle s'applique direction par direction. En reprenant la méthode "upwinding" écrite en introduction Eq.(3.12) et Eq.(3.13), on obtient le schéma final pour discrétiser la partie convective de l'équation de transport de la Level-Set $\mathbf{u} \cdot \nabla \phi$.

Intégration temporelle : schéma Rk3

Nous nous apercevons dans la pratique que la discrétisation de type Euler explicite d'ordre un en temps est largement insuffisante voir même des schémas d'ordre supérieur comme le montre S.Tanguy [101]. Il est par voie de conséquence absolument nécessaire d'employer un schéma de discrétisation temporelle d'ordre très élevé. C'est ce que nous avons réalisé avec l'emploi d'un schéma Runge-Kutta dans une version optimale au 3ème ordre. Nous allons décrire la manière dont se construit un tel schéma afin de mieux exposer ses propriétés.

Nous réécrivons la discrétisation de l'équation de transport de la Level-Set sous la forme suivante,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = L(\phi) \quad (3.23)$$

où $L(\phi)$ est un diminutif de la discrétisation Weno au 5ème ordre de la partie convective de l'équation de transport $\mathbf{u} \cdot \nabla \phi$. La discrétisation d'Euler explicite de premier ordre s'écrit alors de la façon suivante,

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t L(\phi^n) \quad (3.24)$$

Cette méthode possède l'avantage d'être très stable sous la condition CFL,

$$\Delta t \leq \Delta t_1 \quad (3.25)$$

Cependant l'ordre premier de convergence est insuffisant dans bien des situations comme la notre. L'objectif des schémas TVD-Runge-Kutta est de maintenir cette stabilité au sens TVD tout en augmentant l'ordre de convergence. Dans l'article de Shu et Osher [90], nous trouvons une formulation générale du schéma de Runge-Kutta,

$$\phi^{(i)} = \sum_{k=0}^{i-1} \left(\alpha_{ik} \phi^{(k)} + \Delta t \beta_{ik} L(\phi^{(k)}) \right) \quad i = 1, \dots, m \quad (3.26)$$

$$\phi^{(0)} = \phi^n, \quad \phi^{(m)} = \phi^{n+1}$$

Si tous les coefficients sont positifs $\alpha_{ik} \geq 0$ et $\beta_{ik} \geq 0$ alors un schéma de Runge-Kutta est une simple combinaison convexe de pas d'Euler. Il est montré dans [90] qu'un tel schéma est stable au sens TVD sous la condition CFL suivante,

$$\Delta t \leq c \Delta t_1$$

$$\text{avec } c = \min_{i,k} \frac{\alpha_{ik}}{\beta_{ik}} \quad (3.27)$$

$$\text{et } \alpha_{ik} \geq 0, \beta_{ik} \geq 0$$

En suivant le principe de construction d'un schéma de Runge-Kutta Eq.(3.26), les coefficients du schéma de Runge-Kutta eu 3ème optimal sont calculés dans [88], nous donnant le schéma de discrétisation temporelle final suivant,

$$\begin{aligned}\phi^{(1)} &= \phi^n + \Delta t L(\phi^n) \\ \phi^{(2)} &= \frac{3}{4} \phi^n + \frac{1}{4} \left(\phi^{(1)} + \Delta t L(\phi^{(1)}) \right) \\ \phi^{(n+1)} &= \frac{1}{3} \phi^n + \frac{2}{3} \left(\phi^{(2)} + \Delta t L(\phi^{(2)}) \right)\end{aligned}\tag{3.28}$$

Ce qui donne la condition de stabilité CFL $c = 1$ dans l'Eq.(3.27). En plus d'obtenir un schéma de discrétisation temporel d'ordre élevé, la stabilité temporelle TVD de ce schéma de Runge-Kutta couplée avec la stabilité spatiale TVD du schéma Weno au 5ème ordre pour discrétiser $L(\phi)$ assure l'inexistence d'oscillations numériques parasites dans le transport de forts gradients. Cette propriété de stabilité est cruciale pour faire face aux situations de sous résolution de la Level-Set.

3.2.4 Approche conservative : schéma Rk3/Weno5/c

Introduction

Nous venons d'exposer une discrétisation de l'équation de transport de la Level-Set écrite sous sa forme non conservative (3.2). Une telle discrétisation fait appel à une formulation de type différences finies. Or, il peut paraître judicieux de plutôt discrétiser la forme conservative de l'équation de transport (3.3) à l'aide de schémas de type volumes finis. En effet, il est bien connu qu'une solution intégrale respecte mieux la physique du transport de forts gradients locaux. Grâce au concept de flux numérique issu de l'intégration des lois de conservation, les méthodes volumes finis assurent la conservation de la solution numérique. Cette propriété prend toute son importance pour une méthode de suivi d'interface puisque la conservation des surfaces ou volumes initiaux de chaque sous-espace est un critère important.

Pour une formulation de type volumes finis, la quantité discrète calculée au point (i, j) est l'intégrale de la solution sur la cellule $\Omega_{i,j}$,

$$\bar{\phi}_{i,j}^n = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \phi(x, y, t^n) dx dy \tag{3.29}$$

Afin de construire le schéma numérique de type volumes finis, l'équation de transport est intégrée de la même manière,

$$\iint_{\Omega_{i,j}} \phi_t d\Omega + \iint_{\Omega_{i,j}} \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) d\Omega = 0 \tag{3.30}$$

La transformation d'Ostrograski nous permet d'exprimer l'intégrale de volume comme une intégrale de surface, $\delta\Omega_{i,j}$ étant le contour de la cellule $\Omega_{i,j}$ et $\mathbf{n}$ sa normale extérieure,

$$\iint_{\Omega_{i,j}} \phi_t d\Omega + \int_{\delta\Omega_{i,j}} (\mathbf{u} \phi) \cdot \mathbf{n} d(\delta\Omega) = 0 \quad (3.31)$$

On vient ainsi de définir F et G les flux numériques à travers les facettes de la cellule $\Omega_{i,j}$ de calcul tels que,

$$\begin{aligned} F_{i+\frac{1}{2}, j} &= \int_{y_{i,j-\frac{1}{2}}}^{y_{i,j+\frac{1}{2}}} u(x_{i+\frac{1}{2},j}, y) \phi(x_{i,j+\frac{1}{2}}, y) dy \\ G_{i, j+\frac{1}{2}} &= \int_{x_{i-\frac{1}{2},j}}^{x_{i+\frac{1}{2},j}} u(x, y_{i,j+\frac{1}{2}}) \phi(x, y_{i,j+\frac{1}{2}}) dx \end{aligned} \quad (3.32)$$

Tout comme la formulation non conservative, la discrétisation en temps est faite grâce à la méthode d'Euler dans sa version explicite, ce qui revient à écrire au final,

$$\frac{\bar{\phi}_{i,j}^{n+1} - \bar{\phi}_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{F_{i+\frac{1}{2}, j} - F_{i-\frac{1}{2}, j}}{\Delta x} + \frac{G_{i, j+\frac{1}{2}} - G_{i, j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} \approx 0 \quad (3.33)$$

Il reste alors à trouver une approximation aux flux numériques F et G . Comme on a pu le faire avec l'approche non conservative, nous appliquons la méthode "upwinding" direction par direction pour calculer ces flux, ce qui revient à écrire le schéma au premier ordre suivant,

$$\begin{cases} si \ u_{i+\frac{1}{2},j} > 0 & , \quad F_{i+\frac{1}{2},j} \approx u_{i+\frac{1}{2},j} \bar{\phi}_{i-1,j}^n \\ si \ u_{i+\frac{1}{2},j} < 0 & , \quad F_{i+\frac{1}{2},j} \approx u_{i+\frac{1}{2},j} \bar{\phi}_{i,j}^n \end{cases} \quad (3.34)$$

et,

$$\begin{cases} si \ v_{i,j+\frac{1}{2}} > 0 & , \quad G_{i,j+\frac{1}{2}} \approx v_{i,j+\frac{1}{2}} \bar{\phi}_{i,j-1}^n \\ si \ v_{i,j+\frac{1}{2}} < 0 & , \quad G_{i,j+\frac{1}{2}} \approx v_{i,j+\frac{1}{2}} \bar{\phi}_{i,j}^n \end{cases} \quad (3.35)$$

Un tel schéma est consistant et sera donc convergent toujours sous le respect de la condition de stabilité CFL Eq.(3.14).

Intégration spatiale : schéma Weno5

Le schéma Weno5 n'est pas dans ce cas appliqué sur les dérivées discrètes au premier ordre, les termes $q^\pm$, mais directement sur les valeurs discrètes $\bar{\phi}_{i,j}^n$. La procédure Weno va nous permettre d'obtenir un lissage par pondération de deux quantités $\phi_{i+\frac{1}{2},j}^{n+}$ et $\phi_{i+\frac{1}{2},j}^{n-}$, le signe étant lié à un décentrement du calcul à droite et gauche du point $x_{i+\frac{1}{2},j}$.

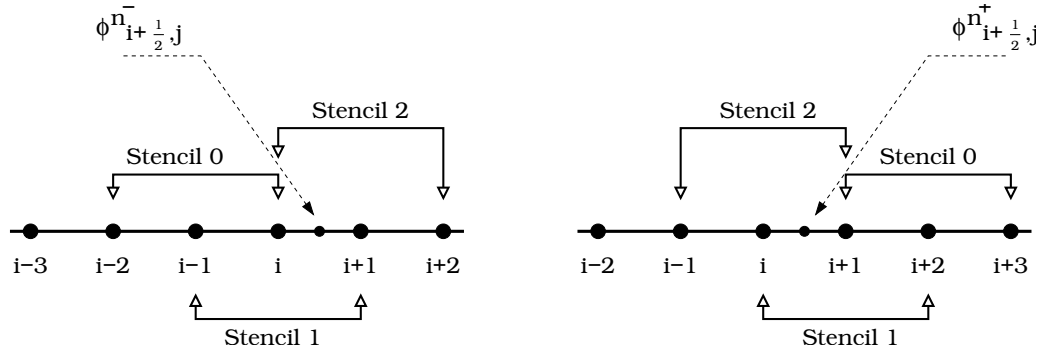


FIG. 3.4 – Stencils de discrétisation pour l'élaboration des schémas ENO au 3ème ordre et Weno au 5ème ordre pour la formulation conservative

$$\begin{aligned}
 \phi_{i+\frac{1}{2},j}^{n\pm 0} &= \frac{1}{3} r_1^\pm - \frac{7}{6} r_2^\pm + \frac{11}{6} r_3^\pm \\
 \phi_{i+\frac{1}{2},j}^{n\pm 1} &= -\frac{1}{6} r_2^\pm + \frac{5}{6} r_3^\pm + \frac{1}{3} r_4^\pm \\
 \phi_{i+\frac{1}{2},j}^{n\pm 2} &= \frac{1}{3} r_3^\pm + \frac{5}{6} r_4^\pm - \frac{1}{6} r_5^\pm
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

où les termes $r^\pm$ sont les suivants,

$$\begin{aligned}
 r_1^- &= \bar{\phi}_{i-2,j}^n, \quad r_2^- = \bar{\phi}_{i-1,j}^n, \quad r_3^- = \bar{\phi}_{i,j}^n \\
 r_4^- &= \bar{\phi}_{i+1,j}^n, \quad r_5^- = \bar{\phi}_{i+2,j}^n
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

et,

$$\begin{aligned}
 r_1^+ &= \bar{\phi}_{i+3,j}^n, \quad r_2^+ = \bar{\phi}_{i+2,j}^n, \quad r_3^+ = \bar{\phi}_{i,j}^n \\
 r_4^+ &= \bar{\phi}_{i-1,j}^n, \quad r_5^+ = \bar{\phi}_{i-2,j}^n
 \end{aligned} \tag{3.38}$$

Le schéma Weno au 5ème ordre est une combinaison pondérée de ces trois dérivées exprimées pour les stencils 0,1 et 2,

$$\phi_{i+\frac{1}{2},j}^{n,\pm} = \omega_0^\pm \phi_{i+\frac{1}{2},j}^{n,\pm 0} + \omega_1^\pm \phi_{i+\frac{1}{2},j}^{n,\pm 1} + \omega_2^\pm \phi_{i+\frac{1}{2},j}^{n,\pm 2} \quad (3.39)$$

où les pondérations ω_0 , ω_1 et ω_2 sont calculées de la manière suivante,

$$\begin{aligned} \omega_0^\pm &= \frac{\alpha_0^\pm}{\alpha_0^\pm + \alpha_1^\pm + \alpha_2^\pm} \\ \omega_1^\pm &= \frac{\alpha_1^\pm}{\alpha_0^\pm + \alpha_1^\pm + \alpha_2^\pm} \\ \omega_2^\pm &= \frac{\alpha_2^\pm}{\alpha_0^\pm + \alpha_1^\pm + \alpha_2^\pm} \end{aligned} \quad (3.40)$$

tel que la pondération soit consistante $\omega_0 + \omega_1 + \omega_2 = 1$ et avec,

$$\begin{aligned} \alpha_0^\pm &= \frac{1}{10} \left(\frac{1}{\epsilon + IS_0^\pm} \right)^2 \\ \alpha_1^\pm &= \frac{6}{10} \left(\frac{1}{\epsilon + IS_1^\pm} \right)^2 \\ \alpha_2^\pm &= \frac{3}{10} \left(\frac{1}{\epsilon + IS_2^\pm} \right)^2 \end{aligned} \quad (3.41)$$

où ϵ généralement fixé à 10^{-6} permet d'éviter que le dénominateur soit nul et où les $IS^\pm$ dénotent l'indicateur de régularité,

$$\begin{aligned} IS_0^\pm &= \frac{13}{12} (r_1^\pm - 2r_2^\pm + r_3^\pm)^2 + \frac{1}{4} (r_1^\pm - 4r_2^\pm + 3r_3^\pm)^2 \\ IS_1^\pm &= \frac{13}{12} (r_2^\pm - 2r_3^\pm + r_4^\pm)^2 + \frac{1}{4} (r_2^\pm - r_4^\pm)^2 \\ IS_2^\pm &= \frac{13}{12} (r_3^\pm - 2r_4^\pm + r_5^\pm)^2 + \frac{1}{4} (3r_3^\pm - 4r_4^\pm + r_5^\pm)^2 \end{aligned} \quad (3.42)$$

Intégration temporelle : schéma Rk3

Le schéma de Runge-Kutta au 3ème ordre s'écrit identiquement à la version non conservative pour la variable discrète $\bar{\phi}$,

$$\begin{aligned}\bar{\phi}^{(1)} &= \bar{\phi}^n + \Delta t L(\bar{\phi}^n) \\ \bar{\phi}^{(2)} &= \frac{3}{4} \bar{\phi}^n + \frac{1}{4} \left(\bar{\phi}^{(1)} + \Delta t L(\bar{\phi}^{(1)}) \right) \\ \bar{\phi}^{(n+1)} &= \frac{1}{3} \bar{\phi}^n + \frac{2}{3} \left(\bar{\phi}^{(2)} + \Delta t L(\bar{\phi}^{(2)}) \right)\end{aligned}\tag{3.43}$$

où $L(\bar{\phi})$ représente la discrétisation conservative par calcul des flux numériques apparaissant lors de l'intégration de la partie convective de l'équation de transport, opération réalisée par l'intermédiaire du schéma Weno5 que nous venons d'exposer.

3.3 Redistanciation

3.3.1 Problématique

L'équation de transport de la Level-Set a été construite telle que chaque iso contour en plus de l'interface elle-même soit advecté par le champ de vitesse local. Une telle méthodologie implique que les iso contours ne restent pas localement à la même distance l'un de l'autre lorsque la composante tangentielle du gradient de la vitesse normale aux iso contours est non nulle, c'est à dire dans la très grande majorité des cas de simulation. La propriété de fonction distance signée que nous avons donnée initialement à la Level-Set est "cassée" par l'advection, ce phénomène étant bien purement mathématique et non numérique. Un exemple graphique concret est donné sur la Fig.(3.5) pour mieux comprendre ce phénomène. Si initialement, chaque iso contour représente bien par définition l'ensemble des points à une certaine distance de l'interface, l'advection par un champ de vitesse a provoqué des resserrements et des étirements au bout d'un temps t de simulation signifiant la perte de la propriété distance puisque $\|\nabla\phi\| \neq 1$.

Il est à souligner dans un premier temps que cela ne gêne pas à priori la localisation de l'interface. Mais comme nous avons utilisé cette propriété distance pour définir le calcul de la normale à l'interface, celui-ci sera de plus en plus inexact en avançant dans le temps. L'application numérique de conditions de saut suivant la normale à l'interface, comme nous devons le faire pour notre modèle pour simuler des écoulements diphasiques, devient alors inévitablement divergente en utilisant une telle définition du calcul de la normale. D'autres problèmes peuvent surgir de cet écartement progressif dans le temps de la Level-Set de sa définition initiale de fonction distance signée. En plus de celui de la normale, d'autres calculs peuvent s'appuyer sur la propriété distance de la Level-Set comme nous le verrons plus tard avec la méthode Ghost-Fluid. Il peut aussi apparaître de forts gradients locaux dans des cas extrêmes de simulation pouvant provoquer des instabilités numériques ou tout simplement rendre plus compliqué une localisation fine de l'interface à l'intérieur d'une cellule du maillage.

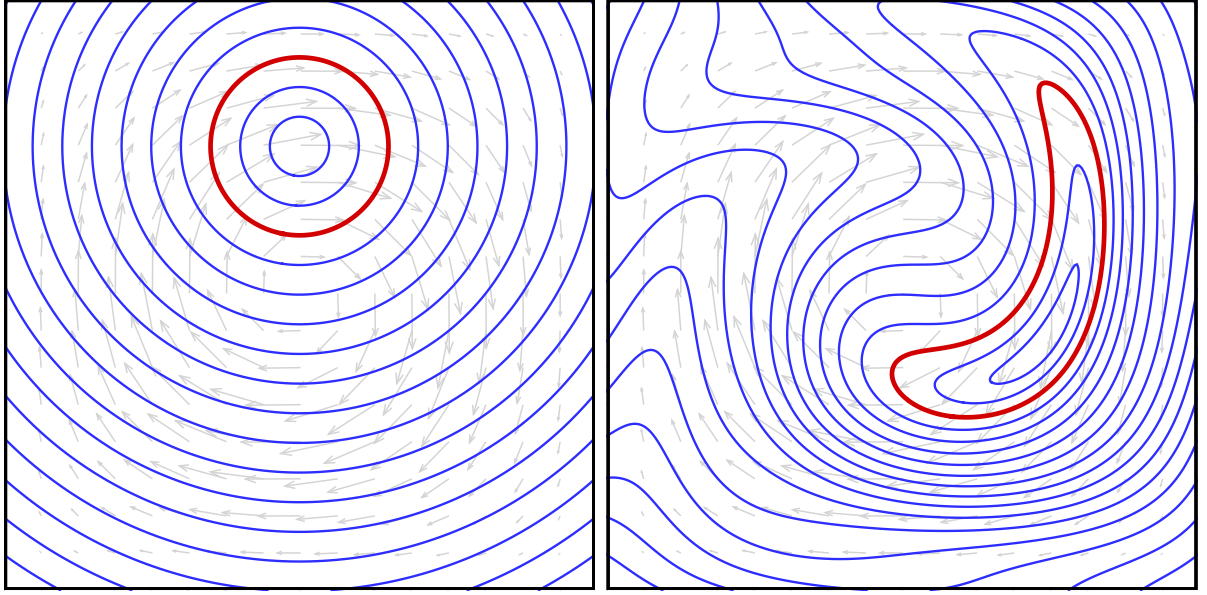


FIG. 3.5 – Exemple typique de l'évolution de quelques iso contours d'une Level-Set dans un champ de vitesse cisaillant où l'iso contour particulier qu'est l'interface est en rouge ; (à gauche) les iso contours initiaux tels qu'ils représentent bien l'ensemble des points à une certaine distance signée à l'interface ; (à droite) les mêmes iso contours advectés par le champ de vitesse au bout d'un temps t de simulation

3.3.2 Équation de redistanciation

Il est par conséquent absolument nécessaire de corriger cette perte de la propriété distance signée. C'est dans ce sens que Sussman et al. [100] ont mis au point un algorithme de réinitialisation de la Level-Set dit algorithme de redistanciation. Le principe est de corriger la position des iso contours à partir du seul iso contour valable qu'est l'interface. Cette correction a pour but de réinitialiser les valeurs de la Level-Set à partir de la position calculée de l'interface à l'instant t^{n+1} afin de redonner la propriété de fonction distance signée. Cet algorithme de redistanciation s'appuie sur la résolution de l'équation aux dérivées partielles suivante,

$$\begin{cases} \frac{\partial \Phi}{\partial t'} = \text{sign}(\phi(x, t)) (1 - \|\nabla \Phi\|) \\ \Phi(x, t' = 0) = \phi(x, t) \end{cases} \quad (3.44)$$

Si t' est considéré comme un temps fictif alors la solution stationnaire de cette équation est bien celle que l'on recherche, c'est à dire la fonction distance signée à l'interface, et sans que la position de l'interface n'est changée entre les Level-Set $\phi(x, t)$ et $\Phi(x, t' \rightarrow \infty)$ (t étant ici une variable fixe). Si l'on obtient bien théoriquement le but recherché, il s'avère que ce n'est pas tout à fait le cas lors de la pratique numérique à cause des erreurs de discrétisation. Les proportions de l'erreur commise peuvent être importantes si l'on n'emploie pas des schémas d'ordre élevé.

Trop d'imprécision et de diffusion dans les schémas numériques employés pour résoudre cette Eq.(3.44) peut s'avérer catastrophique car la position de l'interface change dans la pratique, un phénomène bien connu dans la communauté scientifique.

3.3.3 Résolution numérique

En parallèle du développement des schémas Weno pour des lois de conservation hyperbolique, Jiang et Peng [33] ont étendu le domaine d'application de cette classe de schéma à la résolution des équations de Hamilton-Jacobi. L'équation de redistanciation Eq.(3.44) rentre dans cette catégorie de PDE, elle se réécrit de la manière suivante dans une forme semi discrète,

$$\frac{\partial \Phi_{i,j}}{\partial t'} = \hat{H} (D_x^+ \Phi_{i,j}, D_x^- \Phi_{i,j}, D_y^+ \Phi_{i,j}, D_y^- \Phi_{i,j}) \quad (3.45)$$

Où $\hat{H}$ est l'Hamiltonien numérique et où $D_x^+ \Phi_{i,j}$, $D_x^- \Phi_{i,j}$, $D_y^+ \Phi_{i,j}$ et $D_y^- \Phi_{i,j}$ sont des approximations Weno au 5ème ordre des dérivées premières décentrées amont et aval de Φ au point $x_{i,j}$. Suivant les développements présentés dans [33], nous introduisons les quantités suivantes,

$$\begin{aligned} \Delta_x^+ \Phi_{i,j} &= \Phi_{i+1,j} - \Phi_{i,j} \quad , \quad \Delta_x^- \Phi_{i,j} = \Phi_{i,j} - \Phi_{i-1,j} \\ \Delta_y^+ \Phi_{i,j} &= \Phi_{i,j+1} - \Phi_{i,j} \quad , \quad \Delta_y^- \Phi_{i,j} = \Phi_{i,j} - \Phi_{i,j-1} \end{aligned} \quad (3.46)$$

Afin d'exprimer le calcul des dérivées,

$$\begin{aligned} D_x^\pm \Phi_{i,j} &= \frac{1}{12} \left(-\frac{\Delta_x^+ \Phi_{i-2,j}}{\Delta x} + 7\frac{\Delta_x^+ \Phi_{i-1,j}}{\Delta x} + 7\frac{\Delta_x^+ \Phi_{i,j}}{\Delta x} - \frac{\Delta_x^+ \Phi_{i+1,j}}{\Delta x} \right) \\ &\pm \Phi^W \left(\frac{\Delta_x^- \Delta_x^+ \Phi_{i\pm 2,j}}{\Delta x}, \frac{\Delta_x^- \Delta_x^+ \Phi_{i\pm 1,j}}{\Delta x}, \frac{\Delta_x^- \Delta_x^+ \Phi_{i,j}}{\Delta x}, \frac{\Delta_x^- \Delta_x^+ \Phi_{i\mp 1,j}}{\Delta x} \right) \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\begin{aligned} D_x^\pm \Phi_{i,j} &= \frac{1}{12} \left(-\frac{\Delta_x^+ \Phi_{i-2,j}}{\Delta x} + 7\frac{\Delta_x^+ \Phi_{i-1,j}}{\Delta x} + 7\frac{\Delta_x^+ \Phi_{i,j}}{\Delta x} - \frac{\Delta_x^+ \Phi_{i+1,j}}{\Delta x} \right) \\ &\pm \Phi^W \left(\frac{\Delta_x^- \Delta_x^+ \Phi_{i\pm 2,j}}{\Delta x}, \frac{\Delta_x^- \Delta_x^+ \Phi_{i\pm 1,j}}{\Delta x}, \frac{\Delta_x^- \Delta_x^+ \Phi_{i,j}}{\Delta x}, \frac{\Delta_x^- \Delta_x^+ \Phi_{i\mp 1,j}}{\Delta x} \right) \end{aligned}$$

où,

$$\Phi^W(a, b, c, d) = \frac{1}{3} \omega_0 (a - 2b + c) + \frac{1}{6} \left(\omega_2 - \frac{1}{2} \right) (b - 2c + d) \quad (3.48)$$

avec,

$$\begin{aligned}
\omega_0 &= \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2} \quad , \quad \omega_2 = \frac{\alpha_2}{\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2} \\
\alpha_0 &= \frac{1}{(\epsilon + IS_0)^2} \quad , \quad \alpha_1 = \frac{6}{(\epsilon + IS_1)^2} \quad , \quad \alpha_2 = \frac{3}{(\epsilon + IS_2)^2} \\
IS_0 &= 13 (a - b)^2 + 3 (a - 3b)^2 \\
IS_1 &= 13 (b - c)^2 + 3 (b + c)^2 \\
IS_2 &= 13 (c - d)^2 + 3 (3c - d)^2
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Il reste à choisir un flux pour l'Hamiltonien $\hat{H}$. Il est recommandé d'utiliser un flux de Godunov [33] qui se définit comme suit,

$$\hat{H}(u^+, u^-, v^+, v^-) = \begin{cases} S_0 \left(\sqrt{[max((u^+)^-, (u^-)^+)]^2 + [max((v^+)^-, (v^-)^+)]^2} - 1 \right) \\ S_0 \left(\sqrt{[max((u^+)^+, (u^-)^-)]^2 + [max((v^+)^+, (v^-)^-)]^2} - 1 \right) \end{cases} \tag{3.50}$$

Il nous reste enfin à exprimer $S_0 = sign(\phi(x, t))$. Il est d'usage de lisser cette quantité et nous utilisons la formulation suivante,

$$S_0 = \frac{\phi(x, t)}{\sqrt{(\phi(x, t))^2 + (\Delta x)^2}} \tag{3.51}$$

Ce lissage est nécessaire pour obtenir de meilleures propriétés de conservation et pour assurer la stabilité. Certains auteurs comme Croce [18] ou Peng [64] préfèrent d'autres formulations pour tenter d'améliorer les performances de l'algorithme de réinitialisation mais nous n'avons pas trouvé en ce qui nous concerne une amélioration manifeste, les problèmes numériques étant plus profond. L'équation de redistanciation peut en effet se réécrire sous une forme d'équation de convection hyperbolique,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t'} + \left(sign(\phi(x, t)) \frac{\nabla \Phi}{\|\nabla \Phi\|} \right) \cdot \nabla \Phi = sign(\phi(x, t)) \tag{3.52}$$

montrant que l'information se propage suivant les caractéristiques partant de l'interface suivant la normale vers l'extérieur. Ce croisement des caractéristiques est l'explication des difficultés numériques pour garder une interface intacte [79].

La forme Eq.(3.52) montre également que la vitesse de propagation est unitaire. Les pas de temps et d'espace étant confondus, on définit le pas de temps ainsi,

$$\Delta x^r = 0.25 \text{ ou } 0.5 \Delta x \quad (3.53)$$

En général, nous préférons réaliser 3 itérations de redistance avec $\Delta x^r = 0.5\Delta x$ correspondant au meilleur compromis trouvé entre précision et temps de calcul.

3.3.4 Exemple de redistanciation

Il est proposé ici un exemple de mise en oeuvre de la résolution numérique de l'équation de redistanciation avec les schémas qui viennent d'être présentés. Nous allons mettre en lumière l'importance de la redistanciation pour calculer au mieux la courbure κ à l'interface.

Nous choisissons une Level-Set représentant une interface circulaire de rayon $R = 0.01$ placée au centre d'un domaine de calcul $[-0.02, 0.02]^2$. Nous perturbons la Level-Set par un signal tel que l'interface soit inchangée et tel que les autres iso contours soient de plus en plus faux au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'interface,

$$\begin{cases} \phi(x, y) = d + \frac{R}{20} \sin\left(\frac{\pi d}{R}\right) \sin(5\theta) \\ \text{avec } d = R - \sqrt{x^2 + y^2} \text{ et } \theta = \tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right) \end{cases} \quad (3.54)$$

Le résultat de la simulation pour un maillage 64^2 est donné Fig.(3.6) avec $\Delta x^r = 0.5\Delta x$. Tout d'abord, on s'aperçoit qu'il n'y a pas de différence discernable à l'oeil de la position de l'interface alors que les iso contours de la Level-Set sont repositionnés correctement au fur et à mesure que l'onde numérique se propage des deux côtés de l'interface. Ensuite, nous avons placé à côté de la Level-Set le calcul de la courbure κ par un schéma centré. Initialement, l'erreur de calcul pour un point proche de l'interface est assez significative à la vision des iso contours. Par contre, le résultat est nettement amélioré avec l'application de l'algorithme de redistance. Toutefois, les erreurs de discrétisation font apparaître des oscillations parasites pour les iso contours alors que ceux-ci devraient être parfaitement circulaires. En conclusion, cet exemple montre bien tout l'avantage de redistancier pour calculer au mieux la courbure mais montre également toutes ses limites.

3.4 Cas tests académiques

Afin de tester les méthodes de suivi d'interface, une quantité importante de cas de simulation ont été imaginés au fil des années de développement. Non seulement ces simulations permettent de quantifier les performances des méthodes et ainsi de les comparer, mais elles donnent également une aide à la mise en pratique des schémas numériques. Les simulations dites du "disque de Zalesak" et du "Serpentin" sont les plus souvent rencontrées dans la littérature, nous les avons donc logiquement réalisées. Chacune d'entre elles est calibrée pour un problème bien particulier, la formation de filaments dans le cas du serpent et le transport d'angle de contact dans le cas

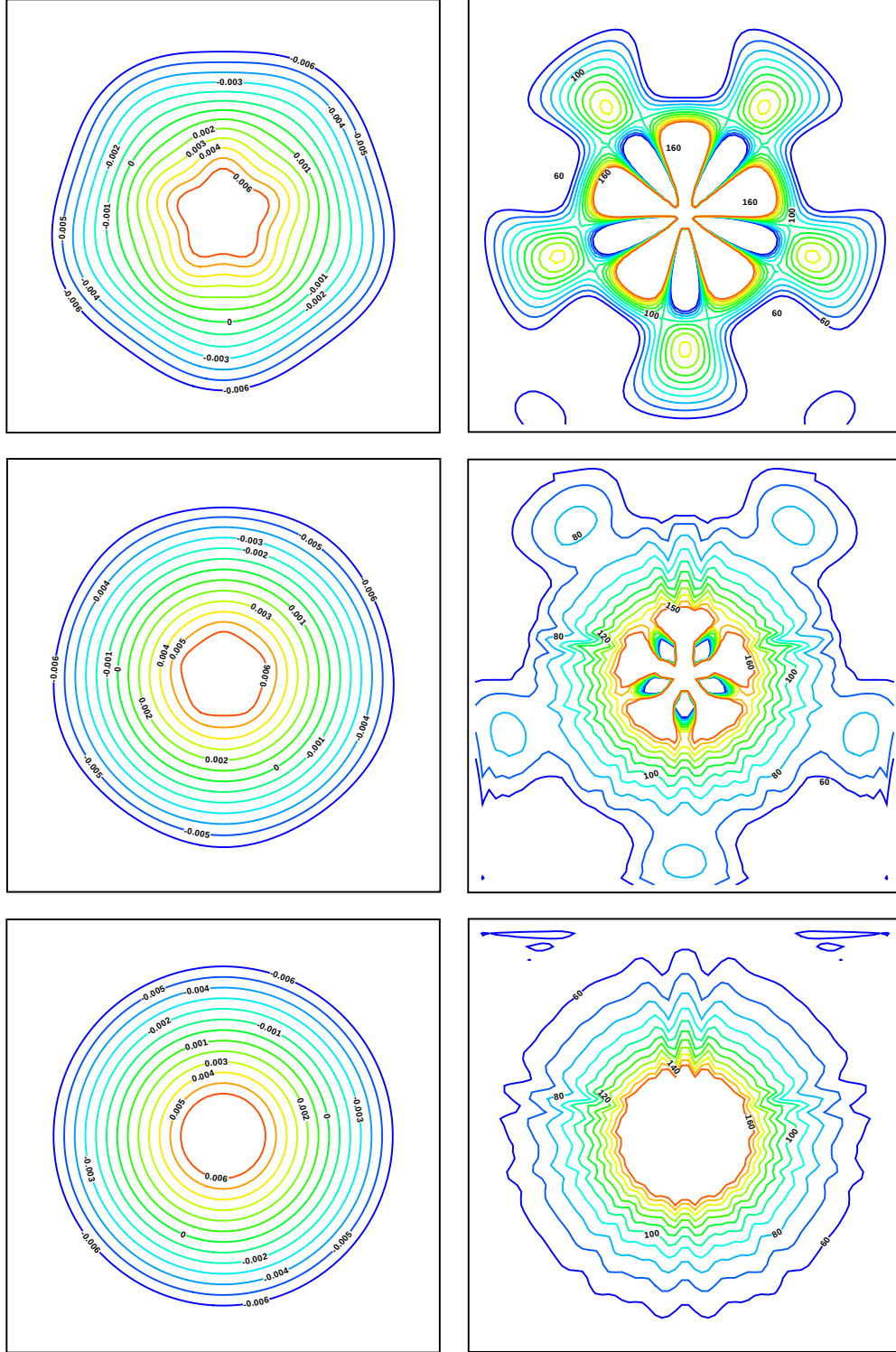


FIG. 3.6 – Exemple de redistanciation d’une interface circulaire perturbée par un signal Eq.(3.54) ; L’évolution du calcul va de haut en bas : initial, 16 itérations de redistance et 32 itérations de redistance ; (à gauche) Iso contours de la Level-Set ; (à droite) Iso contours de la courbure κ calculés avec le schéma Eq.(5.24,5.25).

du disque de Zalesak. Nous mesurons les écarts à la solution théorique et non pas seulement les pertes ou gains de masse car nous verrons qu’une telle mesure est bien souvent trop restrictive pour une question de logique implacable.

La méthode Level-Set présente l’inconvénient de l’utilisation de l’algorithme de redistanciation pour les raisons que nous venons d’exposer. Les résultats qui vont être présentés seront toujours donnés avec et sans l’utilisation de cet algorithme (en sachant que la non utilisation de cet algorithme casse la propriété distance de la méthode et donc l’accès au calcul de la normale). La volonté de mesurer l’impact sur les performances de la méthode des schémas de discrétisation de l’équation de transport en dissociation de celui de l’algorithme de redistanciation en est évidemment la raison. Nous verrons que tous deux ont des effets similaires qui se juxtaposent l’un à l’autre.

3.4.1 Disque de Zalesak

Dans ce cas, on considère la rotation d’un disque de Zalesak [114], cercle épuré d’une fente suivant son diamètre. Ce cas test permet d’identifier les problèmes de dispersion et de diffusion des schémas numériques. En effet, la présence de singularités permet de mesurer ces effets puisqu’il existe de forts gradients locaux.

Paramétrisation des calculs

Étant donné un domaine de calcul $[0, 100]^2$, un disque de rayon 15 et possédant une fente de largeur de 5 et de hauteur 25 est centré au point (50, 75). Un champ de vitesse stationnaire tournoyant est défini par les équations suivantes,

$$\begin{aligned} u &= (\pi/314)(50 - y) \\ v &= (\pi/314)(x - 50) \end{aligned} \tag{3.55}$$

Ce champ est tel qu’au bout d’un temps $t = 628s$ le disque soit exactement revenu à sa position initiale sans aucune déformation, d’où le caractère fort pratique de ce cas test par la possibilité de mesurer directement l’erreur commise par superposition des disques advectés à chacune des rotations complètes. Suivant la condition CFL, le pas de temps qui a été utilisé est le suivant,

$$\Delta t = \Delta x \tag{3.56}$$

Lorsque la redistanciation est activée, 3 itérations de redistance sont effectuées suivant un pas d’espace $\Delta x^r = 0.5\Delta x$.

Résultats graphiques

Pour un maillage 128^2 , les Fig.(3.7) et (3.8) nous montrent le résultat des simulations après un tour complet du disque avec respectivement les schémas Rk3/Weno5/n et Rk3/Weno5/c. Sans redistanciation, les effets de dissipation des deux schémas se manifestent par l’arrondissement des angles du disque de Zalesak. On constate que la dissipation est moins importante avec le schéma de type conservatif Rk3/Weno5/c. Toutefois, le centre de la fente est moins bien capté en comparaison de la version non conservative même si cela reste tout à fait léger. Pour les deux schémas, l’inclusion de l’algorithme de redistanciation a pour effet d’augmenter en proportion

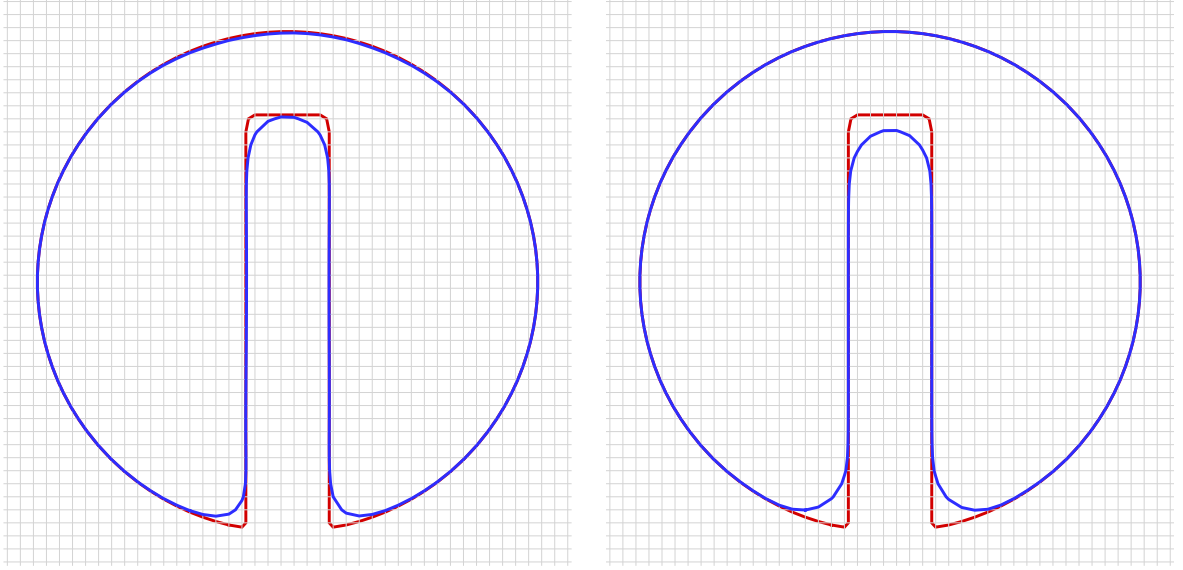


FIG. 3.7 – Cas test du disque de Zalesak avec le schéma Rk3/Weno5/c et un maillage 128^2 ; (à gauche) sans redistanciation; (à droite) avec redistanciation; (en rouge) la solution exacte; (en bleue) la solution numérique après un tour de rotation

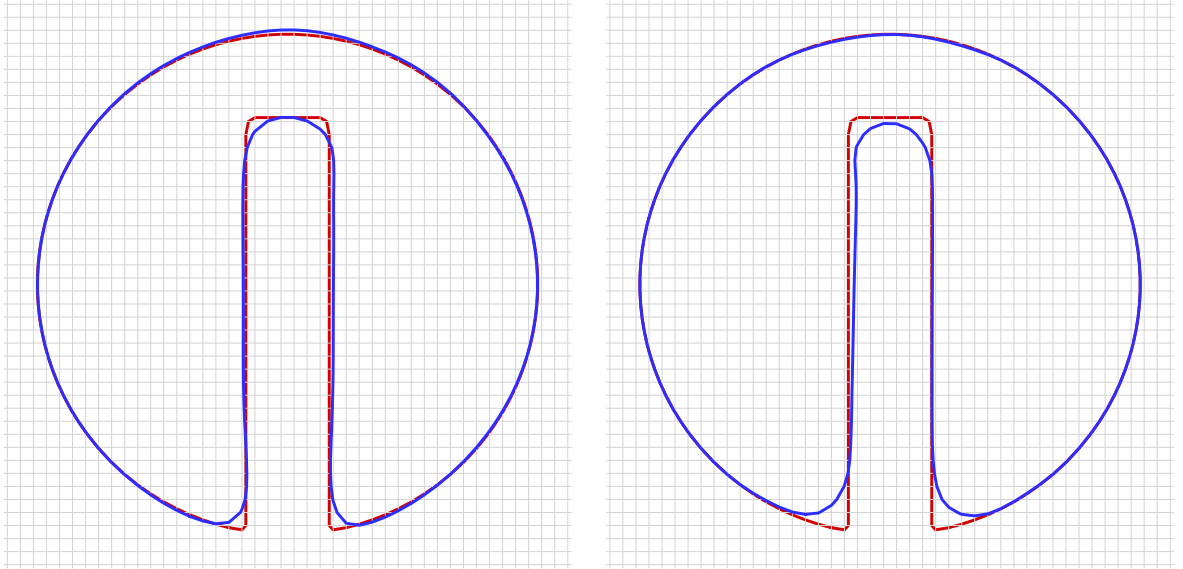


FIG. 3.8 – Cas test du disque de Zalesak avec le schéma Rk3/Weno5/n et un maillage 128^2 ; (à gauche) sans redistanciation; (à droite) avec redistanciation; (en rouge) la solution exacte; (en bleue) la solution numérique après un tour de rotation

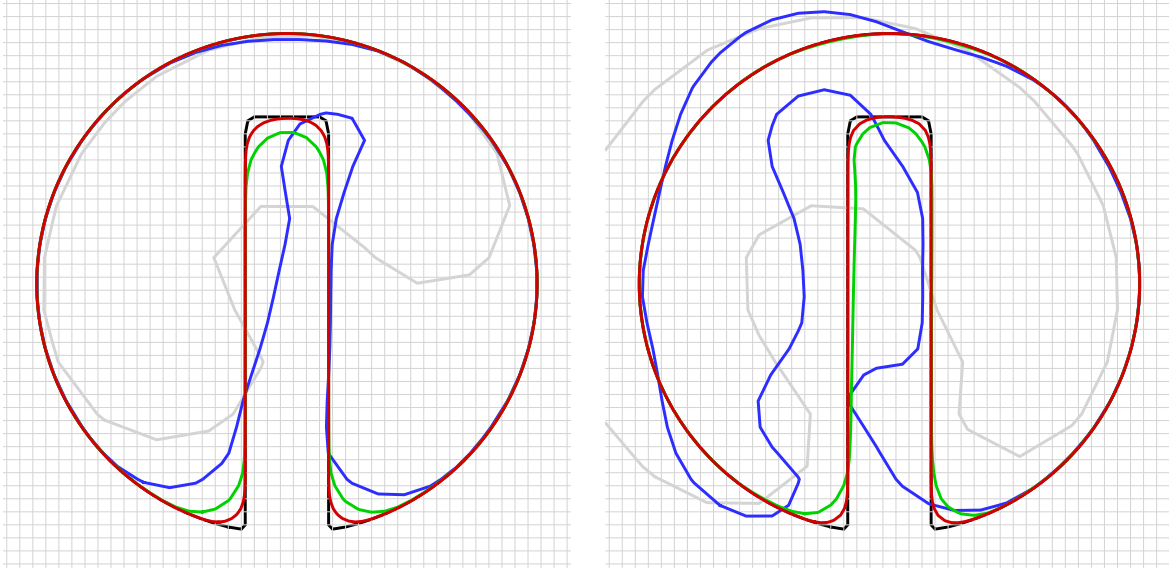


FIG. 3.9 – Cas test du disque de Zalesak pour différents maillages avec redistanciation : gris - 32^2 , bleue - 64^2 , vert - 128^2 , rouge - 256^2 , noir - solution exacte ; (à gauche) avec le schéma Rk3/Weno5/n ; (à droite) avec le schéma Rk3/Weno5/c ; (la grille correspond à un maillage 128^2)

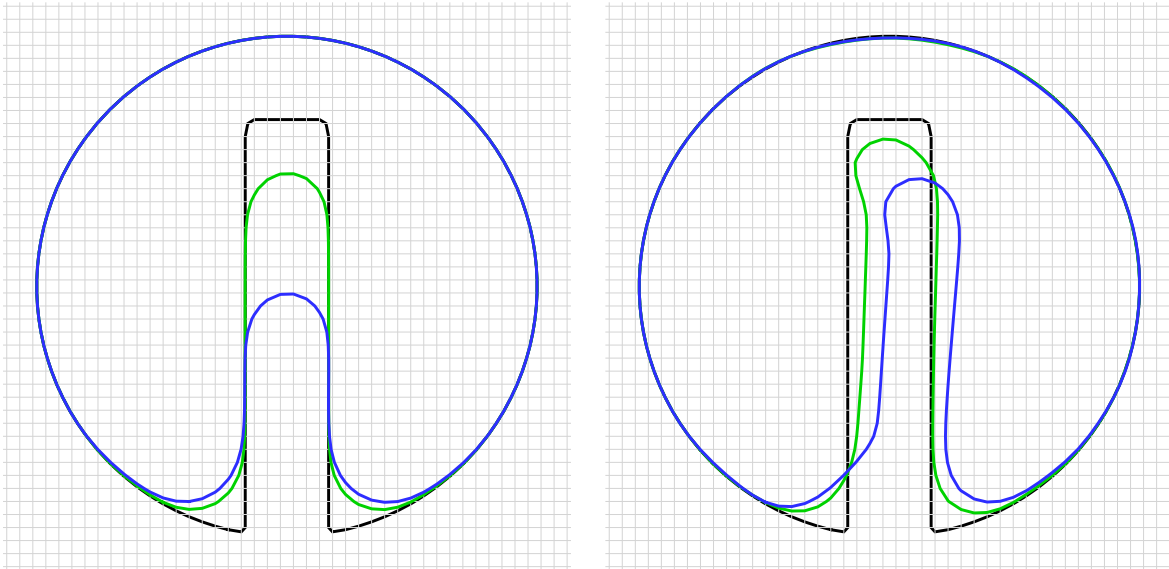


FIG. 3.10 – Cas test du disque de Zalesak après plusieurs tours de rotation pour un maillage 128^2 avec redistanciation : vert - 3 tours, bleue - 10 tours ; (à gauche) avec le schéma Rk3/Weno5/n ; (à droite) avec le schéma Rk3/Weno5/c

l'arrondissement des angles. Il a donc sur ce cas un effet concret tout à fait similaire à la dissipation numérique. Les figures (3.9) et (3.10) nous montrent quelques résultats complémentaires lorsque la redistanciation est effective. Sur la Fig.(3.9), on s'aperçoit qu'il existe en quelque sorte un maillage minimum pour capter correctement l'advection du disque. Si les résultats sur les maillages 32^2 et 64^2 ne sont pas incohérents, un maillage 128^2 semble nécessaire pour la capture soit plus que correcte. La Fig.(3.10) met en avant la nuance qui existe entre les schémas Rk3/Weno5/n et Rk3/Weno5/c. Pour la version non conservative, il n'existe pas de décalage de la fente au contraire de la version conservative mais la diffusion est nettement plus importante.

	Sans redistanciation				Avec redistanciation			
	Rk3/Weno5/n		Rk3/Weno5/c		Rk3/Weno5/n		Rk3/Weno5/c	
Maillage	$\ E_\phi\ _{L_1}$	q	$\ E_\phi\ _{L_1}$	q	$\ E_\phi\ _{L_1}$	q	$\ E_\phi\ _{L_1}$	q
32^2	0.371	-	0.293	-	3.845	-	2.227	-
64^2	0.131	1.50	0.106	1.47	0.497	2.95	0.643	1.79
128^2	0.066	0.99	0.057	0.89	0.162	1.62	0.143	2.17
256^2	0.047	0.49	0.043	0.41	0.057	1.51	0.051	1.49

TAB. 3.1 – Disque de Zalesak : normes de l'erreur $\|E_\phi\|_{L_1}$ au bout d'une rotation complète et taux de convergence q associé

Normes de l'erreur

Dans un premier temps, nous pourrions être tenté de mesurer les pertes de masse afin de quantifier les erreurs dans le transport du disque. Or, on s'aperçoit que l'on gagne de la masse sur le haut de la fente alors que l'on en perd sur le bas, les deux s'annulant donc en quelque sorte l'un l'autre. En conséquence, il est préférable de construire une norme d'erreur. Afin d'exploiter la possibilité de mesure directe par superposition des disques après une rotation complète, nous construisons une norme discrète L^1 de l'erreur entre ϕ^{ini} , correspondant aux valeurs de ϕ initiales décrivant le disque de Zalesak, et ϕ^{calc} , correspondant aux valeurs de ϕ calculées au bout d'un temps $t = 628s$ correspondant à un tour du disque. Cette norme peut tout à fait s'appliquer dans les cas sans et avec redistance puisque tous les iso contours de la Level-Set sont sensés revenir à leur position initiale sans déformation tout comme le disque.

$$\|E_\phi\|_{L_1} = \frac{1}{nx \ ny} \sum_{i,j} \left| \phi_{i,j}^{ini} - \phi_{i,j}^{calc} \right| \quad (3.57)$$

En utilisant cette norme, l'ensemble des résultats obtenus sont répertoriés dans le Tab.(3.1). Ces résultats amènent quelques commentaires. Tout d'abord, on constate que la redistanciation est nettement plus pénalisante sur la qualité du résultat en comparaison de la diffusion propre

des schémas numériques d'advection de la Level-Set même si ce n'est pas d'une évidence flagrante sur les Fig.(3.7) et (3.8). Ensuite, le résultat graphique sur la Fig.(3.9) est confirmé, il existe un maillage minimum tel que le disque soit correctement advecté. Enfin, les normes calculées nous indiquent la supériorité quasi systématique du schéma Rk3/Weno5/c sur le schéma Rk3/Weno5/n. En conclusion, le calcul des normes d'erreur $\|E_\phi\|_{L_1}$ confirme toutes les observations graphiques.

3.4.2 Serpentin

Le cas test du serpentin introduit par Bell, Collela et Glaz [3] permet cette fois ci de quantifier les performances d'une méthode de suivi d'interface lorsque l'interface s'étire jusqu'à former un long ligament sous l'effet d'un écoulement cisailant. Ce cas test est sévère puisque comme nous allons le voir le ligament s'étire indéfiniment avec le temps produisant inévitablement une situation de sous résolution. Tout d'abord, les schémas numériques employés doivent être suffisamment robustes pour éviter que le code ne diverge face à une telle situation. Ensuite, ils doivent être suffisamment précis pour capter le mieux possible le ligament lorsque sa largeur approche celle de la maille et ainsi conserver la surface initiale. Il est très intéressant de tester la méthode de suivi d'interface dans une telle situation car elle se retrouve quasi inévitablement lorsque l'on désire simuler des écoulements diphasiques cisailant comme dans le cas qui nous intéresse, un jet liquide cisailé par un courant gazeux.

Paramétrisation des simulations

On considère un domaine carré $[0, 1]^2$, un cercle de rayon 0.15 est placé à l'instant initial au point (0.5, 0.75). Un champ de vitesse $\mathbf{u}$ tournoyant stationnaire est défini par le potentiel des vitesses suivant,

$$\psi = \frac{1}{\pi} \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y) \quad (3.58)$$

Suivant la condition CFL, le pas de temps utilisé lors des simulations est le suivant,

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{2} \quad (3.59)$$

Lorsque la redistanciation est effective, 3 itérations de redistance sont réalisées dans tous les cas suivant un pas d'espace $\Delta x^r = 0.5\Delta x$.

Résultats graphiques

Pour un maillage 128^2 et un temps de simulation $t = 3s$, les résultats de simulations sont donnés sur les Fig.(3.11) et (3.12).

Au regard de la solution exacte, l'interface a subit de très larges déformations à $t = 3 s$. Le cercle initial s'est transformé en un serpent de plus en plus long au fur et à mesure du temps et qui s'enroule autour du point central. Tout d'abord, nous pouvons nous apercevoir que l'interface est globalement bien capturée pour le maillage et le temps d'arrêt considérés. Si l'on observe la solution exacte et le bout de la queue du serpent, on constate que la largeur du filament approche sensiblement l'ordre de grandeur de la maille, voir même en dessous pour la toute fin. Nous pouvons donc considérer que la méthode Level-Set associée aux schémas Rk3/Weno est de bonne facture sur ce cas même si elle n'est pas parfaite.

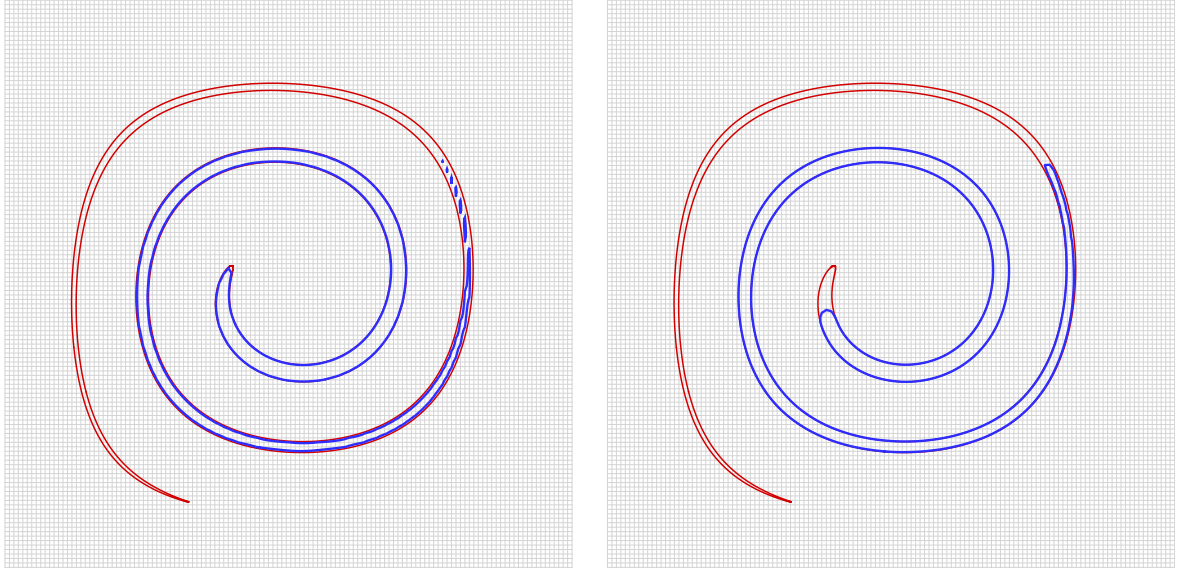


FIG. 3.11 – Cas test du serpent in avec le schéma Rk3/Weno5/n pour un maillage 128^2 et pour un temps de simulation $t = 3$ s ; (en rouge) la solution exacte ; (en bleue) la solution numérique ; (à gauche) sans redistanciation ; (à droite) avec redistanciation

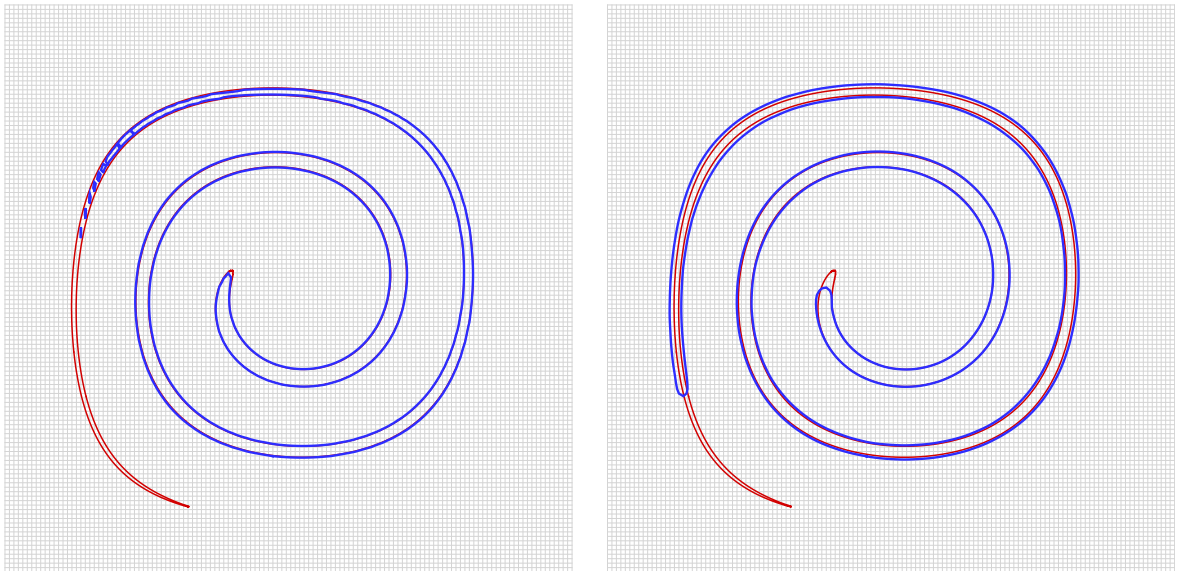


FIG. 3.12 – Cas test du serpent in avec le schéma Rk3/Weno5/c pour un maillage 128^2 et pour un temps de simulation $t = 3$ s ; (en rouge) la solution exacte ; (en bleue) la solution numérique ; (à gauche) sans redistanciation ; (à droite) avec redistanciation

Néanmoins, il existe d'importantes nuances entre les deux schémas employés, et plus importantes encore lorsqu'on utilise l'algorithme de redistanciation. Intrinsèquement, le schéma Rk3/Weno5/c issu d'une discrétisation conservative de l'équation de transport capture nettement mieux la queue du serpent, sur une longueur assez conséquente alors que tout le long la largeur est proche de la taille de la maille. La redistanciation a quant à elle pour effet d'épaissir artificiellement la fin de la queue, ce qui a pour effet plutôt paradoxal d'améliorer la conservation de la masse. Cependant, on peut remarquer que la tête du serpent n'est pas correctement capturée, le léger gradient a été lissé sous l'effet diffusif de l'opération redistance comme on a pu le voir avec le cas test du disque de Zalesak. Cet effet est bien plus important avec une discrétisation de type non conservatif Rk3/Weno5/n sans que l'on puisse avancer une explication rationnelle puisque les résultats sont quasi identiques sans redistanciation concernant la tête du serpent.

Évolution de la surface du serpent

Afin de donner quelques compléments aux résultats graphiques des Fig.(3.11) et (3.12), l'évolution dans le temps de la surface du serpent pour différents maillages est donnée sur les Fig.(3.13) et Fig.(3.14). Les courbes Fig.(3.13) correspondent aux surfaces obtenues sans redistanciation. Elles mettent en avant la supériorité systématique du schéma Rk3/Weno5/c sur le schéma Rk3/Weno5/n quel que soit le maillage et dans des proportions assez importantes. C'est bien simple, il est nécessaire de doubler le maillage dans le cas du schéma Rk3/Weno5/n pour obtenir un résultat proche de celui du schéma Rk3/Weno5/c. Sur la Fig.(3.14), représentant les courbes obtenues de la surface du serpent quand la redistanciation est effective, il est plus difficile de faire des discernements entre les deux schémas. Il est assez amusant de constater que les résultats sont quasi symétriquement opposés. Le schéma Rk3/Weno5/n produit toujours des pertes de masse tandis que l'on gagne toujours avec le schéma Rk3/Weno5/c. Les proportions de pertes et de gains sont les mêmes en fonction du maillage utilisé. Ce résultat met encore en avant l'effet assez trouble de la redistance comme on a pu le voir sur les résultats graphiques des Fig.(3.11) et (3.12). La dissipation numérique engendrée par la redistance peut faire perdre ou gagner de la masse sur le cas du serpent mais aura par contre toujours tendance à gonfler les erreurs numériques de transport de l'interface. On peut facilement le constater si l'on observe pour un temps donné les pertes ou gains de masse avec et sans redistanciation pour le même maillage et le même schéma.

3.5 Conservation de la masse

La méthode Level-Set est souvent à juste titre montrée du doigt pour des problèmes de conservation de la masse. La méthode VOF lui est du coup souvent préférée car elle assure intrinsèquement cette conservation par le biais d'algorithmes d'advection géométrique. Cependant, si les problèmes de conservation de la masse de la méthode Level-Set étaient durant les années 90 bel et bien très limitatifs quant au champ d'investigation des écoulements diphasiques, l'usage de schémas de discrétisation d'ordre très élevés en temps et en espace réduit considérablement le problème. Nous avons pu voir au paragraphe précédent que nous obtenons des résultats probants avec les schémas Rk3/Weno5/n et Rk3/Weno5/c, en particulier pour le cas test du serpent. Il reste que ce problème est toujours d'actualité et de nombreux laboratoires de recherche s'activent pour trouver des solutions.

Appliquée à la résolution des équations de Navier-Stokes diphasiques, la méthode Level-Set fait surgir des problèmes de conservation lorsque le saut de masse volumique est important à l'interface (typiquement pour des simulations eau/gaz ce qui est fort gênant), ou surtout lorsque

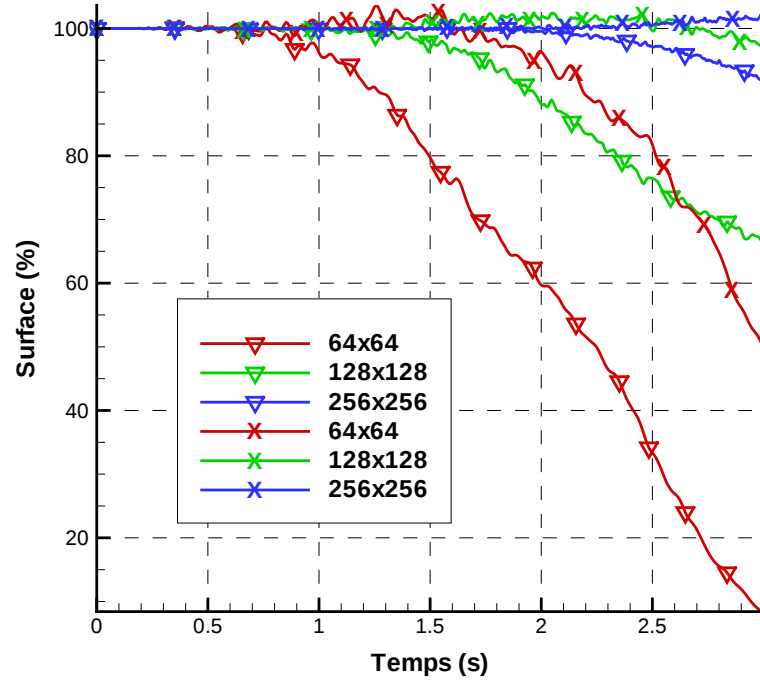


FIG. 3.13 – Évolution dans le temps de la surface du serpent sans redistance (les gradients correspondent au schéma Rk3/Weno5/n et les croix au schéma Rk3/Weno5/c)

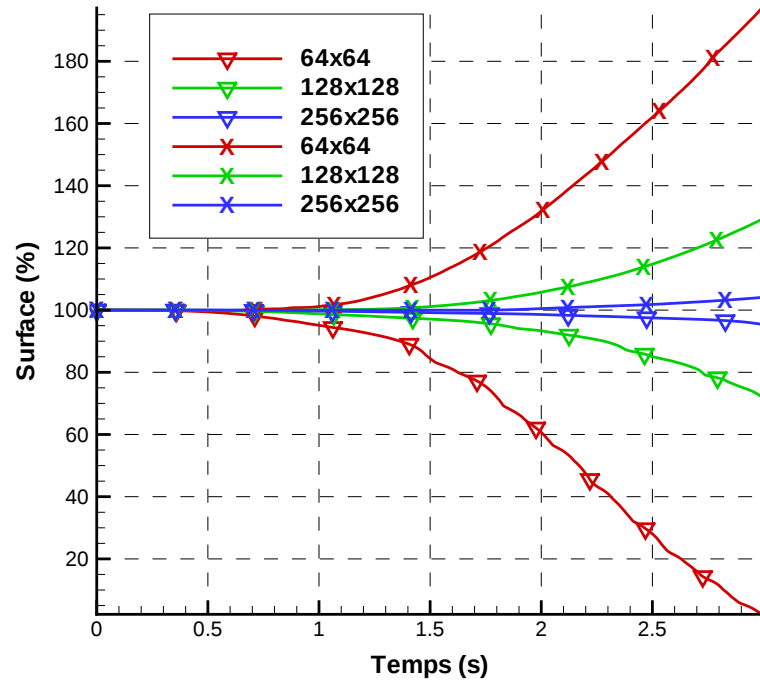


FIG. 3.14 – Évolution dans le temps de la surface du serpent avec redistance (les gradients correspondent au schéma Rk3/Weno5/n et les croix au schéma Rk3/Weno5/c)

des gouttes arrachées à un important volume de liquide vont se retrouver isolées dans le domaine de calcul car elles vont disparaître assez rapidement au fur et à mesure de l'avancement en temps si le maillage n'est pas suffisant. Il est spécialement important de corriger cette non conservation de masse pour simuler la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux.

Il est souvent associé au problème de conservation de la masse l'algorithme de redistanciation, et très certainement de façon trop exclusive. En effet, nous avons pu constater que l'algorithme de redistanciation n'a qu'un effet cumulatif avec les schémas de discrétisation de l'équation de transport de l'interface quant aux erreurs de transport de l'interface. Les problèmes de conservation de la masse sont exclusivement liés aux erreurs de discrétisation, et spécialement en cas de sous résolution, pour les deux équations que nous résolvons successivement.

Nous allons à présent présenter quelques unes des principales solutions qui ont été imaginées pour résoudre ce problème de conservation de la masse. En suivant l'ordre chronologique de l'histoire de leur développement, elles sont les suivantes : la méthode de redistanciation sous contrainte de résolution, le couplage avec une méthode VOF et le couplage avec une méthode Front-Tracking. Nous parlerons dans un dernier temps d'une méthode peu utilisée mais diablement efficace : la méthode par choix de contour.

3.5.1 Redistanciation sous contrainte

Sussman et Fatemi ont proposé dans [98] une amélioration de l'algorithme de redistanciation standard ayant pour but d'éliminer le déplacement de l'interface lors de cette opération. L'idée est de rajouter une contrainte locale dans l'équation de redistanciation. Cette contrainte a pour but d'assurer la conservation de la masse d'un point de vu numérique puisque théoriquement, l'équation de redistanciation initiale devrait assurer cette propriété.

Nous définissons la contrainte par une fonction f , l'équation de redistanciation s'écrivant alors sous la forme suivante,

$$\begin{cases} \frac{\partial \Phi}{\partial t'} = S(\phi) (1 - \|\nabla \Phi\|) + \lambda f(\phi) = L(\phi, \Phi) + \lambda f(\phi) \\ \Phi(x, t' = 0) = \phi(x, t) \end{cases} \quad (3.60)$$

où λ est uniquement une fonction de t . Nous ne nous intéressons pas dans un premier temps à f mais plutôt à λ . Pour déterminer au mieux cette valeur, nous nous donnons l'équation suivante qui assure la propriété de conservation de la masse,

$$\partial_t \int_{\Omega} H^\epsilon(\phi) = 0 \quad (3.61)$$

où H^ϵ est une fonction de Heaviside régularisée. A partir de cette équation, nous pouvons écrire les développements suivants,

$$\partial_t \int_{\Omega} H^\epsilon(\phi) = \int_{\Omega} H^{\epsilon'}(\phi) \phi_t = \int_{\Omega} H^{\epsilon'}(\phi) (L(\phi, \Phi) + \lambda f(\phi)) = 0 \quad (3.62)$$

λ peut alors se calculer de la manière suivante,

$$\lambda = \frac{-\int_{\Omega} H^{\epsilon'}(\phi) L(\phi, \Phi)}{\int_{\Omega} H^{\epsilon'} f(\phi)} \quad (3.63)$$

Il reste à se donner une définition pour f , résolution propose d'utiliser la suivante,

$$f(\phi) = H^{\epsilon'}(\phi) |\nabla \phi| \quad (3.64)$$

Avec cette définition, les corrections ne se font que proche de l'interface, sans perturber la fonction distance plus loin de l'interface. Il est à noter que si la redistanciation ne change pas le zéro de la Level-Set, alors l'effet de la contrainte sera nul puisque λ sera égal à zéro. Pour appliquer la méthode d'un point de vue numérique, nous émettons la remarque que la masse doit être conservée de la même manière dans chacune des cellules de calcul Ω_{ij} . On calcule ainsi dans la pratique une valeur de λ pour chacune des cellules afin de corriger Φ_{ij} . Au final, la méthode de redistanciation avec contrainte de Sussman et Fatemi s'écrit,

$$\begin{cases} \Phi_t = L(\phi, \Phi) + \lambda_{ij} f(\phi) \\ \lambda_{ij} = \frac{-\int_{\Omega_{ij}} H^{\epsilon'}(\phi) L(\phi, \Phi)}{\int_{\Omega_{ij}} H^{\epsilon'} f(\phi)} \end{cases} \quad (3.65)$$

En appliquant cette méthode aux cas tests classiques tel que le disque de Zalesak, Sussman et Fatemi ont conclu à une minoration des déplacements de l'interface dus à l'application de l'équation de redistanciation. On peut toutefois regretter qu'en l'état, cette méthode ne règle en rien les erreurs effectuées lors de l'étape d'advection de la Level-Set (nous devrions pouvoir réussir à le réaliser en modifiant l'algorithme). Ensuite, cette méthode altère la régularité de la Level-Set et par conséquent le calcul des propriétés géométriques de l'interface. De plus, nous verrons que cette méthode est en quelque sorte obsolète vis à vis de la méthode par choix de contour. En conclusion, la méthode de redistanciation sous contrainte n'est plus vraiment d'actualité mais le concept n'est pas à oublier.

3.5.2 Couplage avec une méthode VOF

Afin d'assurer la conservation de la masse, il peut paraître judicieux d'utiliser la méthode VOF. Par le biais d'algorithmes d'advection géométriques, elle assure de façon intrinsèque cette propriété comme nous l'avons vu lors du chapitre de présentation des méthodes de suivi d'interface. Or nous avons vu aussi que cette méthode possède un handicap de taille vis à vis de la méthode Level-Set qui est le calcul de la courbure à l'interface, ce problème étant mis en évidence par le test de la bulle statique. La méthode VOF avec un algorithme d'advection géométrique a aussi la fâcheuse tendance à produire dans des cas de sous résolution de petites structures ("flot-sam")⁵ pour assurer cette conservation de la masse [36]. La méthode Level-Set quant à elle donne une solution bien plus visqueuse, elle est bien plus lisse et continue. Dans ce sens, A.Bourlioux [5] a été le premier auteur à imaginer qu'un couplage entre les deux méthodes était possible afin d'exploiter les propriétés avantageuses de chacune des méthodes avant que M.Sussman [99, 96]

⁵Dans le cas de la simulation de la désintégration d'un liquide, ce problème peut induire un nuage de gouttes non physique

améliore et démocratise plus tard cette méthode. La méthode Level-Set assure la capture spatio-temporelle de l'interface ainsi que le calcul des propriétés géométriques tandis que la méthode VOF nous sert à corriger les pertes ou gains de masse à chaque itération en temps.

Il est quasi immédiat de définir une fonction taux de présence à partir de la Level-Set par le biais de l'intégration dans une cellule d'une Heaviside régularisée de la Level-Set. L'inverse est malheureusement nettement plus délicat à réaliser. M.Sussman [99, 96] a tout de même réussi à construire un algorithme relativement complexe permettant de réaliser cette opération (algorithme basé sur une méthode de dichotomie). Il a par la suite comparé les résultats obtenus avec sa méthode de couplage nommée CLSVOF avec les méthodes originelles seules. Il est conclu qu'à la différence de la méthode Level-Set, les pertes de masse ne dépassent jamais plus de 20 %, les pertes de masse ont été nettement minorées. Néanmoins, les corrections des valeurs de la Level-Set à partir de la fonction taux de présence altèrent sa régularité impliquant un calcul moins performant des propriétés géométriques de l'interface que si l'on utilisait la méthode Level-Set seule. En conséquence, pour des écoulements où la tension de surface est dominante, la précision des calculs sera moindre. La méthode de couplage est toutefois toujours supérieure à la méthode VOF originelle sur la précision du calcul de la normale et de la courbure. Enfin, il est à noter que le temps de calcul additionnel nécessaire au couplage est presque négligeable par rapport au reste et que la parallélisation est naturelle et quasi immédiate.

En conclusion, cette méthode de couplage représente une bonne alternative aux méthodes Level-Set et VOF. On obtient une méthode hybride qui n'a certes pas gardé les qualités des méthodes originelles mais a par contre largement minoré les défauts. En ce qui concerne la simulation de la désintégration, on garde cependant un défaut de la méthode VOF : la tendance à créer des gouttes non physiques mise en évidence par le cas test du serpent ("flotsam"). La méthode de couplage avec des marqueurs présentée dans le paragraphe suivant est sur ce point meilleure.

3.5.3 Couplage avec une méthode de suivi de marqueurs

Le défaut du couplage avec une méthode VOF est qu'il est délicat de calculer une Level-Set à partir d'une fonction taux de présence. Cette difficulté est surtout liée au fait que les deux méthodes sont eulériennes. De plus, si la méthode VOF conserve la masse explicitement, la précision dans le transport de l'interface n'est pas manifeste. En revanche, les méthodes de marqueurs sont connues pour être très précises dans le transport de l'interface grâce à la nature lagrangienne avec par conséquent une très bonne conservation de la masse même si celle-ci n'est pas explicite. Enright et al. [22] ont dans ce sens préféré coupler la méthode Level-Set avec une méthode marqueurs de volume.

En pratique, Enright distribue le plus uniformément possible des marqueurs de part et d'autre de l'interface dans une bande dont la distance à l'interface est fixée grâce à une petite procédure comme sur la Fig.(3.15) (de 2 à 3 mailles de calcul). On attribue initialement un signe aux marqueurs en fonction du sous domaine dans lequel ils se trouvent. Ces marqueurs sans masse sont ensuite advectés passivement par le champ de vitesse dans le même temps que la Level-Set. Au regard du signe de la Level-Set calculée, si des marqueurs sont passés de l'autre côté de l'interface, alors ils indiquent un mauvais transport local de l'interface. Il reste alors à trouver un moyen de recalculer la Level-Set à partir de ces marqueurs.

L'idée originale et majeure de Enright réside dans l'attribution d'un rayon fictif aux marqueurs tel que l'interface soit tangente au cercle ainsi défini comme sur la Fig.(3.16). Le rayon

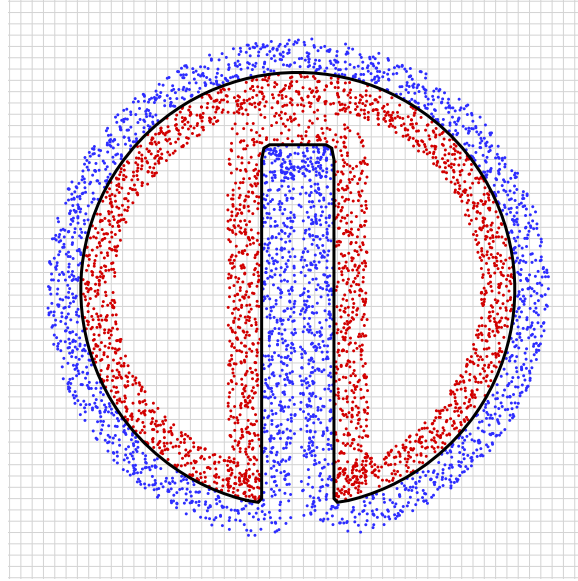


FIG. 3.15 – Initialisation des marqueurs de volume dans une bande de chaque côté de l'interface

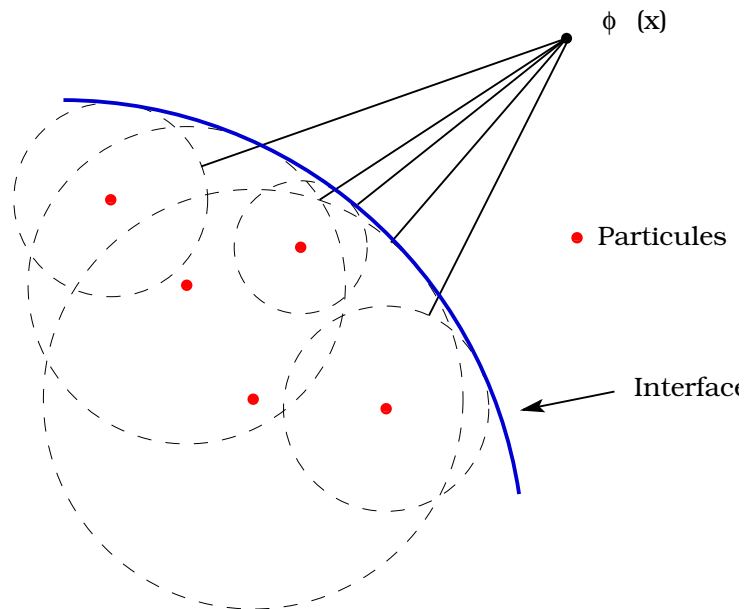


FIG. 3.16 – Schématisation du calcul de la valeur de la Level-Set à partir de marqueurs de volume, les cercles représentant leur rayon fictif ayant pour valeur la distance à l'interface

représente tout simplement la distance à l'interface directement calculable par interpolation de la Level-Set sur la grille de calcul.

Nous pouvons constater sur la Fig.(3.16) que si le nombre de marqueurs est suffisant pour que les cercles se chevauchent, alors l'ensemble des cercles peuvent définir une interface tangente à chacun d'entre eux avec une bonne précision. En supposant que les marqueurs sont advectés exactement, alors cette interface est la bonne solution du problème. En définissant une Level-Set associée à chacun des marqueurs par,

$$\phi_p(\mathbf{x}) = r_p - (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \quad (3.66)$$

où r_p est le rayon fictif de la particule et $\mathbf{x}_p$ sa position, on peut calculer avec une bonne précision la valeur de la Level-Set en un point $\mathbf{x}$ situé de l'autre coté de l'interface vis à vis des marqueurs par,

$$\phi(\mathbf{x}) = \min_{\forall p} (\phi_p(\mathbf{x})) \quad (3.67)$$

ce qui représente concrètement la longueur minimale entre le point $\mathbf{x}$ et les points représentant l'intersection de la ligne passant par $\mathbf{x}$ et $\mathbf{x}_p$ avec le cercle fictif comme schématisé sur la Fig.(3.16). Il reste alors à attribuer le signe à la Level-Set en fonction du sous domaine dans lequel se trouve le point $\mathbf{x}$.

Il est essentiel de remarquer que le calcul de la Level-Set en un point $\mathbf{x}$ nécessite forcément l'utilisation des marqueurs situés de l'autre côté de l'interface. Or, nous ne pouvons pas à priori connaître avec exactitude à quel sous domaine appartient un point $\mathbf{x}$ dont l'on veut recalculer la distance signée à l'interface. Nous pourrions penser dans un premier temps que les marqueurs peuvent donner cette information mais les erreurs d'interpolation font que des cercles situés de part et d'autre de l'interface peuvent se chevaucher d'où une indétermination. C'est le principal problème de la méthode que Enright [22] a résolu grâce à un artifice algorithmique dont il est difficile de déterminer la pertinence. Il n'a toutefois pas assez bien mis en évidence le problème.

Un autre problème est la gestion dynamique peu évidente de la distribution dans le temps des marqueurs au cours du temps, difficulté récurrente avec les méthodes de marqueurs. Il est à noter également que le temps de calcul est largement gonflé et la parallélisation délicate à réaliser. Enfin, la Level-Set corrigé avec cette procédure est beaucoup moins lisse, le calcul de la courbure est forcément moins précis sans que cela soit dramatique. Sur ce dernier problème, il serait d'ailleurs intéressant d'effectuer des comparaisons avec le couplage d'une méthode VOF pour savoir laquelle détériore le moins le calcul des propriétés géométriques de l'interface. À priori, du fait qu'il soit plus naturel de définir une Level-Set avec des marqueurs, cela devrait être cette méthode la plus performante mais le résultat n'est pas évident.

Les résultats obtenus avec cette méthode sont tout à fait satisfaisants comme nous pouvons l'observer à la visualisation des animations d'écoulements liquide réalisées par Fedkiw et Enright ⁶. Nous avons implémenté cette méthode dans le code de calcul mais sans l'utiliser concrètement par la suite.

⁶<http://graphics.stanford.edu/~fedkiw/>

3.5.4 Choix de contour

Nous allons présenter dans ce paragraphe une dernière manière d'assurer la conservation de la masse avec la méthode Level-Set. Nous la nommons la méthode par choix de contour. La méthode utilise la propriété distance de la Level-Set et le fait que n'importe quel contour défini par $\{x \mid \phi(x) = c\}$ peut représenter l'interface.

Après les étapes successives d'advection et de redistanciation au cours d'une itération, nous savons que les erreurs de discrétisation impliquent une mauvaise capture spatio-temporelle de l'interface dans des proportions plutôt équilibrées entre les deux algorithmes. Cependant, la Level-Set est bel et bien une fonction distance après la résolution de l'équation de redistanciation. De ce constat, la méthode est très simple de mise en oeuvre puisqu'elle consiste à choisir le contour de la Level-Set tel que celui-ci assure la préservation de la masse.

Pour réaliser une telle opération dans un espace bidimensionnel (la transposition à un espace tridimensionnel se fait naturellement), on calcule la surface S_0 initiale à l'aide d'une fonction de Heaviside régularisée H^ϵ ⁷ ainsi que la surface S obtenue après la redistanciation,

$$S_0 = \int_{\Omega} H^\epsilon(\phi^n) \quad \text{et} \quad S = \int_{\Omega} H^\epsilon(\Phi) \quad (3.68)$$

Nous calculons également le périmètre P associé à la Level-Set Φ obtenue après redistanciation à l'aide de la dérivée de la Heaviside régularisée, c'est à dire une fonction de Dirac régularisée δ^ϵ ,

$$P = \int_{\Omega} \delta^\epsilon(\phi^n) \quad (3.69)$$

La Level-Set finale ϕ^{n+1} est alors calculée de la manière suivante,

$$\phi^{n+1} = \Phi - \frac{S - S_0}{P} \quad (3.70)$$

La méthode s'appuie sur le fait qu'il existe un écart très faible au cours d'une itération en temps entre la solution obtenue et la solution réelle grâce à l'utilisation de schémas d'ordre élevé. Le nouveau contour considéré pour représenter l'interface ne doit pas être aberrant vis à vis de la solution réelle. Or, il est important de noter que l'erreur supplémentaire commise sur la localisation de l'interface sera tout au plus de l'ordre de celle commise après les étapes d'advection et de redistanciation à la nuance qu'elle est répartie de façon globale et égalitaire tout le long de l'interface. Si on perd en précision sur la localisation de l'interface, l'algorithme a l'énorme avantage d'assurer intrinsèquement la conservation de la masse. Nous avons réussi à employer la méthode avec succès sur quelques cas de simulations diphasiques en comparant les solutions obtenues mais des tests supplémentaires élaborés sont à réaliser afin de valider le comportement de la méthode dans des situations extrêmes. Il semble tout de même que la méthode a des atouts indéniables malgré son aspect rudimentaire. Cependant, il est difficile de l'appliquer lorsque nous ne connaissons pas à priori la masse théorique qui doit être présente dans le domaine de calcul à un instant t . Cette situation peut arriver par exemple lors de simulations diphasiques dites spatiales comme l'atomisation d'un jet liquide où au cours d'une itération de calcul une certaine masse de liquide est injecté et qu'une autre quantité sort du domaine sans que l'on puisse la déterminer avec précision puisqu'elle change généralement constamment dans le temps de façon chaotique.

⁷Une définition d'une fonction de Heaviside régularisée est donnée dans le chapitre suivant

Chapitre 4

Traitement des conditions de saut

Sommaire

4.1 Présentation du problème	85
4.1.1 Introduction	85
4.1.2 Problématique numérique	86
4.1.3 L'équation de Poisson	87
4.2 La méthode CSF	88
4.2.1 Principe	88
4.2.2 Application aux équations de Navier-Stokes avec la méthode Level-Set	89
4.3 La méthode "Ghost-Fluid"	92
4.3.1 Principe	92
4.3.2 Application à l'équation de Poisson avec la méthode Level-Set . . .	93

Comme nous l'avons introduit au premier chapitre lors de la présentation du modèle, l'interface localisée par la fonction Level-Set est le lieu de discontinuités du à la présence de la tension de surface et à l'équilibre des forces de déformation visqueuses, résultant des conditions de saut sur la vitesse et la pression. Les propriétés physiques des fluides, la densité et la viscosité, changent également brutalement à la traversée de l'interface. Il est nécessaire de se donner les outils numériques afin de traiter ces conditions de saut avec le plus de rigueur possible. Concrètement, nous devons trouver une méthode numérique capable de raccorder les solutions des équations aux dérivées partielles à l'interface entre deux sous-espaces. Nous allons présenter au cours de ce chapitre deux d'entre elles, la méthode CSF et la méthode Ghost-Fluid. Si la méthode CSF s'appuie sur une régularisation des variables qui sautent à l'interface, ce qui est en quelque sorte une manière de contourner le problème, la méthode Ghost-Fluid a elle l'avantage de traiter le problème de front puisqu'elle est capable de délivrer des solutions discrètes discontinues à la traversée d'une interface. Nous allons voir comment nous pouvons réaliser une telle performance numérique qui n'a rien d'évidente au départ grâce aux travaux de Fedkiw et al. [48].

4.1 Présentation du problème

4.1.1 Introduction

Nous sommes dans la situation de vouloir résoudre un système d'équations aux dérivées partielles, les équations de Navier-Stokes, pour lequel la solution, la vitesse et la pression, respecte des conditions de saut à la traversée d'une interface de topologie quelconque. Le domaine d'étude

est subdivisé en deux sous-espaces délimités par l'interface représentant deux fluides bien distinct. En vertu du modèle adopté au premier chapitre, en tout point de chaque sous-espaces la vitesse et la pression sont strictement solutions des équations de Navier-Stokes. Mais faut t'il encore que l'on se donne les conditions aux limites pour fermer le système. Les conditions de saut expriment concrètement des conditions de raccord entre les solutions de chaque sous-espace. Les solutions sont en quelque sorte indépendantes l'une de l'autre, la solution dans un sous-espace donnant les conditions aux limites pour la solution dans l'autre sous-espace, suivant les conditions de saut à l'interface, et inversement. Le choix numérique qui a été fait ici est le modèle à un fluide, nous ne résolvons pas les mouvements de chaque fluide de manière indépendante, mais bien de manière couplée. Nous recherchons en chaque instant la solution globale sur l'ensemble du domaine d'étude du système d'EDP avec respect des conditions aux limites : les conditions de saut à l'interface et les conditions aux frontières du domaine.

4.1.2 Problématique numérique

Nous allons tout d'abord mettre en évidence la problématique numérique lorsqu'on recherche des solutions discrètes discontinues à la traversée d'une interface. Si la définition mathématique de la dérivée de la solution ne pose pas de problème lorsqu'on travaille avec un espace continu pour tout point aussi proche qu'il soit de l'interface, ce n'est plus le cas lorsqu'on cherche à évaluer ces dérivées de façon discrète. En effet, un calcul classique d'une dérivée discrète peut amener à utiliser deux points discrets de part et d'autre de l'interface. Nous sommes donc amené en quelque sorte à contourner ce problème par des artifices numériques.

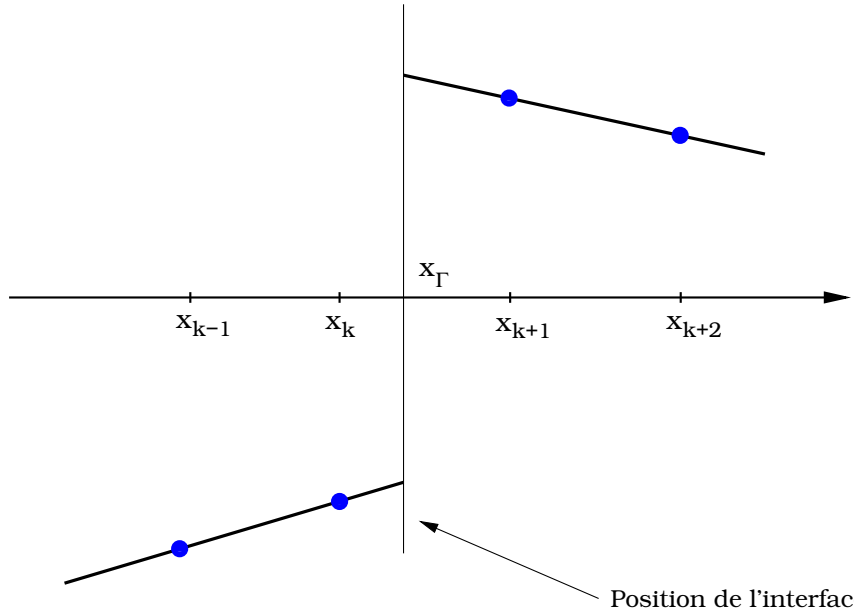


FIG. 4.1 – Problématique numérique de la recherche de solutions discrètes discontinues à la traversée d'une interface pour un espace monodimensionnel. La solution continue est représentée par le trait plein tandis que les points représentent la solution discrète.

Par exemple, si l'on considère l'équation de Laplace monodimensionnelle,

$$u_{xx} = 0 \quad \text{tel que} \quad [u]_{x_{\Gamma}} = a$$

et un maillage cartésien régulier $(x_i)_{i=1..N}$ de pas Δx , une discrétisation centrée en chaque point x_i s'écrit,

$$\frac{\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta x}\right) + \left(\frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta x}\right)}{\Delta x} = 0$$

Le point x_Γ étant le lieu de la discontinuité comme sur la Fig(4.1), il est situé entre deux points de discrétisation x_k et x_{k+1} . La solution de cette équation de Laplace est linéaire par morceaux. Nous pouvons nous apercevoir immédiatement que l'approximation de la dérivée centrée au point $x_{k+\frac{1}{2}}$ ($u'(x_{k+\frac{1}{2}}) \approx \left(\frac{u(x_{k+1}) - u(x_k)}{\Delta x}\right)$) n'a pas de sens, puisque $u(x_{k+1}) - u(x_k) \approx a = O(1)$. L'estimation de sa valeur en un point situé d'un côté de l'interface nécessite l'utilisation d'un point discret situé de l'autre côté de l'interface. En conséquence, l'approximation de la dérivée n'est pas bien définie, la discrétisation de l'équation de Laplace n'est pas convergente.

On définit ainsi les points x_i réguliers, dont le stencil de discrétisation associé (ensemble des points discrets nécessaires au calcul de la dérivée) exclu la présence d'un saut, et les points x_i irréguliers, dont l'interface traverse les points le stencil associé. Les discrétisations standards des dérivées pour les points irréguliers nécessitent une modification afin de prendre en compte correctement la présence du saut.

4.1.3 L'équation de Poisson

Le développement des méthodes permettant de résoudre un tel problème est très souvent associé à la résolution discrète de l'équation de Poisson bidimensionnelle à coefficients discontinus,

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\beta(x) \nabla u(x)) = f(x) & x \in \Omega = \Omega^+ \cup \Omega^- \cup \Gamma \\ [u]_\Gamma = u^+ - u^- = a(x) & x \in \Gamma \\ [\beta u_n]_\Gamma = (\beta u_n)^+ - (\beta u_n)^- = b(x) & x \in \Gamma \end{cases} \quad (4.1)$$

où $u_n = \nabla u \cdot \mathbf{n}$, $\mathbf{n}$ étant le vecteur normal à Γ , l'interface de séparation des sous-espaces Ω^+ et Ω^- , et orienté de Ω^- vers Ω^+ . Les conditions aux frontières de Ω ne sont pas données ici, elle peuvent être une condition de Dirichlet ou de Neumann voir les deux en même temps.

La raison de la recherche de ce problème Eq.(4.1) est que l'équation de Poisson est souvent rencontrée dans divers problèmes et plus particulièrement en mécanique des fluides. Si l'on calcule la divergence de l'équation de conservation de la quantité de mouvement, on obtient la formulation suivante pour la pression,

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = -\nabla \cdot (u \cdot \nabla u - \nu \nabla \cdot \mathbf{D})$$

La solution en pression est donc bien solution d'une équation de Poisson à coefficients variables dans le cas des écoulements diphasiques.

4.2 La méthode CSF

4.2.1 Principe

Afin de simuler l'écoulement du sang dans le coeur, Peskin [65] a développé la méthode dite "Immersed Boundary Method" (IBM) au fil des années. Le comportement du coeur était modélisé par une membrane élastique mobile, exerçant sur le fluide une force singulière le mettant en mouvement. L'introduction de cette force singulière dans les équations du mouvement pose un problème numérique puisqu'il n'est pas possible de la traiter directement, les points discrets représentant la membrane étant différents des points de discrétisation du champ hydrodynamique sur grille fixe. La méthode de Peskin [65] s'appuie sur une régularisation de cette force grâce une formulation volumique régularisée approchant la formulation surfacique originale. La force volumique est répartie ou étalée suivant plusieurs cellules voisines de la membrane, suivant les points discrets correspondant au champ hydrodynamique.

Si l'on considère la force surfacique f_s s'exprimant en tout point x_s d'une l'interface Γ (en fonction du champ hydrodynamique par exemple), alors on peut définir une force volumique f_v en tout point x de l'espace de calcul Ω de la manière suivante,

$$f_v(x) = \int_{\Gamma} f_s(x) \delta(x - x_s) d\Gamma \quad (4.2)$$

où δ est la fonction de Dirac. Si l'on calcule l'intégrale de volume de f_v suivant l'espace de calcul Ω alors,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} f_v(x) d\Omega &= \int_{\Omega} \left(\int_{\Gamma} f_s(x) \delta(x - x_s) d\Gamma \right) d\Omega \\ &= \int_{\Gamma} f_s(x) \left(\int_{\Omega} \delta(x - x_s) d\Omega \right) d\Gamma \\ &= \int_{\Gamma} f_s(x) d\Gamma \end{aligned} \quad (4.3)$$

C'est la partie mathématique de la méthode IBM de Peskin. Elle consiste à transformer l'intégrale de surface initiale en une intégrale de volume pouvant être injectée dans une équation bilan en volume comme les équations de Navier-Stokes. La seconde partie de la méthode est numérique et consiste à choisir une fonction permettant de régulariser la force f_v sachant que pour l'instant elle est concentrée sur l'interface. Grossièrement, cette étape numérique se résume en l'approximation suivante,

$$f_v(x) \approx \int_{\Gamma} f_s(x) \delta^\epsilon(x - x_s) d\Gamma \quad (4.4)$$

où δ^ϵ est cette fois-ci une fonction de Dirac régularisée suivant quelques mailles voisines du point x_s . Brackbill et al. [6] ont démocratisé la méthode IBM de Peskin pour traiter numériquement la tension de surface dans les équations de Navier-Stokes, il lui a donné le nom de CSF pour "Continuum Surface Force", la méthode étant en général plus connue aujourd'hui sous ce nom. Cette méthode a été originellement appliquée pour une méthode de suivi d'interface de type VOF, elle a depuis été appliquée avec succès aux méthodes Front-Tracking [110] et Level-Set [10].

4.2.2 Application aux équations de Navier-Stokes avec la méthode Level-Set

Tout d'abord, on reprend l'équation de conservation de la quantité de mouvement des équations de Navier-Stokes dans une formulation intégrale. Elle est valable dans chacun des sous-espaces Ω_i ,

$$\int_{\Omega_i} \rho_i \frac{D\mathbf{u}_i}{Dt} dx = \int_{\partial\Omega_i} \mathbf{T}_i \cdot \mathbf{n}_i ds \quad (4.5)$$

Par sommation des deux intégrales, nous écrivons la forme intégrale des équations de Navier-Stokes valable sur l'ensemble du domaine d'étude $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Gamma$,

$$\int_{\Omega_1} \rho_1 \frac{D\mathbf{u}_1}{Dt} dx + \int_{\Omega_2} \rho_2 \frac{D\mathbf{u}_2}{Dt} dx = \int_{\partial\Omega_1} \mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{n}_1 ds + \int_{\partial\Omega_2} \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{n}_2 ds \quad (4.6)$$

Or,

$$\int_{\partial\Omega_1} \mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{n}_1 ds + \int_{\partial\Omega_2} \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{n}_2 ds = \int_{\partial\Omega} \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} ds + \int_{\Gamma} \mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{n}_1 ds + \int_{\Gamma} \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{n}_2 ds \quad (4.7)$$

En adoptant la convention $\mathbf{n} = \mathbf{n}_1 = -\mathbf{n}_2$, nous obtenons le résultat final,

$$\int_{\Omega} \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} dx = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{T} dx + \int_{\Gamma} (T_1 - T_2) \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (4.8)$$

Que l'on peut réécrire sous la forme d'une condition de saut,

$$\int_{\Omega} \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} dx = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{T} dx + \int_{\Gamma} [T] \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (4.9)$$

Ainsi, la forme intégrale pour un espace Ω arbitraire fait apparaître explicitement l'action de la tension de surface dans les équations du mouvement. Les conditions de saut traduisent bien l'action d'une force de surface sur l'interface Γ . Dans le contexte de la méthode Level-Set, Chang et al. [10] montrent que l'intégrale de surface peut être approchée par une intégrale de volume suivant la formulation,

$$\int_{\Gamma} \sigma \kappa \mathbf{n} d\Gamma = \int_{\Omega} \sigma \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi d\Omega \quad (4.10)$$

Cette égalité peut se justifier par la propriété mathématique suivante,

$$\int g(x) \delta(f(x)) dx = \frac{g(0)}{|f'(0)|} \quad (4.11)$$

On rejoint ainsi le principe de Peskin quant à la partie mathématique de la méthode IBM. Sachant que l'espace Ω est quelconque dans l'Eq.(4.9), nous obtenons une équation différentielle locale grâce à la transformation de l'intégrale de surface en une intégrale de volume,

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{T} + \sigma \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi \quad (4.12)$$

Or nous sommes capables d'exprimer ρ et μ de la même façon en fonction de la Level-Set ϕ ,

$$\begin{aligned} \rho(\phi) &= \rho_2 + (\rho_1 - \rho_2) H(\phi) \\ \mu(\phi) &= \mu_2 + (\mu_1 - \mu_2) H(\phi) \end{aligned} \quad (4.13)$$

où la fonction de Heaviside est définie par,

$$H(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \phi < 0 \\ 1/2 & \text{si } \phi = 0 \\ 1 & \text{si } \phi > 0 \end{cases} \quad (4.14)$$

Au final, nous obtenons une équation bilan locale de la conservation de la quantité de mouvement écrite sous une forme faisant intervenir ϕ dans toutes les quantités sautant à l'interface,

$$\rho(\phi) \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot (2\mu(\phi) \mathbf{D}) + \sigma \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi \quad (4.15)$$

Il reste que cette équation est inapplicable dans la pratique d'un point de vu numérique du fait de la dissociation des points discrets représentant l'interface des points de discrétisation du champ hydrodynamique. On effectue en pratique une régularisation de l'ensemble des quantités présentant un saut à l'interface en introduisant une forme régularisée des fonctions de Dirac δ^ϵ et de Heaviside H^ϵ . Les formulations les plus souvent rencontrées dans la littérature sont les suivantes,

$$H^\epsilon(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \phi < -\epsilon \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\phi}{\epsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\epsilon}\right) \right) & \text{si } |\phi| \leq \epsilon \\ 1 & \text{si } \phi > \epsilon \end{cases} \quad (4.16)$$

$$\delta^\epsilon(\phi) = \frac{dH^\epsilon}{d\phi} = \begin{cases} 0 & \text{si } |\phi| > \epsilon \\ \frac{1}{2\epsilon} \left(1 + \cos\left(\frac{\pi\phi}{\epsilon}\right) \right) & \text{si } |\phi| \leq \epsilon \end{cases} \quad (4.17)$$

où ϵ est le paramètre de lissage définissant l'épaisseur virtuelle de l'interface (égale à 2ϵ). Il est en général choisi tel que,

$$\epsilon = \alpha \Delta x \quad \text{avec} \quad 1 \leq \alpha \leq 2 \quad (4.18)$$

Avec une telle méthode, en calculant la divergence de l'équation de conservation de la quantité de mouvement Eq.(4.15) et si l'on considère que la vitesse est nulle alors on trouve que la pression est solution de l'équation de Poisson suivante,

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho(\phi)} \nabla p \right) = \nabla \cdot (\sigma \kappa(\phi) \delta^\epsilon(\phi) \nabla \phi) \quad (4.19)$$

C'est une équation à coefficients non constants tel que le lissage permette de la résoudre sans trop de difficultés. Avec une telle équation, la solution en pression respectera le saut à l'interface mais celui-ci sera régularisé suivant l'épaisseur ϵ tout comme $\rho(\phi)$ ou $\mu(\phi)$ comme sur la Fig.(4.2) ci-dessous.

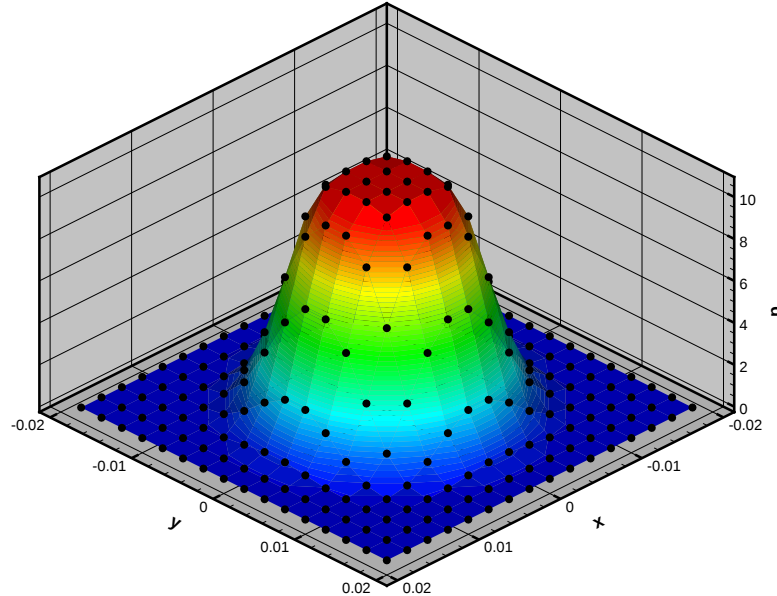


FIG. 4.2 – Solution en pression en appliquant la méthode CSF dans le cas d'une goutte statique avec $\epsilon = 2.5\Delta x$ et un maillage 16^2 .

4.3 La méthode "Ghost-Fluid"

4.3.1 Principe

La méthode CSF possède les avantages d'être robuste et facile d'implémentation. Toutefois, même si la méthode est parfaitement convergente, la solution numérique s'écarte de la physique proche de l'interface puisque les discontinuités sont lissées suivant quelques points discrets autour de l'interface. Cette régularisation ne peut avoir qu'un effet rétroactif nocif sur les performances du solveur pour calculer l'évolution dans le temps du champ hydrodynamique et donc par conséquent l'évolution de l'interface. La considération de forces volumiques au voisinage de l'interface pour modéliser l'action d'une force de surface dans les équations du mouvement tend à créer des vitesses non physiques à cause de gradients de pression purement numériques. Dans ce sens, il est certainement plus judicieux de traiter directement les conditions de saut à l'interface afin de respecter cette physique, la qualité de la méthode s'en sera que meilleure, sous réserve de ne pas perdre les qualités de robustesse et de mise en oeuvre aisée. Il existe aujourd'hui deux grandes classes de méthodes permettant d'obtenir des solutions discrètes discontinues à la traversée d'une interface : la méthode "immersed interface" (IIM) et la méthode "Ghost-Fluid" (GFM).

La méthode "immersed interface" s'articule autour de développements de Taylor de la solution discrète en prenant en compte la position de l'interface et en injectant les sauts associés à l'intérieur d'un stencil de discrétisation. De tels développements permettent de préserver les sauts de la solution et de ses dérivées à l'interface. La méthode est relativement précise puisqu'elle est au second ordre mais résulte d'un algorithme complexe de mise en oeuvre, particulièrement pour un espace tridimensionnel. Si l'on applique cette méthode au cas du problème de Poisson à coefficients discontinus [41], la matrice de discrétisation n'est pas symétrique, réduisant considérablement les performances d'un solveur itératif d'inversion de matrice. Cette méthode a été cependant appliquée avec succès aux équations de Navier-Stokes incompressibles [40] et fait encore l'objet de développements afin de généraliser et de rendre accessible l'algorithme.

En parallèle du développement de la méthode Level-Set, Fedkiw et al. ont introduit une nouvelle méthode permettant de traiter proprement des conditions de saut à la traversée d'une interface lorsqu'on cherche à discrétiser des EDP. Si elle a été initialement développée pour des conditions de type Rankine-Hugoniot dans le cadre des écoulements compressibles et des équations d'Euler inviscides, elle a été rapidement généralisée pour des conditions de saut quelconques, et en particulier pour le cas qui nous concerne. Son formalisme est en effet suffisamment général et simple de mise en oeuvre pour le faire.

L'idée directrice est l'utilisation d'un domaine fictif de discrétisation par extension continue de la solution à travers l'interface. Pour comprendre plus en détails le principe de la méthode, appuyons nous sur la Fig.(4.3). La solution discrète recherchée est symbolisée par les points (croix) bleues. Une interface à travers laquelle la solution respecte des conditions de saut traverse le maillage entre les points x_k et x_{k+1} . Les conditions à l'interface pour la solution sont doubles sur l'exemple de la Fig.(4.3) : un saut continu et un saut en dérivée. Elles se manifestent par le saut concret de la solution à l'interface et un changement de pente. Le principe de la méthode Ghost-Fluid consiste à imaginer un prolongement continu de la solution à la traversée de l'interface pour chacun des sous-espaces de chaque côté. Si l'on prend en considération le côté gauche de la solution sur la Fig.(4.3) et le point irrégulier x_k , le prolongement revient à rechercher la valeur de la solution $u(x_{k+1})$ au point x_{k+1} telle qu'elle soit une extension de la solution discrète à travers l'interface. La construction d'une nouvelle valeur au point x_{k+1} permettra d'évaluer au mieux les dérivées discrètes au point x_k . L'ensemble de ces valeurs sont calculées dans un espace qui

diffère de celui de la solution, il est qualifié de fantôme d'où le nom de la méthode. Il reste alors à trouver un moyen de calculer ces valeurs fantômes pour chacun des points irréguliers du maillage à partir de la solution discrète recherchée. Cette recherche constitue la difficulté pratique majeure de mise en oeuvre de la méthode Ghost-Fluid.

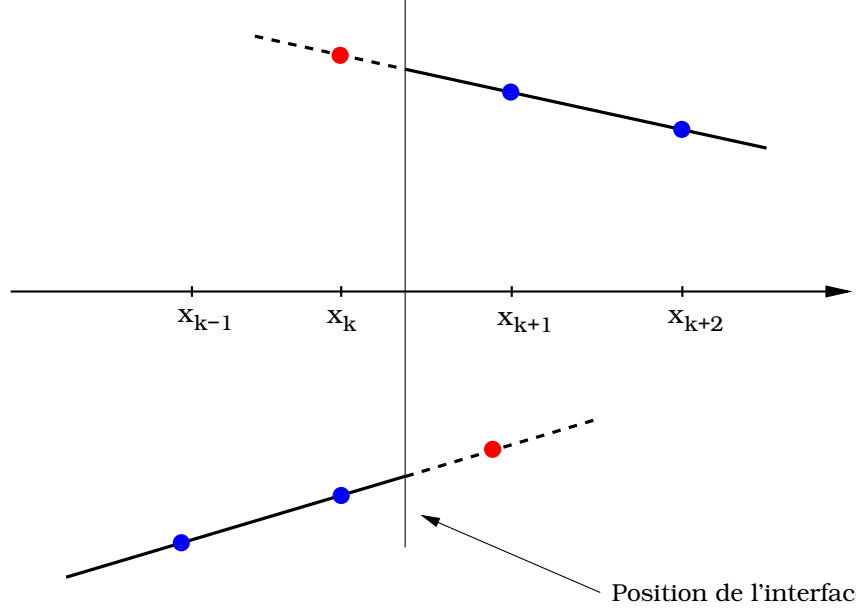


FIG. 4.3 – Principe de la méthode Ghost Fluid

Nous allons voir à présent comment nous pouvons construire ces valeurs fantômes à partir de la Level-Set. Nous en avons l'usage pour connaître la position de l'interface à l'intérieur d'une cellule pour approcher au mieux ces valeurs fantômes. Nous le montrerons en appliquant directement la méthodologie Ghost-Fluid à la résolution du Pb.(4.1), c'est à dire l'équation de Poisson à coefficients variables. C'est bien une partie du problème que l'on cherche à résoudre dans notre modèle car comme nous l'avons vu, la pression est solution de cette équation.

4.3.2 Application à l'équation de Poisson avec la méthode Level-Set

problème monodimensionnel

Reprenons le Pb.(4.1) dans le cas monodimensionnel,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dx} \left(\beta(x) \frac{d}{dx} u(x) \right) = f(x) \quad x \in \Omega = \Omega^+ \cup \Omega^- \cup \Gamma \\ [u]_{\Gamma} = u^+ - u^- = a(x) \quad x \in \Gamma \\ \left[\beta(x) \frac{d}{dx} u(x) \right]_{\Gamma} = (\beta u_x)^+ - (\beta u_x)^- = b(x) \quad x \in \Gamma \end{array} \right. \quad (4.20)$$

La solution de cette équation différentielle est une fonction parabolique par morceaux. On considère un maillage cartésien régulier $(x_i)_{i=1..N}$ de pas Δx et une discrétisation centrée en chaque point x_i tel que $u_i = u(x_i)$, $\beta_i = \beta(x_i)$, $f_i = f(x_i)$, $a_i = a(x_i)$, $b_i = b(x_i)$ et $\phi_i = \phi(x_i)$.

En appliquant le principe des schémas de type volume fini, un schéma standard de discrétisation au deuxième ordre de l'équation de Poisson s'écrit de la façon suivante,

$$\frac{\beta_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} \right) - \beta_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_i \quad (4.21)$$

On considère maintenant que l'interface Γ caractérisée par $\phi(x) = 0$ traverse uniquement le maillage entre les noeuds x_k et x_{k+1} du maillage. Les points x_k et x_{k+1} sont donc des points irréguliers, il est nécessaire de redéfinir l'approximation de la dérivée au point $x_{k+\frac{1}{2}}$, c'est à dire $u'(x_{k+\frac{1}{2}}) \approx \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} \right)$. On retrouve deux fois le calcul de cette dérivée dans le schéma de discrétisation, en l'appliquant pour les points de discrétisation x_k et x_{k+1} .

Saut de la solution Dans un premier temps, nous allons nous intéresser au saut de u , c'est à dire à $[u]_\Gamma = a(x)$, et nous supposons que le saut de la dérivée est nul pour simplifier les développements qui vont suivre ($b(x) = 0$). Nous supposons que le sous domaine Ω^- est situé à gauche de l'interface et donc que le sous domaine Ω^+ est lui situé à droite. De la position des sous domaines dépend le sens dans lequel s'applique la condition de saut de la solution et implique forcément une nuance dans la méthodologie numérique qui va suivre. Grossièrement, l'idée de la méthode Ghost Fluid est d'utiliser un fluide fantôme, extension par prolongement continu du fluide réel à travers l'interface. Soient les valeurs réelles de la solution recherchée $u_k^- \in \Omega^-$ et $u_{k+1}^+ \in \Omega^+$. On doit rechercher une formulation permettant d'approcher les valeurs fantômes de la solution $u_k^+ \in \Omega^+$ et $u_{k+1}^- \in \Omega^-$ telles qu'elles soient dans le prolongement continu de la solution à travers l'interface comme représenté sur la Fig.(4.4).

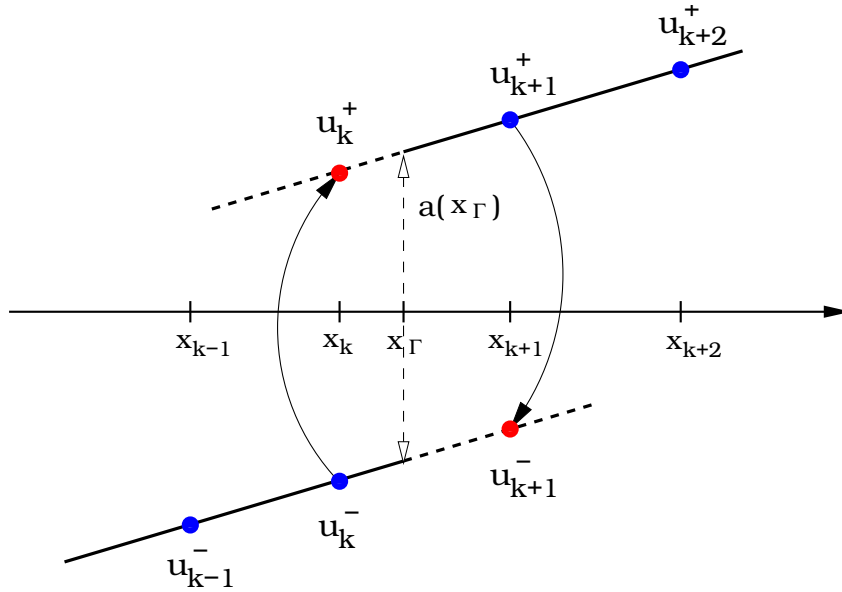


FIG. 4.4 – Représentation graphique de la construction des valeurs fantômes de la solution $u_k^+ \in \Omega^+$ et $u_{k+1}^- \in \Omega^-$

À la vision de la Fig.(4.4), l'opération peut facilement se réaliser avec les formulations suivantes,

$$\begin{cases} u_k^+ &= u_k^- + a(x_\Gamma) \\ u_{k+1}^- &= u_{k+1}^+ - a(x_\Gamma) \end{cases} \quad (4.22)$$

Ces formulations ne sont valables que lorsque les sous domaines Ω^- et Ω^+ sont situés respectivement à gauche et droite de l'interface. Dans l'autre cas, ces formulations s'écriraient de la façon suivante,

$$\begin{cases} u_k^- &= u_k^+ - a(x_\Gamma) \\ u_{k+1}^+ &= u_{k+1}^- + a(x_\Gamma) \end{cases} \quad (4.23)$$

Mais poursuivons désormais avec la position des sous domaines comme sur la Fig.(4.4) sachant que les développements sont absolument les mêmes dans les deux cas de figure et que le résultat final sera identique au signe près.

Maintenant que nous avons construit ces nouvelles valeurs par prolongement continu de la solution à travers l'interface, nous allons les utiliser pour évaluer notre dérivée au point $x_{k+\frac{1}{2}}$. Si l'on reprend la discrétisation originelle de l'équation de Poisson aux points x_k et x_{k+1} Eq.(4.21), elle s'écrit maintenant de la façon suivante avec les nouvelles notations,

$$\begin{cases} \frac{\beta_{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{\boxed{u_{k+1}^+} - u_k^-}{\Delta x} \right) - \beta_{k-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_k^- - u_{k-1}^-}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_k \\ \frac{\beta_{k+\frac{3}{2}} \left(\frac{u_{k+2}^+ - u_{k+1}^+}{\Delta x} \right) - \beta_{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{k+1}^+ - \boxed{u_k^-}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_{k+1} \end{cases} \quad (4.24)$$

Nous remplaçons la valeur réelle u_{k+1}^+ par la valeur fantôme u_{k+1}^- ainsi que la valeur réelle u_k^- par la valeur fantôme u_k^+ afin de calculer correctement la dérivée au point $x_{k+\frac{1}{2}}$ dans les deux cas,

$$\begin{cases} \frac{\beta_{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{\boxed{u_{k+1}^-} - u_k^+}{\Delta x} \right) - \beta_{k-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_k^+ - u_{k-1}^+}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_k \\ \frac{\beta_{k+\frac{3}{2}} \left(\frac{u_{k+2}^+ - u_{k+1}^+}{\Delta x} \right) - \beta_{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{k+1}^+ - \boxed{u_k^+}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_{k+1} \end{cases} \quad (4.25)$$

En utilisant les formulations qui nous ont permis de définir ces valeurs fantômes Eq.(4.22), nous obtenons les nouvelles discrétisations au point x_k et x_{k+1} en enlevant les signes affectés aux valeurs de u puisqu'elles sont maintenant toutes réelles,

$$\begin{cases} \frac{\beta_{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{(u_{k+1} - a(x_\Gamma))}{\Delta x} - u_k \right) - \beta_{k-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_k \\ \frac{\beta_{k+\frac{3}{2}} \left(\frac{u_{k+2} - u_{k+1}}{\Delta x} \right) - \beta_{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{k+1} - (u_k + a(x_\Gamma))}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_{k+1} \end{cases} \quad (4.26)$$

Elles peuvent se réécrire sous les formes simplifiées suivantes,

$$\begin{cases} \frac{\beta_{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} \right) - \beta_{k-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_k + \frac{a(x_\Gamma)}{\Delta x^2} \\ \frac{\beta_{k+\frac{3}{2}} \left(\frac{u_{k+2} - u_{k+1}}{\Delta x} \right) - \beta_{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_{k+1} - \frac{a(x_\Gamma)}{\Delta x^2} \end{cases} \quad (4.27)$$

Nous retrouvons ainsi la discrétisation originelle à la différence que nous avons rajouté une quantité à calculer dans le second membre. La nécessité de localiser l'interface n'intervient en fait que dans le calcul de $a(x_\Gamma)$ pour trouver une interpolation de bonne facture à partir des valeurs voisines $a(x_k)$ et $a(x_{k+1})$. Si l'on utilise le fait que la Level-Set est la distance à l'interface, on peut écrire une interpolation exacte dans le cas monodimensionnel,

$$a(x_\Gamma) = \frac{a_k |\phi_{k+1}| + a_{k+1} |\phi_k|}{|\phi_k| + |\phi_{k+1}|} \quad (4.28)$$

Il est à noter que nous devons utiliser la même valeur de $a(x_\Gamma)$ pour calculer les termes injectés au second membre dans les discrétisations Eq.(4.27).

Saut de la dérivée de la solution Dans un deuxième temps, nous allons nous intéresser au saut de la dérivée de u , c'est à dire $\left[\beta(x) \frac{d}{dx} u(x) \right]_\Gamma = b(x)$. Nous supposons toujours que l'interface traverse le maillage entre les points x_k et x_{k+1} et que le sous domaine Ω^- est situé à gauche de l'interface et le sous domaine Ω^+ à droite, alors que le saut de u est considéré ici comme nul ($a(x) = 0$).

Nous pourrions appliquer une méthodologie similaire à celle qui vient d'être présentée pour corriger le schéma de discrétisation en injectant directement le saut de la dérivée. Or, il est préférable pour des questions de précision d'utiliser une méthodologie un peu différente sachant que β peut aussi présenter un saut à l'interface. Nous allons plutôt discrétiser directement la condition de

saut sur la dérivée grâce à la connaissance de la position de l'interface à l'intérieur de la cellule. Pour cela, on définit un paramètre θ à partir de la Level-Set par,

$$\theta = \frac{|\phi_k|}{|\phi_k| + |\phi_{k+1}|} \quad (4.29)$$

θ peut être utilisé pour estimer la position de l'interface à l'intérieur de la cellule entre les points x_k et x_{k+1} . Comme représenté sur la Fig.(4.5), la cellule est ainsi coupée en 2 parties, une à gauche de taille $\theta\Delta x$ et une à droite de taille $(1-\theta)\Delta x$.

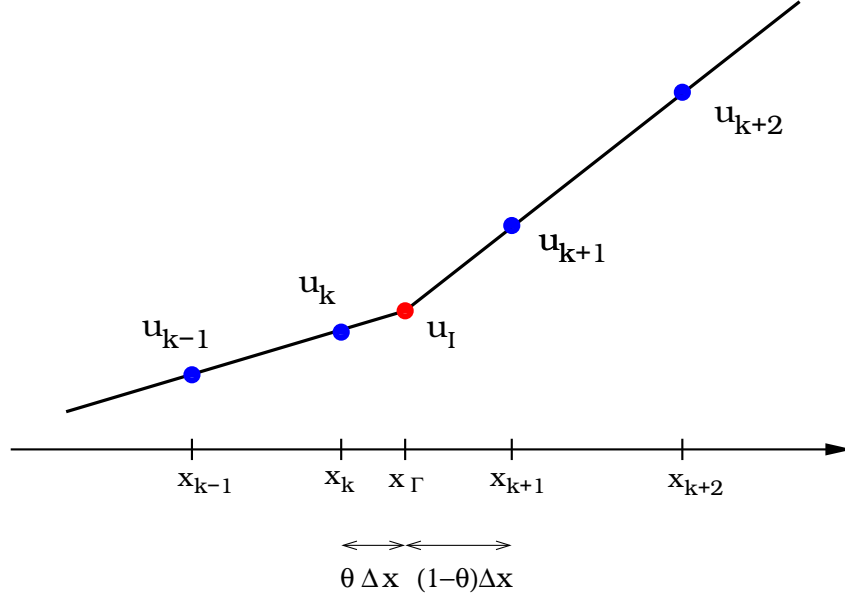


FIG. 4.5 – Représentation graphique de la définition de u_I permettant de discrétiser directement la condition de saut $\left[\beta(x) \frac{d}{dx} u(x) \right]_\Gamma = b(x)$

Grâce à cette localisation, on peut réécrire la condition de saut sur la dérivée de la solution au point x_Γ $\left[\beta(x) \frac{du}{dx} \cdot n \right]_\Gamma = b(x)$ sous une forme discrète,

$$\beta_{k+1} \left(\frac{u_{k+1} - u_I}{(1-\theta)\Delta x} \right) - \beta_k \left(\frac{u_I - u_k}{\theta\Delta x} \right) = b(x_\Gamma) \quad (4.30)$$

où u_I est la valeur de la solution continue au point x_Γ comme sur la Fig.(4.5). Cette discrétisation fait donc intervenir la valeur des dérivées discrètes à droite et à gauche de l'interface, celles qui seront utilisées pour corriger le schéma de discrétisation. En effet, à partir de cette discrétisation, on est capable d'exprimer u_I en fonction de u_k , u_{k+1} , β_k , β_{k+1} , θ et $b(x_\Gamma)$,

$$u_I = \frac{\beta_{k+1}u_{k+1}\theta + \beta_k u_k(1-\theta) - b(x_\Gamma)\theta(1-\theta)\Delta x}{\beta_{k+1}\theta + \beta_k(1-\theta)} \quad (4.31)$$

Cette approximation de u_I nous permet maintenant de réécrire les approximations de ces dérivées à gauche et à droite du point x_Γ fonction du calcul original de la dérivée au point $x_{k+\frac{1}{2}}$,

$$\begin{cases} \beta_k \left(\frac{u_I - u_k}{\theta \Delta x} \right) = \hat{\beta} \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} \right) + \frac{\hat{\beta} b(x_\Gamma)(1 - \theta)}{\beta_{k+1}} \\ \beta_{k+1} \left(\frac{u_{k+1} - u_I}{(1 - \theta) \Delta x} \right) = \hat{\beta} \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} \right) + \frac{\hat{\beta} b(x_\Gamma)\theta}{\beta_k} \end{cases} \quad (4.32)$$

où,

$$\hat{\beta} = \frac{\beta_k \beta_{k+1}}{\beta_k(1 - \theta) + \beta_{k+1}\theta} \quad (4.33)$$

Tout comme nous l'avons introduit pour le saut de u , il est nécessaire afin d'être plus précis de trouver une interpolation de $b(x_\Gamma)$ en fonction des valeurs voisines b_k et b_{k+1} et nous le faisons strictement de la même manière en utilisant la Level-Set,

$$b(x_\Gamma) = \frac{b_k |\phi_{k+1}| + b_{k+1} |\phi_k|}{|\phi_k| + |\phi_{k+1}|} \quad (4.34)$$

Il reste alors à remplacer l'approximation des dérivées dans le schéma de discrétisation d'origine comme nous l'avons fait pour le saut de u au paragraphe précédent, la dérivée droite pour le point x_k et la dérivée gauche pour le point x_{k+1} ,

$$\begin{cases} \frac{\hat{\beta} \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} \right) - \beta_{k-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_k + \frac{\hat{\beta} b(x_\Gamma)(1 - \theta)}{\beta_{k+1}} \\ \frac{\beta_{k+\frac{3}{2}} \left(\frac{u_{k+2} - u_{k+1}}{\Delta x} \right) - \hat{\beta} \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_k + \frac{\hat{\beta} b(x_\Gamma)\theta}{\beta_k} \end{cases} \quad (4.35)$$

Schéma de discrétisation final Les développements venant d'être présentés nous permettent d'écrire un schéma de discrétisation original afin de calculer proprement une solution discrète approchée au problème de Poisson monodimensionnel Eq.(4.20) pour une interface Γ et des conditions de saut quelconques. Les modifications nécessaires à la discrétisation originelle pour traiter correctement le saut de la solution et de sa dérivée s'additionnent l'une à l'autre de manière indépendante sans aucune complication. La solution discrète respectera alors strictement les deux sauts à l'interface sans aucune régularisation, une performance numérique remarquable car elle n'a rien d'évidente au départ. Après quelques calculs, la discrétisation finale en chaque point x_i s'écrit de la façon suivante,

$$\frac{\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} \right) - \hat{\beta}_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_i + F_i^L + F_i^R \quad (4.36)$$

où F_i^L fait référence aux modifications nécessaires éventuelles au calcul de la dérivée décentrée amont en plus du calcul de $\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2}}$, et F_i^R au calcul de la dérivée décentrée aval en plus du calcul de $\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}}$. En utilisant la Level-Set, ces quantités peuvent être calculées de la manière suivante,

Calcul de F_i^L et de $\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2}}$

• Si $\phi_i \cdot \phi_{i-1} > 0$, c'est à dire si l'interface ne traverse pas le maillage entre les points discrets x_{i-1} et x_i , alors on reprend tout simplement la discrétisation originelle correspondant à,

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i-\frac{1}{2}} = \beta_{i-\frac{1}{2}} \\ \text{et} \\ F_i^L = 0 \end{array} \right. \quad (4.37)$$

• Tandis que si $\phi_i \cdot \phi_{i-1} \leq 0$ et donc si l'interface traverse le maillage entre les points discrets x_{i-1} et x_i , alors on définit les variables suivantes nous permettant de calculer F_i^L ,

$$\theta = \frac{|\phi_{i-1}|}{|\phi_{i-1}| + |\phi_i|} \quad (4.38)$$

$$a_\Gamma = \frac{a_{i-1} |\phi_i| + a_i |\phi_{i-1}|}{|\phi_i| + |\phi_{i+1}|} \quad (4.39)$$

$$b_\Gamma = \frac{b_{i-1} |\phi_i| + b_i |\phi_{i-1}|}{|\phi_i| + |\phi_{i+1}|} \quad (4.40)$$

$$\text{Si } \phi_i \geq 0 \text{ et } \phi_{i-1} < 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i-\frac{1}{2}} = \frac{\beta_i \beta_{i-1} (|\phi_i| + |\phi_{i-1}|)}{\beta_i |\phi_{i-1}| + \beta_{i-1} |\phi_i|} \\ \text{et} \\ F_i^L = - \frac{\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2}} a_\Gamma}{\Delta x^2} + \frac{\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2}} b_\Gamma \theta}{\beta_{i-\frac{1}{2}} \Delta x} \end{array} \right. \quad (4.41)$$

$$\text{Si } \phi_i \leq 0 \text{ et } \phi_{i-1} > 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i-\frac{1}{2}} = \frac{\beta_i \beta_{i-1} (|\phi_i| + |\phi_{i-1}|)}{\beta_i |\phi_{i-1}| + \beta_{i-1} |\phi_i|} \\ \text{et} \\ F_i^L = \frac{\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2}} a_\Gamma}{\Delta x^2} - \frac{\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2}} b_\Gamma \theta}{\beta_{i-\frac{1}{2}} \Delta x} \end{array} \right. \quad (4.42)$$

Calcul de F_i^R et de $\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}}$

• Si $\phi_i \cdot \phi_{i+1} > 0$, c'est à dire si l'interface ne traverse pas le maillage entre les points discrets x_i et x_{i+1} , alors on reprend tout simplement la discrétisation originelle correspondant à,

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}} = \beta_{i+\frac{1}{2}} \\ \text{et} \\ F_i^R = 0 \end{array} \right. \quad (4.43)$$

• Tandis que si $\phi_i \cdot \phi_{i+1} \leq 0$ et donc que l'interface traverse le maillage entre les points discrets x_i et x_{i+1} , alors on définit les variables suivantes nous permettant de calculer F_i^R ,

$$\theta = \frac{|\phi_{i+1}|}{|\phi_i| + |\phi_{i+1}|} \quad (4.44)$$

$$a_\Gamma = \frac{a_i |\phi_{i+1}| + a_{i+1} |\phi_i|}{|\phi_i| + |\phi_{i+1}|} \quad (4.45)$$

$$b_\Gamma = \frac{b_i |\phi_{i+1}| + b_{i+1} |\phi_i|}{|\phi_i| + |\phi_{i+1}|} \quad (4.46)$$

$$\text{Si } \phi_i \geq 0 \text{ et } \phi_{i+1} < 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_i \beta_{i+1} (|\phi_i| + |\phi_{i+1}|)}{\beta_i |\phi_{i+1}| + \beta_{i+1} |\phi_i|} \\ \text{et} \\ F_i^R = - \frac{\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}} a_\Gamma}{\Delta x^2} - \frac{\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}} b_\Gamma \theta}{\beta_{i+\frac{1}{2}} \Delta x} \end{array} \right. \quad (4.47)$$

$$\text{Si } \phi_i \leq 0 \text{ et } \phi_{i+1} > 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_i \beta_{i+1} (|\phi_i| + |\phi_{i+1}|)}{\beta_i |\phi_{i+1}| + \beta_{i+1} |\phi_i|} \\ \text{et} \\ F_i^R = \frac{\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}} a_\Gamma}{\Delta x^2} + \frac{\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}} b_\Gamma \theta}{\beta_{i+\frac{1}{2}} \Delta x} \end{array} \right. \quad (4.48)$$

Ce nouveau schéma de discrétisation a l'élégance de préserver la symétrie du système linéaire associé. Cette propriété est très intéressante pour pouvoir utiliser des solveurs itératifs rapides pour inverser la matrice résultante du système linéaire. De plus, le nouveau schéma ne pose pas de complication majeure pour être implémenté dans un code de simulation.

Problème bidimensionnel

Nous venons d'exposer la méthode Ghost Fluid en l'appliquant à la résolution de l'équation de Poisson pour un espace monodimensionnel. Grâce à la Level-Set, la méthode s'avère exacte dans l'interpolation des conditions de saut incorporées dans le schéma de discrétisation $a(x_\Gamma)$ et $b(x_\Gamma)$. Nous allons voir à présent que le cas bidimensionnel pose des difficultés supplémentaires quant au calcul de ces interpolations des sauts sur l'interface.

Pour un espace bidimensionnel, reprenons le Pb.(4.1),

$$\left\{ \begin{array}{ll} \nabla(\beta(x, y)\nabla u(x, y)) = f(x, y) & x \in \Omega = \Omega^+ \cup \Omega^- \cup \Gamma \\ [u(x, y)]_\Gamma = a(x, y) & x \in \Gamma \\ [\beta(x, y) \mathbf{n} \cdot \nabla u(x, y)]_\Gamma = b(x, y) & x \in \Gamma \end{array} \right. \quad (4.49)$$

où $\mathbf{n} = (n^1, n^2)$ est la normale à l'interface et elle est choisie par convention telle qu'elle pointe de Ω^- vers Ω^+ . Si l'on utilise la Level-Set pour calculer la normale, on peut noter que cette convention correspond à $\phi < 0$ dans Ω^- et $\phi > 0$ dans Ω^+ .

Les développements qui ont été présentés dans le cas monodimensionnel peuvent tout à fait s'appliquer ici direction par direction à la différence qu'il est nécessaire de projeter la condition de saut normale dans les directions du maillage.

Projection des sauts Par définition, les dérivées normale et tangentielle de u s'expriment en fonction de u_x et u_y ,

$$\left\{ \begin{array}{lll} u_n & = & \mathbf{n} \cdot \nabla u(x, y) = u_x n^1 + u_y n^2 \\ u_t & = & \mathbf{t} \cdot \nabla u(x, y) = u_x n^1 - u_y n^2 \end{array} \right. \quad (4.50)$$

On en déduit les expressions de u_x et u_y en fonction de u_n et u_t ,

$$\left\{ \begin{array}{ll} u_x & = u_n n^1 + u_t n^2 \\ u_y & = u_n n^2 - u_t n^1 \end{array} \right. \quad (4.51)$$

Du fait de la continuité de $\mathbf{n}$ à travers l'interface, on peut écrire la même formulation pour les conditions de saut en multipliant par β ,

$$\left\{ \begin{array}{ll} [\beta u_x]_\Gamma & = [\beta u_n]_\Gamma n^1 + [\beta u_t]_\Gamma n^2 \\ [\beta u_y]_\Gamma & = [\beta u_n]_\Gamma n^2 - [\beta u_t]_\Gamma n^1 \end{array} \right. \quad (4.52)$$

Si l'on suppose nuls les sauts dans la direction tangentielle, alors on peut effectuer la simplification suivante,

$$\left\{ \begin{array}{ll} [\beta u_x]_\Gamma & = [\beta u_n]_\Gamma n^1 \\ [\beta u_y]_\Gamma & = [\beta u_n]_\Gamma n^2 \end{array} \right. \quad (4.53)$$

Avec une telle simplification, le saut dans la direction normale de la dérivée sera correctement calculé tout en ayant la possibilité de découper la condition direction par direction. Nous pouvons ainsi définir les interpolations de $b(x_\Gamma)$.

Schéma de discrétisation final Le schéma de discrétisation final pour trouver une solution discrète approchée au problème de Poisson bidimensionnel Eq.(4.49) en utilisant la méthode Ghost-Fluid s'écrit,

$$\begin{aligned}
 & \frac{\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2},j} \left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} \right) - \hat{\beta}_{i-\frac{1}{2},j} \left(\frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} \\
 & + \\
 & \frac{\hat{\beta}_{i,j+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y} \right) - \hat{\beta}_{i,j-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y} \right)}{\Delta y} \\
 & = \\
 & f_{i,j} + F_{i,j}^L + F_{i,j}^R + F_{i,j}^B + F_{i,j}^T
 \end{aligned} \tag{4.54}$$

Respectivement, $F_{i,j}^L$, $F_{i,j}^R$, $F_{i,j}^B$ et $F_{i,j}^T$ font référence aux modifications éventuellement nécessaires pour la calcul des dérivées décentrées à gauche, à droite, en bas et en haut du point $x_{i,j}$ en plus des calculs respectifs de $\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2},j}$, $\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2},j}$, $\hat{\beta}_{i,j-\frac{1}{2}}$ et $\hat{\beta}_{i,j+\frac{1}{2}}$. Ils se calculent de la façon suivante,

Calcul de $F_{i,j}^L$ et de $\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2},j}$

- Si $\phi_{i,j} \cdot \phi_{i-1,j} > 0$, alors on reprend la discrétisation originelle,

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i-\frac{1}{2},j} = \beta_{i-\frac{1}{2},j} \\ \text{et} \\ F_{i,j}^L = 0 \end{array} \right. \tag{4.55}$$

- Tandis que si $\phi_{i,j} \cdot \phi_{i-1,j} \leq 0$, on définit les variables suivantes afin de calculer $F_{i,j}^L$ et $\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2},j}$,

$$\theta = \frac{|\phi_{i-1,j}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i-1,j}|} \tag{4.56}$$

$$a_{\Gamma} = \frac{a_{i-1,j} |\phi_{i,j}| + a_{i,j} |\phi_{i-1,j}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i-1,j}|} \quad (4.57)$$

$$b_{\Gamma} = \frac{b_{i-1,j} n_{i-1,j}^1 |\phi_{i,j}| + b_{i,j} n_{i,j}^1 |\phi_{i-1,j}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i-1,j}|} \quad (4.58)$$

$$\text{Si } \phi_{i,j} \geq 0 \text{ et } \phi_{i-1,j} < 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{\beta_{i,j} \beta_{i-1,j} (|\phi_{i,j}| + |\phi_{i-1,j}|)}{\beta_{i,j} |\phi_{i-1,j}| + \beta_{i-1,j} |\phi_{i,j}|} \\ \text{et} \\ F_{i,j}^L = -\frac{\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2},j} a_{\Gamma}}{\Delta x^2} + \frac{\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2},j} b_{\Gamma} \theta}{\beta_{i-\frac{1}{2},j} \Delta x} \end{array} \right. \quad (4.59)$$

$$\text{Si } \phi_{i,j} \leq 0 \text{ et } \phi_{i-1,j} > 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{\beta_{i,j} \beta_{i-1,j} (|\phi_{i,j}| + |\phi_{i-1,j}|)}{\beta_{i,j} |\phi_{i-1,j}| + \beta_{i-1,j} |\phi_{i,j}|} \\ \text{et} \\ F_{i,j}^L = \frac{\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2},j} a_{\Gamma}}{\Delta x^2} - \frac{\hat{\beta}_{i-\frac{1}{2},j} b_{\Gamma} \theta}{\beta_{i-\frac{1}{2},j} \Delta x} \end{array} \right. \quad (4.60)$$

 Calcul de $F_{i,j}^R$ et de $\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2},j}$

- Si $\phi_{i,j} \cdot \phi_{i+1,j} > 0$, alors on reprend la discrétisation originelle,

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i+\frac{1}{2},j} = \beta_{i+\frac{1}{2},j} \\ \text{et} \\ F_{i,j}^R = 0 \end{array} \right. \quad (4.61)$$

- Tandis que si $\phi_{i,j} \cdot \phi_{i+1,j} \leq 0$, on définit les variables suivantes afin de calculer $F_{i,j}^R$ et $\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2},j}$,

$$\theta = \frac{|\phi_{i+1,j}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i+1,j}|} \quad (4.62)$$

$$a_{\Gamma} = \frac{a_{i+1,j} |\phi_{i,j}| + a_{i,j} |\phi_{i+1,j}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i+1,j}|} \quad (4.63)$$

$$b_{\Gamma} = \frac{b_{i+1,j} n^1_{i+1,j} |\phi_{i,j}| + b_{i,j} n^1_{i,j} |\phi_{i+1,j}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i+1,j}|} \quad (4.64)$$

$$\text{Si } \phi_{i,j} \geq 0 \text{ et } \phi_{i+1,j} < 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\beta_{i,j} \beta_{i+1,j} (|\phi_{i,j}| + |\phi_{i+1,j}|)}{\beta_{i,j} |\phi_{i+1,j}| + \beta_{i+1,j} |\phi_{i,j}|} \\ \text{et} \\ F_{i,j}^R = - \frac{\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2},j} a_{\Gamma}}{\Delta x^2} - \frac{\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2},j} b_{\Gamma} \theta}{\beta_{i+\frac{1}{2},j} \Delta x} \end{array} \right. \quad (4.65)$$

$$\text{Si } \phi_{i,j} \leq 0 \text{ et } \phi_{i+1,j} > 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\beta_{i,j} \beta_{i+1,j} (|\phi_{i,j}| + |\phi_{i+1,j}|)}{\beta_{i,j} |\phi_{i+1,j}| + \beta_{i+1,j} |\phi_{i,j}|} \\ \text{et} \\ F_{i,j}^R = \frac{\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2},j} a_{\Gamma}}{\Delta x^2} + \frac{\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2},j} b_{\Gamma} \theta}{\beta_{i+\frac{1}{2},j} \Delta x} \end{array} \right. \quad (4.66)$$

Calcul de $F_{i,j}^B$ et de $\hat{\beta}_{i,j-\frac{1}{2}}$

- Si $\phi_{i,j} \cdot \phi_{i,j-1} > 0$, alors on reprend la discrétisation originelle,

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i,j-\frac{1}{2}} = \beta_{i,j-\frac{1}{2}} \\ \text{et} \\ F_{i,j}^B = 0 \end{array} \right. \quad (4.67)$$

- Tandis que si $\phi_{i,j} \cdot \phi_{i,j-1} \leq 0$, on définit les variables suivantes afin de calculer $F_{i,j}^B$ et $\hat{\beta}_{i,j-\frac{1}{2}}$

$$\theta = \frac{|\phi_{i,j-1}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j-1}|} \quad (4.68)$$

$$a_{\Gamma} = \frac{a_{i,j-1} |\phi_{i,j}| + a_{i,j} |\phi_{i,j-1}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j-1}|} \quad (4.69)$$

$$b_{\Gamma} = \frac{b_{i,j-1} n^2_{i,j-1} |\phi_{i,j}| + b_{i,j} n^2_{i,j} |\phi_{i,j-1}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j-1}|} \quad (4.70)$$

$$\text{Si } \phi_{i,j} \geq 0 \text{ et } \phi_{i,j-1} < 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{\beta_{i,j} \beta_{i,j-1} (|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j-1}|)}{\beta_{i,j} |\phi_{i,j-1}| + \beta_{i,j-1} |\phi_{i,j}|} \\ \text{et} \\ F_{i,j}^B = -\frac{\hat{\beta}_{i,j-\frac{1}{2}} a_\Gamma}{\Delta x^2} + \frac{\hat{\beta}_{i,j-\frac{1}{2}} b_\Gamma \theta}{\beta_{i,j-\frac{1}{2}} \Delta x} \end{array} \right. \quad (4.71)$$

$$\text{Si } \phi_{i,j} \leq 0 \text{ et } \phi_{i,j-1} > 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{\beta_{i,j} \beta_{i,j-1} (|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j-1}|)}{\beta_{i,j} |\phi_{i,j-1}| + \beta_{i,j-1} |\phi_{i,j}|} \\ \text{et} \\ F_{i,j}^B = \frac{\hat{\beta}_{i,j-\frac{1}{2}} a_\Gamma}{\Delta x^2} - \frac{\hat{\beta}_{i,j-\frac{1}{2}} b_\Gamma \theta}{\beta_{i,j-\frac{1}{2}} \Delta x} \end{array} \right. \quad (4.72)$$

Calcul de $F_{i,j}^T$ et de $\hat{\beta}_{i,j+\frac{1}{2}}$

- Si $\phi_{i,j} \cdot \phi_{i,j+1} > 0$, alors on reprend la discrétisation originelle,

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i,j+\frac{1}{2}} = \beta_{i,j+\frac{1}{2}} \\ \text{et} \\ F_{i,j}^T = 0 \end{array} \right. \quad (4.73)$$

- Tandis que si $\phi_{i,j} \cdot \phi_{i,j+1} \leq 0$, on définit les variables suivantes afin de calculer $F_{i,j}^T$ et $\hat{\beta}_{i,j+\frac{1}{2}}$,

$$\theta = \frac{|\phi_{i,j+1}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j+1}|} \quad (4.74)$$

$$a_\Gamma = \frac{a_{i,j+1} |\phi_{i,j}| + a_{i,j} |\phi_{i,j+1}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j+1}|} \quad (4.75)$$

$$b_\Gamma = \frac{b_{i,j+1} n_{i,j+1}^2 |\phi_{i,j}| + b_{i,j} n_{i,j}^2 |\phi_{i,j+1}|}{|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j+1}|} \quad (4.76)$$

$$\text{Si } \phi_{i,j} \geq 0 \text{ et } \phi_{i,j+1} < 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_{i,j} \beta_{i,j+1} (|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j+1}|)}{\beta_{i,j} |\phi_{i,j+1}| + \beta_{i,j+1} |\phi_{i,j}|} \\ \text{et} \\ F_{i,j}^T = -\frac{\hat{\beta}_{i,j+\frac{1}{2}} a_\Gamma}{\Delta x^2} - \frac{\hat{\beta}_{i,j+\frac{1}{2}} b_\Gamma \theta}{\beta_{i,j+\frac{1}{2}} \Delta x} \end{array} \right. \quad (4.77)$$

$$\text{Si } \phi_{i,j} \leq 0 \text{ et } \phi_{i,j+1} > 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\beta}_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_{i,j} \beta_{i,j+1} (|\phi_{i,j}| + |\phi_{i,j+1}|)}{\beta_{i,j} |\phi_{i,j+1}| + \beta_{i,j+1} |\phi_{i,j}|} \\ \text{et} \\ F_{i,j}^T = \frac{\hat{\beta}_{i,j+\frac{1}{2}} a_\Gamma}{\Delta x^2} + \frac{\hat{\beta}_{i,j+\frac{1}{2}} b_\Gamma \theta}{\beta_{i,j+\frac{1}{2}} \Delta x} \end{array} \right. \quad (4.78)$$

L'extension au cas tridimensionnel voir supérieur se fait de la même manière sans aucune difficulté. Quelle que soit la dimension du problème, la matrice résultante au schéma de discrétisation reste symétrique permettant l'emploi de solveurs itératifs rapides pour l'inverser. Notons cependant que les interpolations de θ , $a(x_\Gamma)$ et $b(x_\Gamma)$ ne peuvent pas être cette fois-ci aussi précises que dans le cas monodimensionnel à cause de la courbure de l'interface même si elle reste de bonne facture. La Fig.(4.6) nous permet de vérifier qu'une solution discrète ainsi obtenue est bien discontinue à la traversée de l'interface.

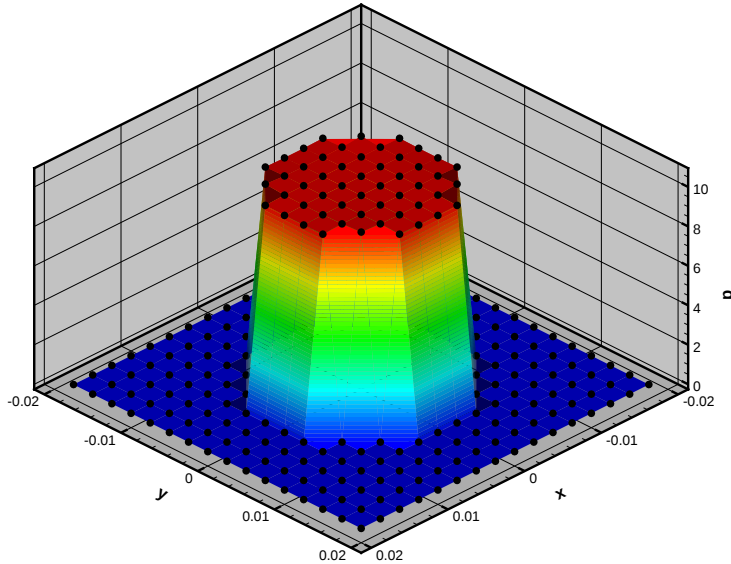


FIG. 4.6 – Solution en pression en appliquant la méthode Ghost-Fluid dans le cas d'une goutte statique et un maillage 16^2 .

Chapitre 5

Résolution des Équations de Navier-Stokes

Sommaire

5.1	Méthode de projection	108
5.1.1	Principe de la méthode	108
5.1.2	Choix de la méthode	109
5.1.3	Traitement numérique	112
5.2	Couplage avec les conditions de saut à l'interface	116
5.2.1	Calcul des propriétés géométriques de l'interface	116
5.2.2	Méthode CSF	117
5.2.3	Méthode Ghost Fluid	117
5.3	Conditions aux frontières du domaine	121
5.3.1	Condition de glissement	122
5.3.2	Condition de non glissement	122
5.3.3	Condition périodique	123
5.3.4	Condition entrante	123
5.3.5	Condition sortante	124
5.4	Tests numériques du solveur monophasique	126
5.4.1	Translation de tourbillons	126
5.4.2	Couche de mélange	127
5.5	Solveur de Poisson MGCG	133
5.5.1	Problématique	133
5.5.2	Principe de la méthode MGCG	133
5.5.3	Mise en oeuvre	134
5.6	Parallélisation	135

Nous disposons à présent avec la méthode Level-Set, permettant la capture spatio-temporelle d'une interface, et la méthode "Ghost Fluid", permettant de traiter numériquement des conditions de saut, des outils numériques nécessaires à la construction d'un solveur des équations de Navier-Stokes pour simuler l'écoulement de deux fluides non miscibles. Ce solveur devra être suffisamment performant pour décrire correctement le champ de vitesse et de pression, cette résolution étant importante puisque le champ de vitesse transporte l'interface. Il existe un couplage fort entre la capture de l'interface, le traitement des conditions de saut et la résolution

des équations de Navier-Stokes. Ce couplage pose un bon nombre de problèmes numériques. Les conditions aux frontières du domaine, qui n'ont toujours pas été explicitées, seront présentées dans ce chapitre.

5.1 Méthode de projection

5.1.1 Principe de la méthode

Il nous est nécessaire de construire un solveur des équations de Navier-Stokes afin de calculer le champ hydrodynamique $(\mathbf{u}, p)$ dans chacune des phases. Dans un premier temps, nous ne nous intéresserons pas à l'aspect diphasique et à la considération de conditions de saut à la traversée d'une interface. Nous allons tout d'abord nous intéresser à la construction d'un solveur monophasique avant d'y incorporer par la suite le traitement des conditions de saut à l'interface, cette démarche étant conforme à une approche à un fluide.

Dans le premier chapitre, lors de la présentation du modèle, nous avons déjà fait quelques hypothèses quant aux équations de Navier-Stokes. Tout comme la mécanique des fluides, la résolution numérique des équations de Navier-Stokes se dissocie en deux grandes catégories : les écoulements compressibles et incompressibles. Or, nous avons émis l'hypothèse de l'incompressibilité de chacun des deux fluides, qu'ils soient liquide ou gazeux. Nous allons voir que cette hypothèse n'est pas forcément un avantage dans la recherche d'une solution discrète, même si chacune des deux catégories possède ses difficultés propres. La vitesse des ondes acoustiques étant infinie dans le cas de fluides incompressibles, le critère de stabilité sur le pas de temps est moins restrictif. Cependant, ce caractère infini pose d'autres difficultés comme la considération des conditions aux limites au problème. Il est très clair aujourd'hui que cela représente un des obstacles majeurs pour développer des méthodes d'ordre élevé.

Les équations de Navier-Stokes incompressibles dont nous recherchons une solution discrète sont les suivantes,

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \frac{1}{\rho} (-\nabla p + \mu \nabla \cdot \mathbf{T}) \end{array} \right. \quad (+ \text{ C.L. }) \quad (5.1)$$

Les conditions aux frontières du domaine d'étude Ω ne sont pas données ici mais sont nécessaires pour fermer le système. Nous verrons un peu plus tard dans ce chapitre les différents types de conditions que nous avons employés.

Il existe dans la littérature scientifique un nombre conséquent de méthodes permettant de résoudre ce système d'équations aux dérivées partielles que sont les équations de Navier-Stokes. Nous pouvons citer les méthodes de compressibilité artificielle, les méthodes de projection, les méthodes spectrales ou encore les méthodes pénalisation tel que la méthode du Lagrangien augmenté. Du fait de sa simplicité pratique de mise en oeuvre et de souplesse d'utilisation, les méthodes de projection sont celles qui ont reçu le plus de succès. Elles ont énormément été employées et développées en largeur depuis les travaux originaux de Chorin [11] et Temam [104].

Une difficulté majeure dans la recherche d'une solution discrète aux équations de Navier-Stokes est le couplage entre vitesse et pression au travers de la condition d'incompressibilité.

L'intérêt majeur d'utiliser une méthode de projection est le découplage pression/vitesse par la résolution successive d'équations découplées vis à vis du couple vitesse/pression. En effet, les méthodes de projection s'articulent autour de la constatation que les équations de Navier-Stokes incompressibles sont similaires à une décomposition de Hodge [11]. Le théorème de décomposition de Hodge stipule que n'importe quel champ de vecteurs $\mathbf{V}$ peut être décomposé en un champ à divergence nulle $\mathbf{V}^d$ et en un autre gradient d'une fonction scalaire $\nabla\phi$,

$$\rho \mathbf{V} = \rho \mathbf{V}^d + \nabla\phi \quad (5.2)$$

On peut ainsi définir un opérateur de projection $\mathbf{P}$ tel que,

$$\mathbf{V}^d = \mathbf{P} \mathbf{V} \quad \text{et} \quad \frac{1}{\rho} \nabla\phi = (\mathbf{I} - \mathbf{P}) \mathbf{V} \quad (5.3)$$

$\mathbf{P}$ est l'opérateur qui projette un champ de vitesse dans l'espace des champs de vitesse à divergence nulle avec les conditions aux limites appropriées. A chaque pas de temps, en appliquant cet opérateur de projection $\mathbf{P}$, la condition d'incompressibilité pour le champ de vitesse sera ainsi strictement respectée.

La perspective de la considération d'une interface et des conditions de saut associées nous encourage à utiliser cette méthode simple, souple et stable tout en étant relativement précise. Il semble que l'aspect diphasique soit plus facilement gérable avec une méthode de projection du fait du découplage pression/vitesse. Il reste que les méthodes de projection ont de nombreuses variantes.

5.1.2 Choix de la méthode

Nous allons nous intéresser à présent à la mise en oeuvre pratique de la méthode. Lorsqu'on désire appliquer une méthode de projection, du fait de ces nombreuses variantes, il existe deux choix distincts à faire. Le premier est la position des inconnues discrètes sur la grille de calcul que sont la pression et les composantes du vecteur vitesse. Le second est l'algorithme numérique a proprement parlé, essentiellement articulé autour de la part explicite et implicite des schémas numériques pour discrétiser temporellement les équations de Navier-Stokes.

Maillage MAC

Tout comme nous l'avons fait pour discrétiser l'équation d'advection de la Level-Set, nous considérons un maillage cartésien uniforme par soucis de simplicité de mise en oeuvre des schémas numériques. Les maillages étant confondus, nous reprenons les mêmes notations,

$$\Omega_{i,j} = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \times [y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}] \quad , \quad 1 \leq i \leq n_x, 1 \leq j \leq n_y \quad (5.4)$$

$$\Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}} = \Delta x \quad , \quad \Delta y_j = y_{j+\frac{1}{2}} - y_{j-\frac{1}{2}} = \Delta y \quad (5.5)$$

$$x_i = \frac{1}{2} \left(x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}} \right) \quad , \quad y_j = \frac{1}{2} \left(y_{j-\frac{1}{2}} + y_{j+\frac{1}{2}} \right) \quad (5.6)$$

Le choix de la position des variables discrètes vitesse/pression sur la grille de discrétisation s'est porté sur un maillage de type MAC, ou encore appelé maillage décalé (de l'anglais "staggered mesh"). Sur une telle grille, la pression est centrée sur le volume de contrôle $\Omega_{i,j}$ tandis que les composantes du vecteur vitesse sont définies sur les côtes de la cellule Fig.(5.1).

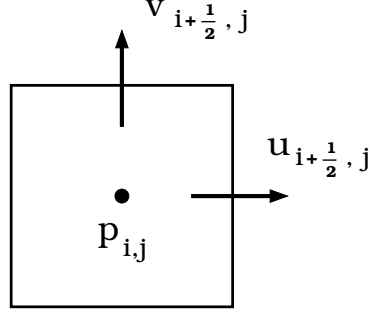


FIG. 5.1 – Maillage décalé de type MAC

La position des variables discrètes sur le maillage n'est pas anodine. Le couplage entre vitesse et pression dans les équations de Navier-Stokes incompressibles, notamment à travers la nullité du divergent de vitesse, nous amène à dissocier la position spatiale des variables. Cela afin d'exprimer aisément d'un point de vue discret une composante de la vitesse en fonction du gradient de pression et inversement. Nous voyons bien que dans le cas d'un maillage MAC, cette opération est immédiate. Il est en particulier facile d'exprimer le divergent du champ de vitesse au centre de la cellule. Cependant, cela complique légèrement la recherche de la solution d'une équation aux dérivées partielles du type advection diffusion, notamment pour l'expression des conditions aux limites.

Méthode de Chorin

Nous avons fait le choix d'implémenter la méthode de projection de Chorin et Temam, autrement nommée dans la littérature "nonincremental pressure-correction scheme" ou encore "pressure-poisson approach". C'est la version originale de l'algorithme de projection, dans une formulation totalement explicite. Comme nous l'avons vu en introduction, une méthode de projection est une méthode de type "prédicteur-correcteur" où l'on détermine en premier lieu un champ de vitesse qualifié d'intermédiaire avant de le projeter et le rendre à divergence nulle suivant une décomposition de Hodge. Étant donné la solution discrète approchée à l'instant t^n , on cherche la solution à l'instant t^{n+1} suivant un pas de temps Δt^n tel que $t^{n+1} = t^n + \Delta t^n$. D'après la formulation de Chorin, la méthode revient à résoudre successivement les équations suivantes,

- Étape de prédiction

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n + \Delta t^n \left(-(\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n + \frac{\mu}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{T}^n \right) \quad (+ \text{C.L.}) \quad (5.7)$$

$$\text{avec } \mathbf{T}^n = (\nabla \mathbf{u}^n + (\nabla \mathbf{u}^n)^T)$$

- Solution en pression

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p^{n+1} \right) = \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (+ \text{ C.L. }) \quad (5.8)$$

- Correction du champ de vitesse pour le rendre à divergence nulle

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t^n}{\rho} \nabla p^{n+1} \quad (+ \text{ C.L. }) \quad (5.9)$$

On obtient ainsi une série de trois équations elliptiques découplées vis à vis du couple vitesse/pression à résoudre successivement. Dans l'étape de prédiction, que ce soit la partie convective du champ de vitesse ou le tenseur des contraintes de déformation visqueuses, la formulation est totalement explicite, les termes sont calculés à l'instant t^n .

Il est établi dans la littérature [25, 56] que l'ordre de convergence temporel de la méthode en l'état dans cette version totalement explicite est d'ordre $O(\Delta t)$ que ce soit pour la pression ou la vitesse avec des conditions aux limites classiques (Une même condition de Dirichlet pour la vitesse prédite $\mathbf{u}^*$ et la vitesse finale à divergence nulle $\mathbf{u}^n$, et une condition de Neumann homogène pour la pression p^{n+1}). Ce taux de convergence est invariant pour la pression si l'on emploie des méthodes d'intégration temporelle supérieures à la méthode d'Euler dans l'étape de prédiction car elle est intrinsèque au fractionnement en étapes successives. Le forçage de la condition artificielle $\mathbf{n} \cdot \nabla p^{n+1} = 0$ sur la frontière du domaine ⁸ implique l'apparition d'une couche limite numérique de pression limitant l'ordre de convergence de la méthode.

Il est possible d'augmenter l'ordre de convergence de la méthode de projection par deux biais. Le premier où l'on incorpore dans l'étape de prédiction le calcul de la pression ∇p^n , appelé forme incrémentale de la méthode de projection, permettant de mieux évaluer la vitesse $\mathbf{u}^*$. Mais surtout un second biais appelé forme rotationnelle de la méthode de projection où l'on implícite en premier lieu le calcul des termes visqueux dans l'étape de prédiction revenant à écrire $\mathbf{T}^*$ au lieu de $\mathbf{T}^n$, mais surtout où l'on considère un autre potentiel que la pression p dans la seconde étape de la méthode de projection. Cette technique permet de mieux prendre en compte la condition pour la pression à la frontière du domaine grâce à une formulation consistante plus proche de la physique [25, 56], mais également d'éliminer toute restriction sur le pas de temps liée à la viscosité. Cependant, lorsqu'on désire appliquer cette méthode de projection rotationnelle alors qu'il existe des conditions de saut à la traversée d'une interface, il semble peu évident au premier abord d'impliciter le tenseur des contraintes visqueuses à cause de la résolution du système d'équations linéaires associé.

⁸voir le paragraphe concernant les conditions aux frontières du domaine

5.1.3 Traitement numérique

Première approximation

Si l'on applique la méthode de Chorin au maillage MAC considéré ici, la discrétisation temporelle par étapes successives des équations de Navier-Stokes incompressibles s'écrit,

- Étape de prédiction

$$\begin{aligned}
 \bullet \quad u_{i+\frac{1}{2},j}^* &= u_{i+\frac{1}{2},j}^n + \\
 &\Delta t^n \left(- \left(u^n \cdot \frac{\partial u^n}{\partial x} + v^n \cdot \frac{\partial u^n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 u^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^n}{\partial y^2} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right) \\
 \bullet \quad v_{i,j+\frac{1}{2}}^* &= v_{i,j+\frac{1}{2}}^n + \\
 &\Delta t^n \left(- \left(u^n \cdot \frac{\partial v^n}{\partial x} + v^n \cdot \frac{\partial v^n}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 v^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v^n}{\partial y^2} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right)
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

- Solution en pression

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right)_{i,j} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j} = \\
 \frac{u_{i+\frac{1}{2},j}^* - u_{i-\frac{1}{2},j}^*}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}}^* - v_{i,j-\frac{1}{2}}^*}{\Delta y}
 \end{aligned} \tag{5.11}$$

- Correction du champ de vitesse pour le rendre à divergence nulle

$$\begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} = u_{i+\frac{1}{2},j}^* - \frac{\Delta t^n}{\rho} \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} \right) \\ v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} = v_{i,j+\frac{1}{2}}^* - \frac{\Delta t^n}{\rho} \left(\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y} \right) \end{cases} \tag{5.12}$$

Lors des deux dernières étapes, lors de la recherche de la solution en pression p et lors de la correction du champ de vitesse $\mathbf{u}^*$, nous pouvons nous apercevoir concrètement de tout l'intérêt d'un maillage MAC pour le problème de couplage vitesse/pression. Que ce soit les composantes de la vitesse ou la pression, ces variables s'expriment aisément en fonction du gradient de l'autre de façon discrète. Nous pouvons cependant noter que ces approximations sont ici seulement au premier ordre.

Une discrétisation standard centrée au second ordre est employée pour discrétiser la dérivée seconde de la pression, l'opérateur de Laplace,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right)_{i,j} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j} \\ = \\ \frac{1}{\rho} \left(\frac{p_{i+1,j}^{n+1} + p_{i-1,j}^{n+1} - 2p_{i,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{p_{i,j+1}^{n+1} + p_{i,j-1}^{n+1} - 2p_{i,j}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) \end{aligned} \quad (5.13)$$

Pour un maillage cartésien uniforme comme considéré ici ($\Delta x = \Delta y$), les discrétisations différences finies et volumes finis sont équivalentes. Nous obtenons ainsi le système linéaire classique correspondant à un stencil de discrétisation 5 points et à une matrice creuse diagonale symétrique définie positive. Nous pourrions employer un stencil de discrétisation 9 points mais cela poserait des difficultés supplémentaires lors de la considération de l'aspect diphasique. Il est d'usage d'employer une méthode itérative d'inversion de matrice tel que les méthodes du gradient conjugué ou les méthodes multigrilles. Nous en parlerons plus tard dans ce chapitre lorsque nous serons dans la situation du solveur complet diphasique où la masse volumique ρ présente un saut à la traversée d'une interface localisée par une fonction Level-Set.

Il nous reste à présent à discrétiser spatialement les termes convectifs et visqueux pour chacune des composantes de la vitesse. De plus, une discrétisation temporelle de type Euler explicite n'est pas suffisante en précision dans la pratique vis à vis du terme convectif non linéaire. Nous allons exposer une discrétisation d'ordre plus élevé.

Intégration temporelle

Il existe dans la littérature de nombreuses méthodes performantes pour intégrer en temps une équation aux dérivées partielles. Bien évidemment, ces méthodes sont issues de l'intégration d'équations de type advection/diffusion bien plus simples en comparaison des équations de Navier-Stokes multidimensionnelles. Cela permet évidemment d'assimiler au mieux les performances de la méthode. Nous pouvons citer la méthode de Lax-Wendroff, la méthode de Runge-Kutta et les méthodes à pas multiples. Comme nous l'avons vu pour intégrer en temps l'équation d'advection de la Level-Set, la méthode de Runge-Kutta s'avère très performante pour réaliser une telle opération. Cependant, elle demande autant d'applications du schéma de discrétisation que l'ordre de la méthode. Au regard de la méthode de projection, elle demande donc autant d'inversion de la matrice pression que l'ordre de la méthode. Du point de vue du temps de calcul, un tel choix serait trop coûteux. La méthode d'Adams-Bashford, classifiée dans les méthodes à pas multiples, ne possède pas cet inconvénient tout en gardant des propriétés de convergence intéressantes. La méthode se construit suivant les développements mathématiques qui vont suivre. Tout d'abord, on reprend la forme générale pour intégrer en temps notre système d'équations

aux dérivées partielles,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = P(\mathbf{u}) \quad (5.14)$$

où $P(\mathbf{u})$ représente l'application de la méthode de projection à la vitesse $\mathbf{u}$. On intègre ensuite cette équation entre les pas de temps t^n et t^{n+1} sachant que $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$,

$$\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n = \Delta t^n \int_{t_n}^{t_{n+1}} P(\mathbf{u}(t)) dt \quad (5.15)$$

Afin de trouver une approximation de l'intégrale de $P(\mathbf{u})$ entre les points t^n et t^{n+1} , on considère le polynôme d'interpolation de Lagrange $L(t)$ entre les points $(t^{n-1}, P(\mathbf{u}^{n-1}))$ et $(t^n, P(\mathbf{u}^n))$ qui s'écrit de la façon suivante,

$$L(t) = P(\mathbf{u}^{n-1}) \left(\frac{t - t^n}{t^{n-1} - t^n} \right) + P(\mathbf{u}^n) \left(\frac{t - t^{n-1}}{t^n - t^{n-1}} \right) \quad (5.16)$$

Dont on approxime l'intégrale entre les pas de temps t^n et t^{n+1} par,

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n+1}} L(t) dt &\approx \frac{\Delta t^n}{2} (L(t^{n+1}) + L(t^n)) \\ &\approx \frac{\Delta t^n}{2} \left(P(u^{n-1}) \frac{t^{n+1} - t^n}{t^{n-1} - t^n} + P(u^n) \frac{t^{n+1} - t^{n-1}}{t^n - t^{n-1}} + P(u^n) \right) \\ &\approx \frac{\Delta t^n}{2} \left(P(u^n) \left(\frac{\Delta t^n + 2\Delta t^{n-1}}{\Delta t^{n-1}} \right) - P(u^{n-1}) \left(\frac{\Delta t^n}{\Delta t^{n-1}} \right) \right) \end{aligned} \quad (5.17)$$

nous permettant ainsi d'écrire le schéma final d'intégration en temps d'Adams-Bashford à d'ordre 2,

$$u^{n+1} = u^n + \frac{\Delta t^n}{2} \left(P(u^n) \left(\frac{\Delta t^n + 2\Delta t^{n-1}}{\Delta t^{n-1}} \right) - P(u^{n-1}) \left(\frac{\Delta t^n}{\Delta t^{n-1}} \right) \right) \quad (5.18)$$

Et si l'on suppose que $\Delta t^n \approx \Delta t^{n-1}$, alors on retrouve une forme simplifiée de ce schéma que nous rencontrons bien plus souvent dans la littérature,

$$u^{n+1} = u^n + \frac{\Delta t^n}{2} (3 P(u^n) + P(u^{n-1})) \quad (5.19)$$

On applique ce schéma uniquement à la partie convective non linéaire des équations de Navier-Stokes au niveau de l'étape de prédiction. Les termes de diffusion par viscosité ne nécessitent pas autant de précision temporelle, l'erreur commise est négligeable vis à vis du terme non linéaire. Au final, en comparant cette méthode d'Adams-Bashford d'avancement en temps avec un méthode Runge-Kutta au 3ème ordre appliquée à l'ensemble de la méthode projection, les résultats sont inférieurs mais comparables comme le montre S.Tanguy [101].

Discrétisation des termes visqueux

La discrétisation des termes visqueux est réalisée de façon totalement explicite à l'aide d'un schéma centré au 2ème ordre,

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial^2 u^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^n}{\partial y^2} \right)_{i+\frac{1}{2},j} &= \frac{u_{i+\frac{3}{2},j}^n - 2u_{i+\frac{1}{2},j}^n + u_{i-\frac{1}{2},j}^n}{\Delta x^2} \\
 &+ \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1}^n - 2u_{i+\frac{1}{2},j}^n + u_{i+\frac{1}{2},j-1}^n}{\Delta y^2} \\
 \left(\frac{\partial^2 v^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v^n}{\partial y^2} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} &= \frac{v_{i,j+\frac{3}{2}}^n - 2v_{i,j+\frac{1}{2}}^n + v_{i,j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta y^2} \\
 &+ \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}}^n - 2v_{i,j+\frac{1}{2}}^n + v_{i-1,j+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x^2}
 \end{aligned} \tag{5.20}$$

Discrétisation des termes convectifs

Tout comme nous l'avons fait pour discrétiser la partie convective de l'équation de transport de la Level-Set, nous employons le schéma Weno au 5ème ordre pour discrétiser spatialement la partie convective des équations de Navier-Stokes $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$. Nous reprenons ainsi les deux schémas Weno au 5ème ordre qui ont été établis pour la Level-Set, la version non conservative Weno5/n et la version conservative Weno5/c, à la différence que ce n'est plus la Level-Set ϕ qui est convectée mais la vitesse $\mathbf{u}$ elle-même. Il est à cet égard nécessaire d'interpoler les composantes de la vitesse du maillage MAC pour obtenir une valeur de la vitesse de convection au bon point discret,

$$\begin{aligned}
 u_{i,j+\frac{1}{2}}^n &= 1/4 \left(u_{i+\frac{1}{2},j}^n + u_{i-\frac{1}{2},j}^n + u_{i+\frac{1}{2},j+1}^n + u_{i-\frac{1}{2},j+1}^n \right) \\
 v_{i+\frac{1}{2},j}^n &= 1/4 \left(v_{i,j+\frac{1}{2}}^n + v_{i,j-\frac{1}{2}}^n + v_{i+1,j+\frac{1}{2}}^n + v_{i+1,j-\frac{1}{2}}^n \right) \\
 u_{i,j}^n &= 1/2 \left(u_{i-\frac{1}{2},j}^n + u_{i+\frac{1}{2},j}^n \right) \quad ; \quad v_{i,j}^n = 1/2 \left(v_{i,j-\frac{1}{2}}^n + v_{i,j+\frac{1}{2}}^n \right)
 \end{aligned} \tag{5.21}$$

5.2 Couplage avec les conditions de saut à l'interface

Il est maintenant nécessaire de greffer à notre solveur monophasique le traitement des conditions de saut à l'interface Γ . Il a été établi lors de la présentation du modèle qu'elles sont les suivantes,

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \begin{bmatrix} p \mathbf{I} - \mu (\nabla \mathbf{u}_i + (\nabla \mathbf{u}_i)^t) \\ \mu (\nabla \mathbf{u}_i + (\nabla \mathbf{u}_i)^t) \end{bmatrix} \cdot \mathbf{n} &= \sigma \kappa \\ \mathbf{t} \cdot \begin{bmatrix} p \mathbf{I} - \mu (\nabla \mathbf{u}_i + (\nabla \mathbf{u}_i)^t) \\ \mu (\nabla \mathbf{u}_i + (\nabla \mathbf{u}_i)^t) \end{bmatrix} \cdot \mathbf{n} &= 0 \end{aligned} \quad (5.22)$$

Lors du chapitre concernant le traitement numérique de conditions de saut, nous avons présenté deux méthodes : la méthode CSF et la méthode Ghost-Fluid. Nous allons les reprendre afin de les appliquer à notre méthode projection sachant que la capture spatio-temporelle de l'interface Γ est réalisée par le transport de la Level-Set ϕ .

Notons que lors de l'avancement en temps de nos inconnues pour notre solveur diphasique complet, nous calculons en premier lieu la Level-Set au temps t^{n+1} avant d'appliquer la méthode projection à la vitesse $\mathbf{u}^n$. L'objectif de la manoeuvre est de réaliser un bon couplage entre la considération des conditions de saut à la traversée de l'interface et la recherche de la vitesse $\mathbf{u}^{n+1}$ à divergence nulle.

5.2.1 Calcul des propriétés géométriques de l'interface

Nous avons besoin dans un premier temps de calculer la normale $\mathbf{n}$ et la courbure κ de l'interface au point x_{ij} afin d'appliquer nos conditions de saut. Nous utilisons à cet effet la fonction Level-Set,

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \quad (5.23)$$

$$\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \right) = \frac{2\phi_x \phi_y \phi_{xy} - \phi_x^2 \phi_{yy} - \phi_y^2 \phi_{xx}}{(\phi_x^2 + \phi_y^2)^{3/2}} \quad (5.24)$$

Une discrétisation standard centrée au second ordre est employée pour chacune des dérivées de la Level-Set ϕ ,

$$\begin{aligned} \phi_x &= \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} & \phi_y &= \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2\Delta y} \\ \phi_{xx} &= \frac{\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j}}{\Delta x^2} & \phi_{yy} &= \frac{\phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j}}{\Delta y^2} \\ \phi_{xy} &= \frac{\phi_{i+1,j+1} + \phi_{i-1,j-1} - \phi_{i+1,j-1} - \phi_{i-1,j+1}}{4\Delta x \Delta y} \end{aligned} \quad (5.25)$$

Quand le dénominateur vaut exceptionnellement zéro, le calcul de ces dérivées est décentré pour assurer la stabilité du code ⁹. Le calcul de la tangente à l'interface est identique à celui présenté dans [48].

⁹Nous avons effectivement trouvé des cas de simulation où cette correction est nécessaire

Nous verrons lors de la présentation des cas tests de validation du code de calcul toute l'importance du calcul de la courbure pour la bonne prise en compte de la condition de saut en pression. Notons qu'il n'est à priori pas évident d'augmenter la précision du calcul des propriétés géométriques car cela demanderait un stencil de discrétisation plus important et il serait alors certainement faussé en cas de sous-résolution de la Level-Set.

5.2.2 Méthode CSF

La méthode CSF est une méthode globale implicite s'appuyant sur une régularisation de l'ensemble des quantités présentant un saut à l'interface : la densité, la viscosité et la pression. De façon classique, on utilise les fonctions de Heaviside et de Dirac régularisées grâce à l'utilisation de la valeur de la Level-Set comme nous les avons définies Eq.(4.16) et Eq.(4.17) pour la viscosité dynamique $\mu(\phi)$ et la densité $\rho(\phi)$.

Nous avons établi que la transformation de l'intégrale de surface de l'action de la tension de surface sur l'interface en une intégrale de volume par l'intermédiaire d'un Dirac régularisé nous permet de modéliser la capillarité par l'inclusion d'un terme source volumique dans les équations de Navier-Stokes Eq.(4.15). Ainsi, notre méthode de projection diphasique avec la méthode CSF s'écrit de la façon suivante,

$$\begin{aligned}
 \bullet \quad \mathbf{u}^* &= \mathbf{u}^n + \Delta t^n \left(- (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n + \frac{\nabla \cdot (\mu(\phi) \mathbf{T}^n)}{\rho(\phi)} + \frac{\sigma \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi}{\rho(\phi)} \right) \\
 \bullet \quad \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho(\phi)} \nabla p^{n+1} \right) &= \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t^n} \\
 \bullet \quad \mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t^n}{\rho(\phi)} \nabla p^{n+1}
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

Les différents termes calculés dans les trois étapes de la méthode de projection ne nécessitent ainsi aucun traitement particulier à l'interface en comparaison de la version monophasique. Notons toutefois qu'il est nécessaire d'être attentif au traitement numérique du tenseur des contraintes visqueuses Eq.(5.20) car la viscosité présente un saut régularisé à l'interface,

$$\nabla \cdot (\mu(\phi) \mathbf{T}^n) \neq \mu(\phi) \Delta \cdot \mathbf{u}^n \quad \text{d'un point de vue discret} \tag{5.27}$$

Il est donc obligatoire de prendre en compte les variations spatiales de $\mu(\phi)$ dans la construction du schéma de type différence finie centré comme dans [48]. Enfin, nous utilisons la méthode itérative MGCG présentée dans ce chapitre pour inverser la matrice résultante au système linéaire associé à la résolution de l'équation de Poisson dont la pression est solution.

5.2.3 Méthode Ghost Fluid

La méthode Ghost-Fluid est une méthode explicite pour traiter les conditions de saut à l'interface comme nous avons pu le voir au chapitre précédent. La méthode nous permet d'obtenir une solution discrète discontinue respectant scrupuleusement les sauts à l'interface. Particulièrement,

la solution discrète en pression discontinue à la traversée de l'interface est ainsi physiquement plus acceptable en comparaison de la solution obtenue avec la méthode CSF quant à la prise en compte de la capillarité. Nous verrons également que la prise en compte du saut de la dérivée de vitesse à la traversée de l'interface est réalisée de manière exacte, un avantage lorsqu'on désire simuler des instabilités interfaciales visqueuses.

Les sauts des inconnues et de leur dérivée sont directement pris en compte numériquement avec la méthode Ghost Fluid dans la discrétisation de l'ensemble des termes de la méthode de projection. Elle nécessite la connaissance de la valeur des sauts dans chacune des directions du domaine de calcul conformément aux hypothèses qui ont été considérées pour exposer les principes numériques de la méthode. L'expression des conditions de saut en l'état ne nous les donne pas, nous devons par conséquent les réécrire afin d'appliquer la méthode Ghost Fluid.

Traitement de l'équation de Poisson

Le saut dans la direction normale du tenseur des contraintes $\mathbf{T}^n$ peut être réécrit de la manière suivante,

$$[p] - [2\mu(\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n})] \cdot \mathbf{n} = \sigma \kappa \quad (5.28)$$

Or $[(\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}] = 0$ car les fluides sont incompressibles comme il est montré dans [48] et [38]. Cette nullité nous permet d'en déduire directement l'expression du saut de pression à l'interface,

$$[p] - [2\mu] (\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} = \sigma \kappa \quad (5.29)$$

A l'aide de cette nouvelle expression, nous pouvons calculer aisément le saut de pression en chaque point discret. Ainsi, nous pouvons désormais appliquer la méthode Ghost Fluid à la discrétisation du problème de Poisson à coefficients discontinus conformément à la méthodologie numérique présentée au chapitre précédent. Une fois les coefficients de la matrice résultante calculés, matrice creuse diagonale symétrique, il nous reste à l'inverser à l'aide du solveur itératif MGCG.

Traitement des termes visqueux

Concernant le saut dans la direction tangentielle du tenseur des contraintes $\mathbf{T}^n$ (ou les composantes tangentielles si on considère un espace tridimensionnel), Kang et al. [48] arrive après un long et complexe calcul à obtenir l'équation matricielle suivante,

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} [\mu u_x] & [\mu u_y] \\ [\mu v_x] & [\mu v_y] \end{pmatrix} &= [\mu] \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{t} \end{pmatrix}^t \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{t} \end{pmatrix} \\
 &+ [\mu] \mathbf{n}^t \mathbf{n} \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix} \mathbf{n}^t \mathbf{n} \\
 &- [\mu] \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{t} \end{pmatrix}^t \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix}^t \mathbf{n}^t \mathbf{n}
 \end{aligned} \tag{5.30}$$

Cette expression nous permet ainsi de calculer les sauts de la dérivée de vitesse dans chacune des directions du maillage comme il est nécessaire de le faire pour appliquer la méthode Ghost Fluid. En effet, nous avons présenté les principes de la méthode en l'appliquant à la résolution de l'équation de Poisson à coefficients variables. Or, ces principes restent les mêmes pour discrétiser le tenseur des contraintes visqueuses $\nabla \cdot (\mu \mathbf{T}^n)$,

$$\begin{aligned}
 &\left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u^n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u^n}{\partial y} \right) \right)_{i+\frac{1}{2},j} \\
 &\left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v^n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v^n}{\partial y} \right) \right)_{i,j+\frac{1}{2}}
 \end{aligned} \tag{5.31}$$

conformément aux développements présentés dans [48]. Au final, la méthode s'avère très performante dans le traitement de saut de la dérivée de vitesse $\mathbf{u}$ à l'interface dans la direction normale comme nous le verrons avec la simulation de l'écoulement de Poiseuille diphasique.

Condition de stabilité : pas de temps adaptatif

Afin de s'assurer de la stabilité temporelle de notre méthode de projection explicite, nous avons besoin de définir un pas de temps adaptatif Δt^n en prenant en compte les effets convectifs et visqueux, des forces capillaires et éventuellement des forces de volume comme la gravité.

La contrainte de stabilité liée à la convection du champ de vitesse nous impose la condition suivante,

$$\underbrace{\Delta t_c \left(\max \left(\frac{\|u\|_\infty}{\Delta x}, \frac{\|v\|_\infty}{\Delta y} \right) \right)}_{C_c} \leq 1 \tag{5.32}$$

C'est la condition CFL classique. La contrainte de stabilité liée à la diffusion visqueuse nous impose la condition suivante,

$$\Delta t_v \underbrace{\left(\max \left(\frac{\mu_l}{\rho_l}, \frac{\mu_g}{\rho_g} \right) \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} \right) \right)}_{C_v} \leq 1 \quad (5.33)$$

Les forces de volume $g = (g_x, g_y)$ peuvent être incluses dans l'estimation du pas de temps convectif Eq.(5.32) en constatant que $\|u\|_\infty + \Delta t \|g_x\|_\infty$ est une approximation linéaire de la vitesse totale à chaque fin de pas de temps dans la direction x . Si nous faisons de même pour la direction y , nous obtenons après quelques développements un nouveau pas de temps convectif Δt_g ,

$$\Delta t_g \left(\max \left(\frac{\|u\|_\infty}{\Delta x} + \sqrt{\left(\frac{\|u\|_\infty}{\Delta x} \right)^2 + \frac{4\|g_x\|_\infty}{\Delta x}}, \frac{\|v\|_\infty}{\Delta y} + \sqrt{\left(\frac{\|v\|_\infty}{\Delta y} \right)^2 + \frac{4\|g_y\|_\infty}{\Delta y}} \right) \right) \leq 2 \quad (5.34)$$

Maintenant, si l'on combine cette contrainte convective sur le pas de temps Δt_g avec la contrainte visqueuse sur le pas de temps Δt_v , nous obtenons l'expression suivante conformément aux développements présentés dans [48],

$$\Delta t \left(C_c + C_v + \left((C_c + C_v)^2 + 4 \underbrace{\max \left(\frac{\|g_x\|_\infty}{\Delta x}, \frac{\|g_y\|_\infty}{\Delta y} \right)}_{C_g} \right)^{1/2} \right) \leq 2 \quad (5.35)$$

Pour être complet, il nous reste à prendre en compte l'accélération due à la tension de surface. Or, la méthode CSF nous indique que la contribution capillaire peut être modélisée par une force volumique $\sigma \delta^\epsilon \kappa / \rho$. La contrainte sur le pas temps liée à la tension de surface peut ainsi être incluse sous la forme d'une force de volume supplémentaire. Le pas temps de temps adaptatif ainsi construit s'écrit finalement,

$$\Delta t^n \left(C_c + C_v + \sqrt{(C_c + C_v)^2 + 4 (C_g + C_s)} \right) \leq 2 \cdot \text{cfl} \quad (5.36)$$

avec $C_s = \frac{\sigma \|\kappa\|_\infty}{\min(\rho_g, \rho_l) \min(\Delta x, \Delta y)^2}$

Le nombre CFL est en général fixé à 0.5. Nous avons pu vérifier dans la pratique qu'un tel pas de temps aussi restrictif avec l'inclusion de la force capillaire est bien nécessaire pour assurer la convergence et stabilité temporelle du code de calcul. Il peut même qu'il soit insuffisant pour un fort rapport de densité typiquement de l'ordre de 1000.

5.3 Conditions aux frontières du domaine

Nous allons exposer au cours de ce paragraphe l'ensemble des conditions aux frontières du domaine pour le couple vitesse/pression qui ont été utilisées pour réaliser l'ensemble des simulations présentées dans la suite de ce mémoire. De telles conditions sont nécessaires pour fermer notre système d'équations. Il est absolument nécessaire de ne pas les négliger car il est fréquent de faire chuter l'ordre de convergence de notre solveur numérique si elles sont mal prises en compte.

En préliminaire, il est nécessaire d'avoir à l'esprit que la convergence de la méthode projection utilisée ici est établie formellement lorsqu'on considère une même condition de Dirichlet pour la composante normale des vitesses $\mathbf{u}^{n+1}$ et $\mathbf{u}^*$ à la frontière du domaine. Dans ce cas, si $\mathbf{n}$ est la normale à la frontière, l'équation de projection du champ de vitesse $\mathbf{u}^*$ dans l'espace des champs de vitesse à divergence nulle Eq.(5.11) nous dicte une condition de Neumann homogène pour la pression,

$$\mathbf{n} \cdot \nabla p^{n+1} = \frac{\rho}{\Delta t^n} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^* - \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^{n+1}) = 0 \quad (5.37)$$

Nous avons à priori la liberté du choix pour la composante tangentielle de la vitesse à la frontière. La convergence de tout autre type de conditions aux limites pour le couple vitesse/pression est beaucoup plus floue, mis à part évidemment pour des conditions périodiques où la question ne se pose plus. Nous verrons en particulier que cela pose un problème pour construire correctement des conditions libres, que ce soit une condition entrante ou sortante.

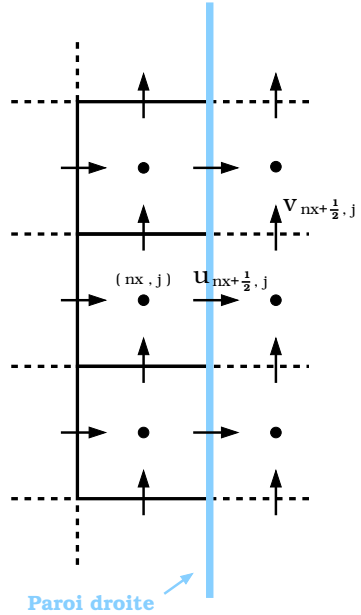


FIG. 5.2 – Schématisation de la position des variables suivant la frontière droite du domaine de calcul

Toutes les conditions aux frontières présentées ci-dessous se limitent à la frontière droite d'un domaine de calcul bidimensionnel excepté pour la condition entrante où il est plus naturel de présenter cette condition pour la frontière gauche. Nous avons schématisé sur la Fig.(5.2) le cas de figure, nous recherchons à exprimer les variables $u_{n_x + \frac{1}{2}, j}$, $v_{n_x + \frac{1}{2}, j}$, $p_{n_x + 1, j}$ et $\phi_{n_x + 1, j}$. Cependant, comme nous avons utilisé un schéma Weno au 5ème ordre pour discrétiser les parties

convectives de l'équation de transport de la Level-Set et des équations de Navier-Stokes, le stencil de discrétisation est constitué de 3 points de part et d'autre du dernier point de discrétisation au bord de la frontière du domaine. Il est donc nécessaire de définir les composantes de la vitesse ainsi que la Level-Set pour les 3 cellules fantômes. La transposition pour les autres frontières du domaine ainsi que pour la version tridimensionnelle du code est naturelle.

5.3.1 Condition de glissement

Une condition de glissement est généralement utilisée dans le cas où l'épaisseur de la couche limite qui se forme sur la frontière est de l'ordre ou négligeable devant la taille de la maille. Nous sommes par conséquent dans l'impossibilité de prendre en compte strictement l'apparition systématique de la couche limite, il est donc préférable de la négliger complètement en laissant numériquement le fluide glisser sur la frontière. Une telle hypothèse est tout à fait concevable, elle n'empêche en rien la convergence du calcul vers une solution tout à fait réaliste. Il est d'usage dans la pratique de construire cette condition en suivant un principe de symétrie, revenant à écrire la condition suivante,

$$\begin{aligned}
 u_{nx+\frac{1}{2},j}^{n+1} &= 0 & v_{nx+\frac{1}{2},j}^{n+1} &= v_{nx-\frac{1}{2},j}^{n+1} \\
 u_{nx+\frac{3}{2},j}^{n+1} &= 0 & v_{nx+\frac{3}{2},j}^{n+1} &= v_{nx-\frac{3}{2},j}^{n+1} \\
 u_{nx+\frac{5}{2},j}^{n+1} &= 0 & v_{nx+\frac{5}{2},j}^{n+1} &= v_{nx-\frac{5}{2},j}^{n+1}
 \end{aligned} \tag{5.38}$$

La condition pour le vitesse $\mathbf{u}^*$ est tout à fait identique. Nous sommes dans la situation de l'Eq.(5.37), la pression respecte une condition de Neumann homogène.

5.3.2 Condition de non glissement

Lorsque la couche limite se formant sur la paroi n'est plus négligeable, il est nécessaire de définir des conditions aux parois telles que la composante tangentielle à la paroi de la vitesse $\mathbf{u}$ à l'interface soit nulle. Pour réaliser correctement cette opération, nous devons faire attention au fait que l'on utilise un maillage MAC impliquant que cette composante tangentielle est décalée d'une demi maille de la paroi. De plus, il peut arriver que l'on souhaite que la paroi soit en mouvement. En supposant que la paroi possède une vitesse a , il est d'usage dans la pratique d'utiliser la technique dite du miroir revenant à écrire la condition de non-glissement suivante,

$$\begin{aligned}
 u_{nx+\frac{1}{2},j}^{n+1} &= 0 & v_{nx+\frac{1}{2},j}^{n+1} &= 2a - v_{nx-\frac{1}{2},j}^{n+1} \\
 u_{nx+\frac{3}{2},j}^{n+1} &= 0 & v_{nx+\frac{3}{2},j}^{n+1} &= 2a - v_{nx-\frac{3}{2},j}^{n+1} \\
 u_{nx+\frac{5}{2},j}^{n+1} &= 0 & v_{nx+\frac{5}{2},j}^{n+1} &= 2a - v_{nx-\frac{5}{2},j}^{n+1}
 \end{aligned} \tag{5.39}$$

Chacune des vitesses fantômes est définie telle qu'on obtienne bien la bonne vitesse à la paroi. Nous sommes toujours dans la situation de l'Eq.(5.37) où la vitesse $\mathbf{u}^*$ respecte strictement la même condition, la condition sur la pression est une condition de Neumann homogène. La pratique numérique confirme qu'une telle condition marche très bien.

5.3.3 Condition périodique

Une condition périodique est telle que l'écoulement que l'on désire simuler possède une symétrie infinie par translation dans une des directions du maillage ou bien même les deux. Elle se définit aisément comme suit sachant bien évidemment que les deux frontières opposées doivent la respecter,

$$\begin{aligned}
 u_{nx+\frac{1}{2},j} &= u_{\frac{1}{2},j} & v_{nx+\frac{1}{2},j} &= v_{\frac{1}{2},j} \\
 u_{nx+\frac{3}{2},j} &= u_{\frac{3}{2},j} & v_{nx+\frac{3}{2},j} &= v_{\frac{3}{2},j} & p_{nx+1,j} &= p_{1,j} \\
 u_{nx+\frac{5}{2},j} &= u_{\frac{5}{2},j} & v_{nx+\frac{5}{2},j} &= v_{\frac{5}{2},j}
 \end{aligned} \tag{5.40}$$

L'usage de conditions de périodicité est fort pratique pour réaliser des études de convergence en maillage car les conditions aux frontières sont exactes et n'ont strictement aucune influence. Cette condition est également souvent utilisée pour réaliser des simulations du développement temporel d'une instabilité.

5.3.4 Condition entrante

Une condition entrante revient à imposer un profil de vitesse sur la frontière du domaine. Une telle condition peut poser des problèmes si l'on désire que le profil soit turbulent, nécessitant l'emploi d'un modèle pas toujours évident à définir, mais ce n'est pas notre cas. Nous considérons un profil de vitesse laminaire continu $u_{inj}(y)$ perpendiculaire à la frontière gauche du domaine de calcul. Théoriquement, le gradient de pression doit alors respecter une certaine perte de charge à la frontière,

$$\mathbf{n} \cdot \nabla p^{n+1} = \mu \frac{d^2 u_{inj}}{dy^2} \tag{5.41}$$

Or nous avons vu que si nous appliquons la même condition de Dirichlet pour les vitesses $\mathbf{u}^*$ et $\mathbf{u}^{n+1}$, la condition sur la pression ne peut être qu'une condition de Neumann homogène. La pratique numérique montre toutefois qu'une telle condition est déjà satisfaisante malgré le peu de rigueur dans la définition.

Néanmoins, il semble qu'il soit possible d'appliquer des conditions différentes pour les vitesses $\mathbf{u}^*$ et $\mathbf{u}^{n+1}$. Si la vitesse $\mathbf{u}^{n+1}$ doit naturellement respecter le profil de vitesse que l'on désire imposer, la relation suivante nous donne une nouvelle expression pour exprimer la vitesse $\mathbf{u}^*$ afin que le gradient de pression soit mieux défini,

$$\frac{\rho}{\Delta t^n} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^* - \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^{n+1}) = \frac{\rho}{\Delta t^n} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^* - u_{inj}) = \mathbf{n} \cdot \nabla p^{n+1} \tag{5.42}$$

Nous obtenons ainsi une nouvelle expression des conditions aux limites,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^{n+1} &= u_{inj}(y) \\
 \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^* &= u_{inj}(y) + \frac{\Delta t^n}{\rho} \mu \frac{d^2 u_{inj}}{dy^2} \\
 \mathbf{n} \cdot \nabla p^{n+1} &= \mu \frac{d^2 u_{inj}}{dy^2}
 \end{aligned} \tag{5.43}$$

Malheureusement, l'effort de rigueur numérique est en réalité vain car les conditions aux limites ainsi construites vont en fait s'annuler dans la méthode de projection. Le calcul du second membre du système linéaire résultant de la solution en pression fait intervenir les termes $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^*$ et $\mathbf{n} \cdot \nabla p^{n+1}$ qui se soustraient l'un à l'autre. On revient ainsi à la formulation initiale,

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^{n+1} &= u_{inj}(y) & (\mathbf{n} \cdot \nabla(\mathbf{t} \cdot \mathbf{u}^{n+1}) &= 0) \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^* &= u_{inj}(y) & (\mathbf{n} \cdot \nabla(\mathbf{t} \cdot \mathbf{u}^*) &= 0) \\ \mathbf{n} \cdot \nabla p^{n+1} &= 0 \end{aligned} \tag{5.44}$$

que nous sommes bien forcé de considérer pour notre condition entrante. En réalité, il n'y a uniquement que les méthodes de projection rotationnelles qui peuvent nous permettre de prendre en compte une condition non homogène pour la pression.

5.3.5 Condition sortante

La construction de conditions aux limites telles que la frontière agisse comme une sortie libre, c'est à dire comme si la frontière représentait la délimitation de la fenêtre de vue d'une caméra en regardant l'écoulement que l'on simule, pose des problèmes extrêmement plus compliqués que les précédentes. On comprend facilement qu'une telle opération est délicate d'un point de vue numérique puisqu'on ne possède aucune information sur l'écoulement juste derrière la frontière, empêchant toute discrétisation correcte, même au premier ordre. Or, une condition sortante permettrait de réaliser des simulations en concordance avec la réalité expérimentale, comme si on était en train de filmer l'écoulement que l'on simule.

De nombreux laboratoires ont cherché à trouver une parade à la fois théorique et numérique pour réaliser une condition sortante. Cependant, les résultats sont peu fructueux car le problème mathématique posé est bien compliqué. Les solutions les plus répandues s'appuient sur des expériences numériques empiriques en testant tout simplement plusieurs types de conditions qui font plus appel à une heuristique qu'à une réelle théorie mathématique et physique [24]. Cependant, quelques axes de recherche semblent intéressants à exploiter. Nous en retiendrons deux,

- Le premier axe de recherche consiste à résoudre une équation d'advection sur la frontière en estimant la vitesse de convection c à la frontière constante ou pas. Ainsi, une condition sortante convective s'écrit alors de la façon suivante,

$$\frac{\partial \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}}{\partial t} + c \mathbf{n} \cdot \nabla(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) = 0 \tag{5.45}$$

Ainsi, lorsque nous imposons le débit entrant dans le domaine de calcul, nous sommes parfaitement capable de déterminer une vitesse de convection c telle que le débit total soit respecté à chaque pas de temps. Ensuite, la résolution explicite de cette équation sur la frontière permet de fournir une condition de Dirichlet sur la vitesse normale. Concernant la vitesse tangentielle, nous avons à priori la liberté du choix : il doit être soumis à des tests numériques.

Cette condition sortante convective est souvent à juste titre appelée dans la littérature condition absorbante. En effet, la considération d'une telle condition a pour effet d'aspirer l'écoulement vers les sorties du domaine. Cet artifice numérique a malheureusement beaucoup de limites puisqu'on comprend bien que la condition à la frontière n'est en réalité pas tout à fait une sortie libre. Afin que l'influence de l'aspiration sur l'écoulement simulé soit négligeable, cela nécessite l'emploi de frontières éloignées ce qui n'est pas très avantageux d'un point de vue du temps de calcul. Dans le cas contraire, il devient de plus en plus délicat de déterminer correctement la vitesse de convection c pour minimiser l'impact de l'aspiration sur l'écoulement, spécialement si celui-ci possède une dynamique tourbillonnaire complexe. Néanmoins, il semble que la méthode donne des résultats encourageants. Nous avons réalisé quelques tests avec notre propre code sans être finalement séduit par la méthode. Il semble en effet que l'aspect diphasique complique de surcroît sérieusement les choses.

- Le second axe de recherche s'appuie cette fois sur l'imposition à la frontière de la valeur de la composante normale du tenseur des contraintes. Ainsi, une condition sortante de traction se traduit par l'application discrète sur la frontière de la condition suivante,

$$[p \mathbf{I} - \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad (5.46)$$

Nous remarquons tout de suite la proximité avec les conditions de saut à l'interface, ce qui peut paraître séduisant pour construire une condition sortante prenant explicitement en compte l'aspect diphasique. Malheureusement, nous avons vu qu'il nous est impossible d'appliquer une condition de Neumann non homogène pour la pression avec une méthode de projection non rotationnelle comme la notre. Une alternative consiste alors d'utiliser la condition suivante ¹⁰,

$$\begin{aligned} p^{n+1} &= 0 \\ \mathbf{n} \cdot \nabla (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^*) &= 0 \quad (\mathbf{n} \cdot \nabla (\mathbf{t} \cdot \mathbf{u}^*) = 0) \\ \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} &= 0 \quad (\mathbf{n} \cdot \nabla (\mathbf{t} \cdot \mathbf{u}^{n+1}) = 0) \end{aligned} \quad (5.47)$$

La condition sortante ainsi définie n'est tout à fait une condition de traction mais elle s'en approche. C'est celle que nous avons utilisée dans nos simulations. Il est à noter que dans le cas d'une méthode de projection rotationnelle, Guermond [25] a établi formellement la convergence avec l'application d'une condition de traction même si l'ordre est faible, une performance remarquable. Cette démonstration montre alors que la condition sortante que nous utilisons Eq.(5.47) est loin d'être aberrante. Plusieurs auteurs comme Nguyen [57] et M.Sussman [97] ont d'ailleurs déjà proposé une condition de Dirichlet homogène sur la pression par intuition et par des tests numériques diphasiques concluants sans toutefois y apporter une justification théorique.

¹⁰L'approximation de la partie convective est dégénérée au premier ordre pour les 3 mailles les plus proches de la frontière du domaine de calcul

5.4 Tests numériques du solveur monophasique

5.4.1 Translation de tourbillons

Dans l'intention de quantifier par la simulation le taux de convergence de notre méthode de projection, la simulation de la translation de vortex est tout à fait adéquate. Si l'on considère un domaine de calcul unitaire $[0, 1]^2$ et périodique dans les deux directions, la solution visqueuse des équations de Navier-Stokes incompressibles ci-dessous traduit la translation diagonale de tourbillons,

$$\begin{cases} u(x, y, t) = 1 + 2 \cos(2\pi(x - t)) \sin(2\pi(y - t)) e^{-8\pi^2 \nu t} \\ v(x, y, t) = 1 - 2 \sin(2\pi(x - t)) \cos(2\pi(y - t)) e^{-8\pi^2 \nu t} \\ p(x, y, t) = -(\cos(4\pi(x - t)) + \cos(4\pi(y - t))) e^{-16\pi^2 \nu t} \end{cases} \quad (5.48)$$

La translation s'accompagne d'un amortissement exponentiel de l'intensité des tourbillons sous l'effet de la dissipation visqueuse. Soit une viscosité cinématique $\nu = 0.01$, la Fig.(5.3) ci-dessous représente cette solution à l'instant initial et au temps $t = 1.125$ s.

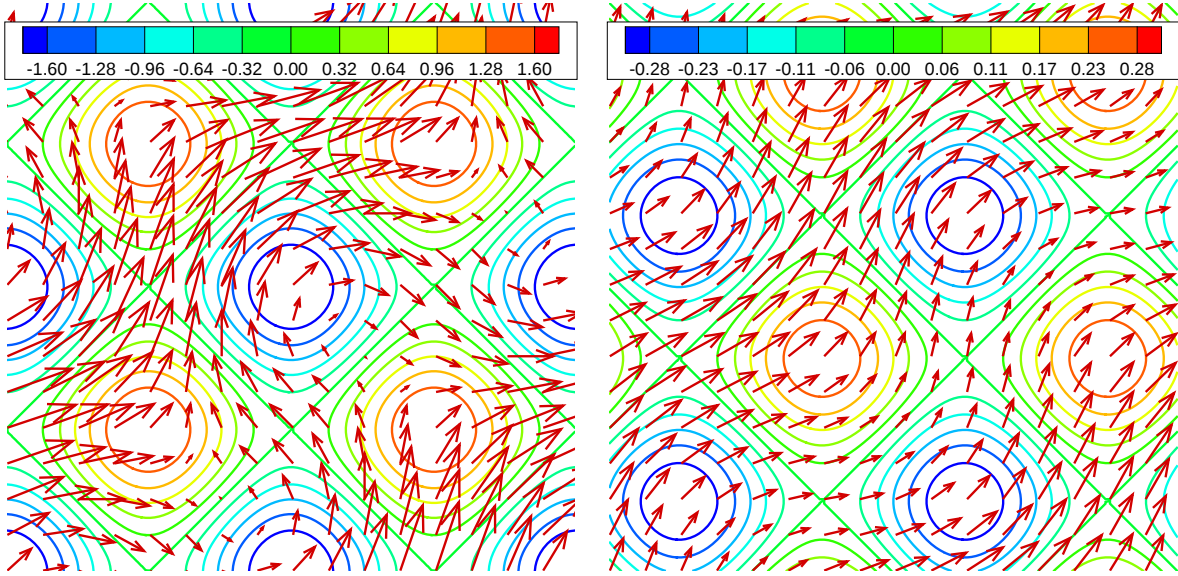


FIG. 5.3 – Représentation de la solution $(\mathbf{u}, p)$ du problème de translation diagonale de tourbillons Eq.(5.48) aux temps $t = 0$ s (à gauche) et $t = 1.125$ s (à droite)

Nous avons effectué des simulations de ce problème pour des maillages $2^n \times 2^n$ avec $n = 4, 5, 6$ et 7 et en utilisant les schémas Ab2/Weno5/n et Ab2/Weno5/c. Au bout d'un nombre d'itérations tel que $t = 1.0$ s, nous avons mesuré les normes L^2 des erreurs pour les composantes u et v de la vitesse (elles sont bien évidemment égales du fait de la symétrie du problème) et de la pression p . Les résultats accompagnés des taux de convergence associés sont regroupés dans le Tab.(5.1).

Que ce soit pour le schéma de type non conservatif Ab2/Weno5/n ou le schéma de type conservatif Ab2/Weno5/c, les normes calculées ainsi que les taux de convergence associés sont sensiblement les mêmes. Il n'y a pas de différence fondamentale entre les deux sur ce cas test. Globalement, le solveur des équations de Navier-Stokes incompressibles que nous avons construit possède un ordre de convergence de 1.75. Cet ordre de convergence est valable pour les composantes de la vitesse ainsi que la pression. Il est important de le souligner car ce n'est pas toujours le cas.

	Ab2/Weno5/n				Ab2/Weno5/c			
Maillage	$\ u\ _{L^2}$	q	$\ p\ _{L^2}$	q	$\ u\ _{L^2}$	q	$\ p\ _{L^2}$	q
32^2	$8.86 \cdot 10^{-3}$	-	$2.64 \cdot 10^{-3}$	-	$9.09 \cdot 10^{-3}$	-	$1.32 \cdot 10^{-3}$	-
64^2	$2.52 \cdot 10^{-3}$	1.81	$7.83 \cdot 10^{-4}$	1.75	$2.53 \cdot 10^{-3}$	1.85	$4.47 \cdot 10^{-4}$	1.56
128^2	$7.47 \cdot 10^{-4}$	1.75	$2.25 \cdot 10^{-4}$	1.80	$7.48 \cdot 10^{-4}$	1.76	$1.56 \cdot 10^{-4}$	1.52
256^2	$2.21 \cdot 10^{-4}$	1.76	$6.28 \cdot 10^{-5}$	1.84	$2.21 \cdot 10^{-4}$	1.76	$4.77 \cdot 10^{-5}$	1.71

TAB. 5.1 – Normes L_2 des erreurs de simulation et taux de convergence associé pour la solution Eq.(5.48). pour $t = 1.0$ s et $\nu = 0.01$ ($\|u\|_{L^2} = \|v\|_{L^2}$ dans tous les cas)

Au regard de la littérature scientifique sur les méthodes de projection [25, 56], notamment les méthodes implicites de type Crank-Nicolson ou les méthodes rotationnelles de type Kim et Moin [34], l'ordre de convergence du solveur développé ici est tout à fait respectable.

5.4.2 Couche de mélange

La simulation bidimensionnelle d'une double couche de mélange périodique est un cas test proposé par Bell et al. [3] pour vérifier les bonnes performances d'un solveur numérique pour résoudre les équations de Navier-Stokes incompressibles. Pour un domaine de calcul unitaire $[0, 1]^2$ avec des conditions aux frontières périodiques dans les deux directions, la simulation d'une double couche de mélange peut être définie par les conditions initiales suivantes,

$$\begin{cases} u(x, y, t) = \tanh(\rho(y - 0.75)) & \text{pour } y \leq 0.5 \\ v(x, y, t) = \delta \sin(2\pi(x + 0.25)) \end{cases} \quad (5.49)$$

où ρ est l'épaisseur de la couche de cisaillement et δ l'amplitude initiale de la perturbation. La perturbation sinusoïdale suivant la composante v engendre une instabilité dans la couche de mélange définie par deux profils en tangente hyperbolique raccordés. Comme on peut le voir Fig.(5.4), l'instabilité se manifeste par l'apparition et l'accroissement de tourbillons. Le contrôle de l'épaisseur de la couche par le biais du paramètre ρ permet d'obtenir des tourbillons d'une taille plus ou moins importante. Plus la couche initiale sera petite, plus les vortex générés seront fins et donc difficiles à capter numériquement, puisqu'il y a moins de mailles dans la couche. En

général, lorsqu'on s'intéresse à ce cas test, les auteurs emploient seulement deux valeurs de ρ , définissant ainsi un cas qualifié de couche épaisse et un autre de couche mince.

Il n'existe pas de solution exacte pour ce problème, visqueuse ou non. En conséquence, si l'on désire réaliser une étude de convergence, une telle restriction requiert de simuler le problème avec un maillage très fin dans le but de se donner une solution référence. Nous ne nous intéresserons pas ici à une telle étude mais plutôt au cas inviscide, nous permettant de quantifier les performances des schémas employés en mesurant les pertes d'énergie cinétique dues à la viscosité numérique intrinsèque aux schémas. La viscosité numérique est directement reliée à l'erreur de troncature des schémas, il est donc intéressant de la mesurer. La cas de la couche mince apporte un autre intérêt. Du fait de la sous résolution dans la couche de cisaillement, comme le montre Minion [54, 55], les schémas numériques peuvent provoquer l'apparition de tourbillons parasites. Ils disparaissent lorsqu'on utilise des maillages suffisamment fins. Une étude en perte d'énergie cinétique lors de l'apparition des tourbillons parasites permettra de juger de la robustesse des schémas.

Couche épaisse

Nous allons répertorier dans ce paragraphe les résultats relatifs aux simulations du problème Eq.(5.49) avec les paramètres $\rho = 30$ et $\delta = 0.05$, définissant ainsi une épaisseur de couche de cisaillement épaisse. Pour un maillage 128^2 , le résultat Fig.(5.4) nous montre que le champ de vitesse dans la couche est suffisamment résolu (approximativement 16 mailles) pour que les schémas numériques captent très correctement les tourbillons générés par l'instabilité de cisaillement.

Pour un nombre d'itérations tel que $t = 2$ s, nous mesurons pour plusieurs maillages de taille $2^n \times 2^n$ l'énergie cinétique totale dans le domaine de calcul au cours du temps,

$$E = \sum_{i,j} (u_{i,j}^2 + v_{i,j}^2) \quad (5.50)$$

Théoriquement, elle devrait rester constante au cours du temps du fait de la bi périodicité de l'écoulement et de l'absence de viscosité. Or, on s'aperçoit sur la Fig.(5.5) qu'elle diminue de façon conséquente. Cela est du à la viscosité numérique intrinsèque aux erreurs troncatures temporelle et spatiale des schémas numériques. On peut le montrer aisément pour des schémas d'ordre faible de type Upwind ou Lax-Wendroff sur une équation d'advection (Leveque).

On s'aperçoit que globalement la diminution est plus importante lorsque $t > 0.8$ s. Au regard de la Fig.(5.5), ce temps correspond au plein développement des deux tourbillons. Par la suite, les structures se font plus fines, elles sont donc plus dures à capter. Il n'y pas cependant de bond particulier même pour le maillage 64^2 relevant la bonne qualité de la méthode de projection avec le schéma Ab2/Weno5.

Le Tab.(5.2) regroupe l'ensemble des pertes d'énergie pour les maillages considérés avec l'utilisation des schémas Ab2/Weno5/n et Ab2/Weno5/c. Cette perte d'énergie est tout à fait assimilable à une erreur, on peut donc tout à fait calculer le taux de convergence associé. On remarque tout de suite la précision plus importante du schéma de type conservatif Ab2/Weno5/c sur ce problème, que ce soit pour l'erreur qui est faite ou pour l'ordre de convergence associé. Tout comme nous l'avons constaté pour l'advection de la Level-Set sur la cas du serpent dans le chapitre concerné, ce type de discrétisation est moins dissipative que la version plus classique non conservative.

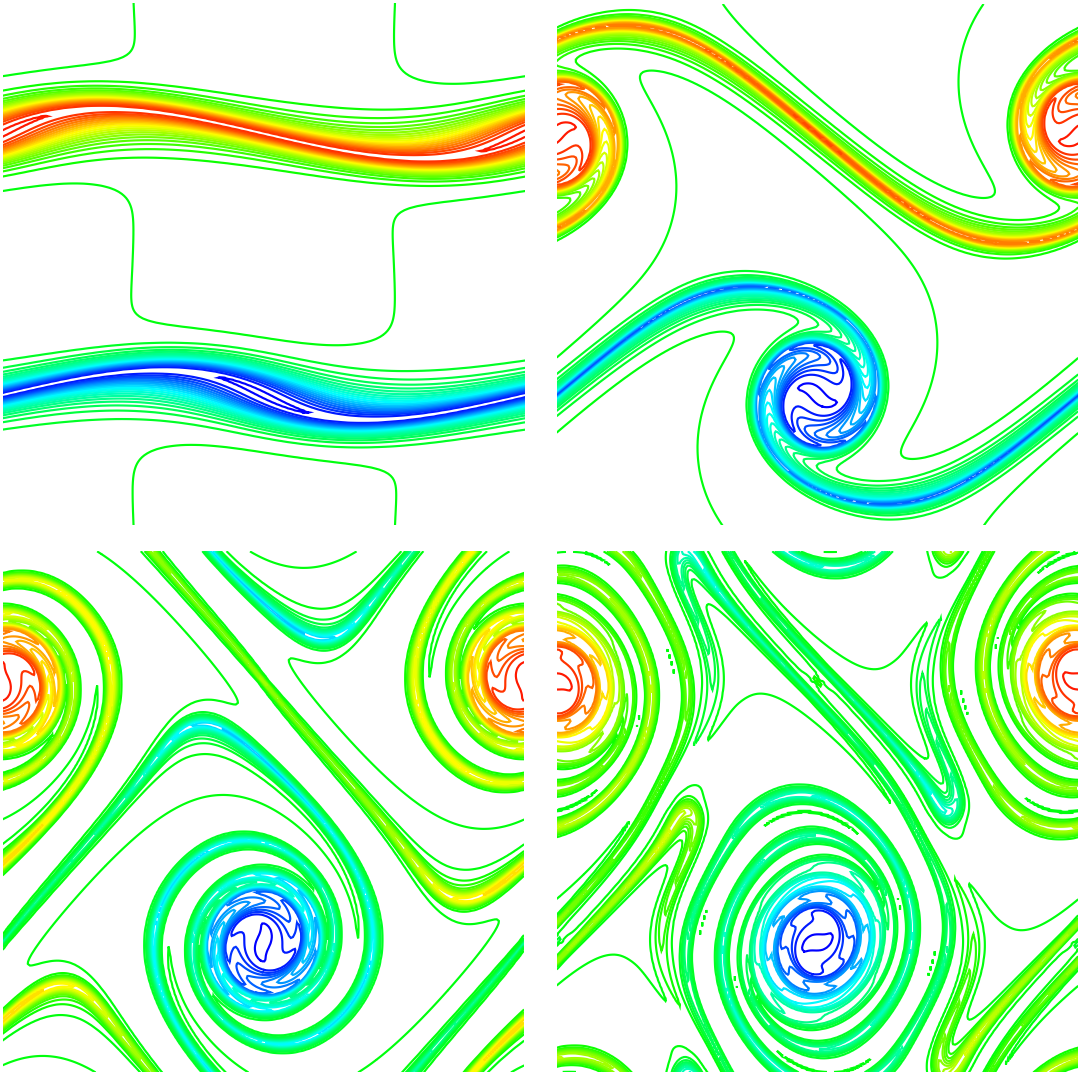


FIG. 5.4 – Simulation numérique de la double couche de mélange ($\rho = 30$ et $\delta = 0.05$) avec un maillage 256^2 . De gauche à droite et de haut en bas, les temps de simulation sont $t = 0.5, 1.0, 1.5$ et 2 s.

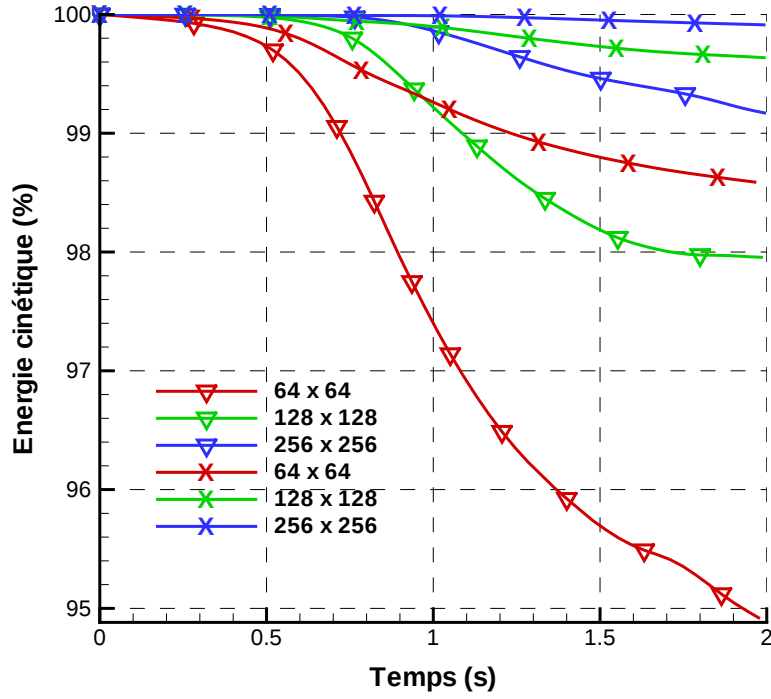


FIG. 5.5 – Perte en énergie cinétique au cours du temps ($\rho = 30$ et $\delta = 0.05$). (∇) Schéma Ab2/Weno5/n, (x) Schéma Ab2/Weno5/c.

	Ab2/Weno5/n		Ab2/Weno5/c	
Maillage	Perte d'énergie (%)	q	Perte d'énergie (%)	q
32^2	13.108 %	-	5.747 %	-
64^2	5.118 %	1.24	1.423 %	2.01
128^2	2.045 %	1.32	0.365 %	1.96
256^2	0.832 %	1.30	0.088 %	2.05

TAB. 5.2 – Pertes d'énergie au bout d'un temps $t = 2$ s pour le problème Eq.(5.49) ($\rho = 30$ et $\delta = 0.05$).

Couche fine

On se donne cette fois-ci un paramètre $\rho = 80$ ou 100 tel que l'épaisseur de la couche de cisaillement soit fine (approximativement 6 mailles dans la couche pour un maillage 128^2). Nous forçons ainsi le solveur à une situation de sous résolution du champ de vitesse afin d'observer son comportement dans un tel cas de figure. Comme le note Minion et al. [54, 55], des instabilités numériques se manifestent par l'apparition non physique de tourbillons parasites comme on peut le voir Fig.(5.6). Minion démontre que ces tourbillons sont bel et bien dus à une sous résolution et qu'ils apparaissent pour la grande majorité des schémas numériques. Il montre également qu'ils seraient la conséquence de l'accroissement de perturbations instables de petite longueur du fait de l'erreur de troncature de la méthode numérique. Une viscosité, quelle soit physique ou numérique, suffisamment importante pourrait amener à les faire disparaître. Dans ce sens, le résultat de la Fig.(5.6) est logique, la méthode Ab2/Weno5/c étant moins dissipative, les tourbillons parasites sont plus importants, impliquant une instabilité plus importante. Il n'y a pas toutefois un fossé énorme entre les méthodes Ab2/Weno5/c et Ab2/Weno5/n à ce niveau.

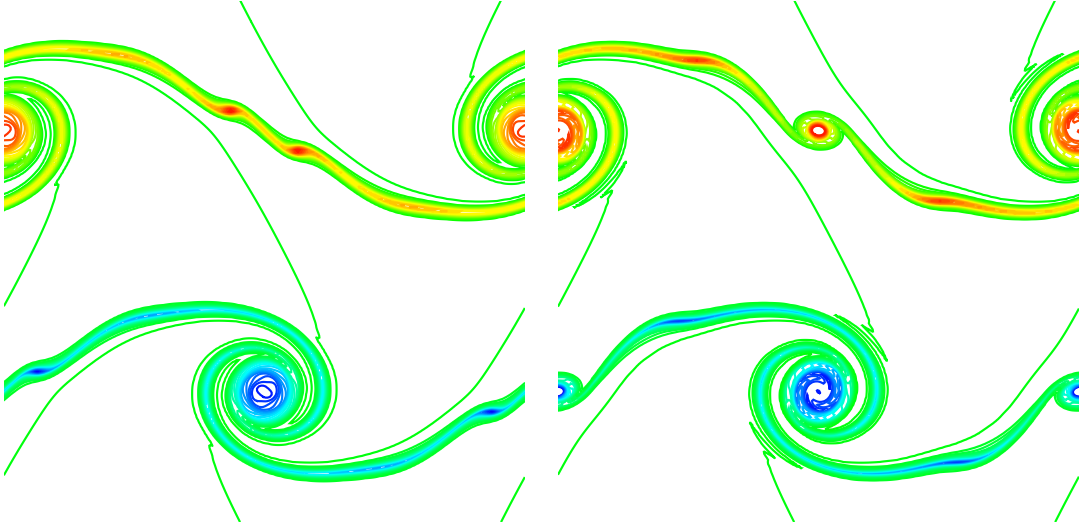


FIG. 5.6 – Simulation numérique de la double couche de mélange ($\rho = 80$ et $\delta = 0.05$) avec un maillage 256^2 pour $t = 0.8$ s.

Au regard de la Fig.(5.7), on constate que le palier de temps pour lequel la baisse d'énergie cinétique devient importante est tel que $t > 0.6$ s. Ce temps est donc plus faible que dans le cas de la couche épaisse. L'apparition des tourbillons parasites peut être à l'origine de ce décalage puisqu'on constate qu'une fois ces tourbillons générés, la baisse est moins significative.

Minion souligne également que de telles instabilités peuvent provoquer dans le cas de méthodes non robustes un abaissement du taux de convergence de la méthode. Le Tab.(5.3) montre que ce n'est pas vraiment le cas avec la méthode de projection considérée ici. Toutefois, les pertes d'énergie cinétique sont en toute logique plus importantes que dans le cas de la couche épaisse du fait de la sous résolution. Les schémas Ab2/Weno5/c et Ab2/Weno5/n sont donc relativement robustes sur ce cas de simulation. Ensuite, on constate toujours l'efficacité plus importante quant à la diffusion numérique du schéma de type conservatif, autant pour l'erreur faite que pour le taux de convergence associé.

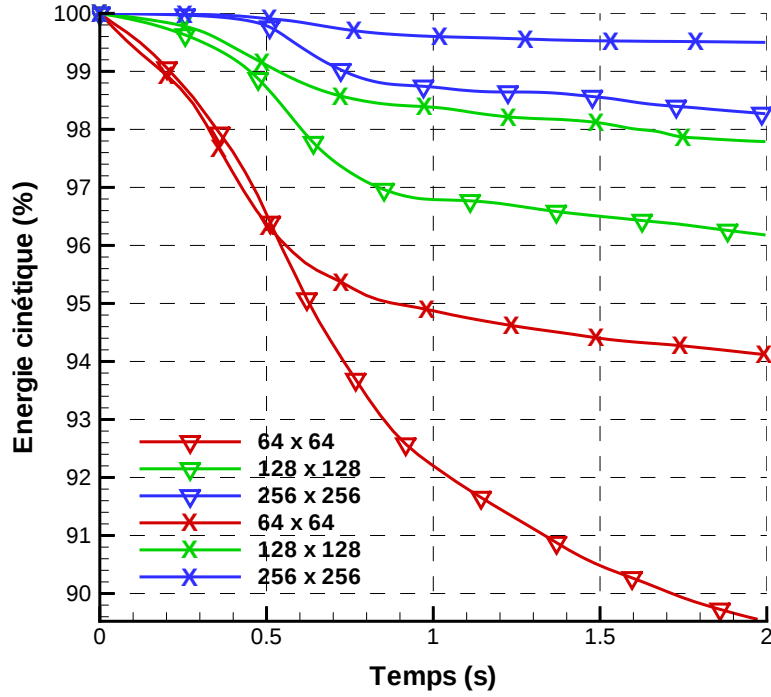


FIG. 5.7 – Perte en énergie cinétique au cours du temps ($\rho = 100$ et $\delta = 0.05$). (∇) Schéma Ab2/Weno5/n, (x) Schéma Ab2/Weno5/c.

	Ab2/Weno5/n		Ab2/Weno5/c	
Maillage	Perte d'énergie (%)	q	Perte d'énergie (%)	q
64^2	10.478 %	-	5.885 %	2.01
128^2	3.823 %	1.45	2.212 %	1.41
256^2	1.732 %	1.15	0.501 %	2.14

TAB. 5.3 – Pertes d'énergie au bout d'un temps $t = 2$ s pour le problème Eq.(5.49) ($\rho = 100$ et $\delta = 0.05$).

5.5 Solveur de Poisson MGCG

5.5.1 Problématique

Nous devons porter une attention particulière sur l'algorithme itératif d'inversion de matrice indispensable à la résolution du problème de Poisson dont la pression est solution dans la méthode de projection Eq.(5.10). C'est une équation elliptique à coefficients variables, un fort rapport de densité complique sérieusement les choses pour obtenir un taux de convergence élevé. L'utilisation d'algorithmes itératifs classiques (on exclut les solveurs directs) tels que les méthodes de Gauss-Seidel, de Jacobi ou du gradient conjugué implique des temps de calcul trop importants pour pouvoir raisonnablement effectuer des simulations sur des maillages typiquement de l'ordre du million de mailles, voir même en deçà lorsque par exemple on désire réaliser une étude paramétrique nécessitant une batterie de simulations¹¹. Avec de telles méthodes, notre solveur dans sa totalité passerait environ plus de 95% du temps à l'inversion de la matrice pression. Avec des méthodes modernes, on peut gagner énormément de temps de calcul et faire descendre ce pourcentage à environ 40 – 50%.

5.5.2 Principe de la méthode MGCG

Il existe plusieurs critères pour choisir un algorithme pour résoudre au mieux notre problème. Tout d'abord, celui-ci doit être facilement parallélisable et sans que ses performances ne chutent trop afin de l'utiliser sur des supercalculateurs parallèles à mémoire distribuée. Ensuite, il est très intéressant que le taux de convergence de l'algorithme itératif reste inchangé en augmentant la taille du maillage, une propriété qu'il n'est pas évident d'obtenir. Enfin, et c'est la plus importante des propriétés dans notre cas, le solveur doit se montrer robuste quand le saut de densité est élevé, il n'est pas rare que les algorithmes itératifs divergent lorsque celui-ci est supérieur à seulement 100. Une très bonne alternative est l'algorithme du gradient conjugué préconditionné par une méthode multigrille (MGCG) [102, 106]. L'algorithme est un excellent compromis entre performance et simplicité de mise en oeuvre.

Les méthodes multigrilles géométriques [106, 111] sont connues pour être les plus rapides pour inverser la matrice résultante au problème de Poisson à coefficients constants. On peut descendre jusqu'à $O(N)$ opérations (multiplications, additions,...) avec un cycle FMG ("Full Multigrid"), N étant le nombre d'inconnues. Elles sont de plus parallélisables et le taux de convergence ne chute pas avec l'augmentation en taille du maillage. Cependant, dans le cas du problème de Poisson à coefficients variables, une méthode multigrille géométrique classique devient rapidement divergente. A partir de cette constatation, il devient nécessaire pour rendre la méthode convergente de modifier l'algorithme initial en espérant obtenir une méthode aussi efficace que dans le cas du problème de Poisson à coefficients constants. Malheureusement, ce n'est pas du tout évident à réaliser malgré les nombreux efforts de recherche dans le domaine. On peut citer en particulier les méthodes de "semi-coarsening" ou les méthodes algébriques (AMG). En particulier, il semble que l'algorithme de S.Schaffer [85] soit très prometteur dans le domaine mais la complexité de l'algorithme n'est pas évidente à maîtriser et du coup à implémenter, tout comme les méthodes multigrilles algébriques. Ce n'est pas le cas de la méthode du gradient conjugué préconditionné par une méthode multigrille géométrique. Cette méthode est la conjonction de deux algorithmes simples de mise en oeuvre. La méthode du gradient conjugué permet d'assurer la robustesse du solveur vis à vis de la discontinuité des coefficients tandis que le préconditionnement par une méthode multigrille accélère grandement la convergence. La méthode MGCG ne manque pas ainsi

¹¹ $256^2 \propto 65.10^3$ / $512^2 \propto 262.10^3$ / $256^3 \propto 17.10^6$ / $512^3 \propto 134.10^6$

d'être performante et en particulier lorsque les coefficients sont fortement discontinus comme le montre Tatebe [102]. Le faible nombre d'itérations nécessaire pour obtenir la convergence souhaitée est invariant à la taille du maillage. Enfin, la parallélisation de la méthode est tout à fait classique et ne pose pas de difficulté majeure.

5.5.3 Mise en oeuvre

La méthode MGCG est une méthode du gradient conjugué préconditionné par une méthode multigrille. L'algorithme que nous avons implémenté est le suivant,

```

Soit la valeur initiale  $x^{(0)}$ , on calcule  $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ 

for  $i = 1, 2, \dots$     tant que  $\|r^{(i)}\|/\|r^{(0)}\| > \epsilon$ 

     $z^{(i-1)} = V_{\text{cycle}}(A, r^{(i-1)})$     un cycle multigrille en V

     $\rho_{i-1} = (r^{(i-1)}|z^{(i-1)})$ 

    if  $i = 1$ 
         $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
    else
         $\beta_{i-1} = \rho_{i-1}/\rho_{i-2}$ 
         $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1}p^{(i-1)}$ 
    end if

     $q^{(i)} = Ap^{(i)}$ 
     $\alpha_i = \rho_{i-1}/(p^{(i)}|q^{(i)})$ 

     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
     $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 

end

```

(5.51)

Le préconditionnement par une méthode multigrille consiste à effectuer un ou plusieurs cycles multigrilles à partir de la matrice complète (différent du préconditionnement classique où l'on inverse une matrice approchée). Il est donc nécessaire de définir les matrices sur les grilles grossières ainsi que les opérateurs de restriction et d'interpolation. Or nous utilisons un maillage décalé où l'inconnue est localisée au milieu de la maille et les coefficients sur les côtés, les définitions doivent se faire en conséquence. Nous utilisons en pratique des opérateurs de restriction et d'interpolation classiques bilinéaires conjoints tandis que les matrices sur les grilles grossières respectent l'algorithme de construction de Galerkin [106]. Nous avons testé plusieurs cycles multigrilles et en particulier les cycles V et FMG sans trouver une grande différence de l'un à l'autre quant au temps de convergence. Il semble qu'un unique cycle V associé à une seule itération de l'algorithme Red-Black Gauss-Seidel de post et pré lissage soit suffisant.

5.6 Parallélisation

Introduction

La prolifération de supercalculateurs massivement parallèles à mémoire distribuée est un atout que l'on ne peut négliger lorsqu'on désire utiliser un code instationnaire totalement explicite de type DNS. Notre code de calcul est rapidement très gourmand en temps de calcul, il est fréquent d'avoir besoin de semaines entières de calcul, voir des mois si on utilise un ordinateur monoprocesseur ! Or, ces supercalculateurs proposent la possibilité d'utiliser un nombre conséquent de processeurs pouvant aujourd'hui aller dans la pratique jusqu'à 128, sachant que ceux-ci sont évidemment individuellement de plus en plus puissants. Nous pouvons entrevoir de grosses possibilités futures puisque cela représente en cumulé une multiplication par 10 de la puissance de calcul tous les 4 ans ¹².

Pour avoir la possibilité d'utiliser plusieurs processeurs à la fois, il est nécessaire de "paralléliser" le code de simulation, une opération délicate pour un novice. Grossièrement, nous devons donner des directives de compilation pour synchroniser les calculs sur les différents processeurs. Fort heureusement, la tâche nous est simplifiée grâce à la distribution de bibliothèques de sous-programmes spécialisés comme MPI ¹³. La grande portabilité de l'application MPI permet de la retrouver aujourd'hui sur l'ensemble des supercalculateurs, c'est la bibliothèque la plus largement répandue, elle est rapide et efficace.

Mise en oeuvre avec la bibliothèque MPI

La bibliothèque MPI est un ensemble de sous-programmes permettant de paralléliser explicitement notre code de simulation par échange de messages. Chaque processeur exécute le même programme avec un espace en mémoire pour les variables qui lui est propre. La mémoire n'est absolument pas partagée, une même variable dans le programme peut prendre des valeurs différentes en fonction du processus. Il est à la charge du développeur de synchroniser les calculs et les communications entre processeurs.

Le calcul de la solution discrète à notre problème en un point ne nécessite que des points "voisins". Nous pouvons par conséquent utiliser la technique de décomposition de domaine consistant à définir initialement une carte fixe de processus où chaque processeur est affecté au calcul de l'ensemble des routines du programme mais seulement pour une partie du maillage comme schématisé sur le Fig.(5.8). Comme chaque processus exécute le même programme, il convient d'allouer dans la mémoire locale chacun des tableaux de variables seulement suivant les bornes correspondant au sous domaine attribué pour se simplifier la tâche. On se simplifie la mise en place de la parallélisation à partir de la version séquentielle monoprocesseur en changeant simplement les bornes et on améliorera dans un même temps la lisibilité.

Ensuite, nous définissons les blocs de variables qui seront communiqués de processeur à processeur (communication point à point) à chaque fois que cela est nécessaire pour assurer le bon calcul aux frontières du domaine alloué pour chaque processus. Comme il est représenté sur la Fig.(5.8), nous devons définir des blocs tels que dans chaque direction les 3 points voisins consécutifs soient communiqués d'un processus à l'autre à cause du stencil de discrétisation du schéma Weno au 5ème ordre, donc pour les composantes de la vitesse et la fonction Level-Set. La

¹²Voir le paragraphe "pourquoi un tel outil ?" dans l'introduction générale

¹³Message Passing Interface, <http://www.open-mpi.org/>, <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/>

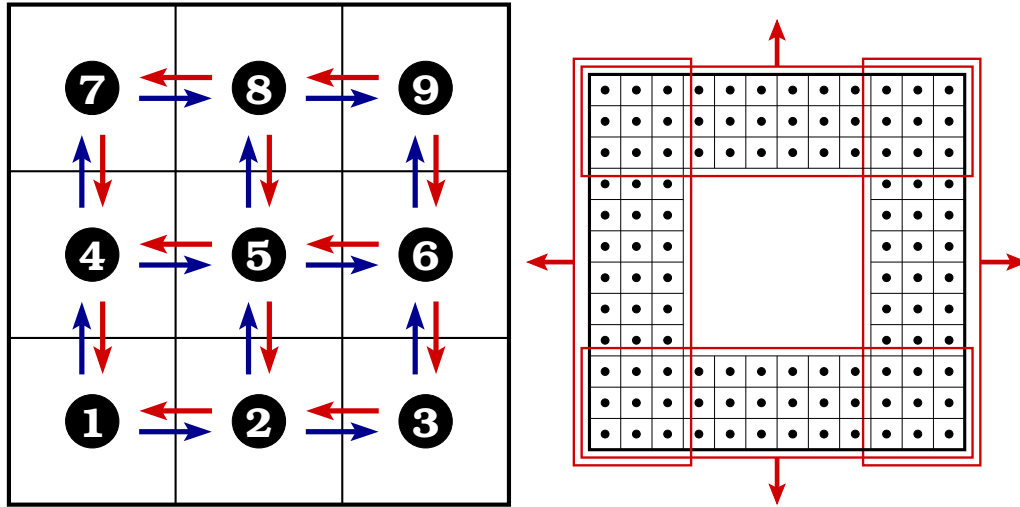


FIG. 5.8 – (à gauche) Distribution de 9 processeurs sur une grille de calcul bidimensionnelle, les flèches représentent les communications associées (des communications supplémentaires sont à rajouter dans le cas de conditions périodiques) ; (à droite) Construction de 4 blocs de variables à communiquer aux processeurs voisins

pression quant à elle ne nécessite qu'un seul point voisin. Par contre, l'utilisation d'un algorithme multigrille multiplie le nombre de blocs à définir par autant de fois qu'il existe de grilles grossières.

Enfin, nous devons porter une attention toute particulière à l'optimisation de la synchronisation des communications. Cette étape est assez technique mais nous pouvons obtenir de très bon résultats avec un minimum de rigueur. L'essentiel est lié à l'utilisation de communications non bloquantes permettant de réaliser dans un même temps plusieurs transferts de blocs (lors d'une instruction d'émission, le programme continue à exécuter les tâches qui suivent avant même que l'opération de réception ne soit terminée). La copie temporaire en mémoire lors de l'émission permet de s'affranchir de la charge d'assurer la synchronisation de la réception complète des blocs en découplant les deux opérations.

Dans la pratique, les performances de parallélisation mesurées pour notre code de simulation indiquent qu'il est nécessaire d'utiliser des sous domaines de dimension supérieure à 128 points pour un espace bidimensionnel et de 64 points pour un espace tridimensionnel. Ces dimensions assurent que le temps incombé aux communications est très inférieur au temps effectif de calcul.

Chapitre 6

Validation du solveur numérique

Sommaire

6.1	Bulle statique	138
6.2	Modes de vibration d'une goutte	145
6.3	Oscillation capillaire d'une onde de surface	151
6.4	Écoulement de Poiseuille diphasique	156
6.5	Instabilité de Rayleigh-Taylor	159
6.5.1	Cadre linéaire de l'instabilité	159
6.5.2	Cadre non linéaire de l'instabilité	161

Ce chapitre est consacré à la mesure des performances de l'outil numérique à travers diverses configurations académiques "simplistes" possédant la plupart du temps une solution analytique. Lors de la simulation, la mesure directe de l'erreur commise en comparaison de la solution analytique, voir même expérimentale, nous permet en effet de calibrer immédiatement les performances des méthodologies et schémas numériques employés. Cette étape de validation du code de simulation est fondamentale, elle accompagne le développeur tout au long de l'écriture du code afin de vérifier et de mesurer la convergence du solveur et d'éviter toute erreur d'implémentation. À la condition que le nombre de configurations étudiées soit suffisamment exhaustif pour couvrir la gamme des phénomènes physiques associés au modèle, chacun d'entre eux pouvant être isolé, l'utilisateur pourra alors stipuler que le code est convergent dans toutes les situations aussi complexes qu'elles soient. Cependant, pour une simulation quelconque donnée, un écart acceptable entre la solution discrète obtenue et la solution exacte reste sous la réserve d'utiliser un maillage suffisamment fin.

Le nombre volontairement important de cas qui vont être présentés est relié à l'idée de fournir une base de données afin que le lecteur puisse effectuer des comparaisons avec son propre code de simulation, en rapport avec les techniques numériques qui ont été utilisées ici. Les cas présentés sont les suivants : La bulle ou goutte statique, les modes de vibration d'une goutte, l'oscillation capillaire d'une onde de surface (dit aussi du cas test de Prosperetti), l'écoulement de Poiseuille diphasique et enfin l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Nous en avons effectué d'autres comme le cas test du barrage ou l'instabilité de Kelvin-Helmholtz qui ne sont pas présentés ici. Dans le premier cas, il est difficile de chiffrer l'erreur car nous possédons uniquement une solution expérimentale graphique grossière [13]. Et dans le second, nous avons eu des difficultés à initialiser correctement les simulations afin de retrouver la loi de dispersion théorique. Cependant, nous avons réalisé les mêmes simulations de type Front-tracking de Tryggvason et al. [109] et les résultats graphiques corrélaient à merveille [14, 15].

6.1 Bulle statique

Le test de la bulle statique est très certainement le premier cas de simulation rudimentaire à avoir été utilisé pour tester la bonne convergence des schémas numériques employés pour discrétiser la tension de surface, autrement dit pour traiter les conditions de saut à l'interface. La simplicité de ce cas de simulation permet en effet de bien isoler ce phénomène, la solution théorique étant tout simplement dictée par la loi de Laplace.

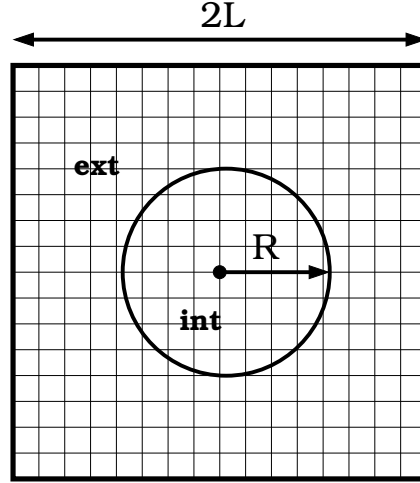


FIG. 6.1 – Schématisation du cas de simulation de la bulle ou goutte statique et annotations associées

Dans la pratique, une bulle ou bien une goutte est placée au centre du domaine de discrétisation comme schématisé Fig.(6.1). L'interface est circulaire, ce qui n'est pas sans déjà représenter des difficultés numériques. Dans les deux cas, la bulle ou la goutte sont en surpression vis à vis du milieu extérieur d'après la loi de Laplace du fait de la tension de surface et de la concavité de l'interface. En l'absence de gravité, les champs scalaires de pression sont constants dans chacun des milieux tels que,

$$\begin{cases} p_{int} - p_{ext} = \frac{\sigma}{R} & , \quad \text{en 2D} \\ p_{int} - p_{ext} = \frac{2\sigma}{R} & , \quad \text{en 3D} \end{cases} \quad (6.1)$$

Dans l'expression plus générale des conditions de saut à l'interface établie au premier chapitre Eq.(1.15), les termes dus aux contraintes de déformation visqueuses n'interviennent pas du fait de la théorique nullité du champ de vitesse. Or, les difficultés à imposer correctement les conditions de saut direction par direction dans le repère de coordonnées local de l'interface amènent des erreurs numériques quant aux pressions calculées d'une maille à l'autre. Ces erreurs ont pour conséquence de créer des vitesses artificielles sous l'action des surpressions ou souspressions numériques. Ces vitesses artificielles portent communément le nom de courants parasites.

Il est difficile de trouver dans la littérature des paramètres communs quant aux propriétés des deux fluides et aux dimensions considérées afin d'effectuer des comparaisons entre les tech-

riques numériques ou tout simplement les divers codes, chacun des auteurs employant ses propres paramètres préférés. Ce constat est malheureusement fort dommageable.

Une comparaison des taux de convergence des méthodes CSF et Ghost Fluid sera présentée. Il est à noter que si les résultats présentés ici sont tous issus de la version bidimensionnelle du code de simulation, les mêmes tests ont été effectués pour la version tridimensionnelle avec autant de succès.

Paramétrisation des simulations

L'inexistence de paramètres communs dans la littérature nous contraint une nouvelle fois à utiliser des paramètres originaux. Ceux qui ont été retenus sont volontairement sévères afin d'éprouver les schémas numériques à un cas plus extrême de simulation correspondant à un saut de masse volumique élevé, un coefficient de tension de surface élevé et un petit rayon,

$$\left\{ \begin{array}{ll} L &= 2 \text{ cm} \\ R &= 1 \text{ cm} \\ \rho_{int} &= 1000 \text{ kg.m}^{-3} \\ \mu_{int} &= 10^{-3} \text{ Pa.s} \\ \rho_{ext} &= 1 \text{ kg.m}^{-3} \\ \mu_{ext} &= 10^{-5} \text{ Pa.s} \\ \sigma &= 0.1 \text{ N.m}^{-1} \end{array} \right. \quad (6.2)$$

Les indices sont ici conformes aux annotations présentées Fig.(6.1), nous considérons donc une goutte sauf mention contraire. Des conditions de glissement sont employées sur les frontières du domaine, elles n'ont de toute manière que très peu d'influence dans la pratique. Une seule itération de redistance est réalisée dans tous les cas dans le but de limiter son impact avéré dans la pratique sur le développement en temps des courants parasites par déplacement artificiel de l'interface. La goutte étant théoriquement statique, il est peu intéressant d'étudier son effet ici. Nous le ferons pour le cas test qui suit où une goutte de surface initialement perturbée est en mouvement oscillatoire.

Premières observations

Pour un maillage relativement modeste 32^2 , les courants parasites obtenus avec la méthode Ghost-Fluid sont présentés Fig.(6.2). Dans les deux cas de figure, après la première itération et au bout d'un temps long de simulation, les champs de vitesse sont grossièrement semblables. Dès la première itération, il se crée de la vorticit  artificielle localis e sur l'interface en des points parfaitement sym triques au nombre de huit. Cette vorticit  a par la suite tendance   augmenter en intensit  et   diffuser autour de l'interface pour finir par approximativement se stabiliser   une certaine valeur. Il est   noter que les courants parasites ont la m me apparence lorsqu'il s'agit d'une bulle m me si l'intensit  est plus forte Fig.(6.3). Nous constatons grossi rement que la vorticit  a tendance   plus se d velopper dans le gaz que dans le liquide.

Il est judicieux d'observer et de mesurer les courants parasites apr s la premi re it ration car c'est la seule it ration o  les termes dus aux contraintes de d formation visqueuses n'interviennent pas dans l'expression des conditions de saut Eq.(1.15) du fait de la nullit  initiale du champ de vitesse. Il est donc peu  vident pour la suite de la simulation de raisonner sur le d veloppement en temps des courants parasites du fait de leur intervention dans l'expression des conditions de

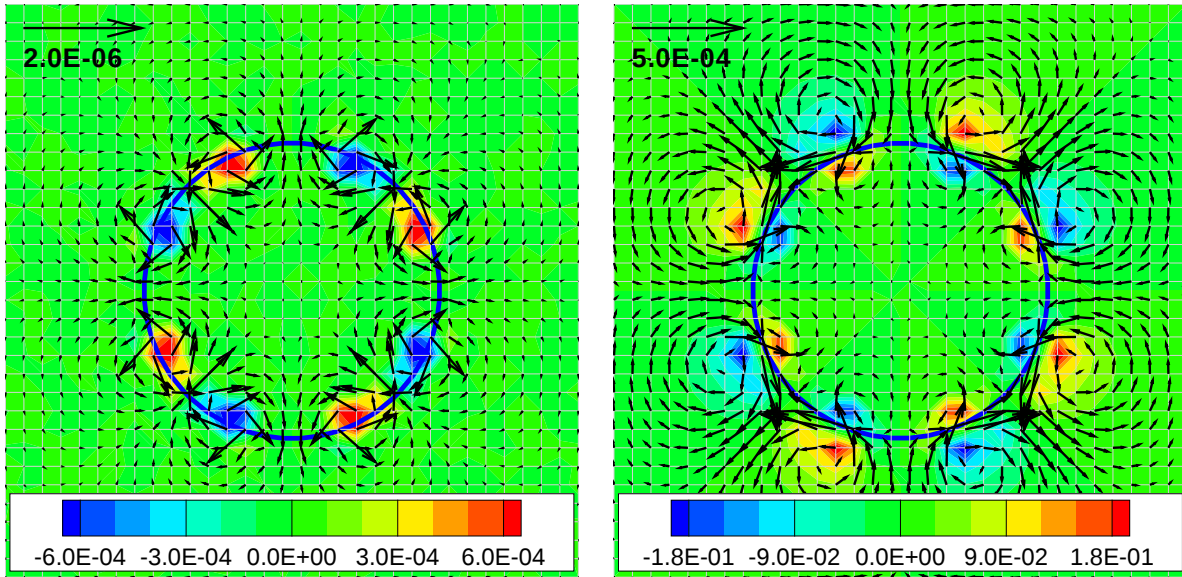


FIG. 6.2 – Cas de la goutte correspondant aux paramètres Eq.(6.2) : exemples typiques de courants parasites obtenus pour un maillage 32^2 et avec la méthode Ghost Fluid ; le champ scalaire correspond à la vorticité ; (à gauche) après la première itération ; (à droite) après un long temps de simulation ($t = 1$ s)

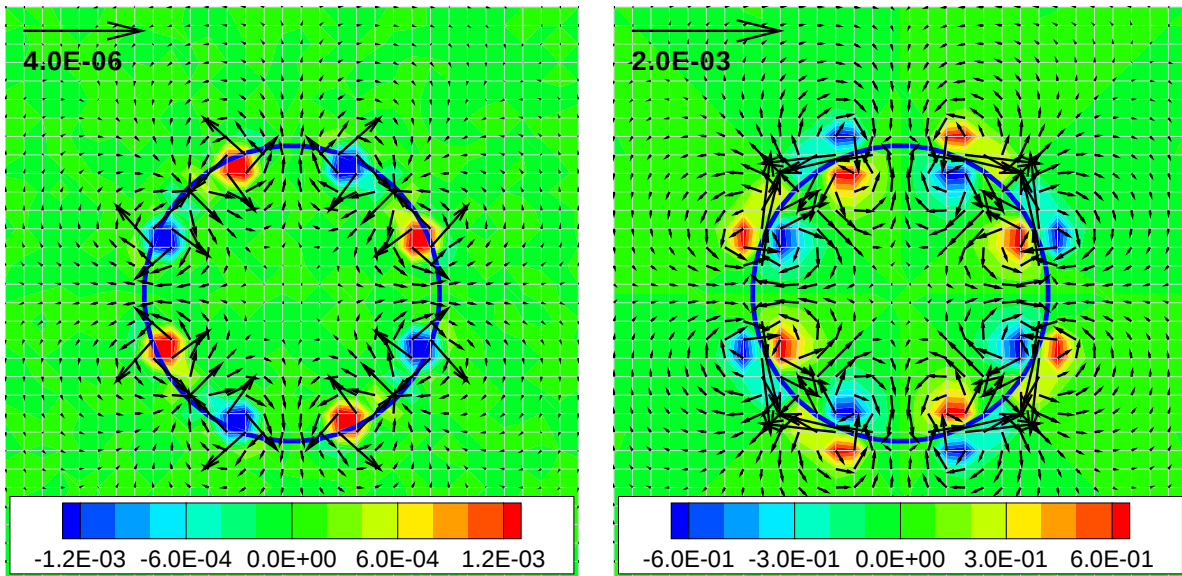


FIG. 6.3 – Cas de la bulle identique à la Fig.(6.2) avec inversion des annotations *int* et *ext* dans l'Eq.(6.2) ; (à gauche) après la première itération ; (à droite) après un long temps de simulation ($t = 1$ s)

saut pour une interface en perpétuel mouvement. Cependant, il reste qu'il est intéressant de mesurer l'intensité des courants parasites dans un tel cas pour vérifier la stabilité du code.

Intensité des courants parasites

Afin de mesurer les erreurs numériques en comparaison de la solution théorique, nous construisons les normes discrètes suivantes sachant que le champ de vitesse est théoriquement nul,

$$\begin{aligned}\|\mathbf{u}\|_{\infty} &= \max_{i,j} (u_{i,j}^2 + v_{i,j}^2)^{1/2} \\ \|\mathbf{u}\|_{L_2} &= \left(\frac{1}{nx \, ny} \sum_{i,j} (u_{i,j}^2 + v_{i,j}^2) \right)^{1/2}\end{aligned}\tag{6.3}$$

Elles reviennent donc à mesurer l'intensité des courants parasites. Les tableaux Tab.(6.1) et Tab.(6.2) regroupent l'ensemble des normes calculées après la première itération et au bout d'un temps de simulation correspondant à $t = 1 \text{ s}$ pour différents maillages et en utilisant les paramètres Eq.(6.2).

L'intensité des courants parasites est logiquement bien plus forte au bout de $t = 1 \text{ s}$ qu'après la première itération. Lors des premières itérations, le solveur est en perpétuelle recherche d'un état d'équilibre qu'il ne peut vraiment trouver puisque les courants parasites sont non physiques, d'où l'augmentation rapide de l'intensité.

Dans les deux cas, les tableaux Tab.(6.1) et Tab.(6.2) montrent la supériorité de la méthode Ghost-Fluid sur la méthode CSF. L'intensité des courants parasites est toujours plus faible dans le cas de la méthode Ghost-Fluid. Après la première itération, l'écart est approximativement d'un ordre de puissance pour des maillages modestes jusqu'à deux ordres pour des maillages plus importants. En conséquence, l'ordre de convergence de la méthode Ghost-Fluid est supérieur à celui de la méthode CSF juste après la première itération. Il vaut 2.42 en moyenne pour la méthode Ghost-Fluid contre 1.93 en moyenne pour la méthode CSF. L'écart est encore plus important au bout du temps de simulation $t = 1 \text{ s}$, l'ordre de convergence vaut 2.93 en moyenne pour la méthode Ghost-Fluid contre 1.05 en moyenne pour la méthode CSF. En conclusion, ces tableaux montrent que non seulement la méthode Ghost-Fluid est intrinsèquement meilleure mais qu'elle est également plus stable en temps en comparaison de la méthode CSF.

Influence des propriétés des fluides

Dans le but de mieux comprendre encore le phénomène des courants parasites, il est intéressant de regarder quelle peut être l'influence des propriétés des fluides sur le développement en temps des courants parasites : les viscosités, les densités et la tension de surface. Nous le ferons uniquement pour la méthode Ghost-Fluid, plus performante que la méthode CSF. La simulation utilisant les paramètres Eq.(6.2) et un maillage 32^2 nous servira de référence. La Fig.(6.4) nous donne ainsi l'évolution de la norme L_2 des simulations en changeant de façon conséquente une des viscosités ou bien les deux, ou encore en doublant et quadruplant la tension de surface.

On remarque tout d'abord que la méthode Ghost-Fluid est robuste aux variations des paramètres des fluides car la norme reste relativement du même ordre (La norme L_2 reste dans

	Méthode Ghost Fluid				Méthode CSF			
Maillage	$\ u\ _\infty$	q	$\ u\ _{L_2}$	q	$\ u\ _\infty$	q	$\ u\ _{L_2}$	q
8^2	$1.42 \cdot 10^{-5}$	—	$5.70 \cdot 10^{-6}$	—	$4.91 \cdot 10^{-4}$	—	$1.94 \cdot 10^{-4}$	—
16^2	$7.18 \cdot 10^{-6}$	0.98	$1.88 \cdot 10^{-6}$	1.60	$6.00 \cdot 10^{-5}$	3.03	$2.21 \cdot 10^{-5}$	3.13
32^2	$9.70 \cdot 10^{-7}$	3.06	$1.90 \cdot 10^{-7}$	3.30	$3.06 \cdot 10^{-5}$	0.97	$5.43 \cdot 10^{-6}$	2.02
64^2	$2.09 \cdot 10^{-7}$	2.21	$2.48 \cdot 10^{-8}$	2.94	$1.24 \cdot 10^{-5}$	1.30	$1.50 \cdot 10^{-6}$	1.86
128^2	$4.06 \cdot 10^{-8}$	2.36	$3.27 \cdot 10^{-9}$	2.92	$5.19 \cdot 10^{-6}$	1.26	$4.02 \cdot 10^{-7}$	1.90

TAB. 6.1 – Normes infinies et L_2 de l’erreur après la première itération, q étant le taux de convergence associé

	Méthode Ghost Fluid				Méthode CSF			
Maillage	$\ u\ _\infty$	q	$\ u\ _{L_2}$	q	$\ u\ _\infty$	q	$\ u\ _{L_2}$	q
8^2	(des.)	—	(des.)	—	(des.)	—	(des.)	—
16^2	$8.08 \cdot 10^{-3}$	—	$1.88 \cdot 10^{-3}$	—	$3.55 \cdot 10^{-2}$	—	$1.94 \cdot 10^{-2}$	—
32^2	$3.42 \cdot 10^{-4}$	4.55	$7.50 \cdot 10^{-5}$	4.65	$3.12 \cdot 10^{-2}$	0.19	$1.18 \cdot 10^{-2}$	0.72
64^2	$5.13 \cdot 10^{-5}$	2.74	$7.97 \cdot 10^{-6}$	3.23	$2.12 \cdot 10^{-2}$	0.56	$5.44 \cdot 10^{-3}$	1.12
128^2	$2.79 \cdot 10^{-5}$	0.88	$4.74 \cdot 10^{-6}$	0.75	$6.44 \cdot 10^{-3}$	1.72	$1.38 \cdot 10^{-3}$	1.98

TAB. 6.2 – Normes infinies et L_2 de l’erreur après un temps de simulation correspondant à $t = 1$ s, q étant le taux de convergence associé. (des.) signifie que les courants parasites sont suffisamment forts pour détruire l’interface.

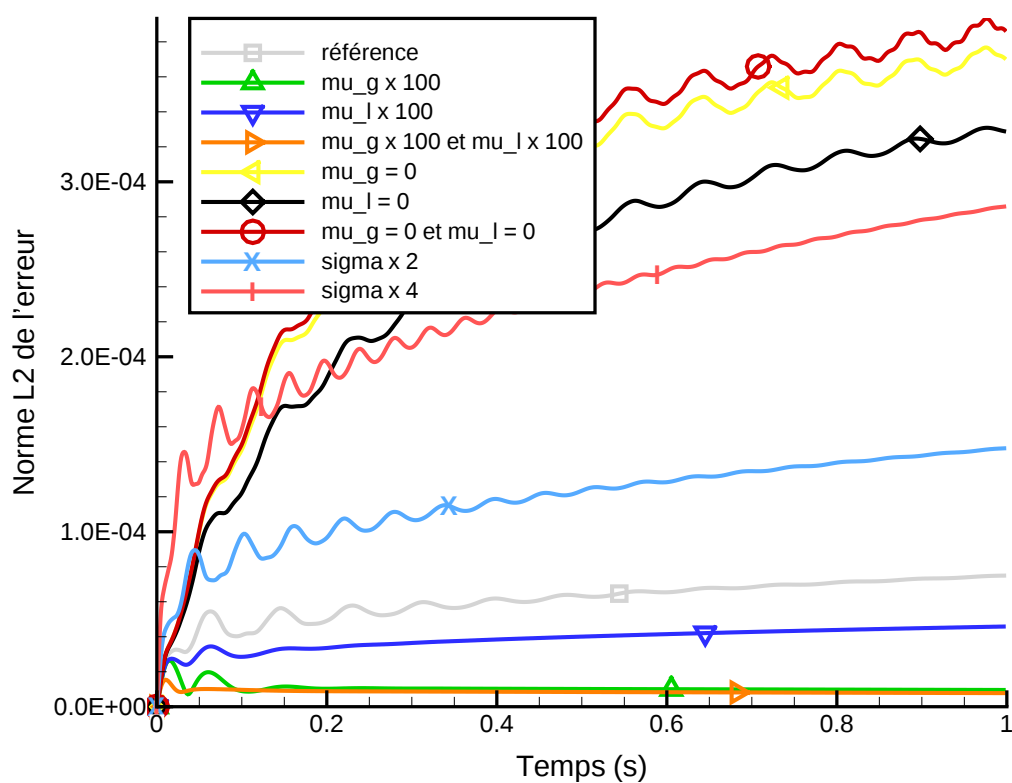


FIG. 6.4 – Évolution dans le temps de la norme L_2 des courants parasites en changeant un à un les paramètres Eq.(6.2). Maillage 32^2 .

une fourchette allant de 3.10^{-5} à 4.10^{-4}). La viscosité du gaz a une influence logiquement prépondérante vis à vis de celle du liquide car c'est dans le gaz que les vortex sont les plus forts Fig.(6.2). L'intensité des courants parasites est multipliée par autant de fois que l'on multiplie la tension de surface. En conclusion, il semble que nous retrouvions la loi de comportement établie par Lafaurie et al. [36] avec une méthode VOF/CSF, une loi très largement répandue dans la communauté scientifique,

$$\|\mathbf{u}\|_{L_2} = C \frac{\sigma}{\mu} \quad (6.4)$$

Où C est une constante de proportionnalité. Si la dépendance avec la viscosité est plus floue, la dépendance avec la tension de surface est bien strictement identique avec la méthode Ghost-Fluid.

Origine numérique des courants parasites

Il serait maintenant intéressant de comprendre qu'elle est l'origine numérique de ces courants parasites. Il existe trop peu de raisonnements dans la littérature avançant un postulat sur l'origine de ces courants parasites.

Tout d'abord, les effets visqueux sont à exclure dans l'explication de l'apparition des courants parasites. Etant donné que le champ de vitesse est initialement nul, les termes dus aux contraintes visqueuses n'interviennent pas lors de la première itération et n'interviendraient jamais si le champ de vitesse obtenu après cette première itération était bien nul comme souhaité. C'est donc bien le calcul du champ de pression qui en est à l'origine. Dans l'étape de correction de la méthode de projection, une vitesse non nulle est calculée sous l'effet des surpressions ou souspressions numériques relatives aux erreurs de calcul du champ de pression.

Les méthodes Ghost-Fluid ou CSF sont sensées être exactes dans l'application numérique d'une bonne balance entre saut de pression et tension de surface. Dans l'étape de correction de la méthode de projection, la prise en compte exacte du saut de pression avec la méthode Ghost-Fluid devrait permettre d'obtenir un gradient de pression nul et donc une vitesse nulle puisque $\mathbf{u}^* = \mathbf{0}$ à la condition que la pression soit bien constante dans chacun des fluides ce qui devrait être théoriquement le cas. Pour la méthode CSF, le lissage obtenu pour la pression impliquant des gradients non nuls autour de l'interface est compensé par le calcul de $\mathbf{u}^*$, autrement dit par le terme volumique rajouté dans l'étape de prédiction pour modéliser la tension de surface. La source de l'erreur ne vient pas des méthodes elles-mêmes, elle est tout autre.

C'est en fait l'erreur commise dans le calcul de la courbure κ qui elle seule est à l'origine de ces courants parasites. Un simple test permet de vérifier un tel postulat : si nous omettons de calculer la courbure en rentrant plutôt sa valeur exacte qui vaut $1/R$ dans le cas d'une interface circulaire alors la norme infinie du champ de vitesse sera quel que soit le maillage de l'ordre du résidu de la méthode itérative pour inverser la matrice pression, que ce soit pour la méthode Ghost-Fluid ou la méthode CSF. Ce constat rejoint une relation obtenue par A.Benkenida [4] en calculant le rotationnel du terme capillaire à partir de la loi de Laplace.

Si l'erreur faite dans le calcul de la courbure est la même, il reste que l'impact sur la génération des courants parasites dépend fortement de la méthode utilisée comme nous avons pu le voir précédemment, la méthode Ghost-Fluid étant toujours supérieure sur la méthode CSF car la solution en pression est plus proche de la réalité physique.

6.2 Modes de vibration d'une goutte

En l'absence de gravité, une goutte ou une bulle immergée au sein d'un fluide "neutre" et dont la surface est perturbée telle qu'elle ne soit plus sphérique subira sous l'action de la tension de surface des oscillations telles que le système soit ramené à l'équilibre, à l'état sphérique. Comme nous l'avons vu dans le chapitre concernant le modèle physique, la capillarité a pour effet de minimiser l'aire de la surface de séparation entre deux fluides afin de minimiser le défaut d'énergie de liaison moléculaire à l'interface. Cependant, l'état d'équilibre ne peut être atteint que sous l'action conjuguée de la viscosité, qui a pour effet d'amortir les oscillations provoquées par la tension de surface. Dans le cas inviscide, une goutte ou une bulle déformée se met à osciller indéfiniment, nous nous intéressons ici à cette situation.

L'objectif de ce cas test est de fournir une vérification de la bonne implémentation numérique des conditions de saut sans considérer l'aspect visqueux, revenant ainsi à considérer la loi de Laplace. La différence avec le cas test de la bulle statique vu précédemment est que cette fois-ci l'interface est en mouvement, la courbure locale change en permanence dans le temps et elle est plus ou moins complexe à calculer en fonction de la valeur du mode de déformation Fig.(6.5). Nous pouvons ainsi vérifier la bonne balance entre traitement des conditions de saut par la méthode Ghost-Fluid et la résolution des équations de Navier-Stokes par la méthode de projection. Le caractère théorique infini des oscillations nous permettra également de jauger la dissipation numérique des schémas numériques intrinsèque à tout code de simulation du type présenté dans ce mémoire dans le cas général d'un écoulement diphasique avec interface et non comme nous l'avons fait précédemment pour le solveur des équations de Navier-Stokes. L'impact de la redistanciation pourra également être étudiée.

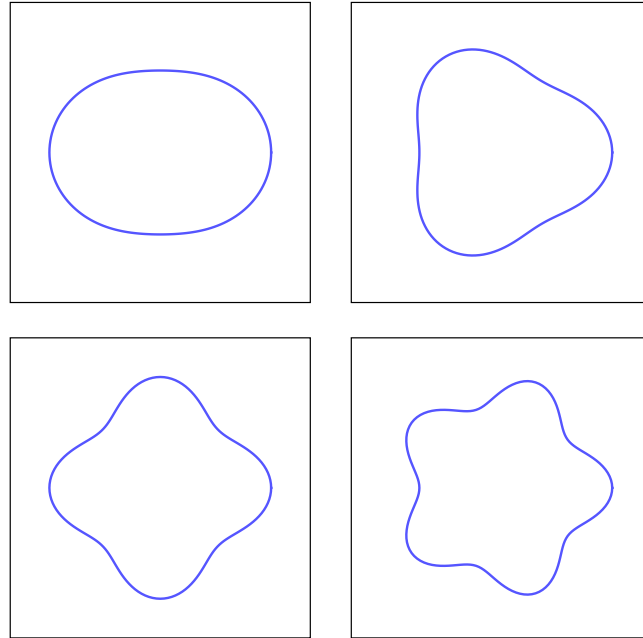


FIG. 6.5 – Modes initiaux de déformation pour les modes respectifs 2, 3, 4 et 5 de gauche à droite et de haut en bas avec $\epsilon = 0.15$ Eq.(6.5) (la taille de boîte représentée ici ne correspond pas à celle utilisée pour les simulations qui vont suivre)

En utilisant la théorie des écoulements potentiels, Rayleigh ou Lamb [37] ont su trouver une solution exacte à l'aide d'une base de solutions propres. Cette base de solutions propres dérive de déformations harmoniques de l'interface suivant un système de coordonnées sphérique. Pour un espace bidimensionnel, où l'on considère non plus une goutte mais un barreau cylindrique infini, ces déformations harmoniques initiales correspondent à l'équation suivante,

$$R = R_0 (1 + \epsilon \cos(n\theta)) \quad , \quad n \text{ étant le mode de déformation} \quad (6.5)$$

Afin de les visualiser graphiquement, les déformations initiales correspondant aux modes 2,3,4 et 5 sont représentées sur la Fig.(6.5). En linéarisant la condition dynamique à l'interface, nous obtenons la pulsation de l'oscillation ω_n associée à chacun des modes [105],

$$\omega_n^2 = \frac{n(n+1)(n-1)}{\rho_{int} + \rho_{ext}} \frac{\sigma}{R_0^3} \quad (6.6)$$

Paramétrisation des simulations

Le domaine de calcul employé est carré $[-0.02, 0.02]^2$, la schématisation et les annotations associées aux simulations réalisées sont similaires à la Fig.(6.1). Nous considérons une goutte de liquide de rayon non perturbé R_0 placée au centre du domaine de calcul et un fluide environnement similaire à de l'air dans le but de minimiser son influence sur les oscillations. Des conditions de glissement sont employées pour l'ensemble des frontières du domaine de calcul, elles permettent de réduire un impact nuisible des parois en laissant le fluide glisser sur celles-ci. Rappelons que les deux fluides considérés sont non visqueux. Nous avons opté pour les mêmes paramètres volontairement sévères que ceux du cas test précédent de la goutte statique,

$$\left\{ \begin{array}{ll} L & = 2 \text{ cm} \\ R_0 & = 1 \text{ cm} \\ \rho_{int} & = 1000 \text{ kg.m}^{-3} \\ \rho_{ext} & = 1 \text{ kg.m}^{-3} \\ \sigma & = 0.1 \text{ N.m}^{-1} \\ \epsilon & = 0.02 \text{ ou } 0.15 \end{array} \right. \quad (6.7)$$

De la valeur de ϵ dépendra ce que l'on veut mesurer. La linéarisation de la condition dynamique à l'interface pour l'obtention théorique de la pulsation des oscillations Eq.(6.6) limite la validité du résultat à de petites déformations. Une valeur faible de ϵ nous permettra de vérifier suivant le maillage employé que la goutte déformée oscille bien à la bonne fréquence. Une valeur plus importante de ϵ nous permettra par contre de jauger la dissipation numérique des schémas numériques en exagérant l'amplitude des oscillations. Même si la dissipation numérique est bien évidemment présente dans les deux cas, elle est beaucoup plus manifeste et facile à mesurer dans le cas de larges déformations de la goutte. Concernant la redistanciation, nous allons étudier son impact dans les deux cas en changeant tout simplement le nombre d'itérations. Par contre, nous n'étudierons plus la méthode CSF car nous avons déjà montré sur le cas de la goutte statique ses limites en comparaison de la méthode Ghost-Fluid bien plus performante. Pour l'ensemble des simulations, nous employons le schéma Rk3/Weno5/n.

Fréquence des oscillations

Nous allons nous intéresser dans ce paragraphe aux fréquences d'oscillation calculées par le code de simulation pour les modes 2,3,4 et 5 et les paramètres Eq.(6.7) avec $\epsilon = 0.02$. Nous les comparerons tout simplement aux valeurs théoriques. Pour l'ensemble des résultats, une seule itération de redistance est effectuée pour limiter son influence comme nous verrons au paragraphe suivant.

Les tableaux Tab.(6.3) et Tab.(6.4) regroupent l'ensemble des résultats. Il est à noter que les fréquences trouvées peuvent varier en fonction des points de l'interface que l'on suit, il faut donc accorder une certaine distance vis à vis des résultats donnés ici. On peut constater que les fréquences calculées sont satisfaisantes dans l'ensemble puisque dès le maillage 32^2 l'erreur est seulement de l'ordre de quelques pourcents. En augmentant la valeur du mode, il est logiquement plus difficile au code de simuler l'oscillation de la goutte avec la bonne fréquence. Cela est dû au fait que les courbes de l'interface sont moins résolues pour un même maillage Fig.(6.5), la courbure κ est calculée avec moins de finesse et donc par voie de conséquence le saut de pression. Plus la valeur du mode est importante, plus il est difficile de respecter la loi de Laplace. L'étude en maillage nous montre aussi une difficulté pour le code à converger rapidement, le taux étant très souvent inférieur à 1.

En conclusion, tout comme le cas précédent de la goutte statique, il semble que de la précision du calcul de la courbure dépende la précision du résultat pour imposer correctement les conditions de saut grâce à la méthode Ghost-Fluid.

Dissipation numérique et redistance

Ce cas test à la vertu de pouvoir mettre en évidence à la fois les effets de dissipation numérique et de redistanciation de la Level-Set si les fluides considérés sont non visqueux. Il suffit pour cela de regarder l'évolution dans le temps d'un point de l'interface et de préférence les points pour lesquels l'amplitude des oscillations sont les plus grandes. Les Fig.(6.6) et Fig.(6.7) montrent ainsi l'évolution d'un de ces points pour les modes respectifs 2 et 4, un maillage 32^2 , les paramètres Eq.(6.7) et pour deux valeurs de $\epsilon = 0.02$ ou 0.15 . Dans chacun des cas, plusieurs courbes sont données correspondant au nombre d'itérations de redistance effectué ($\Delta x^r = 0.5\Delta x$).

Sans surprise, la dissipation numérique est plus forte lorsque $\epsilon = 0.15$, lorsque l'amplitude de l'oscillation est plus importante, mais également lorsque la valeur du mode augmente. La dissipation s'accompagne d'un petit décalage de la position centrale de l'oscillation. On devine à la lecture des courbes que la conservation de la masse n'est pas strictement respectée. Cette dissipation n'a par contre que peu d'effet sur la fréquence d'oscillation de la goutte.

Quant à la redistance, elle renforce les effets dissipatifs numériques comme nous avons pu le voir lors des tests de transport pur de l'interface dans un champ de vitesse stationnaire dans le chapitre concernant la Level-Set. La redistance renforce également le phénomène de décalage du point central d'oscillation et donc la conservation de la masse. Elle peut même provoquer l'apparition de légères oscillations numériques comme nous pouvons l'observer sur la Fig.(6.6) lorsque $\epsilon = 0.02$, lorsque l'amplitude des oscillations se limite à une seule maille. Enfin, elle peut s'avérer catastrophique à la fois au niveau dissipation numérique et au niveau de la conservation de la masse dans des cas sévères comme le montre la Fig.(6.7) lorsque $\epsilon = 0.15$. La courbe représentant le calcul pour 5 itérations de redistance montre qu'il existe une espèce de seuil de complexité (courbure sous résolue et forte amplitude d'oscillation) tel que la redistance ait un impact très nuisible sur la qualité du résultat. Cependant, la redistance n'a qu'un effet additif

dans l'ensemble des schémas numériques utilisés pour résoudre notre modèle et en particulier concernant la conservation de la masse. Il y a même un certain nombre de courbes qui sont quasi confondues en augmentant le nombre d'itérations de redistance.

	Mode 2			Mode 3		
Maillage	Freq. (Hz)	erreur	q	Freq. (Hz)	erreur	q
Théorique	3.896	x	x	7.793	x	x
32^2	3.833	1.63 %	-	7.621	2.21 %	-
64^2	3.853	1.10 %	0.57	7.676	1.50 %	0.56
128^2	3.878	0.46 %	1.26	7.699	1.21 %	0.31

TAB. 6.3 – Fréquences d'oscillation calculées avec la méthode Ghost-Fluid et erreurs relatives pour les modes 2 et 3, q étant le taux de convergence associé.

	Mode 4			Mode 5		
Maillage	Freq. (Hz)	erreur	q	Freq. (Hz)	erreur	q
Théorique	12.322	x	x	17.426	x	x
32^2	12.035	2.33 %	-	16.475	5.46 %	-
64^2	12.145	1.44 %	0.69	16.817	3.49 %	0.65
128^2	12.204	0.96 %	0.58	17.023	2.31 %	0.60

TAB. 6.4 – Fréquences d'oscillation calculées avec la méthode Ghost-Fluid et erreurs relatives pour les modes 4 et 5, q étant le taux de convergence associé.

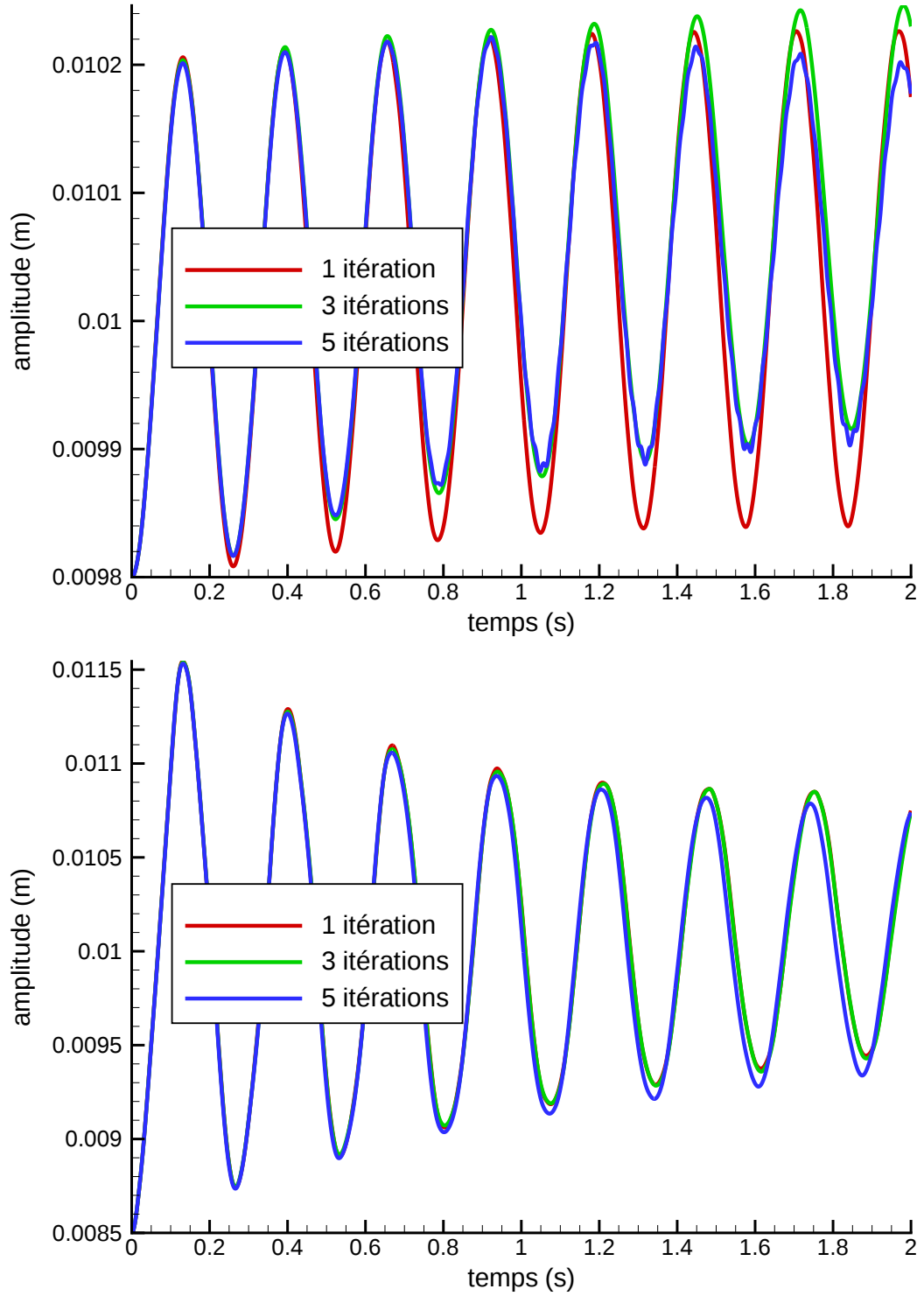


FIG. 6.6 – Dissipation numérique et impact de la redistance lors de l'oscillation de la goutte déformée pour le mode 2 pour un maillage 32^2 et les paramètres Eq.(6.7) ; (en haut) $\epsilon = 0.02$; (en bas) $\epsilon = 0.15$

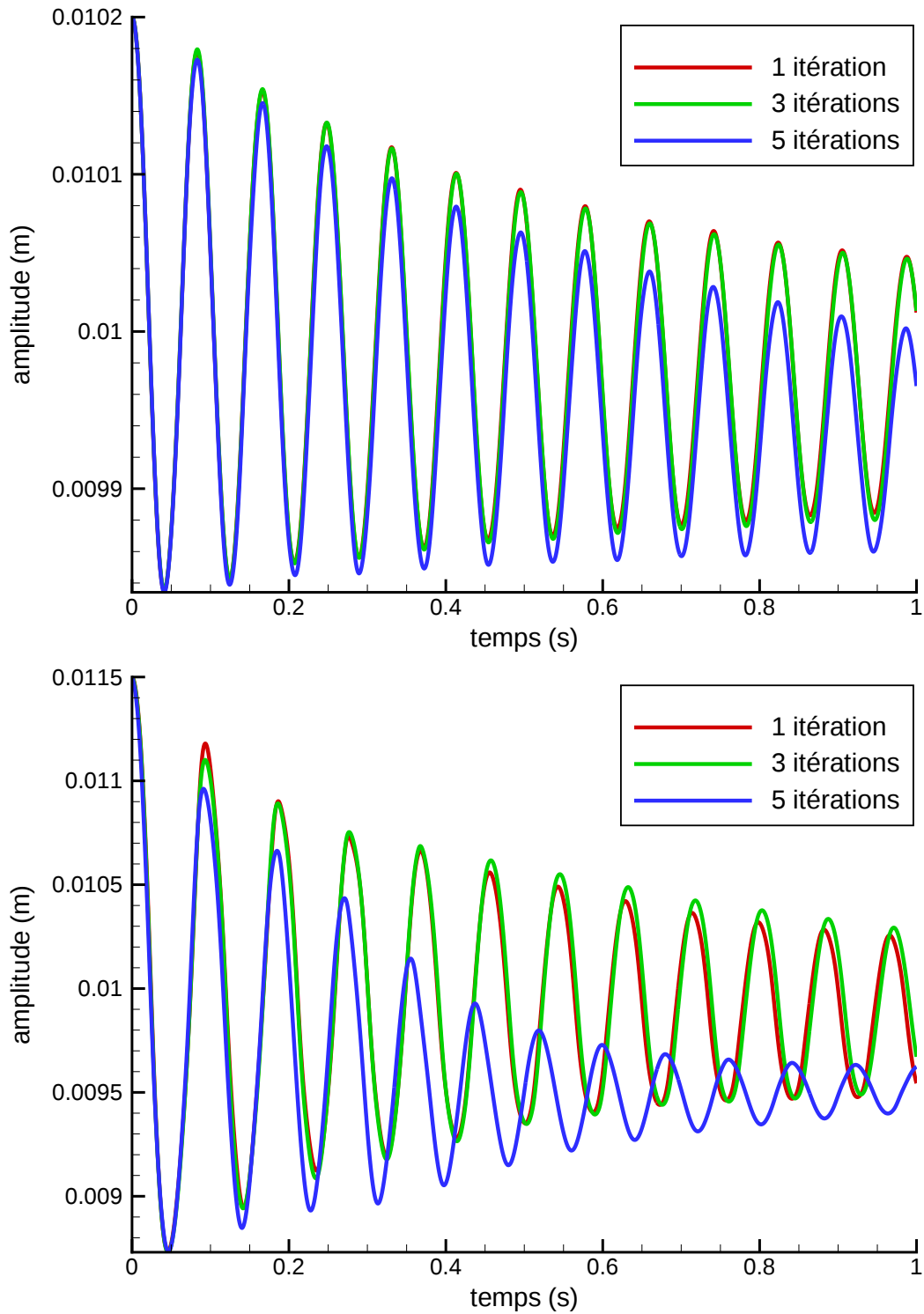


FIG. 6.7 – Dissipation numérique et impact de la redistance lors de l'oscillation de la goutte déformée pour le mode 4 pour un maillage 32^2 et les paramètres Eq.(6.7) ; (en haut) $\epsilon = 0.02$; (en bas) $\epsilon = 0.15$

6.3 Oscillation capillaire d'une onde de surface

Dans ce paragraphe, nous présentons les performances du code de calcul quant à la simulation de l'oscillation capillaire amortie d'une surface séparant deux fluides visqueux. En l'absence de gravité, une surface perturbée par une onde sinusoïdale de longueur d'onde quelconque est stable au sens de l'analyse linéaire des modes normaux. La surface initialement déformée se met à osciller sous l'action de la tension de surface, cette oscillation étant amortie sous l'effet de la diffusion visqueuse.

Cette simulation présente plusieurs intérêts. Tout d'abord, tout comme le cas des modes de vibration d'une goutte, elle peut permettre de quantifier les effets de viscosité numérique. Ceci peut être réalisé dans le cas inviscide, où l'onde de déformation est sensée osciller indéfiniment. Comme nous l'avons déjà réalisé précédemment, nous ne le ferons pas ici, cela ne présenterait que peu d'intérêt. Ensuite, avec viscosité, les performances du code pourront être quantifiées alors que les effets capillaires et visqueux sont aussi prépondérants l'un que l'autre. Aucun des termes des équations de Navier-Stokes n'est négligeable, il en est de même pour les conditions de saut à l'interface entre les deux fluides visqueux. De la bonne discrétisation de l'ensemble des conditions de saut dépendra l'aptitude du code à respecter au mieux la solution théorique.

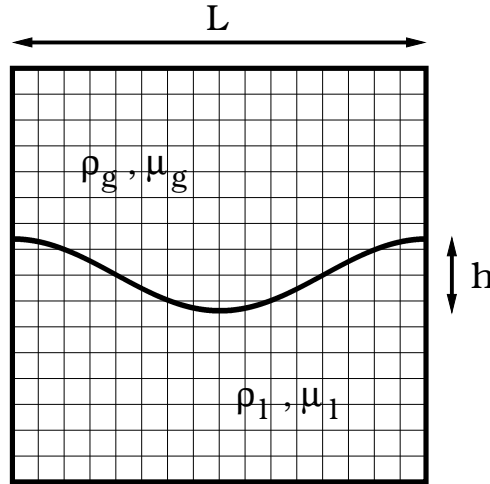


FIG. 6.8 – Conditions initiales pour la simulation de l'oscillation amortie d'un onde de surface

Solution théorique

Nous nous intéressons exclusivement au cas bidimensionnel. Nous considérons un domaine de calcul carré de longueur L dans lequel deux fluides visqueux sont superposés Fig.(6.8). On note $\eta(x, t)$ la hauteur de la surface de séparation entre les deux fluides telle que,

$$\eta(x, t) = a(t) \cos(kx) \cos(\omega t) \quad , \quad \text{avec} \quad k = \frac{2\pi}{L} \quad \text{et} \quad a(0) = \frac{h}{2} \quad (6.8)$$

Un certain nombre de résultats théoriques sont disponibles pour ce cas. Si l'on se réfère à l'analyse des modes normaux de petites amplitudes comme celle de Lamb [37], on trouve la

relation de dispersion suivante dans l'hypothèse où la dimension verticale est infinie, ce que l'on supposera par la suite,

$$\omega^2 = \frac{\sigma k^3}{\rho_l + \rho_g} \quad (6.9)$$

Dans le cas où la viscosité n'est pas négligeable, l'amortissement est de type exponentiel. Nous ne donnerons pas ici l'expression du taux d'amortissement issu de l'analyse des modes normaux car cette solution s'avère insuffisante pour quantifier au mieux les erreurs de simulation [70, 69]. En effet, étant donné que les deux fluides sont initialement au repos, il est préférable de résoudre le problème aux valeurs initiales car l'analyse de stabilité considère un régime établi. C'est ce qu'a réalisé Prosperetti dans les cas où la dimension verticale est infinie [71] et finie [71]. Dans l'hypothèse où les viscosités cinématiques sont identiques $\nu_g = \nu_l = \nu$, la solution analytique exacte s'écrit ainsi,

$$\begin{aligned} a(t) = & \frac{4(1-4\beta)\nu^2 k^4}{8(1-4\beta)} a(0) \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\nu k^2 t}\right) \\ & + \sum_{i=1}^4 \frac{z_i}{Z_i} \left(\frac{\omega^2 a(0)}{z_i^2 - \nu k^2} \right) \exp((z_i^2 - \nu k^2)t) \operatorname{erfc}\left(z_i t^{1/2}\right) \end{aligned} \quad (6.10)$$

où z_i sont les quatre racines complexes de l'équation algébrique suivante,

$$\begin{aligned} z^4 - 4\beta(k^2\nu)^{1/2} z^3 + 2(1-6\beta)k^2\nu z^2 \\ + 4(1-3\beta)(k^2\nu)^{3/2} z + (1-4\beta)\nu^2 k^4 + \omega^2 z^2 = 0 \end{aligned} \quad (6.11)$$

et où les Z_i sont obtenus par permutation cyclique des indices,

$$Z_1 = (z_2 - z_1)(z_3 - z_1)(z_4 - z_1) \quad , \quad \dots \quad (6.12)$$

La pulsation des oscillations ω est la même que pour l'analyse des modes normaux Eq.(6.9) et β est un paramètre défini par,

$$\beta = \frac{\rho_l \rho_g}{(\rho_l + \rho_g)^2} \quad (6.13)$$

Lorsque les viscosités cinématiques ν_g et ν_l sont différentes, la solution Eq.(6.10) de Prosperetti n'est plus valable.

Paramétrisation des simulations

Nous employons un domaine de calcul carré $[0, 2\pi]^2$ avec des conditions périodiques sur les frontières gauche et droite et de glissement sur les frontières haute et basse. Ainsi définie, nous pouvons considérer négligeable l'effet de confinement en hauteur pour être en accord avec la solution théorique Eq.(6.10), en particulier grâce au glissement du fluide sur les parois haute et basse. Encore une fois nous optons pour une tension de surface σ importante tandis que nous considérons deux sauts de densité ρ_l/ρ_g bien différents,

$$\left\{ \begin{array}{lcl} L & = & 2\pi \\ h & = & 0.04 L \\ \rho_l & = & 1000 \text{ kg.m}^{-3} \\ \nu_l & = & 0.001 \text{ m}^2.\text{s}^{-1} \\ \rho_g & = & 1 \text{ ou } 1000 \text{ kg.m}^{-3} \\ \nu_g & = & 0.001 \text{ m}^2.\text{s}^{-1} \\ \sigma & = & 0.1 \text{ N.m}^{-1} \end{array} \right. \quad (6.14)$$

Les deux sauts de densité ρ_l/ρ_g considérés montreront bien que la convergence est plus difficile à obtenir lorsque le saut est important. Il est à noter qu'un saut de 1000 a rarement été utilisé par les auteurs ayant réalisé cette simulation comme [70, 69, 60]. Et signalons déjà que le nombre de CFL a dû être parfois abaissé à 0.25 voir à 0.15 pour réaliser une telle simulation car nous avons éprouvé des problèmes de stabilité. Nous montrerons ainsi toute la potentialité de la méthode Level Set pour suivre une interface couplée à la méthode Ghost Fluid pour traiter les conditions de saut. Toutes les simulations présentées ici utilisent le schéma Rk3/Weno5/n car on ne s'intéresse pas au problème de diffusion numérique mais à la précision intrinsèque des schémas. Une seule itération de redistance est effectuée toujours pour limiter son impact sur les simulations.

Résultats des simulations

Le résultat graphique des simulations pour les deux sauts de densité considérés et plusieurs maillages est montré sur la Fig.(6.9). Nous pouvons observer le très bon accord entre théorie et simulation dès l'utilisation d'un maillage 16^2 lorsque $\rho_l/\rho_g = 1$ et dès le maillage 32^2 lorsque $\rho_l/\rho_g = 1000$. Pour des maillages plus faibles, voir très faible avec le maillage 8^2 , les résultats sont très loin d'être catastrophiques même lorsque le saut de densité vaut 1000.

Afin de quantifier l'erreur commise, nous construisons la norme suivante,

$$\|e\| = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |a^{num}(t_i) - a^{theo}(t_i)| \quad (6.15)$$

Où a^{theo} correspond à la solution de Prosperetti Eq.(6.10) et a^{num} à la solution calculée. Le calcul de cette norme est arrêté au temps $t = 5000 \text{ s}$ lorsque $\rho_l/\rho_g = 1$ et $t = 1000 \text{ s}$ lorsque $\rho_l/\rho_g = 1000$, correspondant ainsi aux courbes Fig.(6.9). L'ensemble des résultats est répertorié dans le Tab.(6.5).

Nous obtenons bien des résultats nettement meilleurs lorsque le saut de densité est de 1. Dès le maillage 32^2 , l'écart obtenu entre les deux sauts considérés est d'une puissance grossièrement.

Nous observons que le taux de convergence relativement élevé pour de petits maillages plafonne au fur et à mesure que le maillage est plus important. La raison doit certainement être liée à la difficulté de converger vers la solution analytique à cause des hypothèses de petites déformations et celle d'un milieu verticalement infinie pour obtenir la solution analytique. Par conséquent, il est difficile de commenter ces taux de convergence obtenus. Nous préférons retenir ici la précision intrinsèque du code de simulation sur ce cas test de l'oscillation d'onde de surface, même lorsque la tension de surface et le saut de densité sont importants et que le maillage est très faible. En cas de sous résolution dans une simulation diphasique quelconque, nous pouvons espérer que le calcul ne sera jamais aberrant lorsque des instabilités interfaciales se développent avec de tels résultats pour de petits maillages. En conclusion, ce cas test est très positif quant à notre code de simulation même si bien sur les schémas peuvent encore toujours être améliorés.

Cependant, nous avons du faire face à des problèmes de stabilité lorsque le saut de densité vaut 1000. Dès le maillage 16^2 , nous avons été contraint à abaisser le CFL à 0.25 revenant grossièrement à diviser le pas de temps par 2. Dans le cas contraire, on observe clairement que la simulation diverge brutalement de la solution théorique sans toutefois "exploser". Ensuite, il est assez surprenant que cette contrainte supplémentaire sur le pas de temps soit encore plus sévère en augmentant le maillage puisque nous avons du abaisser à nouveau le CFL à 0.15 pour un maillage 64^2 . Encore plus inquiétant, nous n'avons pas trouvé de CFL suffisamment petit pour garder la stabilité pour un maillage 128^2 . Ce problème est bien connu dans la communauté scientifique bien que cela ne soit pas bien souvent explicitement écrit dans la littérature, et représente très certainement l'un des grands points durs à résoudre pour ce type de code et de simulation. Il semble tout de même qu'on est fait des progrès avec les techniques numériques utilisées ici puisque comme nous l'avons déjà signalé, ils existent pas ou peu de simulations de l'oscillation capillaire amortie d'une onde de surface avec un saut de densité de l'ordre de 1000, semblant indiquer que les simulations divergent plus fortement encore.

	$\rho_l/\rho_g = 1$		$\rho_l/\rho_g = 1000$	
Maillage	$\ e\ $	q	$\ e\ $	q
8^2	0.05623	-	0.22614	-
16^2	0.00890	2.66	0.12545	0.85
32^2	0.00387	1.20	0.04035	1.64
64^2	0.00293	0.40	0.01656	1.28
128^2	0.00255	0.20	x	x

TAB. 6.5 – Erreurs relatives, q étant le taux de convergence associé. La stabilité du code de calcul est mise à mal lorsque $\rho_l/\rho_g = 1000$. Le maillage 64^2 a nécessité un CFL de 0.15, un CFL encore trop important pour le maillage 128^2 . Les maillages inférieurs 32^2 et 16^2 ont nécessité un CFL de 0.25.

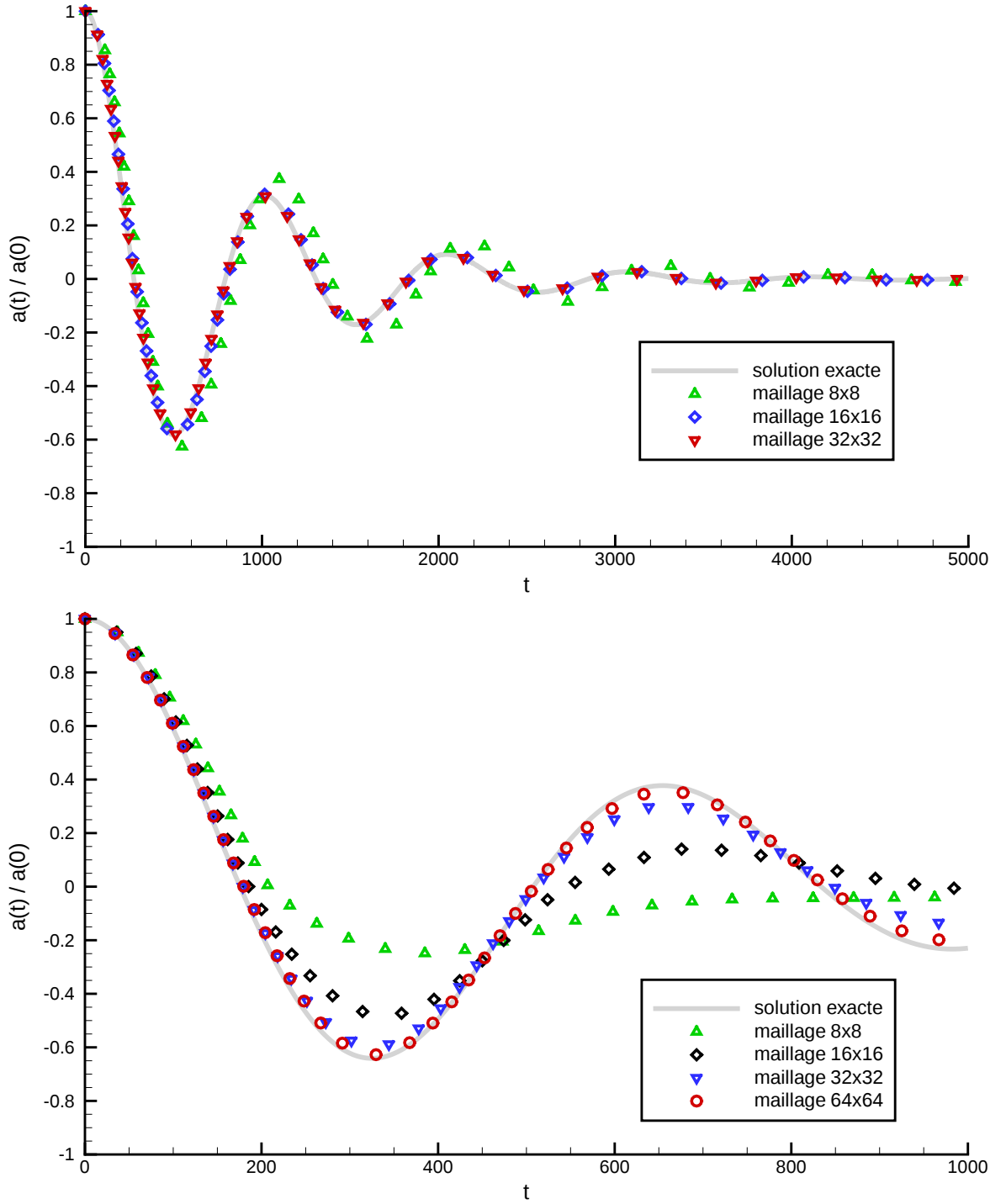


FIG. 6.9 – Courbes obtenues lors de la simulation de l'oscillation d'une onde de surface en comparaison de la solution exacte de Prosperetti Eq.(6.10); (En haut) $\rho_l/\rho_g = 1$; (En bas) $\rho_l/\rho_g = 1000$.

6.4 Écoulement de Poiseuille diphasique

L'écoulement de Poiseuille diphasique est un cas de simulation intéressant permettant d'isoler un phénomène bien particulier : la condition de saut associée à l'équilibre des forces surfaciques visqueuses à l'interface, c'est à dire la partie tangentielle du saut du tenseur des contraintes Eq.(1.15). En effet, comme nous allons le voir, nous sommes dans la situation de la Fig.(6.10) où l'on doit respecter l'Eq.(1.13).

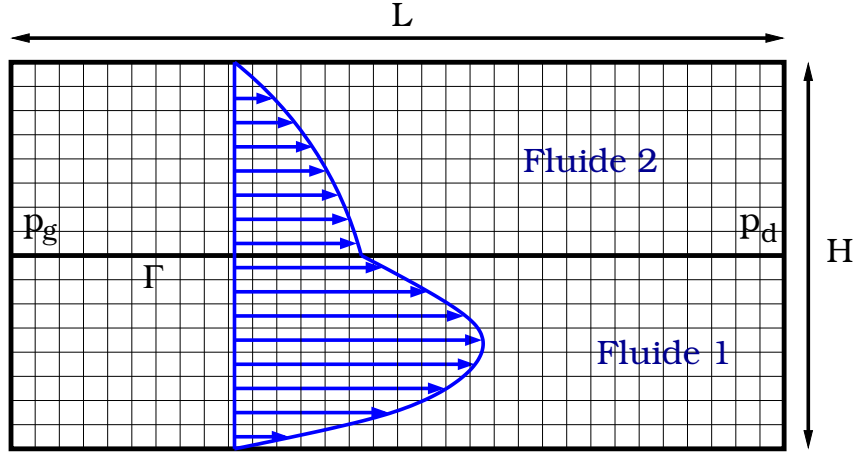


FIG. 6.10 – Schématisation du cas test de l'écoulement de Poiseuille diphasique. Le profil de vitesse représenté ici met en évidence l'existence d'une singularité à l'interface lorsque les fluides possèdent une viscosité dynamique différente.

Solution théorique

Deux fluides superposés horizontalement s'écoulent entre deux plans parallèles sans glissement. La tension de surface et la gravité sont négligées. Tout comme dans le cas monophasique, nous sommes en mesure de calculer une solution analytique. En utilisant les notations de la Fig.(6.10), elle est la suivante,

$$\begin{aligned}
 \text{pour } y \leq 0 \quad & \begin{cases} u_1 = \frac{\Delta p (2(\mu_1 + \mu_2)y^2 + H(\mu_2 - \mu_1)y - \mu_1 H^2)}{4\mu_1 L(\mu_1 + \mu_2)} \\ v_1 = 0 \end{cases} \\
 & \text{et} \\
 \text{pour } y \geq 0 \quad & \begin{cases} u_2 = \frac{\Delta p (2(\mu_1 + \mu_2)y^2 + H(\mu_2 - \mu_1)y - \mu_2 H^2)}{4\mu_2 L(\mu_1 + \mu_2)} \\ v_2 = 0 \end{cases}
 \end{aligned} \tag{6.16}$$

Où $\Delta p = p_g - p_d$ est le différentiel de pression entre la sortie et l'entrée. Cette solution respecte la condition d'équilibre des forces surfaciques visqueuses à l'interface,

$$\mu_1 \left. \frac{du_1}{dy} \right|_{y=0} = \mu_2 \left. \frac{du_2}{dy} \right|_{y=0} = \frac{\Delta p H (\mu_2 - \mu_1)}{4L(\mu_1 + \mu_2)} \quad (6.17)$$

Ce cas test nous permet donc de vérifier si le code de simulation est bien en mesure de considérer une telle condition à l'interface impliquant une singularité à l'interface dans le profil de vitesse comme schématisé sur la Fig.(6.10).

Paramétrisation des calculs

Nous avons effectué des simulations sur différents maillages avec les paramètres suivants,

$$\left\{ \begin{array}{lcl} L & = & 2 \text{ cm} \\ H & = & 2 \text{ cm} \\ \rho_1 & = & 1 \text{ kg.m}^{-3} \\ \mu_1 & = & 10^{-5} \text{ Pa.s} \\ \rho_2 & = & 1 \text{ kg.m}^{-3} \\ \mu_2 & = & 10^{-4} \text{ Pa.s} \\ \sigma & = & 0 \\ \Delta p & = & 0.01 \text{ Pa} \end{array} \right. \quad (6.18)$$

La Level-Set est initialisée puis figée durant toute la simulation afin d'éviter toute éventuelle interférence pour quantifier l'erreur faite dans le calcul du champ de vitesse. Des conditions de non glissement sont considérées pour les parois horizontales afin de strictement respecter la nullité de la vitesse sur les parois. Pour les parois verticales, des conditions de Neumann sont considérées pour la vitesse tandis des conditions de Dirichlet sont considérées pour la pression telles que le différentiel de pression entre l'entrée et la sortie respecte une certaine perte de charge ¹⁴.

Premières observations

Après un certain nombre d'itérations afin d'obtenir une solution stationnaire en partant d'un champ de vitesse initialement nul, le profil de vitesse obtenu pour un maillage 32^2 est donné sur la Fig.(6.11). On peut conclure à la vision de ce résultat que le profil de vitesse est très bien calculé grâce à la méthode Ghost-Fluid qui nous permet de respecter explicitement la condition de saut Eq.(6.17). Il est à signaler que nous avons fait également ce test dans l'autre direction pour vérifier une éventuelle erreur d'implémentation de la méthode dans le code bidimensionnel mais également dans chaque direction pour la version tridimensionnelle du code, la solution étant tout à fait identique évidemment.

Normes de l'erreur

Afin d'aller un peu plus loin dans les investigations, nous avons réalisé une étude de convergence en maillage grâce au calcul des normes discrètes des erreurs $\|e\|_\infty = \|u^{theo} - u^{num}\|_\infty$ et $\|e\|_{L_2} = \|u^{theo} - u^{num}\|_{L_2}$ pour chacun d'entre eux (les normes sont sommées suivant le profil de

¹⁴il est nécessaire de faire attention au fait que la pression est calculée au centre de la cellule fantôme à gauche et à droite pour imposer la bonne perte de charge

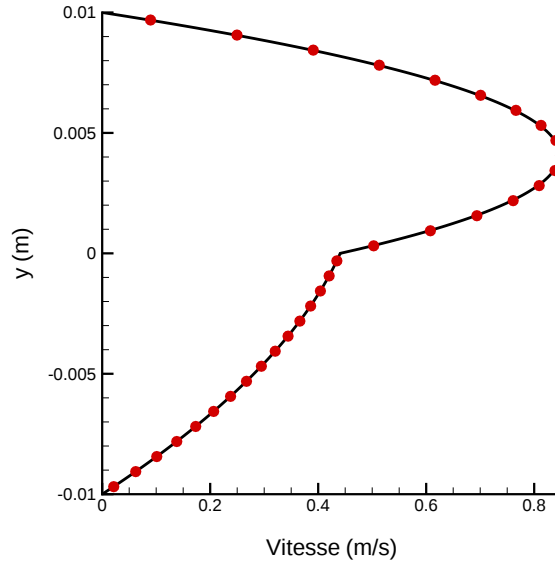


FIG. 6.11 – Représentation graphique du calcul du profil du champ de vitesse pour un maillage 32^2 et les paramètres Eq.(6.18). La solution théorique est en trait plein noir tandis que les points rouges représentent la solution numérique calculée.

vitesse au milieu du domaine mais l'erreur est la même pour tout profil considéré). Le Tab.(6.6) ci-dessous regroupe l'ensemble de ces résultats.

Sachant que la vitesse est de l'ordre de l'unité avec les paramètres que nous avons utilisés, toutes les normes calculées sont faibles. Même pour un maillage 8^2 , la précision du calcul est tout à fait excellente. En cas de sous résolution dans un calcul quelconque, le résultat sera toujours cohérent. Pour un même maillage, les normes infinie et L_2 sont relativement proches l'une de l'autre, ce qui signifie que l'erreur est répartie de façon homogène, elle n'est pas concentrée autour de l'interface.

Maillage	$\ e\ _\infty$	q	$\ e\ _{L_2}$	q
8^2	$3.47 \cdot 10^{-2}$	-	$2.47 \cdot 10^{-2}$	-
16^2	$9.19 \cdot 10^{-3}$	1.92	$6.53 \cdot 10^{-3}$	1.92
32^2	$2.37 \cdot 10^{-3}$	1.96	$1.68 \cdot 10^{-3}$	1.96
64^2	$5.97 \cdot 10^{-4}$	1.99	$3.79 \cdot 10^{-4}$	2.15

TAB. 6.6 – Normes ∞ et L_2 de l'erreur, q étant le taux de convergence associé

On peut aussi observer à la lecture du tableau que le taux de convergence est de 2. Un tel taux de convergence peut paraître surprenant mais peut s'expliquer par l'utilisation de la technique "Sub-Cell Resolution" de Fedkiw pour traiter un saut de dérivée à l'interface.

En conclusion, ce cas test de l'écoulement de Poiseuille diphasique nous permet de valider le comportement du code de simulation pour traiter correctement la partie tangentielle du saut du tenseur des contraintes à la traversée de l'interface Eq.(1.15) grâce à l'utilisation de la méthode Ghost-Fluid traitant explicitement le saut d'une dérivée à l'interface.

6.5 Instabilité de Rayleigh-Taylor

Pour ce dernier cas test, nous nous intéressons à l'aptitude du code de simulation à respecter la théorie de stabilité linéaire appliquée aux équations de Navier-Stokes diphasiques dans le cas de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. C'est un cas de simulation classique pour valider un code tel que le notre, on le rencontre fréquemment dans la littérature car il est très simple de mise en oeuvre [69, 60].

Cette instabilité est très simple de conception : un fluide de densité ρ_h est placé au-dessus d'un fluide plus léger de densité ρ_l , ces deux fluides étant séparés par une interface horizontale. Si l'interface est perturbée par une onde sinusoïdale telle que la longueur ne soit pas trop importante vis à vis de la tension de surface alors l'effet gravitationnel dirigé vers le bas aura tendance à faire "plonger" le fluide lourd placé au dessus du fluide léger sous la forme d'un champignon. Si dans un premier temps, cette instabilité évolue de manière linéaire, elle devient rapidement par la suite non linéaire avec des déformations de l'interface qui peuvent devenir complexes.

Pour des temps de simulation suffisamment courts, c'est à dire tel qu'on reste dans le cadre de la théorie linéaire, la relation de dispersion ci-dessous Eq.(6.19) nous donne le taux de croissance d'une petite onde de déformation initiale sinusoïdale $y = a_0 \cos(kx)$ en fonction des paramètres du problème sous l'hypothèse de fluides non visqueux,

$$n^2 = k g \left(\frac{\rho_h - \rho_l}{\rho_h + \rho_l} - \frac{k^2 \sigma}{g(\rho_h + \rho_l)} \right) \quad (6.19)$$

L'amplitude de la déformation évolue ainsi exponentiellement $a(t) = a_0 e^{nt}$. On constate bien que la tension de surface a tendance à stabiliser la perturbation. On peut ainsi définir une tension de surface critique σ_c tel que $n = 0$ pour laquelle nous obtenons un mode de stabilité marginal.

Nous avons effectué deux types de simulation. Un premier où l'on reste dans le cadre de la stabilité linéaire pour vérifier l'aptitude du code à respecter la relation de dispersion Eq.(6.19). Et un deuxième où le temps de simulation est suffisamment important tel que l'interface subisse de larges déformations non linéaires. Nous pourrions alors vérifier si le code est apte à capturer des déformations fines de l'interface, et en particulier en fonction des schémas numériques qui sont employés pour discrétiser l'équation de transport de la Level-Set.

6.5.1 Cadre linéaire de l'instabilité

Pour ce paragraphe, nous voulons vérifier l'aptitude du code à respecter la théorie de stabilité linéaire et la relation de dispersion Eq.(6.19). Pour cela, nous nous inspirons des simulations de Oevermann et al. [60] où les paramètres sont les suivants,

$$\left\{ \begin{array}{l} L_x = 2 \pi \\ L_y = 4 \pi \\ \rho_h = 3 \text{ kg.m}^{-3} \\ \rho_l = 1 \text{ kg.m}^{-3} \\ A_t = 0.5 \text{ (Nombre de Atwood)} \\ \sigma_c = 20 \text{ N.m}^{-1} \end{array} \right. \quad (6.20)$$

L'interface est initialement une onde sinusoïdale d'amplitude a_0 centrée à mi hauteur de la boîte rectangulaire alors que la gravité est dirigée vers le bas. Des conditions périodiques sont

utilisées sur les cotés verticaux du domaine de calcul par respect du caractère périodique de l'instabilité tandis que pour les parois horizontales, nous laissons les fluides glisser sur celles-ci par le biais de conditions de glissement.

Nous avons effectué plusieurs tests concernant le mode opératoire pour initialiser un tel calcul. En effet, nous savons d'expérience qu'il est délicat d'initialiser correctement le calcul pour trouver le réel écart entre taux de croissance théorique et taux de croissance calculé. Il nous est donné trois possibilités : l'une en partant d'une interface plane et en la perturbant par un champ de vitesse avec respect de la longueur d'onde, et deux autres en partant d'une interface sinusoïdale d'amplitude a_0 avec un champ de vitesse nul ou respectant la théorie de stabilité linéaire. Des tests nous amènent à la conclusion qu'une bonne solution est de partir d'une interface sinusoïdale avec une amplitude infinitésimale $a_0 \propto 10^{-8}$. C'est une manière d'obtenir un taux de croissance "optimal". Dans tous les cas, le bon taux de croissance n'est atteint qu'au bout d'un certain temps bien qu'il soit très court. Il apparaît bien délicat d'en expliquer la raison.

Avec ce mode opératoire d'initialisation, la Fig.(6.12) répertorie graphiquement les taux de croissance calculés pour les maillages 32x64 et 64x128. Tout comme le cas test précédent de l'oscillation d'une onde de surface, très proche dans sa conception du présent cas test, les taux de croissance calculés sont toujours très proches des taux théoriques, même pour des maillages faibles. On note cependant que le taux de croissance numérique est plus proche de la réalité pour de fortes valeurs de la tension de surface σ . Ce résultat peut paraître surprenant mais l'écart est si petit qu'il n'est pas très utile de chercher l'explication.

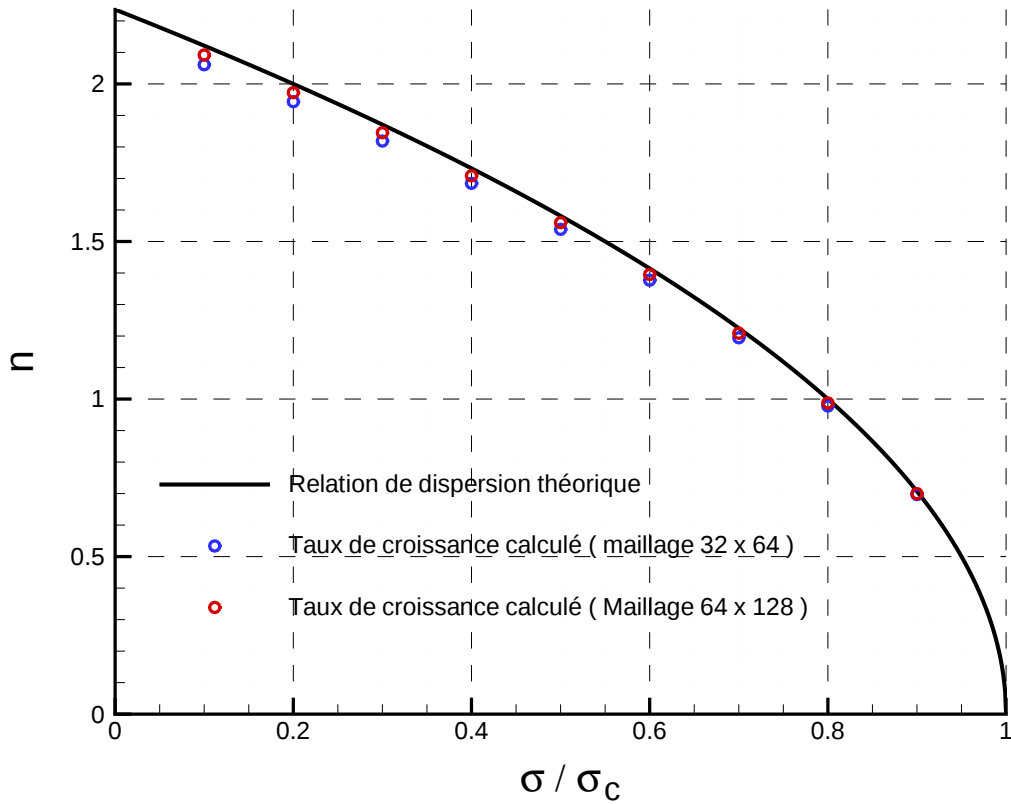


FIG. 6.12 – Simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Taux de croissance calculés en comparaison de la relation de dispersion théorique Eq.(6.19).

Il est donné sur le Tab.(6.5.1) les erreurs exactes commises pour deux valeurs de σ/σ_c et plusieurs maillages. Le taux de convergence est très exactement de 1 pour les deux valeurs.

	$\sigma/\sigma_c = 0.1$		$\sigma/\sigma_c = 0.5$	
Maillage	$\ n^{num} - n^{theo}\ $	q	$\ n^{num} - n^{theo}\ $	q
32x64	$6.032.10^{-2}$	-	$4.254.10^{-2}$	-
64x128	$2.942.10^{-2}$	1.04	$2.134.10^{-2}$	1.00
128x256	$1.452.10^{-2}$	1.02	$1.074.10^{-2}$	0.99

TAB. 6.7 – Erreurs relatives, q étant le taux de convergence associé

6.5.2 Cadre non linéaire de l'instabilité

Pour démontrer l'aptitude du code à capturer une évolution complexe de l'interface, nous avons réalisé des simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en dehors du cadre linéaire. Il existe en particulier dans la littérature une configuration de simulation qui a été réalisée avec les trois grandes classes de méthode de suivi d'interface que sont les méthodes Front-Tracking [69], VOF [72] et Level-Set [101]. Cette configuration fait apparaître au bout d'un certain temps de simulation deux filaments identiques qui sont suffisamment fins pour que la méthode de suivi d'interface ait du mal à ne pas les briser artificiellement sous l'effet d'une sous résolution, dès que l'épaisseur du filament approche l'ordre de la maille. De plus, il est intéressant de noter que la simulation réalisée par Popinet [69] est très précise du fait de l'utilisation d'une méthode lagrangienne de suivi de l'interface, elle peut nous servir de référence. Si cette configuration de simulation nous permet de directement comparer notre propre simulation avec d'autres déjà réalisées et utilisant des méthodes différentes, elle va surtout nous permettre de pouvoir comparer nos schémas de discrétisation Rk3/Weno5/n et Rk3/Weno5/c de l'équation de transport de la Level-Set ainsi que de mesurer encore une fois l'impact de la redistance.

Les paramètres de la simulation sont les suivants,

$$\left\{ \begin{array}{l} L_x = 1 \text{ m} \\ L_y = 4 \text{ m} \\ \rho_h = 1.225 \text{ kg.m}^{-3} \\ \rho_l = 0.1694 \text{ kg.m}^{-3} \\ \mu_h = 3.13 \cdot 10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.s^{-1} \\ \mu_l = 3.13 \cdot 10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.s^{-1} \\ A_t = 0.757 \text{ (Nombre de Atwood)} \\ \sigma = 0 \text{ kg.s}^{-2} \end{array} \right. \quad (6.21)$$

La perturbation initiale de l'interface est donnée par $y = 0.05 \cos(kx)$ avec $k = 2\pi$. Les Fig.(6.13) et Fig.(6.14) regroupent un certain nombre de simulations que nous allons expliciter. Elles sont toutes réalisées avec un maillage 64x256 car c'est pour ce maillage que des problèmes

se posent pour bien capturer les filaments au temps $t = 0.9$ s. On peut trouver dans le mémoire de thèse de S.Tanguy [101] le résultat de la simulation avec un maillage 128×512 avec l'utilisation identique au présent mémoire de la méthode Level-Set couplée à la méthode Ghost-Fluid. Il est montré que les filaments ne présentent pas de brisure et que la forme de l'interface est quasi identique au résultat de référence de Popinet [69].

Il est exposé sur la Fig.(6.13) la simulation de l'instabilité avec une configuration des schémas que l'on pourrait qualifier de base, c'est à dire l'utilisation du schéma Rk3/Weno5/n et 3 itérations de redistance ($\Delta x^r = 0.5\Delta x$). Jusqu'au temps $t = 0.8$ s, il n'y a pas de problème particulier, le calcul est quasi convergent toujours à la lecture du résultat de référence fourni par S.Popinet. Le maillage est suffisamment résolu pour capter correctement les déformations de l'interface. Par contre, on remarque au temps $t = 0.9$ s l'apparition de 2 gouttes dues à la brisure des ligaments. Du fait de cette brisure, on s'écarte très rapidement de la bonne solution puisque les champs de vitesse calculés avec 2 gouttes en comparaison de 2 ligaments ne sont pas du tout les mêmes. En conclusion, la simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor représente une bonne base de travail pour améliorer les performances du code quant à la capture de déformations fines de l'interface dans une configuration où le champ de vitesse calculé interagit avec.

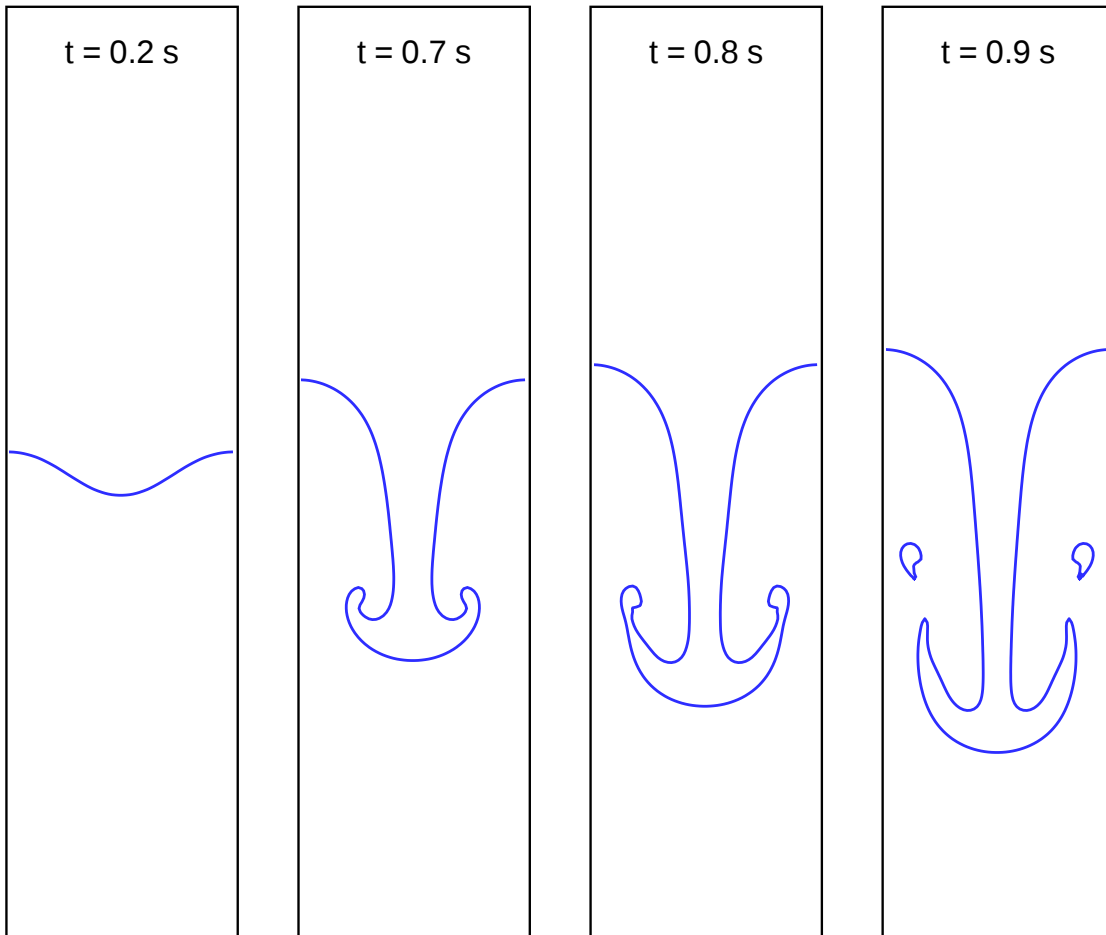


FIG. 6.13 – Simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor avec les paramètres Eq.(6.21) (Maillage 64×256 - Schéma Rk3/Weno5/n - 3 itérations de redistance).

C'est ce que nous avons réalisé sur la Fig.(6.14) où nous exposons le résultat au temps $t = 0.9 s$ pour différents schémas. Tout d'abord, on constate que l'utilisation de la méthode CSF en remplacement de la méthode Ghost-Fluid détériore sans surprise la qualité du résultat. La perte d'information est plus importante, les gouttes formées sont déjà à un stade où elles vont inévitablement disparaître alors que le champignon est du coup trop bas en comparaison des simulations avec la méthode Ghost-Fluid. Ensuite, l'utilisation de l'approche conservative dans la discrétisation de l'équation de transport de la Level-Set par le biais du schéma RK3/Weno5/c améliore inévitablement la qualité du résultat. Si dans le cas de l'application de 3 itérations de redistance, les ligaments sont encore une fois brisés même si la brisure est de toute évidence plus récente, ce n'est plus le cas lors de l'application d'une seule itération de redistance. Par contre, on est encore éloigné de la solution de référence car les ligaments ne sont pas assez écartés. La redistance a toujours pour effet de renforcer les pertes d'information sans que cela soit catastrophique dans ce cas entre une seule et trois itérations, que cela soit pour le schéma RK3/Weno5/n ou RK3/Weno5/c.

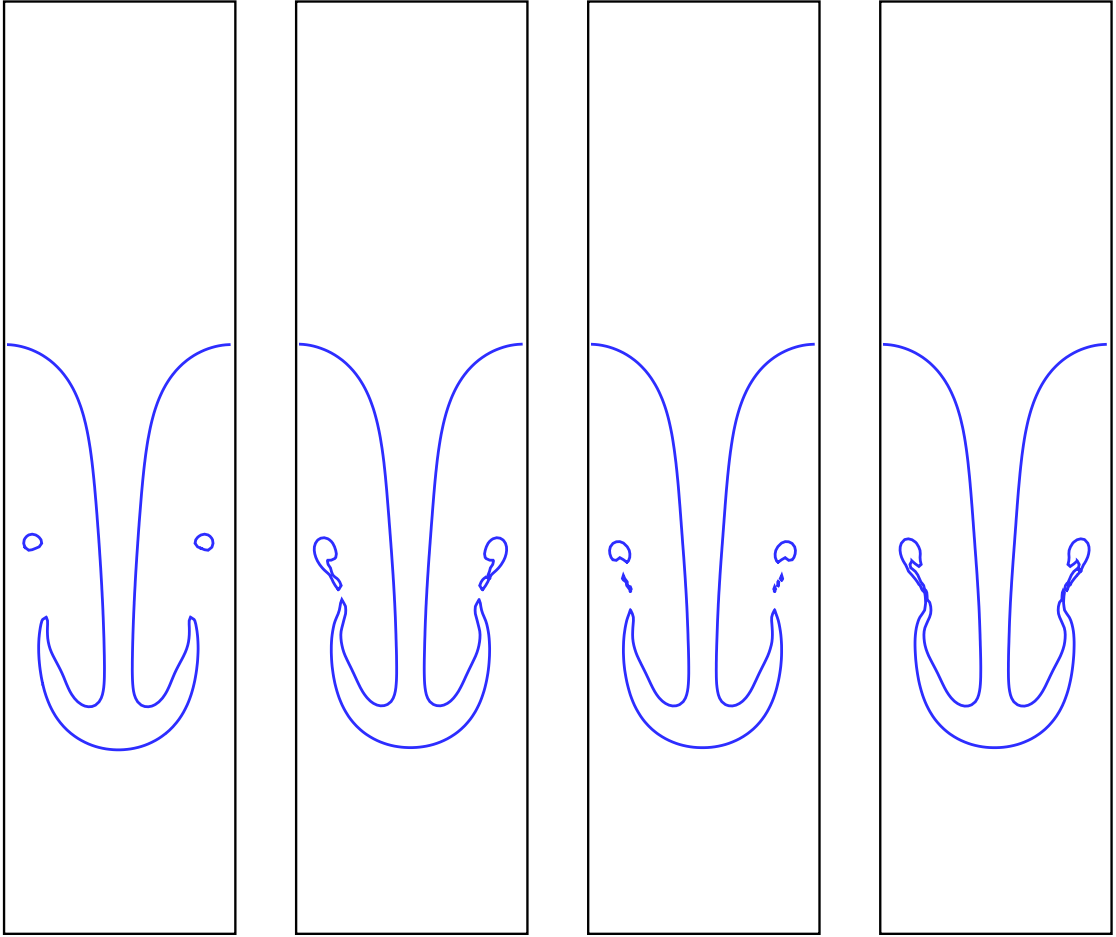


FIG. 6.14 – Diverses simulations de l'instabilité de Rayleigh-Taylor avec les paramètres Eq.(6.21) et un maillage 64×256 arrêtées au temps $t = 0.9 s$; (De gauche à droite) • Rk3/Weno5/n / 3 itérations de redistance / méthode CSF • Rk3/Weno5/c / 3 itérations de redistance • Rk3/Weno5/n / 1 itération de redistance • Rk3/Weno5/c / 1 itération de redistance.

Deuxième partie

Simulation de la désintégration assistée d'une nappe liquide par un courant gazeux

Chapitre 7

Instabilités longitudinales : simulations bidimensionnelles

Sommaire

7.1 Motivations	168
7.1.1 Configuration de la nappe liquide et simulation	168
7.1.2 Oscillation globale d'une nappe liquide	169
7.2 Mise en oeuvre des simulations	170
7.2.1 Préliminaires	170
7.2.2 Le profil de vitesse	170
7.2.3 Les paramètres physiques	173
7.3 Simulation référence : premières observations	175
7.3.1 Déstabilisation initiale de la nappe	175
7.3.2 Dynamique de l'écoulement en régime établi	178
7.3.3 Amplitude et fréquence de l'oscillation globale	181
7.4 Influence des paramètres amont	187
7.4.1 Les vitesses débitantes	187
7.4.2 L'épaisseur de la nappe	191
7.4.3 L'épaisseur de la couche limite gazeuse	196
7.4.4 Loi de comportement	197

Lors de cette nouvelle partie, nous allons nous concentrer sur l'application du code développé à la simulation de la désintégration assistée d'une nappe mince de liquide par deux courants gazeux de part et d'autre. Le choix de la configuration de la nappe de liquide a été fait en raison de la disposition de multiples résultats expérimentaux et du caractère bidimensionnel initial de l'écoulement. Même si l'atomisation assistée d'un jet liquide est un phénomène purement tridimensionnel à la vision de n'importe quelle expérience, les simulations bidimensionnelles qui font l'objet de ce chapitre permettent de mettre en évidence l'oscillation globale de la nappe liquide due à la croissance rapide d'une instabilité de cisaillement de type Kelvin-Helmholtz. Comme nous l'avons vu dans l'introduction générale, c'est l'oscillation globale qui est responsable de la tridimensionnalisation des déformations de la nappe et de l'apparition de ligaments. En conséquence, il apparaît qu'une caractérisation complète des grandeurs de l'oscillation globale comme la fréquence, la longueur d'onde ou l'angle d'ouverture, en fonction des conditions d'injection amont pourrait permettre de prédire par la suite l'atomisation finale. Dans ce sens, nous avons réalisé une étude paramétrique en faisant varier les vitesses débitantes, l'épaisseur de la

nappe ainsi que l'épaisseur de la couche limite dans le gaz. De part cette étude, nous dégagerons une fréquence de battement adimensionnelle similaire à un nombre de Strouhal en fonction des conditions amont en correspondance avec les travaux expérimentaux. Nous tenterons également de mettre en lumière la dynamique de l'écoulement gazeux en interaction avec l'oscillation de la nappe.

7.1 Motivations

Nous désirons appliquer le code de calcul développé à l'étude de la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux. L'objectif est d'apporter une lumière nouvelle tant il reste des points obscurs sur les mécanismes de désintégration malgré les nombreuses études expérimentales et les non moins nombreuses études de stabilité linéaire et non linéaire comme nous l'avons présenté lors de l'introduction. Nous devons dans ce sens rester cohérent dans nos choix afin de respecter au mieux la réalité physique, ce que nous avons déjà fait lors de la mise en place du modèle et du développement du solveur numérique, d'autant plus que l'outil numérique nous permet une grande souplesse dans nos choix. Il est essentiel d'être très soucieux des résultats qui ont déjà été obtenus afin de valider le comportement du code de calcul dans un premier temps, puis par la suite de tenter d'en fournir de nouveaux dans la droite lignée. Nous allons nous attacher dans ce paragraphe à montrer ce qu'il est potentiellement intéressant de réaliser avec des simulations bidimensionnelles vis à vis des résultats déjà connus à ce jour, qu'ils soient expérimentaux ou théoriques.

7.1.1 Configuration de la nappe liquide et simulation

La configuration de la nappe liquide est devenue au fil du temps très populaire chez les expérimentateurs. Elle facilite à la fois l'observation, la mesure et la compréhension des mécanismes de désintégration. La longueur transverse étant largement supérieure à l'épaisseur de la nappe, l'écoulement initial peut être considéré comme bidimensionnel dans une zone proche de la sortie de l'injecteur, les effets de bord étant négligeables. En relation étroite avec ces expériences, cette configuration a donc aussi logiquement été utilisée pour réaliser des études de stabilité bidimensionnelles. Nous disposons par conséquent d'un nombre important de résultats sur cette configuration, ce qui va nous être très pratique pour valider le comportement du code de calcul.

Mais l'intérêt majeur de la configuration de la nappe liquide pour la simulation est la possibilité de réaliser de simples simulations bidimensionnelles pourtant potentiellement fortement intéressantes pour comprendre le développement des instabilités à la surface d'une nappe et dans quelles proportions. En effet, lors de telles simulations, nous pouvons mettre en évidence la croissance des ondes de déformation sinueuse et variqueuse Fig(6). Comme établi par Hagerty et Shea [26], ce sont les deux seules ondes de déformation qui peuvent croître à la surface d'une nappe. Lors d'une simulation bidimensionnelle, elles sont isolées de toute perturbation transverse, représentant un avantage manifeste. Les études de stabilité ont également exploité cette possibilité mais elles se heurtent souvent à des calculs trop complexes si l'on réalise un minimum d'hypothèses. Les viscosités ou le caractère non linéaire des ondes de déformation sont souvent ignorés. Ce n'est pas le cas de l'outil numérique, qui nous permet à priori une liberté totale quant aux paramètres de calcul avec un minimum d'hypothèses.

Enfin, l'outil numérique propose également avec tout autant de facilité de pouvoir réaliser des simulations temporelles ou spatiales. Si les études temporelles représentent un intérêt pour mieux comprendre l'évolution d'un mode de déformation sinueux ou variqueux isolé, les études

spatiales quant à elles se rapprochent de la réalité expérimentale où cette fois un paquet d'ondes peut croître à la surface de la nappe. Il est donc évident que les simulations spatiales présentent un intérêt supérieur de part cette proximité avec les conditions expérimentales. Nous avons tout de même réalisé des simulations temporelles de la croissance d'un mode sinueux ou variqueux. Elles mettent en avant la dynamique complexe de l'écoulement gazeux en particulier lorsque le nombre de Reynolds est important et la manifestation très rapide de la non linéarité de l'instabilité. Mais elles ne présentent que peu d'intérêt si ce n'est pour jauger la convergence du solveur numérique.

7.1.2 Oscillation globale d'une nappe liquide

Influence sur la désintégration

Nous avons vu en introduction que l'oscillation globale est la manifestation d'un battement en phase des deux côtés de la nappe liquide, similaire au battement d'un drapeau au vent. Des simulations spatiales de la désintégration assistée d'une nappe liquide vont nous permettre de mettre en évidence cette oscillation globale de la nappe.

Ce phénomène à l'origine purement bidimensionnel est responsable de la tridimensionnalisation de la désintégration assistée de la nappe. Si Stapper et Samuelsen [94] soulignent l'aspect tridimensionnel de la désintégration par la présence conjuguée d'ondes longitudinales et transverses comme l'ensemble des expérimentateurs, il est de rigueur aujourd'hui d'avancer le postulat que l'onde transverse responsable de l'apparition de ligaments n'est qu'une conséquence directe de l'onde longitudinale, c'est à dire l'oscillation globale. En effet, de nombreux auteurs arrivent à cette conclusion grâce à l'évidence expérimentale comme H.Carentz [9] ou P.Marmottant [52]. Comme le souligne P.Marmottant, les puissances de variation des longueurs d'onde avec la vitesse du gaz cisailant sont différentes signifiant que les deux instabilités diffèrent bien l'une de l'autre. Une conclusion consolidée par la dépendance de la longueur d'onde de l'instabilité transverse avec la tension de surface alors que ce n'est pas le cas de l'instabilité longitudinale.

En conséquence, une étude numérique de l'oscillation globale de la nappe liquide présente un intérêt manifeste. Or, si des simulations bidimensionnelles ne prennent pas en compte la tridimensionnalisation de la désintégration d'une nappe liquide, elles ont le mérite d'isoler le phénomène d'oscillation globale d'une nappe liquide. Et sachant que l'oscillation globale pilote l'ensemble des mécanismes de désintégration, il va de soi qu'une étude poussée par la voie numérique s'avère potentiellement fortement intéressante.

Résultats expérimentaux

Nous disposons à ce jour d'un certain nombre de résultats sur l'oscillation globale de la nappe liquide qu'il serait intéressant de retrouver par la voie numérique. Si les résultats obtenus concordent alors nous pourrions émettre l'hypothèse de la validité du comportement du code de calcul vis à vis de ce phénomène. Ce n'est qu'après cette étape que nous pourrions réaliser des simulations dans l'ambition d'étendre la compréhension de ce phénomène et en particulier de dimensionner la fréquence d'oscillation en fonction des paramètres amont.

Le premier résultat intéressant à retrouver est le diagramme établi par Chigier et al. [50, 51]. Il représente l'existence de régimes de fonctionnement en fonction des vitesses débitantes de liquide et de gaz. Pour un débit de gaz donné, nous évoluerons successivement dans des zones notées A, B et C en augmentant le débit liquide comme nous l'avons déjà expliqué en introduction.

Le second résultat est toujours lié aux vitesses débitantes de gaz et de liquide. C'est la dépendance linéaire de la fréquence de l'oscillation globale avec de la vitesse débitante de gaz.

C'est la corrélation la plus largement admise dans la communauté scientifique et ne pas la retrouver par la voie numérique remettrait en cause la véracité de la simulation vis à vis de la réalité expérimentale.

Impact des couches limites

Nous venons d'évoquer quelques résultats expérimentaux sur l'oscillation globale d'une nappe liquide. Or nous n'avons toujours pas évoqué l'influence avérée des couches limites qui se forment en aval de l'injection sur les parois de l'injecteur. En effet, Lozano [47] montre par exemple à l'aide d'une étude de stabilité linéaire temporelle que de ne pas les prendre en compte s'avère trop restrictif. Or il est délicat d'un point de vue expérimental de prendre en compte cette donnée pour deux raisons : les difficultés à la fois de mesure et de contrôle des épaisseurs. Et comme les études de stabilité s'éloignent trop de la réalité expérimentale, on ne trouve pas dans la littérature de caractérisation de l'influence des couches limites et en particulier de celle qui se forme dans le gaz. C'est en particulier sur ce point que l'outil numérique révèle tout son intérêt car il est très facile de pouvoir contrôler ce paramètre en changeant le profil de vitesse d'une simulation à l'autre.

7.2 Mise en oeuvre des simulations

7.2.1 Préliminaires

Nous désirons réaliser la simulation bidimensionnelle spatiale de la désintégration assistée d'une nappe liquide par un courant gazeux. Pour cela, nous considérons un domaine de calcul rectangulaire où l'injection de la nappe est centrée sur la frontière gauche comme sur la Fig.(7.1). Une condition à la limite entrante est donc utilisée sur la frontière gauche tandis que des conditions à la limite sortantes sont utilisées pour les autres frontières du domaine de calcul.

7.2.2 Le profil de vitesse

Nous devons approcher au mieux la réalité expérimentale, ce qui revient dans un premier temps à considérer un profil de vitesse approché. En général, de l'eau est injectée à travers une fente dont la hauteur peut varier de $300 \mu m$ à $1 mm$ et dont la largeur est telle que le ratio soit bien supérieur à 100 afin de minimiser les effets de bord. A la sortie de la veine d'injection liquide, compte tenu que le nombre de Reynolds est toujours inférieur à 1000, nous pouvons considérer que l'écoulement liquide est un écoulement de Poiseuille plan laminaire,

$$u(y) = \frac{3 U_l}{2 a^2} (a^2 - y^2) \quad (7.1)$$

où a est la demi épaisseur de la nappe liquide et U_l la vitesse moyenne débitante, elle peut varier de $0.5 m.s^{-1}$ à $5 m.s^{-1}$.

En plus de l'injection liquide, un écoulement d'air rapide est généré de part et d'autre de la fente afin de cisailer la nappe liquide. L'air s'écoule sur les parois externes de la veine d'injection

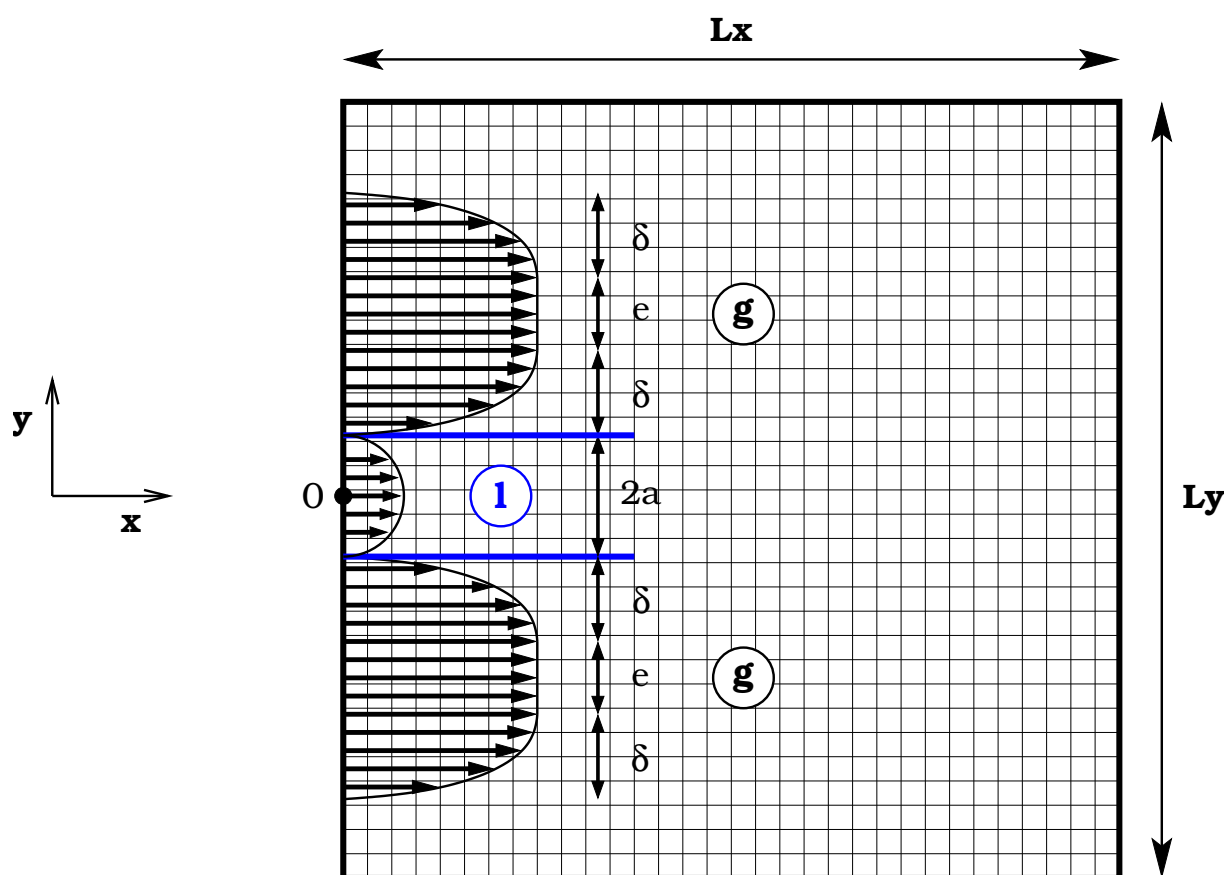


FIG. 7.1 – Configuration des simulations. Profil de vitesse utilisé et grandeurs associées.

liquide, il se forme des couches limites dans le gaz par frottement sur celles-ci. Ensuite, il existe deux types de configuration : l'une où l'écoulement d'air est confiné dans une veine d'injection tout comme le liquide et dont la hauteur peut varier dans de larges proportions en fonction des choix de l'expérimentateur, et une autre où l'air ne fait que s'écouler autour de la veine d'injection de liquide comme sur la Fig.(7.2). Or, cela ne change pas globalement les bases des mécanismes de désintégration, l'instabilité se manifestant à priori dès la sortie de l'injecteur. Le paramètre fondamental est en fait l'épaisseur de la couche limite dans le gaz qui rencontre la surface de la nappe liquide. Elle dépend plus de la longueur de la veine que de la hauteur. La nuance entre les deux configurations s'exprime plus en aval de l'écoulement lorsque les effets diffusifs sur le profil de vitesse d'air se font sentir. Nous pourrions en conclusion très bien considérer l'une ou l'autre des configurations. Cependant, il est peut-être préférable de se rapprocher de la réalité industrielle où l'air est confiné dans une veine dont la hauteur est de l'ordre de l'épaisseur de la nappe.

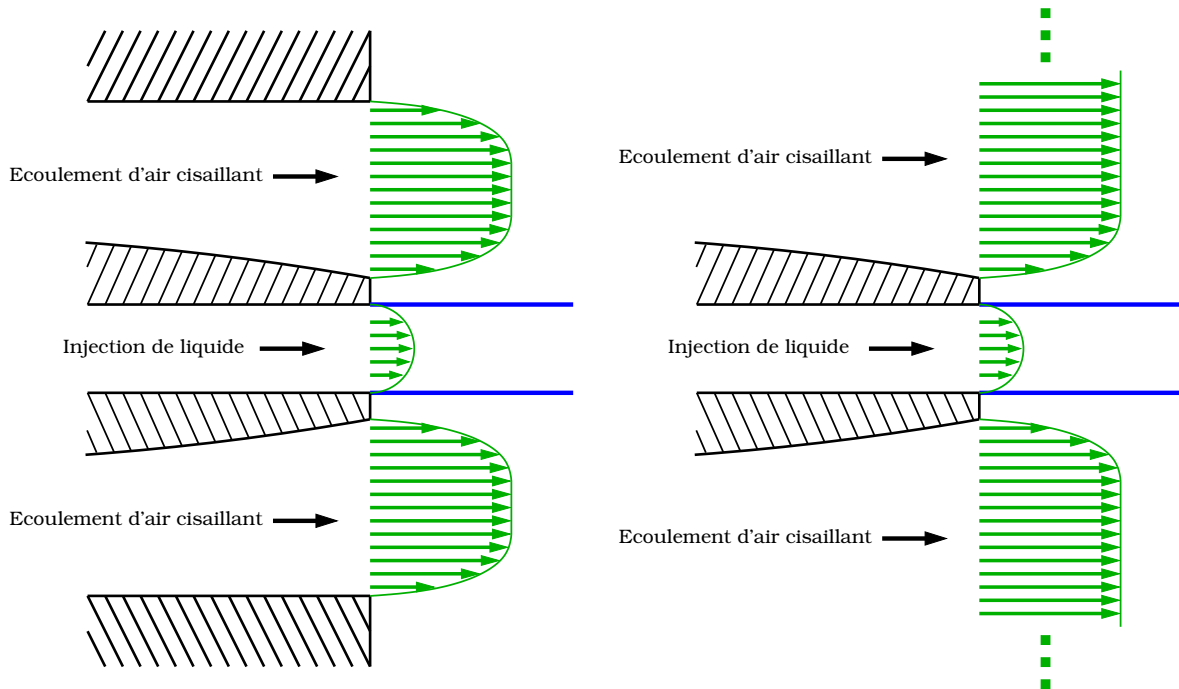


FIG. 7.2 – Les deux types de configuration expérimentale pour l'écoulement gazeux. L'une à gauche où l'écoulement d'air est confiné dans une veine d'injection tout comme le liquide, et une autre à droite où l'air ne fait que s'écouler autour de la veine d'injection de liquide.

Les diverses et nombreuses expériences réalisées sur la configuration de la nappe liquide n'avaient pas pour la plupart pour but d'étudier l'impact de la couche limite dans le gaz mais plutôt l'impact de paramètres que nous pouvons qualifier de globaux comme les vitesses débitantes ou la tension de surface. Il est donc trop rare de trouver dans la littérature sur le sujet des mesures des profils de vitesse de gaz à la sortie de la veine d'injection, d'autant plus que la mesure est délicate. Or, dans une veine dont la hauteur est de l'ordre de l'épaisseur de la nappe, il est possible que les profils obtenus évoluent d'un écoulement quasiment de type Poiseuille pour de petites vitesses vers un écoulement bouchon avec deux couches limites sur les parois internes et externes pour des vitesses plus importantes [52]. Le choix qui a été fait au final est de construire

un profil de vitesse de type bouchon grâce à la solution polynomiale de Polhausen des équations de Prandtl afin que celui-ci soit souple dans sa paramétrisation et un minimum réaliste. Pour une épaisseur de couche limite donnée δ et une vitesse de gaz à l'infini U_g , le profil de vitesse dans la couche limite s'écrit,

$$\frac{u(y)}{U_g} = 2\eta - 2\eta^3 + \eta^4, \quad \eta = \frac{y}{\delta} \quad (7.2)$$

si l'on considère une plaque plane située en $y = 0$. En considérant une épaisseur e entre les deux couches limites, on obtient le profil de vitesse représenté sur la Fig.(7.1).

Nous pouvons remarquer que nous n'avons absolument pas pris en compte l'aspect turbulent de l'écoulement gazeux en adéquation avec des études expérimentales qui montrent que la turbulence ne change en rien les bases du mécanisme de désintégration dans la phase initiale du processus [9, 52].

7.2.3 Les paramètres physiques

Restrictions liées au solveur numérique

Cette configuration de calcul n'est pas sans représenter des difficultés numériques, et ceci pour plusieurs raisons. L'idéal serait de considérer un écoulement eau/air mais le solveur numérique en l'état ne nous permet pas de le faire et nous allons expliquer pourquoi.

Tout d'abord, les vitesses considérées dans des conditions expérimentales sont importantes. Les vitesses de cisaillement de gaz peuvent aller de 20 m.s^{-1} à 80 m.s^{-1} , correspondant à des nombres de Reynolds pouvant évoluer de 500 à 3000. Nous savons qu'un nombre de Reynolds élevé induit une complexité de l'écoulement de part la prépondérance du phénomène convectif non linéaire, d'autant plus que notre code est purement DNS, c'est à dire sans modèle de la turbulence. Cette complexité engendre la nécessité d'augmenter la taille du maillage afin d'être suffisamment résolu pour atteindre la convergence. Cette contrainte est doublée du fait que nous devons transporter une interface par le champ de vitesse local. Un transport convergent nécessite une résolution du champ de vitesse encore supérieure proche de l'interface en comparaison d'une simulation monophasique. Afin d'obtenir des temps de calcul raisonnables dans la pratique, nous devons absolument considérer des nombres de Reynolds plus faibles que dans la réalité expérimentale.

De plus, si les simulations spatiales nous apprennent bien plus de choses que les simulations temporelles, elles sont bien plus dures à mettre en oeuvre en raison du type de condition aux limites considéré sur les frontières du domaine de calcul. La condition à la limite de type sortante utilisée dans ce mémoire ne nous permet pas d'utiliser des nombres de Reynolds élevés car il n'est pas rare que notre solveur numérique diverge dans une telle situation. La mauvaise convection sur la frontière du domaine des vortex provoque des rétroactions nocives sur l'écoulement suffisamment conséquentes pour détériorer la simulation dans des proportions inacceptables.

Une autre contrainte est la difficulté de prendre en compte un saut de densité élevé. La considération d'un saut typiquement de l'ordre de 1000 comme il serait le cas avec un écoulement

eau/air dans des conditions atmosphériques induit une dynamique de l'instabilité interfaciale plus complexe et met à mal la stabilité du code de calcul. Les déformations de l'interface sont très larges et il devient difficile de conserver la masse avec notre méthode Level-Set. On peut même observer dans certains cas des instabilités numériques qui peuvent faire diverger le code de calcul dont il est difficile de comprendre l'origine tant il peut exister différentes raisons.

Paramètres finaux retenus

Au final, en tenant compte des restrictions que nous impose le solveur numérique, les paramètres qui ont été retenus sont les suivants,

$$\begin{aligned}
 \rho_g &= 12.26 \text{ kg.m}^{-3} \\
 \mu_g &= 1.78 \cdot 10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1} \\
 \rho_l &= 1000 \text{ kg.m}^{-3} \\
 \mu_l &= 1.137 \cdot 10^{-2} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1} \\
 \sigma &= 7.28 \cdot 10^{-2} \text{ N.m}^{-1} \\
 U_l &= 2 \text{ m.s}^{-1} \\
 U_g &= 30 \text{ m.s}^{-1} \\
 2a &= 300 \text{ }\mu\text{m} \\
 \delta &= 300 \text{ }\mu\text{m} \\
 e &= 150 \text{ }\mu\text{m} \\
 L_x &= 20 \text{ }a \\
 L_y &= 20 \text{ }a
 \end{aligned} \tag{7.3}$$

Ces paramètres donnent une simulation qualifiée de référence dont nous commentons en profondeur le résultat dans la section suivante.

La densité dans le gaz est équivalente à considérer de l'air pressurisé à 10 bars. En comparaison avec des conditions atmosphériques, la quantité de mouvement du gaz est plus élevée impliquant une manifestation plus rapide de l'oscillation globale et donc une longueur de rupture de la nappe plus courte. Le domaine de calcul nécessaire sera plus court, représentant un gain en temps de calcul. Étant donné la restriction imposée par le solveur numérique sur le saut de densité, nous avons au final un double intérêt numérique à considérer de l'air pressurisé à 10 bars alors que ce n'est aucunement aberrant.

Les viscosités dynamiques ont été largement surestimées afin d'abaisser les nombres de Reynolds et plus particulièrement dans le gaz. Nous nous éloignons par conséquent de la réalité expérimentale. Nous sommes dans une situation de similitude quant aux analyses dimensionnelles qui seront faites par la suite.

Il a été dégagé dans la littérature scientifique des nombres adimensionnels apparaissant comme pertinents pour caractériser la désintégration assistée d'une nappe liquide. Nous les avons résumé ci-dessous avec les valeurs correspondantes aux paramètres choisis Eq.(7.3),

$$\begin{aligned}
\bullet \quad R_{e_g} &= \frac{\rho_g U_g \delta}{\mu_g} = 62 && \text{Nombre de Reynolds dans le gaz} \\
\bullet \quad R_{e_l} &= \frac{\rho_l U_l a}{\mu_l} = 26 && \text{Nombre de Reynolds dans le liquide} \\
\bullet \quad W_e &= \frac{\rho_g (U_g - U_l)^2 a}{\sigma} = 20 && \text{Nombre de Weber aérodynamique} \\
\bullet \quad M &= \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l U_l^2} = 2.76 && \text{Rapport des flux de quantité de mouvement}
\end{aligned}
\tag{7.4}$$

Si comme souhaité les nombres de Reynolds sont faibles, le nombre de Weber aérodynamique et le rapport des flux de quantité de mouvement sont à priori suffisamment importants pour assurer la désintégration de la nappe liquide si on se fie aux études expérimentales.

7.3 Simulation référence : premières observations

Nous allons évoquer lors de ce paragraphe la simulation bidimensionnelle spatiale obtenue avec le code de calcul développé en utilisant les paramètres Eq.(7.3) et la configuration Fig.(7.1). C'est notre simulation référence qui comme nous allons le voir met en lumière l'oscillation globale de la nappe liquide. Le maillage utilisé est de 512^2 , il nous a permis de valider la convergence de la simulation car la simulation obtenue sur le maillage inférieur de 256^2 donne le même résultat à quelques négligeables différences près.

7.3.1 Déstabilisation initiale de la nappe

Afin d'initialiser notre simulation, il existe deux possibilités : une première où la nappe traverse la longueur du domaine de calcul accompagnée du même profil de vitesse d'injection défini précédemment, et une seconde où le domaine de calcul est vierge de toute initialisation, l'injection se faisant au fur et à mesure du calcul grâce à la condition entrante appliquée sur la paroi gauche. Les deux possibilités donnent cependant le même résultat : après une phase transitoire de déstabilisation progressive de la nappe, on trouve un régime établi d'oscillation de la nappe en amplitude et en fréquence. Il est tout de même préférable d'utiliser la seconde solution car la phase transitoire y est plus courte, ce qui représente un gain de temps en calcul. L'oscillation est similaire au battement d'un drapeau au vent. En comparant avec des résultats expérimentaux, nous avons la certitude d'avoir bien affaire à l'oscillation globale de la nappe liquide. Il n'existe même pas une quelconque modulation, la nappe et le champ de vitesse sont parfaitement confondus d'une période à l'autre.

La déstabilisation de la nappe commence en aval de l'injection au niveau de la paroi droite. La nappe commence à osciller avec une longueur d'onde similaire à la longueur finale. A la

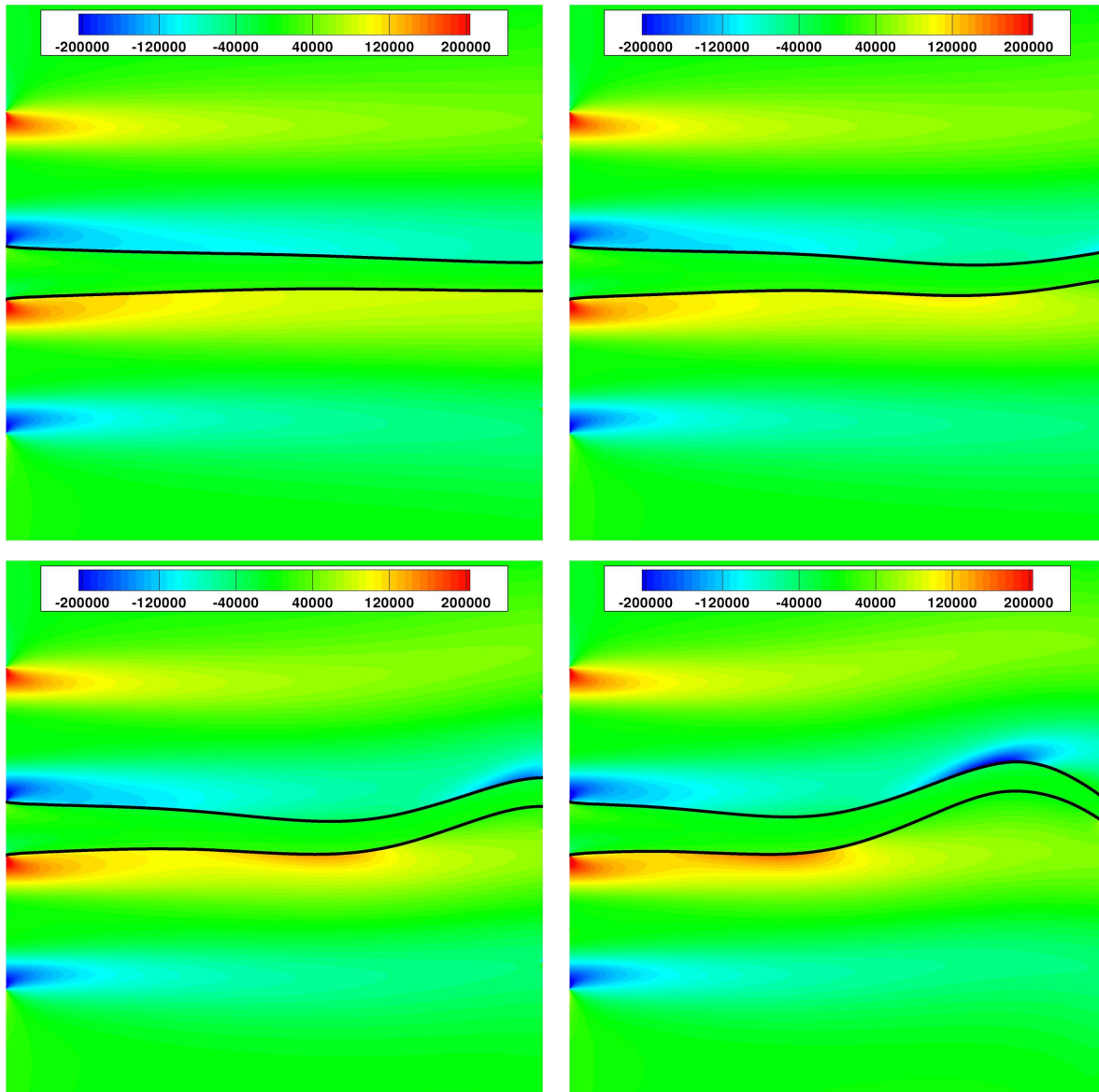


FIG. 7.3 – Déformations initiales progressives de la nappe lors de la phase transitoire et champ de vorticité associé. Le pas de temps entre les images est constant.

vision du champ de vorticit , les petits mouvements initiaux cr ent une d stabilisation rapide du champ de vitesse gazeux. Il est tr s clairement observ  par la suite une interaction forte entre les mouvements de la nappe et l' coulement gazeux rapide. C'est cette interaction qui r sulte au final d'un r gime  tabli d'oscillation. Le profil de vitesse est nettement modifi  par les mouvements verticaux de la nappe, et de plus en plus au fur et   mesure de la croissance en amplitude de l'oscillation de la nappe.

Un fait num rique remarquable est que nous n'appliquons strictement aucune perturbation   la nappe ou au profil de vitesse au niveau de l'injection. L'instabilit  est si forte que de simples erreurs num riques doivent suffire pour obtenir la croissance d'un mode sinueux   la surface de la nappe. En effet, le profil de vitesse tel que nous l'avons d fini est en fait une aberration physique dans le sens o  l' quilibre des forces de cisaillement visqueuses n'est pas respect    la surface de la nappe. Les forces de cisaillement visqueuses qu'exercent la gaz et le liquide   la surface de la nappe peuvent se calculer de la fa on suivante,

$$\tau_p = \begin{cases} \mu_g \frac{d u}{\partial y} = \frac{2\mu_g U_g}{\delta} = 356 & \text{dans le gaz} \\ \mu_l \frac{d u}{\partial y} = \frac{3\mu_l U_l}{a} = 455 & \text{dans le liquide} \end{cases} \quad (7.5)$$

Or comme notre code de calcul a  t  construit tel que cet  quilibre soit strictement respect  gr ce   la m thode Ghost-Fluid, c'est tr s certainement l'explication de la non n cessit  de perturber au niveau de l'injection pour obtenir les oscillations de la nappe. Notre code de calcul cherche en quelque sorte   rattraper ce d s quilibre. Si la nappe restait plane, la diffusion par viscosit  du profil de vitesse pourrait suffire mais elle n'est pas assez rapide pour emp cher les oscillations de la nappe (nous avons obtenu des simulations o  la nappe reste plane si l'on ne perturbe pas mais avec d'autres param tres). Mais au del  de ce fait num rique expliquant la perturbation initiale, c'est bien  videmment la croissance d'une instabilit  de type Kelvin-Helmholtz qui par la suite est responsable de la croissance des oscillations de la nappe.

Il est r guli rement avanc  dans la litt rature un possible m canisme pouvant  tre responsable de la d stabilisation initiale de la nappe pour  tre amplifi  par la suite. C'est la cr ation de vorticit  juste en aval de l'injecteur par d tachement de la couche limite gazeuse derri re la hauteur qui existe exp rimentalement entre les  coulements gazeux et liquide. La surface de s paration n'est en effet jamais nulle   cause des tol rances de fabrication des injecteurs. Encore une fois, notre champ de vitesse consid r  n'est pas vraiment r aliste. Toutefois, la manifestation de l'oscillation globale de la nappe liquide sans consid ration d'une quelconque distance entre les deux couches limites qui se forment de part et d'autre de l'interface par frottement sur les parois de l'injecteur montre par la voie num rique que le m canisme de d tachement de la couche limite gazeuse n'est en aucun cas responsable de l'oscillation globale de la nappe liquide. Cette conclusion va dans le sens des explications fournies par Lozano [46] sur ce cas de figure. Il montre que les nombres de Strouhal associ s aux ph nom nes d'oscillation globale et de cr ation de vortex derri re un cylindre ou une marche descendante en  tant soucieux des bonnes longueurs r f rences ne sont pas du m me ordre. Il est  galement conclu que c'est plut t l'interaction entre les mouvements de la nappe et les couches limites gazeuses qui est responsable de l'oscillation

globale dont la fréquence est plus petite en comparaison des phénomènes de détachement d'une couche limite. C'est ce que nous allons nous attacher à montrer dans le paragraphe suivant.

7.3.2 Dynamique de l'écoulement en régime établi

Nous allons décrire dans ce paragraphe la dynamique du gaz en interaction avec les mouvements de la nappe afin de révéler par la simulation le mécanisme responsable de l'oscillation globale, régime permanent obtenu après une phase transitoire de déstabilisation que nous venons d'exposer.

Afin d'appuyer visuellement les explications qui vont être fournies dans ce paragraphe, il est donné les déformations de l'interface obtenues associées au champ de vitesse, au champ de pression et au champ de vorticit  sur les figures (7.10), (7.12) et (7.11) pour 4 temps diff rents.

D formations de la nappe

Nous allons tout d'abord nous int resser aux d formations de la nappe. Ces d formations sont comme attendu largement non lin aires et r sultent d'une d formation rapide et profonde du profil de vitesse. Avant de discuter de l'oscillation globale obtenue, nous pouvons souligner deux ph nom nes.

Le premier est l'affinement rapide en  paisseur de la nappe liquide. L'explication est tr s simple : le profil de vitesse dans le liquide est modifi  par diffusion visqueuse. Or comme les  paisseurs des couches limites dans le liquide et le gaz sont du m me ordre et par contre que les vitesses sont plus importantes dans le gaz, la diffusion du profil a tendance   acc l rer le liquide tout en respectant la condition d' quilibre des forces de cisaillement visqueuses   l'interface Fig.(7.4). Il s'ensuit une diminution de l' paisseur de la nappe afin de respecter le d bit massique. Une petite  tude rapide des profondeurs croissantes de diffusion par la loi $\sqrt{\nu t}$ confirme toute l'importance du ph nom ne avec les grandeurs utilis es pour la simulation. Il est d'autant plus rapide pour notre simulation vis   vis de la r alit  exp rimentale que nous avons surestim  les viscosit s cin matiques. Elles sont d'ailleurs si proches ($\nu_g = 1.45 \cdot 10^{-4}$ et $\nu_l = 1.137 \cdot 10^{-5}$) que la pr sence du liquide et de l'interface ne change pas grand chose au ph nom ne en comparaison de la version monophasique si ce n'est une diffusion un peu moins rapide dans le liquide. L'affinement de l' paisseur de la nappe est bien uniquement li    la nature du profil de vitesse. L'intuition de L.Raynal [77] et de P.Marmottant [52] quant   cette rencontre des couches limites de part et d'autre de l'interface Fig.(7.5), afin de consid rer un profil de vitesse r aliste pour r aliser une  tude de stabilit  lin aire, est tout   fait coh rente vis   vis de la simulation r alis e ici.

Le second ph nom ne est l'accumulation de liquide aux sommets des oscillations de la nappe. L'explication tient aux mouvements de la nappe qui ont tendance   d former le profil de vitesse   cause de son importante inertie. Le profil de vitesse au voisinage de l'interface n'est rapidement plus horizontal et a pour effet de cr er un flux massique local dirig  vers les sommets des oscillations. Au final, en additionnant ce ph nom ne   celui de l'affinement de l' paisseur de la nappe par diffusion visqueuse, nous obtenons des amas de liquide aux sommets des oscillations reli s par de plus en plus fines nappes de liquide au fur et   mesure de l'avancement de l' coulement. A la vision des photographies exp rimentales, il semble grossi rement qu'on retrouve les m mes d formations de la nappe et en particulier cette accumulation de liquide aux sommets des vagues de la nappe ce qui confirmerait la pertinence de la simulation malgr  les param tres utilis s.

Il est   noter que la brisure capillaire de la nappe intervient souvent juste derri re l'amas de liquide. Si nous ne l'observons pas ici pour notre simulation r f rence, c'est bien le cas lorsque

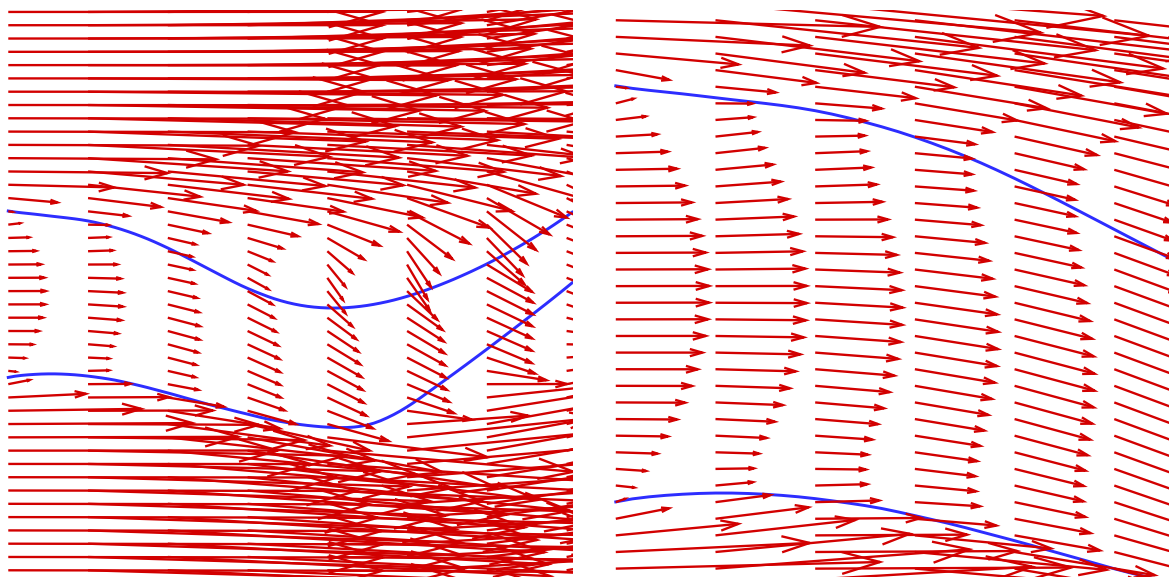


FIG. 7.4 – Diffusion du profil de vitesse à l'interface pour un temps donné.

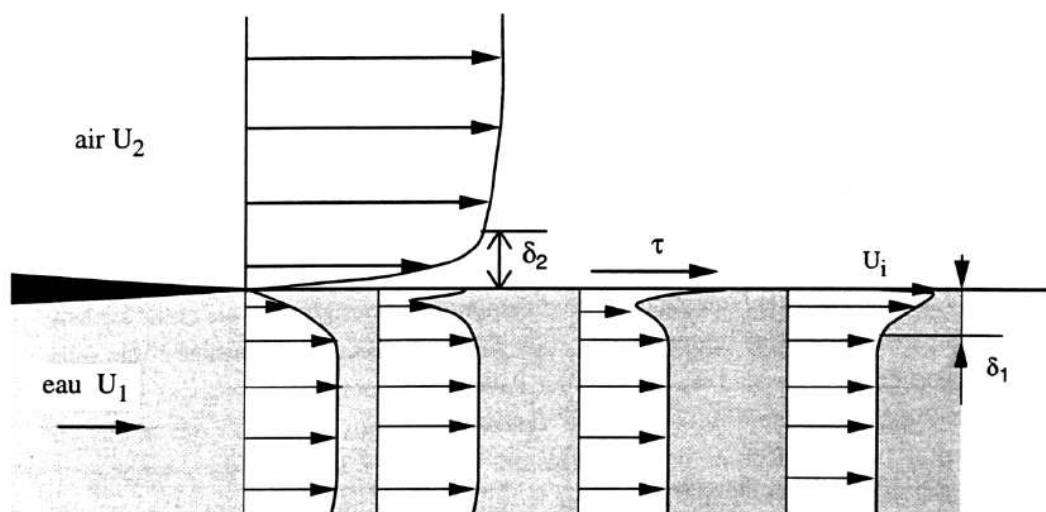


FIG. 7.5 – Rencontre des couches limites d'après L.Raynal [77].

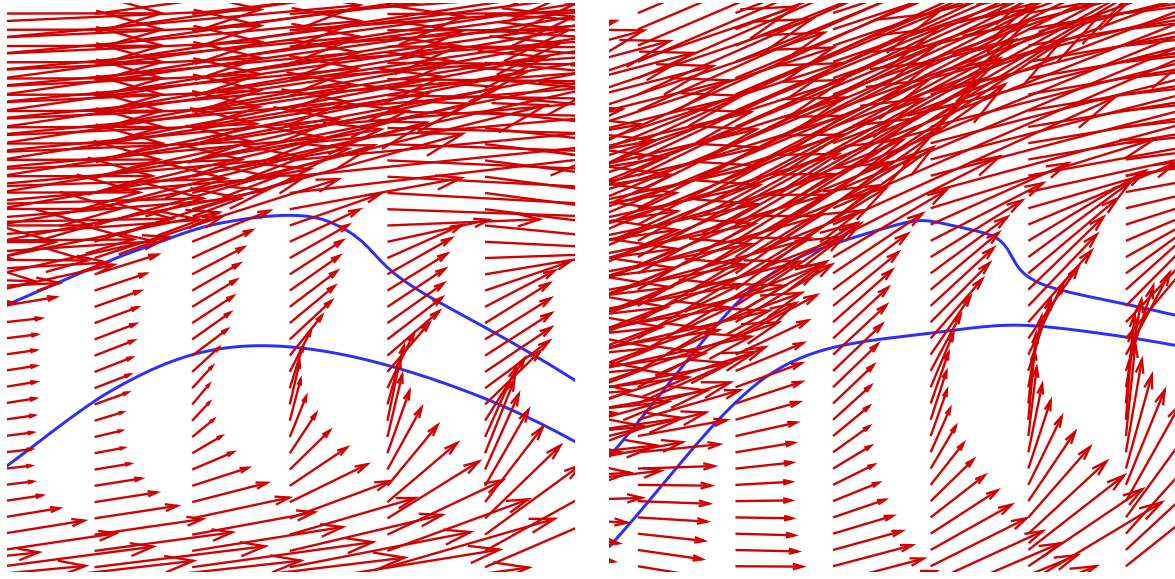


FIG. 7.6 – Formation d’amas de liquide aux maximums d’amplitude de l’oscillation globale par création d’un flux massique local. Profil de vitesse dans l’amas pour deux instants différents.

nous utilisons d’autres paramètres. Nous obtenons ainsi au final un lâché intermittent de paquets de liquide tantôt vers le bas, tantôt vers le haut, une fois sur deux. Si ces paquets de liquide subissent par la suite une atomisation qualifiée de secondaire, ce lâché intermittent d’amas de liquide n’est pas propice à une atomisation de qualité mais on ne peut pas à priori y faire grand chose.

Interaction entre les mouvements de la nappe et l’écoulement gazeux

Nous venons de décrire deux conséquences locales du profil de vitesse cisailant sur les déformations de la nappe liquide. Toutefois, nous n’avons toujours pas mis en lumière la dynamique de l’écoulement gazeux en interaction avec l’oscillation globale de la nappe. En comparaison des mécanismes de diffusion visqueuse et de formation d’amas de liquide aux sommets des vagues, nous allons voir que l’interaction de l’écoulement gazeux avec les mouvements de la nappe est un phénomène beaucoup plus global.

Dès que la nappe commence à osciller, elle se comporte comme un obstacle solide pour l’écoulement gazeux en raison de son inertie. Nous pouvons l’observer aisément à la vision des champs de vitesse, de vorticit  et de pression. Les couches limites gazeuses ont tendance à suivre les déplacements verticaux de la nappe. En conséquence, de la vorticit  s’accumule à proximité des maximums d’amplitude de la nappe liquide pour finalement créer en aval des structures tourbillonnaires dans les creux. Ce phénomène est similaire au décollement d’une couche limite en aval d’une marche descendante, phénomène que l’on maîtrise très bien aujourd’hui, surtout dans le cas laminaire. Toutefois, il est à souligner que la nappe liquide ne se comporte pas tout à fait comme un solide parfait et que les couches limites gazeuses sont largement modifi es avant de décoller en aval des maximums d’amplitude de la nappe, compliquant ainsi un dimensionnement du problème vis à vis des résultats déjà connus à ce jour sur la marche descendante.

Les structures tourbillonnaires g n r es par l’ coulement gazeux en aval des maximums d’am-

plitude de la nappe est un mécanisme qui contribue de façon absolument non négligeable à l'oscillation globale de la nappe liquide. Il existe une interaction très forte entre les mouvements de la nappe et l'écoulement gazeux. Si les mouvements initiaux d'oscillation de la nappe sont responsables de la création de structures tourbillonnaires, l'écoulement gazeux obtenu exerce en retour des forces sur la nappe liquide amplifiant les oscillations jusqu'à ce qu'un équilibre soit trouvé. En effet, le décollement de la couche limite dans les creux de la nappe crée des zones de sous-pression relative à celle de l'autre côté de l'interface participant à faire osciller la nappe. Ainsi, aucun des deux phénomènes n'est prépondérant sur l'autre. Si nous pouvons faire une analogie avec les couches de mélange monophasique quant à la dynamique de l'écoulement gazeux, le dimensionnement du problème et en particulier de la fréquence obtenue est bien différent du fait de la présence de la nappe liquide.

Nous pourrions nous interroger sur la véracité du phénomène quant à la réalité expérimentale. Or, Lozano et al. [46] montrent par l'expérience exactement le même phénomène. Grâce à une technique de fluorescence laser, ils ont pu étudier cette dynamique de l'écoulement gazeux en interaction avec l'oscillation de la nappe comme nous pouvons l'observer sur la Fig.(7.7). Notre simulation ne fait ainsi que conforter ce résultat expérimental et inversement valide le comportement du code de calcul.

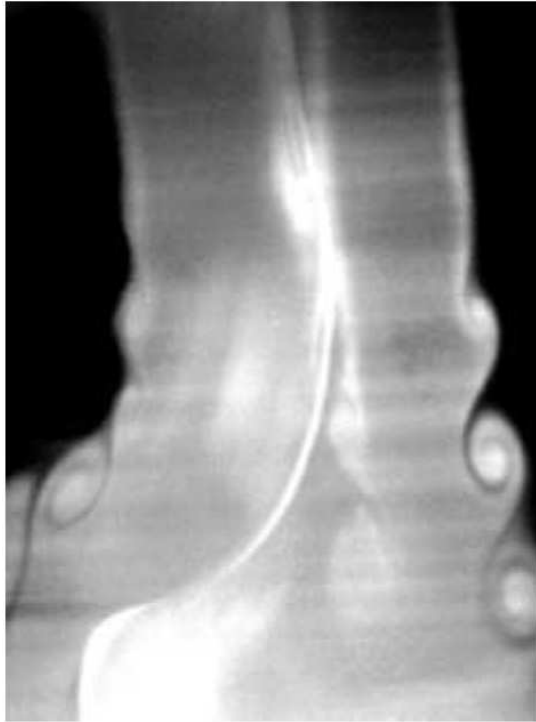


FIG. 7.7 – Visualisation expérimentale du décollement de la couche limite gazeuse en aval du maximum d'amplitude de la nappe liquide (à la droite de la nappe liquide, la trace blanche au milieu de la photographie) issue de l'article de Lozano et al. [46].

7.3.3 Amplitude et fréquence de l'oscillation globale

Tout comme nous le ferions pour des expériences, nous devons nous donner des outils afin de mesurer le plus précisément possible un bon nombre de quantités locales et globales. En

particulier, nous devons soigner la mesure de la fréquence de l'oscillation globale, un paramètre fondamental. Mais il existe d'autres paramètres intéressants à mesurer comme le taux de croissance des oscillations, la longueur d'onde, la célérité des ondes ou encore la vitesse à l'interface. Une étude détaillée de l'influence des paramètres amont sur ces quantités, dont principalement les vitesses débitantes, permettrait de mieux appréhender la compréhension des mécanismes d'atomisation.

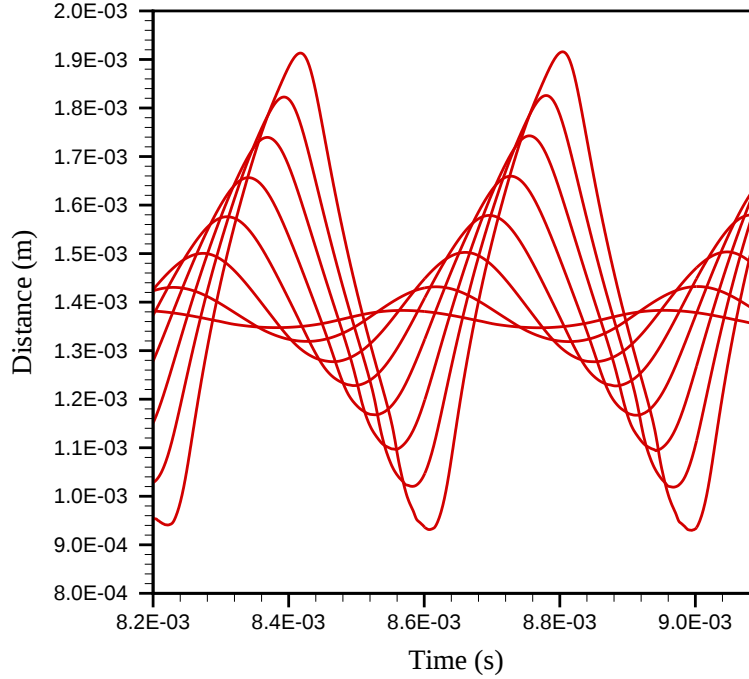


FIG. 7.8 – Signaux issus de la mesure de la distance minimale entre la paroi haute du domaine de calcul et l'interface pour toutes les demi-épaisseurs de nappe ($x/a = 1, 2, 3, \dots$).

Afin de récolter un maximum d'informations et dans de bonnes conditions, nous avons trouvé un excellent moyen en réalisant la mesure à chaque pas de temps des distances minimales entre les parois haute et basse du domaine de calcul et l'interface, et ceci pour toutes les demi-épaisseurs de nappe dans la direction de l'écoulement à partir de la paroi gauche ($x/a = 1, 2, 3, \dots$). Le résultat graphique correspondant à notre simulation référence est donné Fig.(7.8). A la vision de ce graphe, nous comprenons mieux tout l'intérêt de la mesure. Nous pouvons en effet en dégager aisément les mesures précises de la fréquence et du taux de croissance de l'oscillation globale de la nappe liquide. Nous pourrions également tout à fait en tirer les mesures des longueurs d'onde de l'oscillation globale et des vitesses à l'interface même si celles-ci seraient moins précises. Si nous employons le pluriel dans ce cas, c'est que ces grandeurs sont de surcroît évolutives au sein d'une période, et dans des proportions importantes. Il est par conséquent délicat d'en tirer quelque chose de concret. C'est pourquoi nous nous concentrerons uniquement dans ce mémoire sur la fréquence et le taux de croissance de l'oscillation globale.

Nous pouvons remarquer que les oscillations sont approximativement sinusoïdales pour une distance x plus petite que deux épaisseurs de nappe. Par contre, elles ne le sont plus pour des

distances supérieures. Nous ne pouvons cependant rien tirer de concret de cette constatation d'autant que les distorsions sont faibles.

Ensuite, un fait remarquable est l'inexistence d'une quelconque modulation des signaux par une basse fréquence. Les déformations de la nappe sont quasi superposées d'une période à l'autre. La Fig.(7.9) montre ce phénomène puisqu'elle représente la superposition des déformations de l'interface au cours du temps. Nous pouvons également clairement observer sur cette figure l'enveloppe de croissance spatiale de l'oscillation globale.

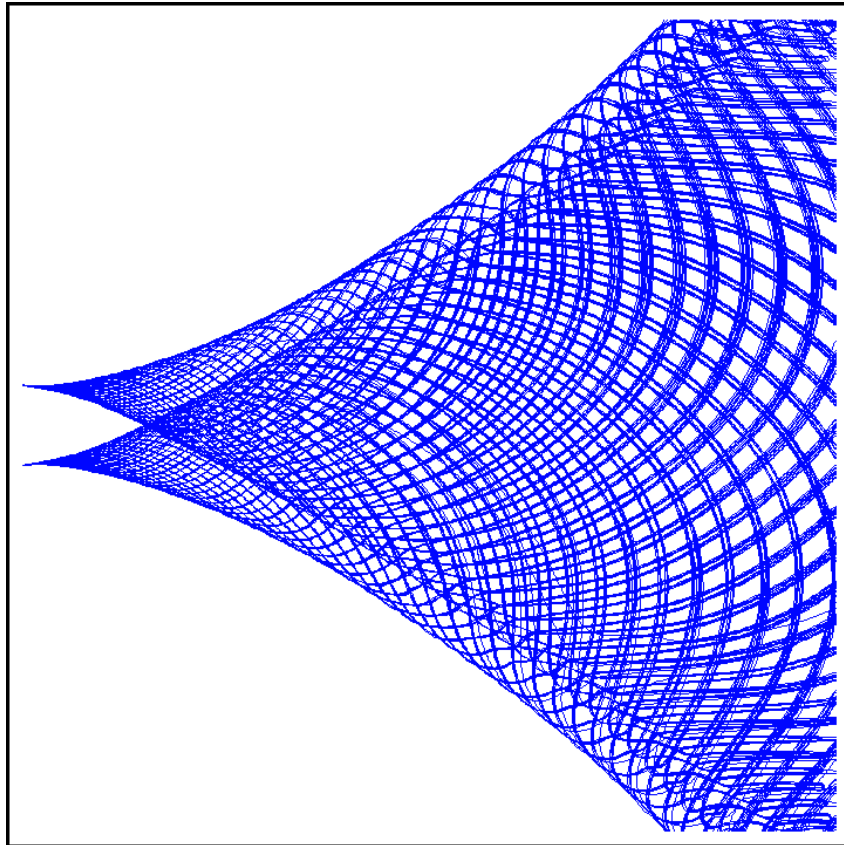


FIG. 7.9 – Superposition des déformations de la nappe au cours du temps (Maillage 512^2).

L'analyse spectrale par une transformée de Fourier discrète appliquée séparément à chacun des signaux indique que la fréquence du fondamental est identique à l'Hertz près. La fréquence de l'oscillation globale ainsi mesurée pour notre simulation référence est de 2571 Hz . Cette fréquence est bien supérieure à celles obtenues expérimentalement dans des conditions de laboratoire et pour des vitesses débitantes identiques tout comme le taux de croissance de l'amplitude Fig.(7.9). Ce résultat est tout à fait logique dans le sens où nous avons considéré de l'air pressurisé à 10 bars ainsi qu'une épaisseur de la couche limite gazeuse relativement faible d'où une force de cisaillement importante d'autant que les viscosités dynamiques ont été surestimées.

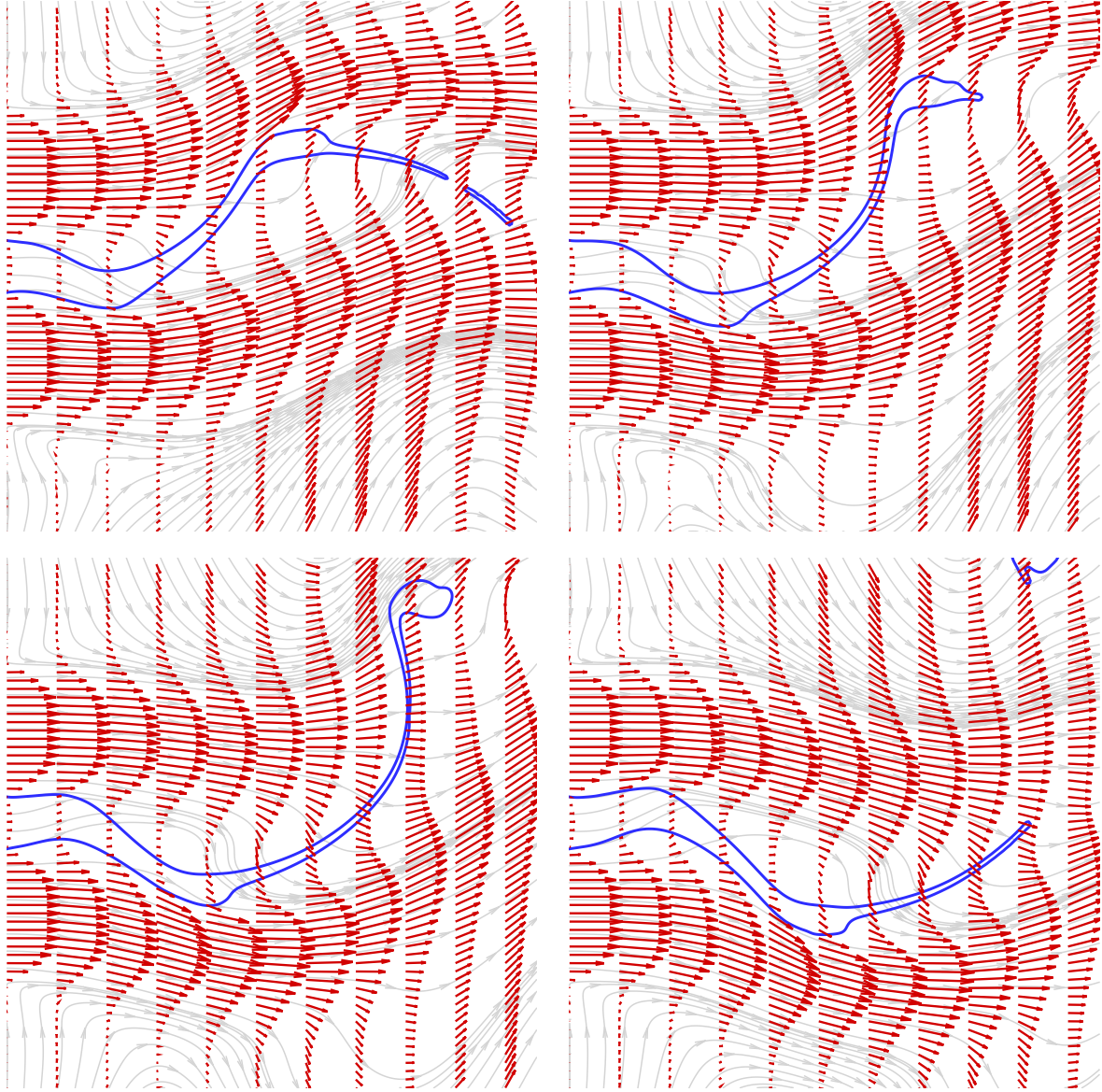


FIG. 7.10 – Simulation spatiale bidimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide avec la configuration Fig.(7.1) et les paramètres Eq.(7.3). Déformations de l'interface et champ de vitesse pour 4 temps différents au sein d'une période d'oscillation globale (Maillage 256^2).

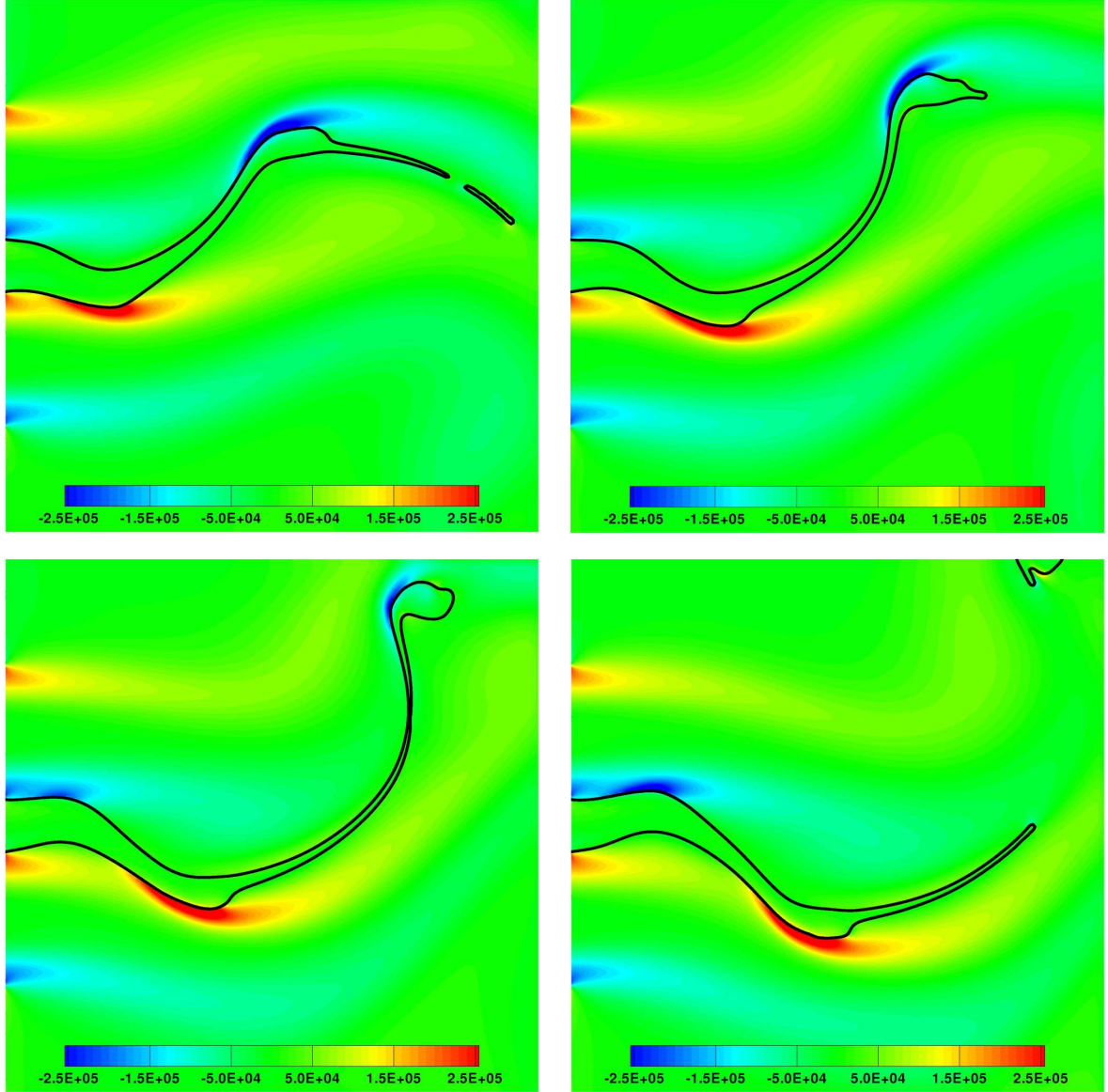


FIG. 7.11 – Simulation spatiale bidimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide avec la configuration Fig.(7.1) et les paramètres Eq.(7.3). Déformations de l'interface et champ de vorticit  pour 4 temps diff rents au sein d'une p riode d'oscillation globale (Maillage 256^2).

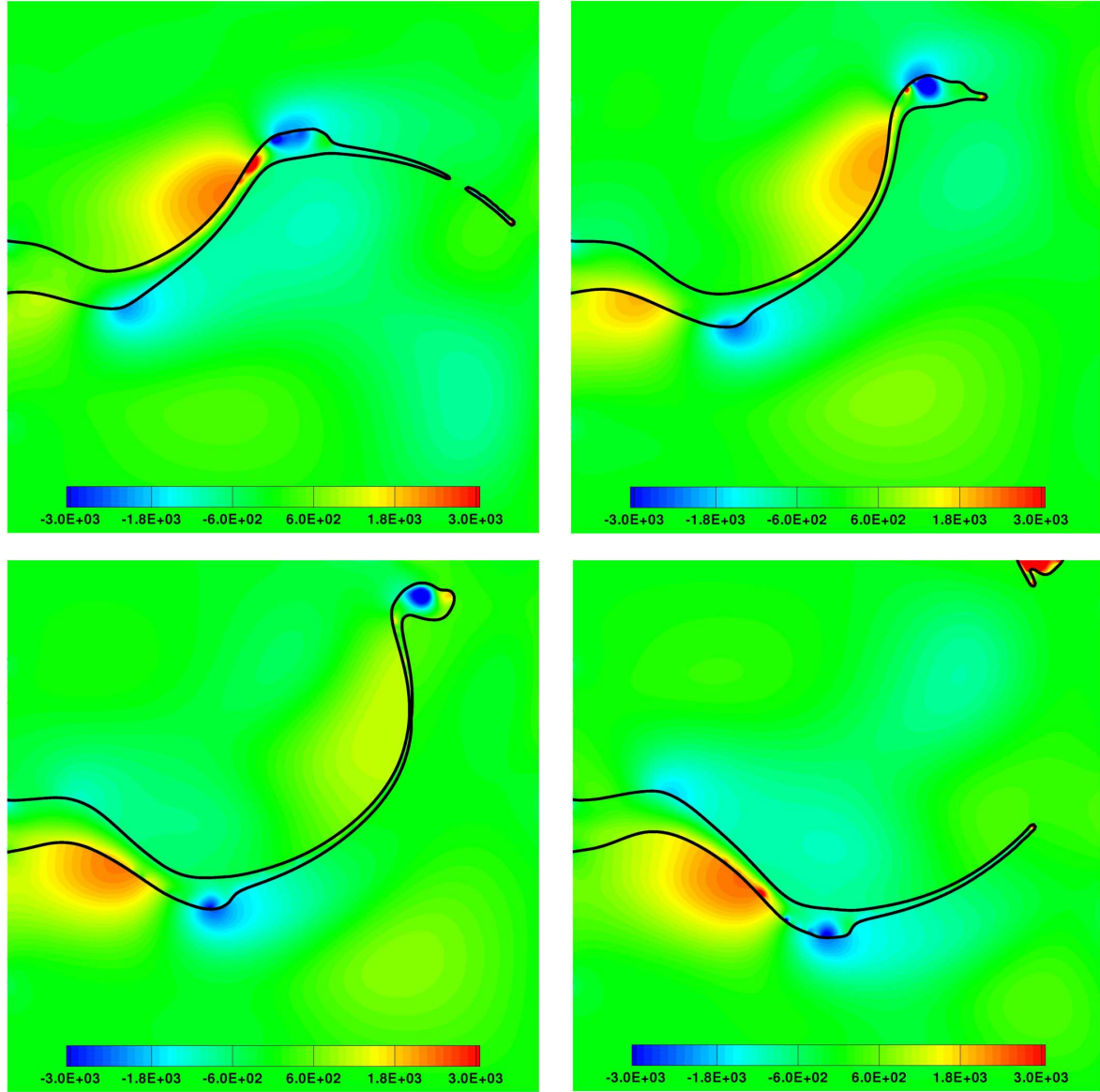


FIG. 7.12 – Simulation spatiale bidimensionnelle de la désintégration assistée d’une nappe liquide avec la configuration Fig.(7.1) et les paramètres Eq.(7.3). Déformations de l’interface et champ de pression pour 4 temps différents au sein d’une période d’oscillation globale (Maillage 256^2).

7.4 Influence des paramètres amont

Nous allons exploiter dans ce chapitre tout l'avantage de la simulation numérique pour réaliser aisément une étude approfondie de l'impact des paramètres amont sur la fréquence de l'oscillation globale de la nappe liquide tels que les vitesses débitantes liquide et gazeuse, l'épaisseur de la nappe liquide ou l'épaisseur de la couche limite gazeuse. Nous avons en effet une liberté quasi totale sur le choix de ces paramètres pour une simulation donnée, un avantage manifeste.

En particulier, nous pouvons modifier à volonté l'épaisseur de la couche limite dans le gaz, un paramètre qui à notre connaissance n'a pas fait l'objet d'une étude expérimentale approfondie car il est difficile de pourvoir contrôler ce paramètre sur un banc d'essai. Nous verrons par contre qu'il est plus délicat pour nos simulations de modifier l'épaisseur de la nappe liquide pour des raisons de convergence mais nous avons tout de même obtenu des résultats viables.

L'objectif de l'étude paramétrique est double. Le premier est de retrouver par la simulation les résultats expérimentaux obtenus à ce jour afin de valider le comportement du code de calcul. Le second est d'incorporer l'influence avérée de l'épaisseur de la couche limite gazeuse dans l'expression de la fréquence réduite f^* qui à ce jour ne prend en compte que les vitesses débitantes et l'épaisseur de la nappe liquide Eq.(1).

Tous les résultats présentés ici sont issus de simulations réalisées avec un maillage 256^2 . Nous supposons avoir atteint la convergence du code de calcul pour l'ensemble des simulations puisque la convergence a déjà été établie pour notre simulation référence et que le résultat de chacune des simulations n'est pas bien différent de la simulation référence. Soulignons que de telles simulations sont déjà gourmandes en temps de calcul. Typiquement, une simulation coûte approximativement quelques jours de calcul sur 4 processeurs.

7.4.1 Les vitesses débitantes

Il est connu depuis maintenant quelques décennies que la vitesse débitante gazeuse est le paramètre déterminant dans les mécanismes de désintégration assistée d'un jet liquide, ou plus précisément le ratio des vitesses débitantes gazeuse et liquide. En toute logique, les expérimentateurs se sont orientés dans un premier temps sur une étude détaillée de leur influence. Il a été trouvé en particulier une dépendance linéaire de la fréquence d'oscillation avec la vitesse débitante gazeuse, un résultat largement admis par l'ensemble de la communauté scientifique tant diverses expériences croisées arrivent toujours à la même conclusion. La vitesse débitante liquide a par contre une influence beaucoup moins claire.

Nous avons ainsi réalisé une batterie de simulations en utilisant les paramètres Eq.(7.3) et la configuration Fig.(7.1) pour différents couples de vitesses débitantes de gaz U_g et de liquide U_l (la vitesse U_g n'est pas en réalité la vitesse débitante mais la vitesse maximum du profil de vitesse dans le gaz. Cependant, une intégration rapide du profil de vitesse dans le gaz montre que les deux valeurs sont proches. Nous pouvons également souligner que la définition de la vitesse de gaz considérée dans les expériences n'est pas toujours clairement donnée). Rappelons que les paramètres Eq.(7.3) n'ont pas de réalité expérimentale dans le sens où nous avons surestimé les viscosités dynamiques. Il n'est donc à priori pas du tout évident de retrouver les résultats expérimentaux.

Les graphes Fig.(7.14) et Fig.(7.14) résument les valeurs des fréquences obtenues dans deux systèmes de coordonnées différents, chacun d'entre eux mettant en lumière séparément deux phénomènes différents l'un de l'autre.

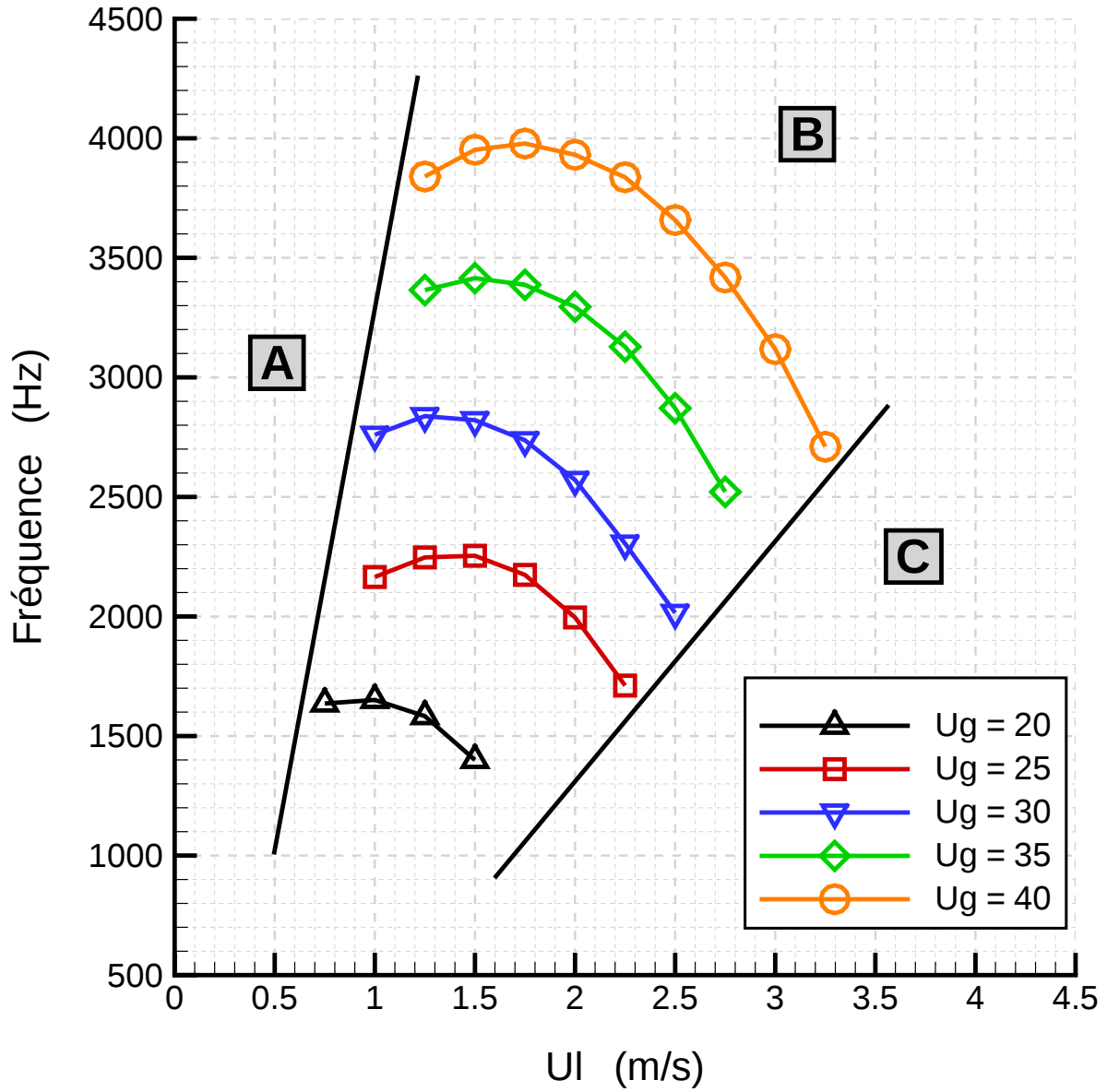


FIG. 7.13 – Fréquences d'oscillation de la nappe liquide en fonction de la vitesse débitante de gaz U_l pour différentes vitesses débitantes de liquide U_g . Les droites indiquent les lieux de transition entre les zones A,B et C telles que les ont définies Mansour et Chigier [50, 51]

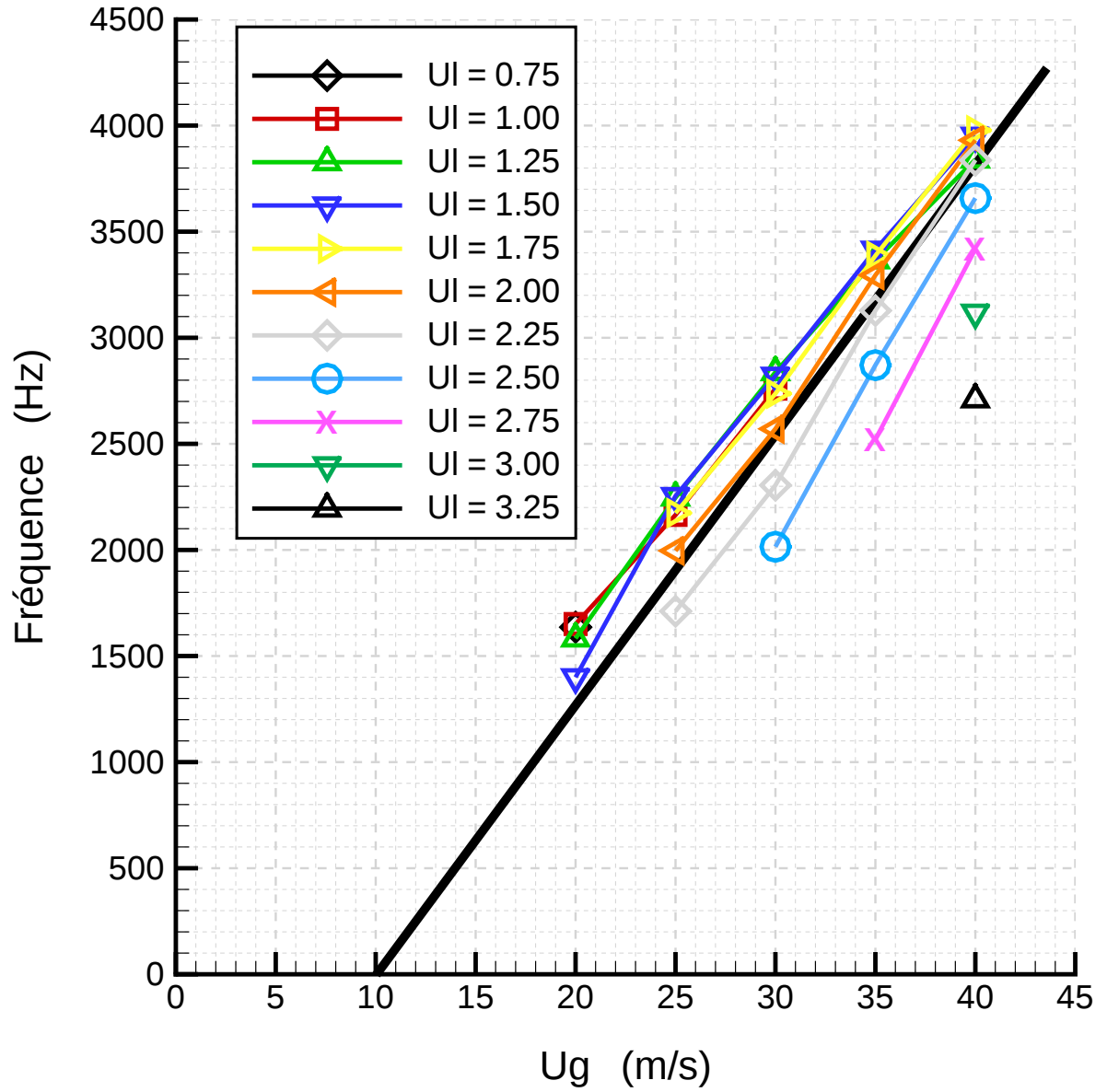


FIG. 7.14 – Fréquences d'oscillation de la nappe liquide en fonction de la vitesse du gaz U_g pour différentes vitesses débitantes de liquide U_l . La droite représente la valeur moyenne.

Vitesse débitante de liquide U_l

Le premier graphe Fig.(7.13) représente la fréquence d'oscillation de la nappe en fonction de la vitesse débitante de liquide U_l pour différentes vitesses de gaz U_g . Il est similaire à beaucoup de présentations de résultats expérimentaux dans la littérature. Chigier et Mansour ont ainsi pu établir à l'aide d'un tel graphe l'existence de régimes de fonctionnement en fonction du ratio des vitesses gazeuse et liquide et nos résultats corrélient à merveille. L'oscillation globale de la nappe liquide n'existe que pour les couples de vitesses se situant dans la zone centrale B (ce qui était bien sur le cas pour notre simulation référence). Pour une vitesse de gaz U_g donnée, il existe ainsi deux valeurs critiques minimale et maximale de la vitesse débitante U_l définissant les zones A et C. Lozano et al. ont retrouvé avec leur propres expériences ces zones A,B et C comme nous pouvons le voir Fig.(7.15) alors que les conditions sont forcément différentes, confirmant un peu plus la réalité de ces régimes de fonctionnement.

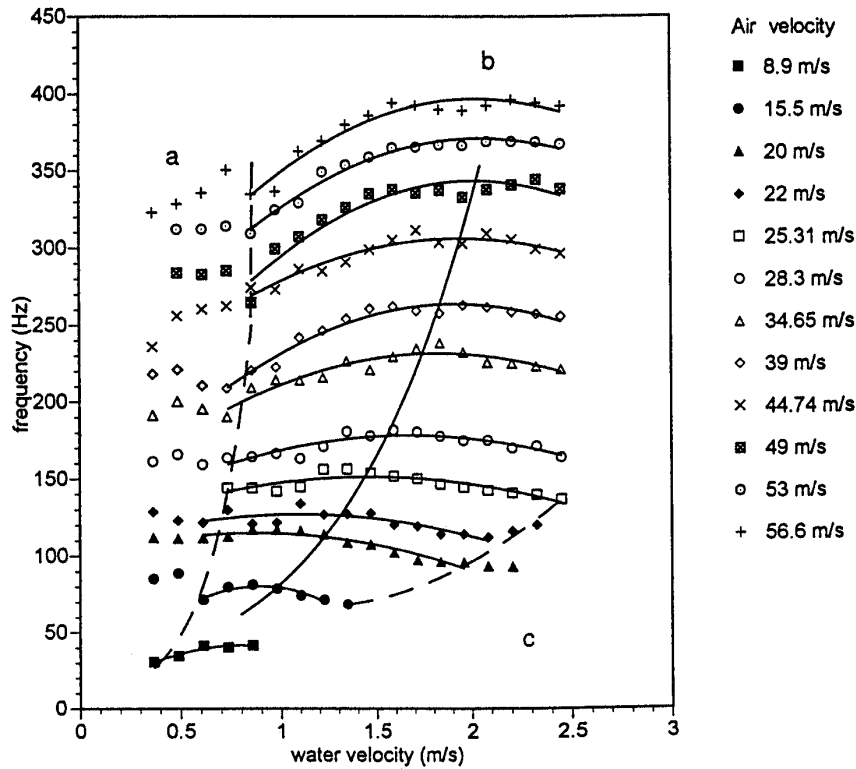


FIG. 7.15 – Diagramme des fréquences d'oscillation de la nappe de liquide obtenu à partir des expériences de Lozano et al.

Pour de grandes valeurs de la vitesse liquide, Chigier et Mansour notent que la zone C est caractérisée par la présence d'ondes variqueuses empêchant la croissance des ondes sinusoïdales résultant d'une faible qualité d'atomisation. Lors de nos simulations, il ne se passe par contre absolument rien. La nappe reste plane même si l'on perturbe fortement l'injection par tout type de signal, l'écoulement est clairement stable. Ce résultat peut s'expliquer par le caractère parfait de la simulation en comparaison de l'expérience. L'observation expérimentale pourrait être reliée à la croissance de bruits dus à l'imperfection de l'injecteur et en particulier à la présence d'une

zone de recirculation par décollement de la couche limite gazeuse à cause de l'espace qui existe entre la nappe liquide et l'écoulement gazeuse, un espace considéré nul dans nos simulations.

Pour de petites valeurs de la vitesse liquide, l'expérimentateur n'observe plus d'oscillation globale dans la zone A. C'est le mode nommé "stretched streamwise ligament breakup" par Stapper et Samuelsen où la nappe se brise en filaments régulièrement espacés dans la direction transverse dès la sortie de l'injecteur. La croissance du mode transverse responsable de la formation de ligaments est beaucoup trop rapide pour observer les battements de la nappe. Or ce phénomène est purement tridimensionnel, nos simulations bidimensionnelles n'ont ainsi que peu de sens par rapport à l'expérience, mais l'absence de toute perturbation transverse se retourne en avantage puisque la simulation révèle la dynamique longitudinale impossible à observer expérimentalement. Nous trouvons un signal présentant de nombreux harmoniques ainsi que des modulations basse fréquence qui n'a plus grand chose à voir avec celui trouvé dans la zone B. Cependant, nous observons toujours un battement de la nappe liquide même si celui-ci est beaucoup moins cohérent. La dynamique dans le gaz étant beaucoup plus complexe, elle nécessite d'ailleurs d'augmenter le maillage pour obtenir la convergence. En réalisant une analyse spectrale du signal, nous pouvons ressortir un fondamental dont la fréquence semble se situer dans le prolongement de la courbe des fréquences obtenues dans la zone B. Ce phénomène mérite certainement de plus amples investigations afin d'exploiter la relative incohérence des simulations bidimensionnelles vis à vis de la réalité expérimentale.

Vitesse débitante de gaz U_g

Le second graphe Fig.(7.14) représente les mêmes fréquences d'oscillation mais cette fois-ci en fonction de la vitesse de gaz U_g et pour différentes vitesses débitantes de liquide U_l . La dépendance est bien approximativement linéaire pour nos simulations comme espéré,

$$f / U_g \propto cst \quad (7.6)$$

La ligne plus épaisse noire représente la moyenne linéaire quadratique. Elle ne passe pas par l'origine mais coupe l'axe des abscisses en une valeur $U_{min} \approx 10$. Cette vitesse pourrait être similaire à la vitesse U_{min} définie par Lozano et al. [47], vitesse minimum fictive nécessaire pour imprimer un mouvement d'oscillation à la nappe liquide.

On note encore une fois l'influence négligeable de la vitesse liquide U_l au regard de la ligne moyenne. Nous remarquons toutefois un écart significatif pour de grandes valeurs de U_l correspondant à des valeurs critiques situées à proximité de la ligne de séparation des zones B et C sur la Fig.(7.13).

7.4.2 L'épaisseur de la nappe

Nous allons poursuivre nos investigations sur l'influence des paramètres amont par l'épaisseur de la nappe liquide. Toujours avec la même configuration Fig.(7.1) et les paramètres Eq.(7.3) sauf mention contraire, nous avons réalisé des simulations en faisant varier la demi épaisseur de la nappe liquide (Une astuce pour gagner du temps de calcul consiste à changer la demi épaisseur

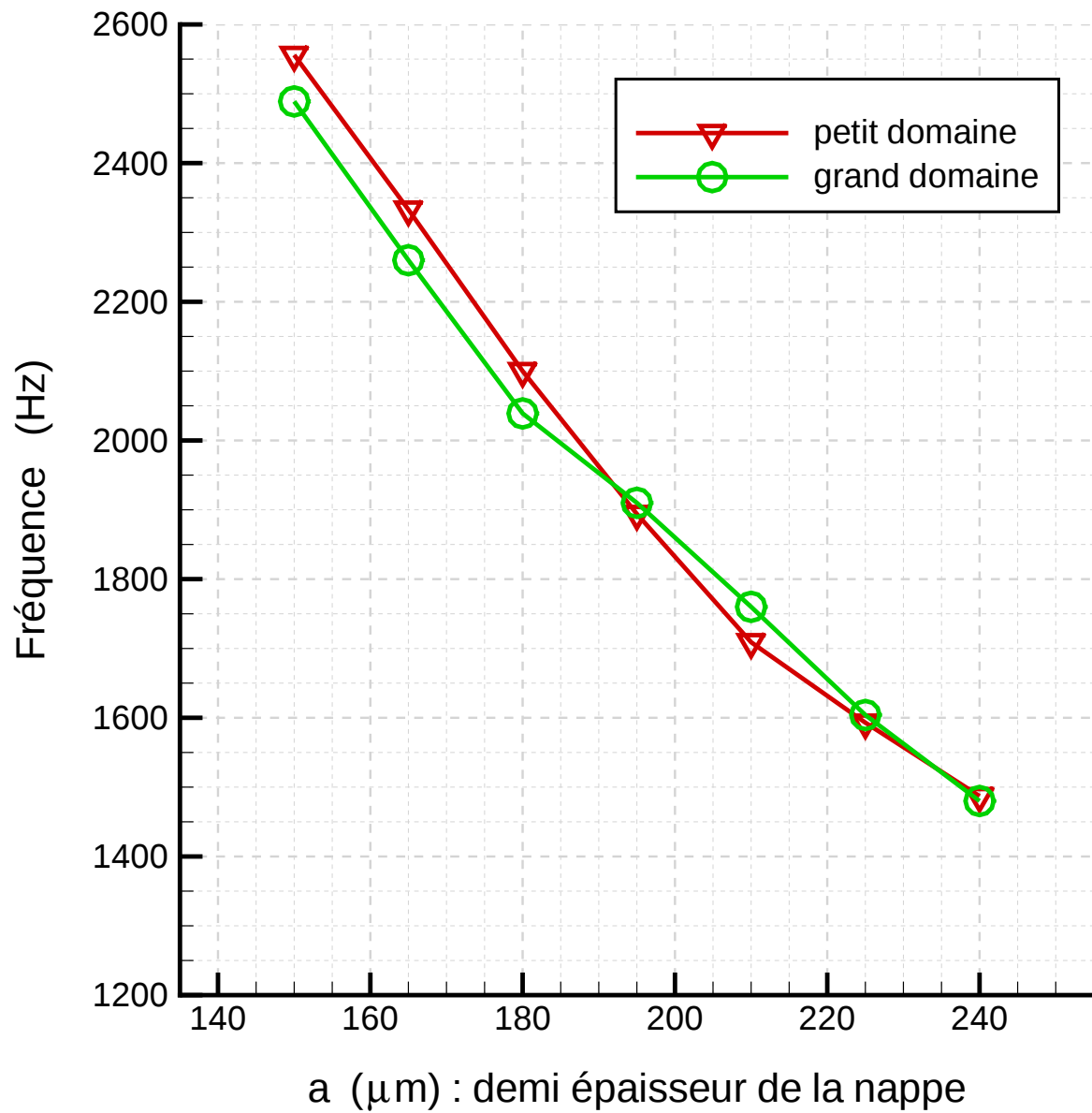


FIG. 7.16 – Fréquences d’oscillation de la nappe liquide en fonction de la demi épaisseur de la nappe a . Nous avons utilisé deux tailles de domaine différentes pour vérifier la tolérance du résultat vis à vis des conditions sortantes aux parois.

au fur et à mesure d'une même simulation, temps correspondant à la phase transitoire pour autant de valeurs considérées).

En partant d'une demi épaisseur a initiale de $150 \mu m$, nous augmentons sa valeur jusqu'à $240 \mu m$ avec un pas de $15 \mu m$. Le profil de vitesse dans le gaz est identique dans sa forme et ses dimensions δ et e et reste toujours "collé" à la nappe liquide. Le profil de vitesse dans le liquide respecte lui la solution de Poiseuille Eq.(7.1) en prenant en compte l'éventuelle nouvelle valeur de a et en considérant une vitesse débitante U_l constante.

Notre désir au départ était de faire varier la demi épaisseur a dans une fourchette plus importante afin de mieux déterminer la loi de variation de la fréquence avec la demi épaisseur. Nous nous sommes heurté à des problèmes numériques liés aux trois conditions sortantes sur les frontières du domaine. L'influence de l'inertie de la nappe est tellement forte dans les mécanismes de l'oscillation globale qu'elle provoque des modifications trop profondes de la dynamique de l'écoulement gazeux et particulièrement à proximité des parois si la variation de l'épaisseur de la nappe est trop importante. Ainsi, nous obtenons une loi de variation de la fréquence de toute évidence inexacte car perturbée par des approximations numériques même si elle est loin d'être aberrante. La fourchette considérée ici est par contre suffisamment petite pour minimiser cette perturbation.

La Fig.(7.16) résume sur un graphe les fréquences ainsi obtenues. Il y est répertorié les résultats en utilisant deux tailles différentes pour le domaine de calcul,

$$\left\{ \begin{array}{l} L_x = L_y = 20 a \quad \text{pour le petit domaine (taille initiale Eq.(7.3))} \\ L_x = L_y = 21 a \quad \text{pour le grand domaine} \end{array} \right. \quad (7.7)$$

Cette légère différence sur la taille du domaine suffit pour obtenir un écart en fréquence entre les deux mais celui-ci est relativement négligeable. Il existe donc une tolérance sur le résultat des simulations à cause des conditions sortantes sur les frontières du domaine.

Au final, il est trouvé une variation inversement linéaire de la fréquence d'oscillation globale avec la demi épaisseur de nappe,

$$f \propto \frac{1}{a} \quad (7.8)$$

Ce résultat diffère de celui mesuré expérimentalement par C.Siegler [92] qui trouve une dépendance en racine. Cependant, si on peut s'interroger sur le bien-fondé du résultat des simulations, nous pouvons en faire autant sur celui de C.Siegler car il n'utilise que trois épaisseurs de nappe différentes. D'ailleurs, le graphe obtenu par H.Carentz [9] qui a aussi utilisé plusieurs épaisseurs de nappe pour ces propres expériences nous donnerait cette fois raison. En conclusion, il reste un flou quant à la loi de variation avec l'épaisseur de nappe mais nous retiendrons l'expression Eq.(7.8).

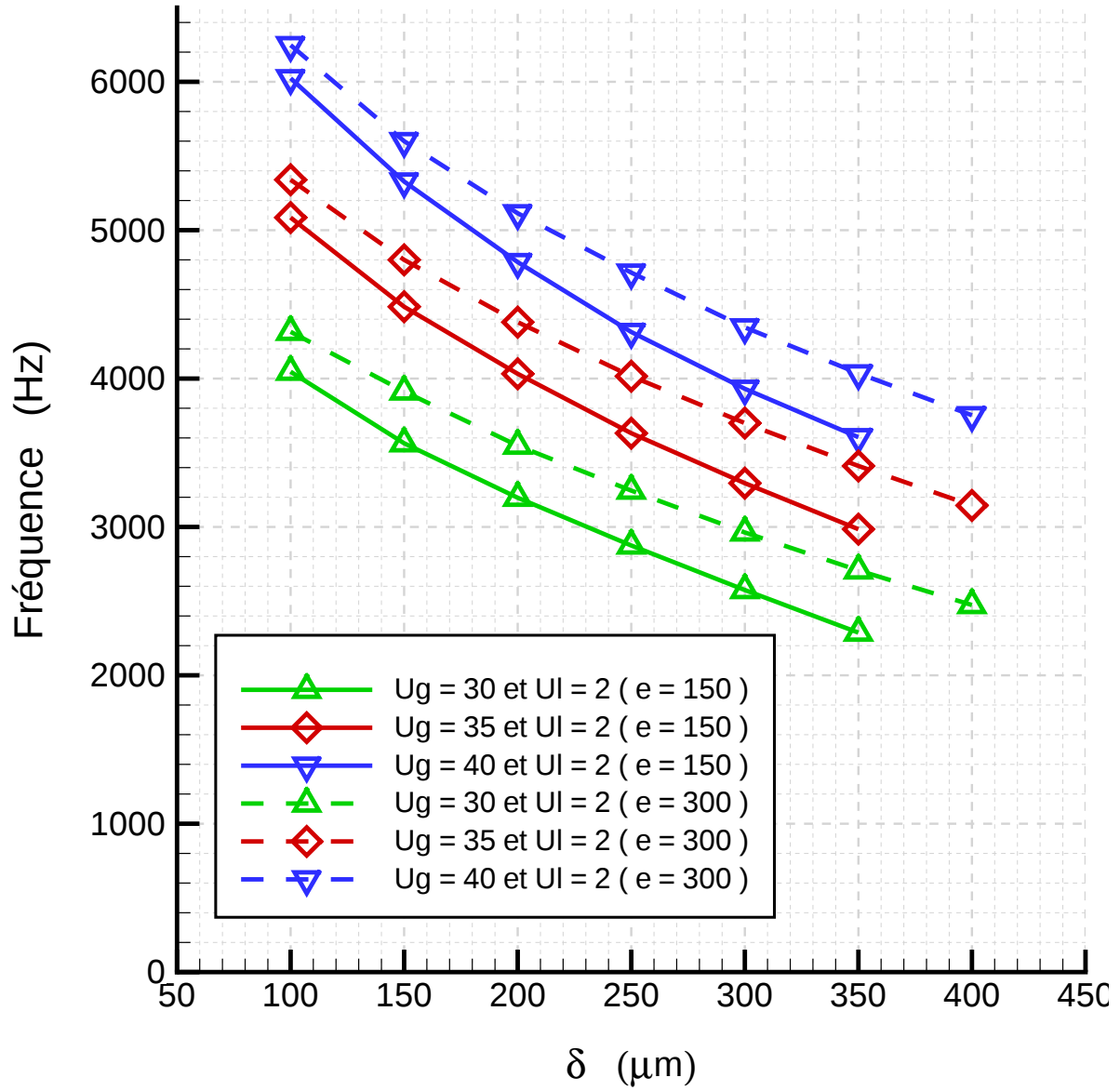


FIG. 7.17 – Fréquences d'oscillation de la nappe liquide en fonction de l'épaisseur de la couche limite gazeuse δ et de la hauteur entre les deux couches limites de gaz e

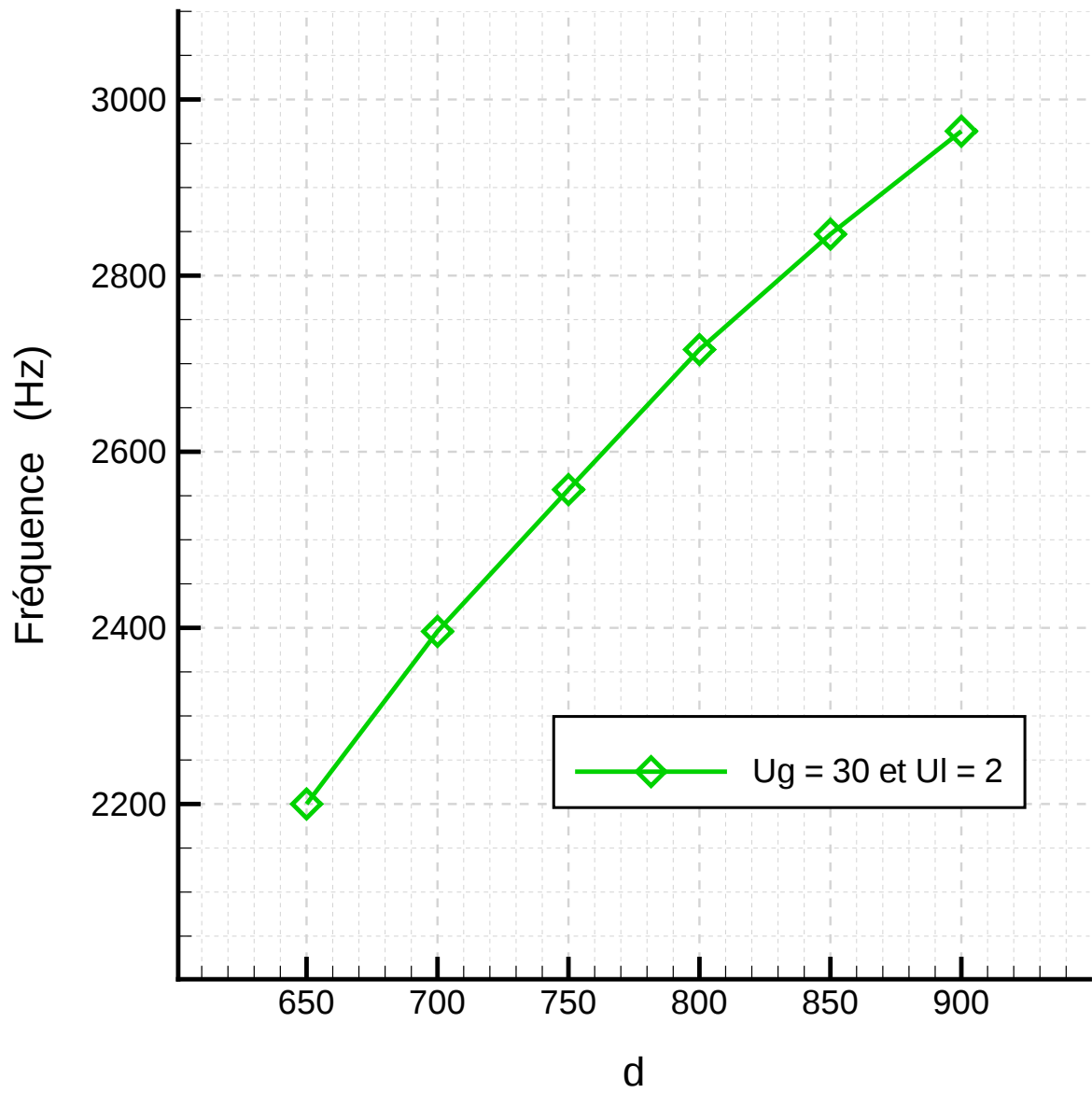


FIG. 7.18 – Fréquences d'oscillation de la nappe liquide en fonction de de la hauteur de la veine d'injection de gaz $d = 2\delta + e$

7.4.3 L'épaisseur de la couche limite gazeuse

L'étude de l'influence de la couche limite gazeuse sur la fréquence d'oscillation est l'objectif principal de nos simulations car elle n'a à notre connaissance jamais fait l'objet d'une étude expérimentale approfondie du fait de la difficulté matérielle de pouvoir la contrôler sur un banc d'essai. Il est même assez rare de trouver dans la littérature des mesures détaillées du profil de vitesse cisailant, les quelques unes existantes sont assez récentes. Pourtant, il est assez évident par intuition physique qu'une non prise en compte des couches limites gazeuses qui se forment en aval de l'injecteur par frottement sur les parois est trop limitatif, on ne peut pas se satisfaire de la vitesse débitante seule. L'écoulement gazeux exerce en effet une force sur la surface de la nappe dépendante de l'épaisseur de la couche limite. A.Lozano et al. [47] ont confirmé cette intuition par une étude de stabilité linéaire temporelle, il est même conclu une très forte influence de la couche limite gazeuse qui voie de conséquence ne peut être ignorée. Si nous faisons l'analogie avec les couches de mélange monophasiques, il est montré que l'épaisseur de vorticité δ_w est un excellent paramètre pour dimensionner le problème,

$$\delta_w = \frac{U_g}{\frac{d u}{d y}} \quad \left(= \frac{\delta}{2} \right) \quad (7.9)$$

C'est le paramètre qu'a repris par exemple P.Marmottant [52] et Raynal. Cependant, nous nous limiterons ici à l'épaisseur de la couche limite gazeuse δ , l'épaisseur de vorticité δ_w étant tout simplement proportionnelle avec δ pour le profil de vitesse considéré dans nos simulations.

La Fig.(7.17) résume graphiquement les simulations que nous avons réalisées avec la configuration Fig.(7.1) et les paramètres Eq.(7.3) sauf mention contraire. Il est à souligner que nous ne rencontrons pas ici les mêmes problèmes avec les conditions sortantes sur les frontières que lors du paragraphe précédent où nous faisons varier l'épaisseur de la nappe de liquide, l'inertie de la nappe très influente sur la dynamique de l'écoulement gazeux étant constante.

En plus de l'épaisseur δ , nous faisons également varier la hauteur de la veine d'injection d'air par l'intermédiaire de la variable e , épaisseur entre les deux couches limites se formant sur les parois interne et externe. Si comme attendu, l'épaisseur de la couche limite a une influence prépondérante, la hauteur de veine est aussi un paramètre non négligeable à prendre en compte. Les effets diffusifs du profil de vitesse gazeux étant conséquents, le fait d'augmenter le flux d'air en hauteur résulte en aval de l'écoulement d'une vitesse à l'interface plus importante. Il est par conséquent tout à fait logique de trouver une augmentation de la fréquence d'oscillation en augmentant la hauteur de la veine d'injection. Afin de compléter les résultats concernant cette influence, nous avons également réalisé des simulations en faisant varier la hauteur de veine d ($d = 2\delta + e$) pour une hauteur initiale de $650 \mu m$ ($e = 50 \mu m$) et finale de $900 \mu m$ ($e = 300 \mu m$) avec un pas de $50 \mu m$. La Fig(7.18) résume graphiquement les résultats obtenus.

Il est trouvé au final une dépendance de la fréquence avec l'épaisseur δ de la couche limite gazeuse telle que,

$$f \cdot \sqrt{\delta} \propto cst \quad (7.10)$$

et une dépendance de la fréquence avec la hauteur de veine d de la couche limite gazeuse telle que,

$$f / \sqrt{d} \propto cst \quad (7.11)$$

Cependant, l'influence de l'épaisseur de la couche limite gazeuse δ est clairement plus importante que celle de la hauteur de veine d même si aucune des deux n'est négligeable. De plus, nous pouvons supposer qu'il doit exister un phénomène de saturation quant à la hauteur de veine. Au delà d'une valeur critique, typiquement lorsque la hauteur de veine est approximativement dix fois supérieure à l'épaisseur de la nappe liquide, les variations en fréquence liées à la hauteur de veine ne doivent plus se faire sentir. La longueur longitudinale de rupture de la nappe est telle que la vitesse cisailante gazeuse peut être considérée comme infinie, ce qui est en fait le cas pour la plupart des expériences comme celle de H.Carrentz ou A.Lozano. Toutefois, les contraintes liées à la géométrie des injecteurs aéromécaniques industriels limitent forcément la hauteur de veine. En conclusion, il est préférable de bien la prendre en compte même si nous retiendrons essentiellement de cette étude la dépendance en racine carrée de la fréquence d'oscillation globale avec l'épaisseur de vorticit  δ_w de l'écoulement gazeux.

7.4.4 Loi de comportement

Nous venons de présenter des études numériques individualisées sur l'influence des paramètres amont que sont les vitesses débitantes liquide et gazeuse, la demi épaisseur de la nappe liquide, l'épaisseur de la couche limite et enfin la hauteur de la veine de gaz. Il serait maintenant intéressant d'utiliser les résultats obtenus afin de dégager des nombres adimensionnels pertinents afin de caract riser de l'oscillation globale de la nappe liquide et en particulier la fréquence.

Il est d'usage aujourd'hui de prendre en compte le rapport des flux de quantité de mouvement M car comme l'a montré L.Raynal [77] ou H.Carentz [9] les caract ristiques globales du jet dépendent de ce rapport. En particulier, la fréquence réduite f^* similaire à un nombre de Strouhal dépend  troitement de ce rapport. Cependant, son expression diff re suivant les auteurs comme nous l'avons présenté en introduction. Aucune d'entre elles ne prend en compte l'influence av r e de l'épaisseur de la couche limite gazeuse. Notre  tude sur le sujet nous permet ainsi de proposer une nouvelle expression de la fréquence réduite f^* qui de toute  vidence sera plus en ad quation avec la r alit  des m canismes de l'oscillation globale.

Compte tenu des lois de variation trouv es de la fréquence avec la vitesse de gaz U_g Eq.(7.6), la demi épaisseur de nappe a Eq.(7.8), l'épaisseur de la couche limite δ Eq.(7.10) et enfin avec

la hauteur de la veine d'injection de gaz d Eq.(7.11), nous avons construit les deux quantités adimensionnelles suivantes,

$$\begin{aligned} \bullet \quad M &= \frac{\rho_g U_g^2 d}{\rho_l U_l^2 2 a} \\ \bullet \quad f^* &= \frac{f a \sqrt{\delta}}{U_g \sqrt{d}} \end{aligned} \tag{7.12}$$

Comme l'a noté S.Siegler [92], il est préférable d'utiliser le flux de quantité de mouvement total intégré dans la définition du rapport M . Ainsi, afin de rester cohérent, ce n'est plus la vitesse de gaz U_g telle qu'elle est définie Eq.(7.2) qu'il faut prendre en compte mais la réelle vitesse débitante par intégration du profil de vitesse.

La Fig.(7.19) donne le résultat graphique associé avec ces définitions avec en abscisse le rapport M et en ordonnée la fréquence réduite f^* . Nous trouvons une valeur moyenne de la fréquence réduite f^* qui vaut approximativement 0.02. L'écart maximum avec la valeur moyenne est d'environ 18%.

Il est intéressant de remarquer que la répartition du nuage de points est similaire aux résultats expérimentaux Fig.(12). Pour les plus petites valeurs de M , la fréquence réduite f^* est plus faible que la valeur moyenne. Par contre, il existe un écart assez important en faisant varier l'épaisseur de la couche limite gazeuse ce qui indique que la loi de variation en racine carrée n'est pas tout à fait juste sans être toutefois aberrante.

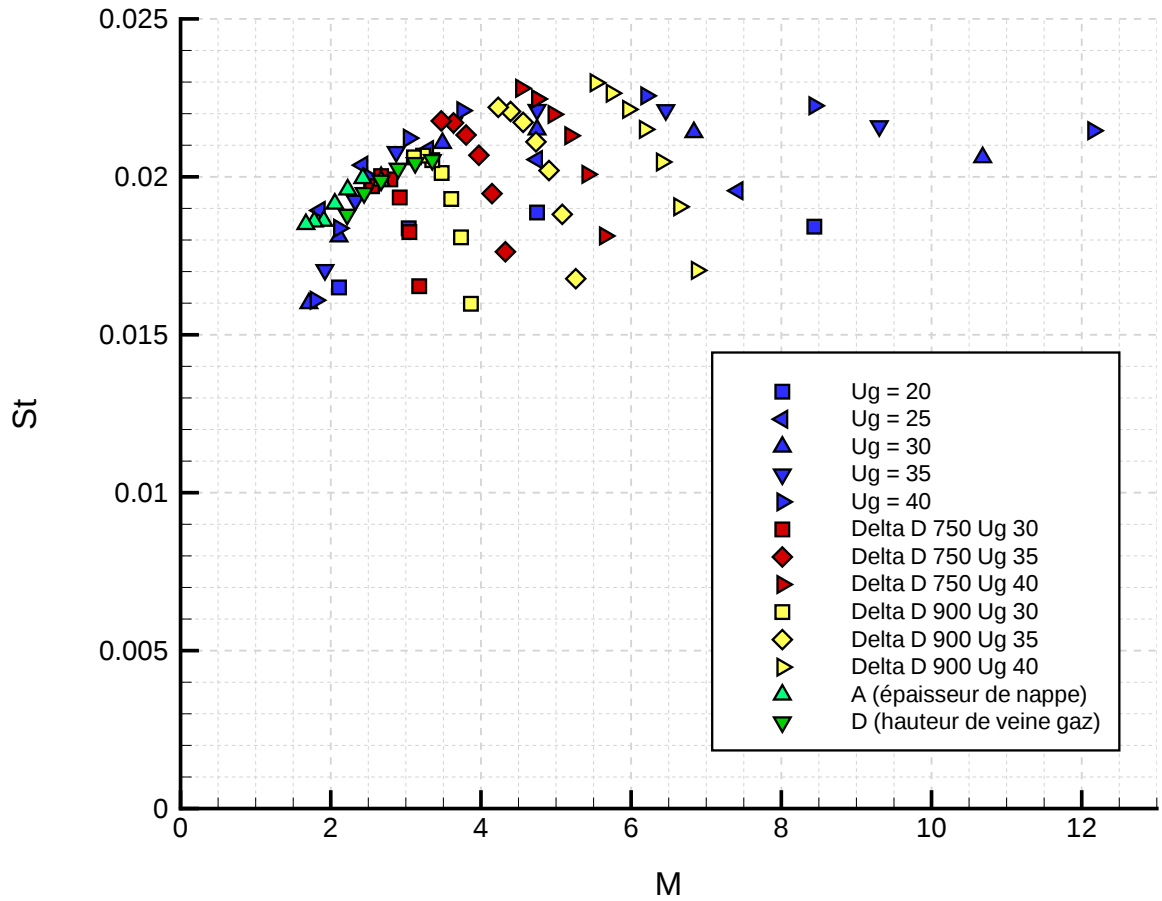


FIG. 7.19 – Répertoire de l'ensemble des fréquences calculées de l'oscillation globale de la nappe liquide dans le système de coordonnées défini par les nombres adimensionnels M et f^* Eq.(7.12). Delta correspond aux calculs en faisant varier l'épaisseur de la couche limite gazeuse et D à la hauteur de veine.

Chapitre 8

Formation de ligaments : simulations tridimensionnelles

Sommaire

8.1 Simulations temporelles	202
8.1.1 Mise en oeuvre et motivations	202
8.1.2 Influence de l'écoulement gazeux	203
8.2 Une simulation spatiale	204

Après nous être intéressé lors du dernier chapitre à la caractérisation de l'oscillation globale par la réalisation de simulations bidimensionnelles spatiales, il nous reste maintenant à mettre en lumière par la simulation la formation de ligaments afin d'être complet quant aux mécanismes de désintégration assistée d'une nappe liquide par un courant gazeux. Cette phénoménologie intrinsèque aux mécanismes de désintégration est responsable de la tridimensionnalisation des déformations de la nappe. Son étude est essentielle dans le sens où elle participe grandement à la désintégration du jet liquide. En effet, comme le souligne très bien Stapper et Samuelsen [94], si l'oscillation globale de la nappe liquide est responsable de la brisure transverse de la nappe liquide, l'existence parallèle d'une onde transverse au sens de l'écoulement provoque une brisure supplémentaire perpendiculairement à la première. La conjonction des deux ondes donnent naissance à des cellules de liquide dont la taille est étroitement liée aux longueurs d'onde. Il apparaît par conséquent comme essentiel de déterminer la longueur d'onde de l'onde transverse afin de quantifier la granulométrie finale.

Toutefois, nous n'avons pas pu à ce jour réaliser une telle étude par la simulation comme nous avons pu le faire pour caractériser l'oscillation globale. L'explication tient au fait que l'onde transverse est une conséquence de l'oscillation globale. Ainsi, seules des simulations spatiales tridimensionnelles pourraient nous permettre de relier l'espacement entre les ligaments avec la fréquence de l'oscillation globale comme l'a réalisé expérimentalement H.Carentz [9]. Or de telles simulations coûtent très cher en temps de calcul. Une rapide évaluation du temps de calcul nécessaire à la réalisation d'une seule simulation donne un résultat se chiffrant à plusieurs semaines nécessaires en utilisant plus de 32 processeurs. Une étude paramétrique devient tout bonnement impossible, la puissance des supercalculateurs n'étant pas encore à ce jour suffisante avec le code de calcul en l'état. C'est pourquoi nous nous limiterons quasiment dans ce chapitre à une étude de faisabilité.

8.1 Simulations temporelles

8.1.1 Mise en oeuvre et motivations

Nous désirons réaliser la simulation temporelle tridimensionnelle de la désintégration assistée d'un jet liquide afin de mettre en évidence artificiellement la phénoménologie de formation ligamentaire. Il apparaît naturel de conserver la configuration de la nappe liquide utilisée précédemment puisque nous connaissons déjà les grandeurs associées à l'oscillation globale avec les paramètres Eq.(7.3). Au regard de la configuration bidimensionnelle Fig.(7.1), nous rajoutons donc une dimension supplémentaire dans la profondeur correspondant à la direction transverse de la nappe de liquide comme schématisé Fig.(8.1). Nous reprenons ainsi les mêmes paramètres à une différence près : l'écoulement gazeux n'est plus confiné dans une veine, il est considéré comme infini comme schématisé Fig.(7.2). La raison est une diffusion trop rapide du profil de vitesse sans cette hypothèse, il est préférable de maintenir une vitesse infinie de cisaillement constante revenant concrètement à utiliser une condition de glissement sur les frontières du domaine de calcul.

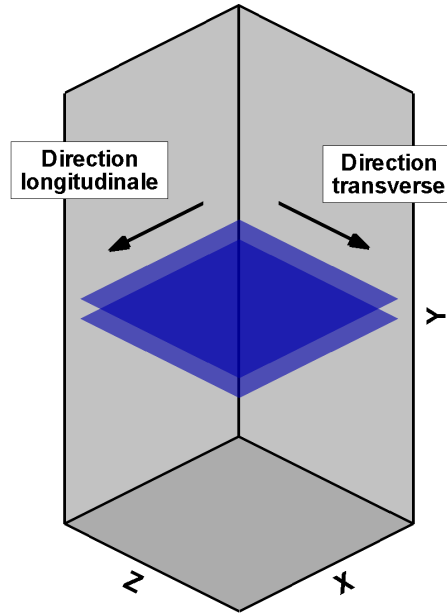


FIG. 8.1 – Configuration initiale des simulations temporelles tridimensionnelles

Comme nous réalisons une simulation temporelle, nous perturbons notre nappe de liquide initialement plane par des modes sinusoïdaux par le biais du champ de vitesse, tel que les dimensions du domaine de calcul soient des multiples entiers des longueurs d'onde. La composante v de la vitesse perturbatrice s'écrit (la composante w étant nulle),

$$\left\{ \begin{array}{ll} v = & 0.5 U_l \sin\left(\frac{2\pi}{L_x} x\right) \quad \text{mode de perturbation longitudinal} \\ & + 0.5 U_l \sin\left(\frac{6\pi}{L_z} z\right) \quad \text{mode de perturbation transverse} \end{array} \right. \quad (8.1)$$

avec les dimensions suivantes pour le domaine de calcul,

$$\begin{cases} L_x = 20 a \\ L_y = 40 a \\ L_z = 20 a \end{cases} \quad (8.2)$$

La longueur d'onde du mode de perturbation dans le sens longitudinal de la nappe est égale à la longueur du domaine L_x . Elle correspond à un mode sinueux sensé représenter l'oscillation globale de la nappe liquide. C'est pourquoi la longueur longitudinale du domaine a été choisie de telle manière qu'elle soit de l'ordre de la longueur d'onde de l'oscillation globale de notre simulation bidimensionnelle référence au chapitre précédent. Avec un tel choix, la dynamique de l'écoulement gazeux est similaire à celle trouvée lors de la simulation spatiale bidimensionnelle mais il n'est pas du tout évident que son influence sur les mouvements de la nappe soit la même.

Pour observer les ligaments, nous sommes contraint à également perturber la nappe dans le sens transverse. Dans le cas contraire, l'écoulement reste parfaitement bidimensionnel. Cela est malheureusement tout à fait logique car rien ne pourrait expliquer une déstabilisation numérique transverse "naturelle". Si l'on se fie aux travaux originaux de P.Marmottant [52] et de N.Bremond [7], l'apparition des ligaments serait due à une modulation en épaisseur de la nappe par la manifestation d'une instabilité de Rayleigh-Taylor. La modification profonde du profil de vitesse dans la nappe crée des accélérations locales des particules fluides perpendiculairement à la nappe, la surface serait donc bien potentiellement instable au sens de Rayleigh-Taylor. Si l'on suit ce raisonnement, notre simulation est tout à fait susceptible de reproduire ces accélérations mais nous avons vu lors de la simulation de l'instabilité classique de Rayleigh-Taylor que l'instabilité ne se manifeste pas numériquement si l'on ne perturbe pas l'interface. Nous sommes par conséquent contraint de perturber transversalement la nappe par un mode forcé dont la longueur d'onde est arbitraire. Nous avons choisi au final une longueur d'onde telle que la surface soit perturbée par trois périodes complètes afin d'éventuellement observer des interactions entre les ligaments. Elle est ainsi de l'ordre de la longueur d'onde de l'oscillation globale en correspondance avec l'évidence expérimentale. Notons enfin qu'une telle perturbation provoque bien une modulation en épaisseur de la nappe liquide.

8.1.2 Influence de l'écoulement gazeux

Nous avons réalisé un certain nombre de simulations et nous en présentons trois ici. Ces trois simulations diffèrent des paramètres Eq.(7.3) par la vitesse de gaz infinie U_g considérée. Les trois vitesses considérées sont de 20,30 et 40 $m.s^{-1}$ et nous présentons le résultat des simulations respectivement Fig.(8.2,8.3,8.4), Fig.(8.5,8.6,8.7) et Fig(8.8,8.9). Le nombre important de figures présentées pour chacune des simulations est relié à l'idée de bien montrer l'évolution dans le temps des déformations de la nappe liquide, les dynamiques mises à jour étant très intéressantes.

Nous allons commencer par faire quelques commentaires communs aux trois simulations. Nous remarquons tout d'abord que les deux modes de perturbation croissent à la surface de la nappe. Si le résultat est très attendu pour le mode longitudinal étant donné que l'interface subit une instabilité de cisaillement de type Kelvin-Helmholtz, il est moins évident pour l'onde transverse. Cette croissance confirmerait la présence d'une accélération perpendiculaire à la nappe des particules fluides par la modification du profil de vitesse. Il serait par contre pertinent de s'interroger sur la forte intensité de la perturbation que nous avons imposée. Or, nous avons

effectué des simulations avec des intensités plus faibles et le résultat est le même à la différence que l'instabilité est plus longue à se développer. Ensuite, lorsque la modulation de l'épaisseur de la nappe liquide commence à devenir suffisamment importante, la dégénérescence de l'onde de déformation sous l'effet d'une instabilité de type Rayleigh-Plateau provoque la création rapide de ligaments aux sommets des modulations. Nous retrouvons ainsi pour chacune des simulations trois ligaments régulièrement espacés dans la direction transverse conformément aux observations expérimentales.

L'influence de l'écoulement gazeux sur les effets tridimensionnels est plus que manifeste. Pour la première simulation Fig.(8.2,8.3,8.4) utilisant une vitesse infinie de cisaillement de gaz de 20 m.s^{-1} , les déformations de l'interface sont relativement simples. Les trois ligaments sont nettement visibles, on peut même observer les gouttes qui s'arrachent par capillarité au bout des ligaments. En augmentant la valeur de la vitesse infinie de cisaillement U_g à 30 m.s^{-1} sur la Fig.(8.5,8.6,8.7) puis à 40 m.s^{-1} sur la Fig(8.8,8.9), la qualité de l'atomisation devient nettement meilleure. Nous discernons de moins en moins les trois ligaments car il existe rapidement un nombre important de structures secondaires, les déformations de la nappe sont de plus en plus anarchiques. D'ailleurs, les effets d'un maillage trop grossier se font sentir. L'épaisseur de la nappe devient tellement fine qu'elle est tout juste capturée par le code de calcul. On remarque la formation de structures complexes telles que des poches ou des bagues qui finissent par se briser. Si les structures respectent bien une brisure correspondant à l'onde de perturbation transverse par la présence périodique des mêmes structures, le nombre, la forme et la taille des structures finales de liquide dépendent fortement de l'écoulement gazeux. Ce résultat tend à prouver que la connaissance des longueurs d'onde longitudinale et surtout transverse est une condition nécessaire mais non suffisante pour connaître la granulométrie finale.

8.2 Une simulation spatiale

Dans le but de continuer nos investigations sur la corrélation entre l'oscillation globale et l'onde transverse, nous avons tenté de réaliser des simulations spatiales tridimensionnelles avec encore une fois la configuration Fig.(7.1) et les paramètres Eq.(7.3)¹⁵. L'objectif des simulations était de retrouver les ligaments sans que le mode de perturbation transverse soit forcé. Or, à notre grand désarroi, nous n'avons jamais pu observer de ligaments et cela même en perturbant transversalement le jet liquide. Nous n'avons pas d'explication rationnelle puisque les simulations temporelles ont mis à jour la formation rapide de ligaments pour les mêmes paramètres physiques et les mêmes dimensions. Il faut dire que nous n'avons pu réaliser que quelques simulations car le coût de calcul est exorbitant. Nous avons en effet besoin de maillages au grand minimum de 10.10^6 mailles, ce qui est pour le moins conséquent sachant de surcroît que le nombre de pas de temps nécessaire est aussi important.

Un exemple de simulation est donné Fig.(8.10). Nous pouvons y observer la manifestation de l'oscillation globale de la nappe liquide. Il est assez curieux sur ce cas tridimensionnel de la nécessité de perturber la nappe afin d'obtenir l'oscillation alors que ce n'était pas le cas pour la version bidimensionnelle. La raison doit être une influence plus importante de la tension de surface. Non seulement la tension de surface est doublée en passant d'un espace bidimensionnel à un espace tridimensionnel, mais il existe également les effets de bord. La tension de surface a tendance à transformer rapidement le jet liquide plan en un jet rond. C'est d'ailleurs sans aucun doute la raison de la formation d'un pseudo ligament au sommet de l'amplitude d'oscillation.

¹⁵les bords de la nappe ne "colle" pas avec les frontières du domaine de calcul car la condition de sortie n'accepte guère une telle situation, c'est à dire un écoulement important suivant sa tangente.

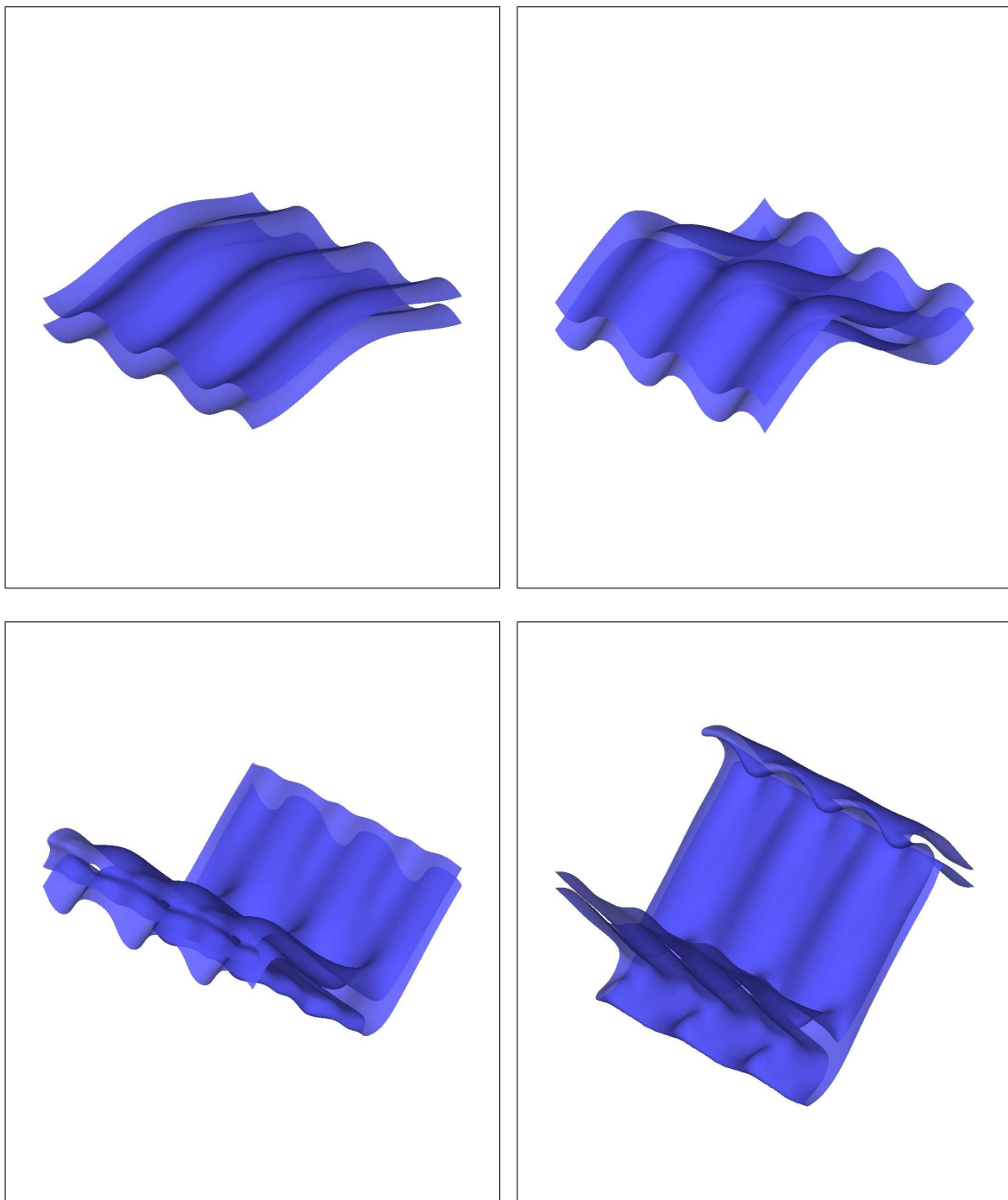


FIG. 8.2 – Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 20 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Première partie) • Maillage 128x128x256 •

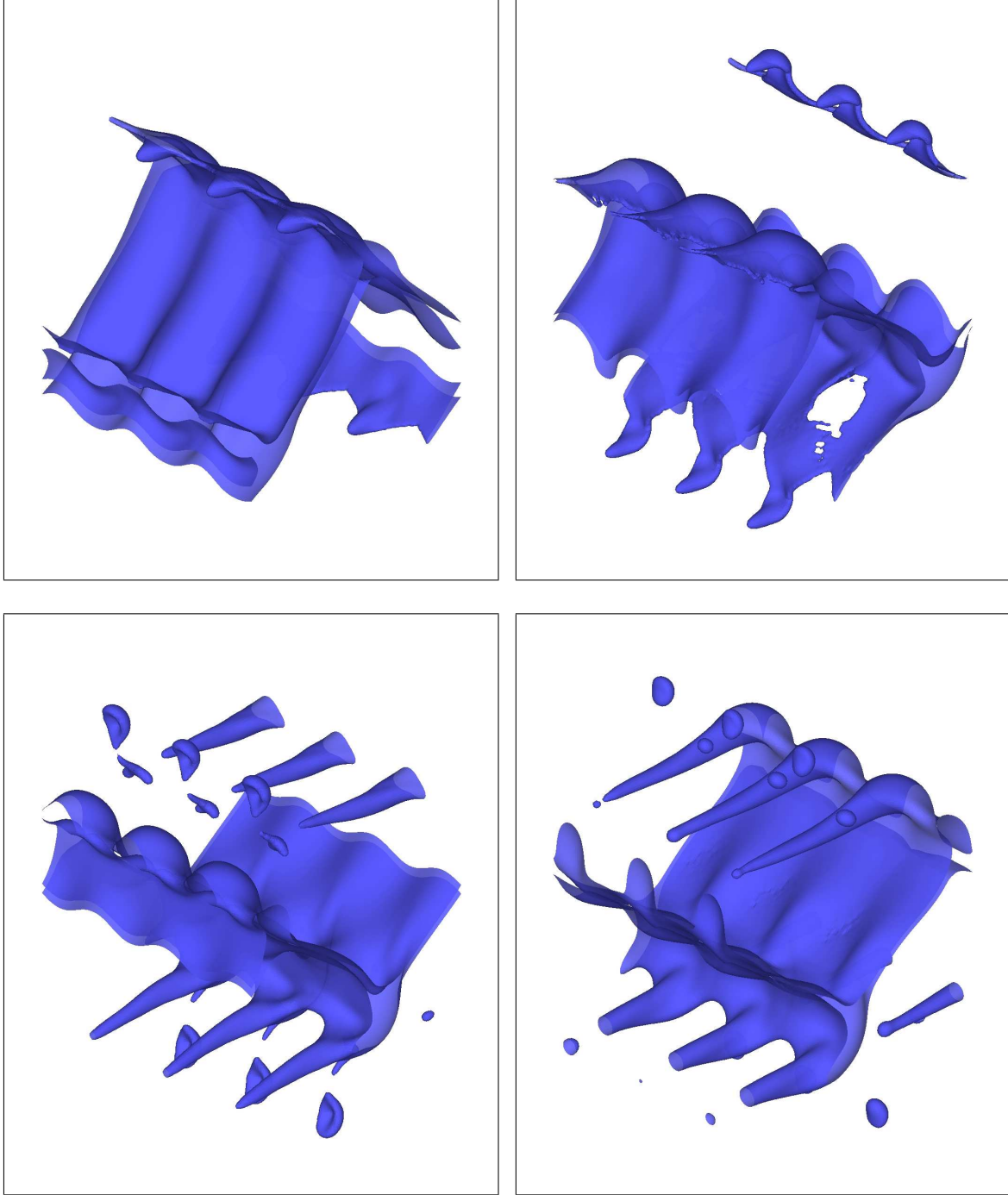


FIG. 8.3 – Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 20 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Seconde partie) • Maillage 128x128x256 •

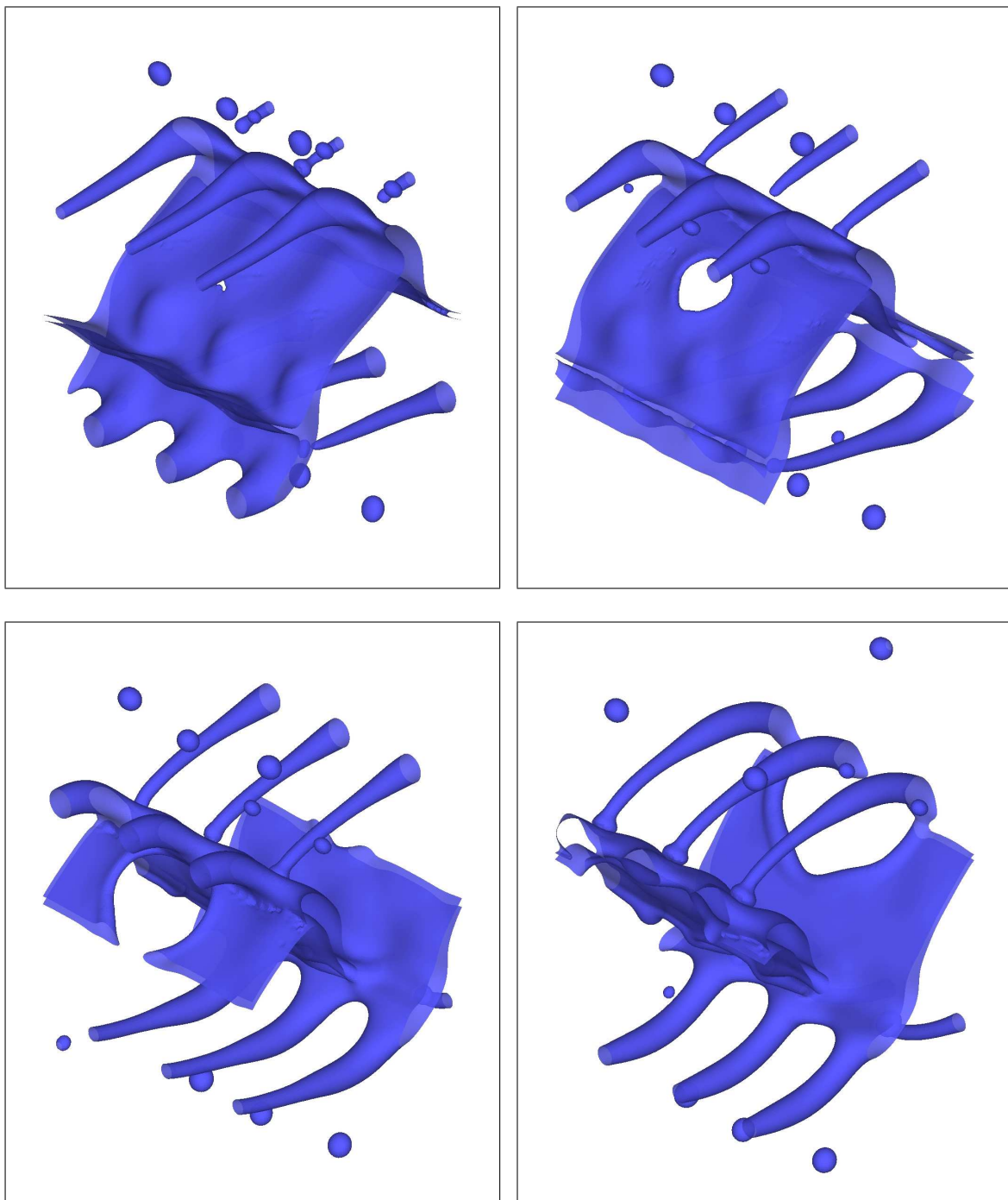


FIG. 8.4 – Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 20 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Troisième et dernière partie) • Maillage $128 \times 128 \times 256$ •

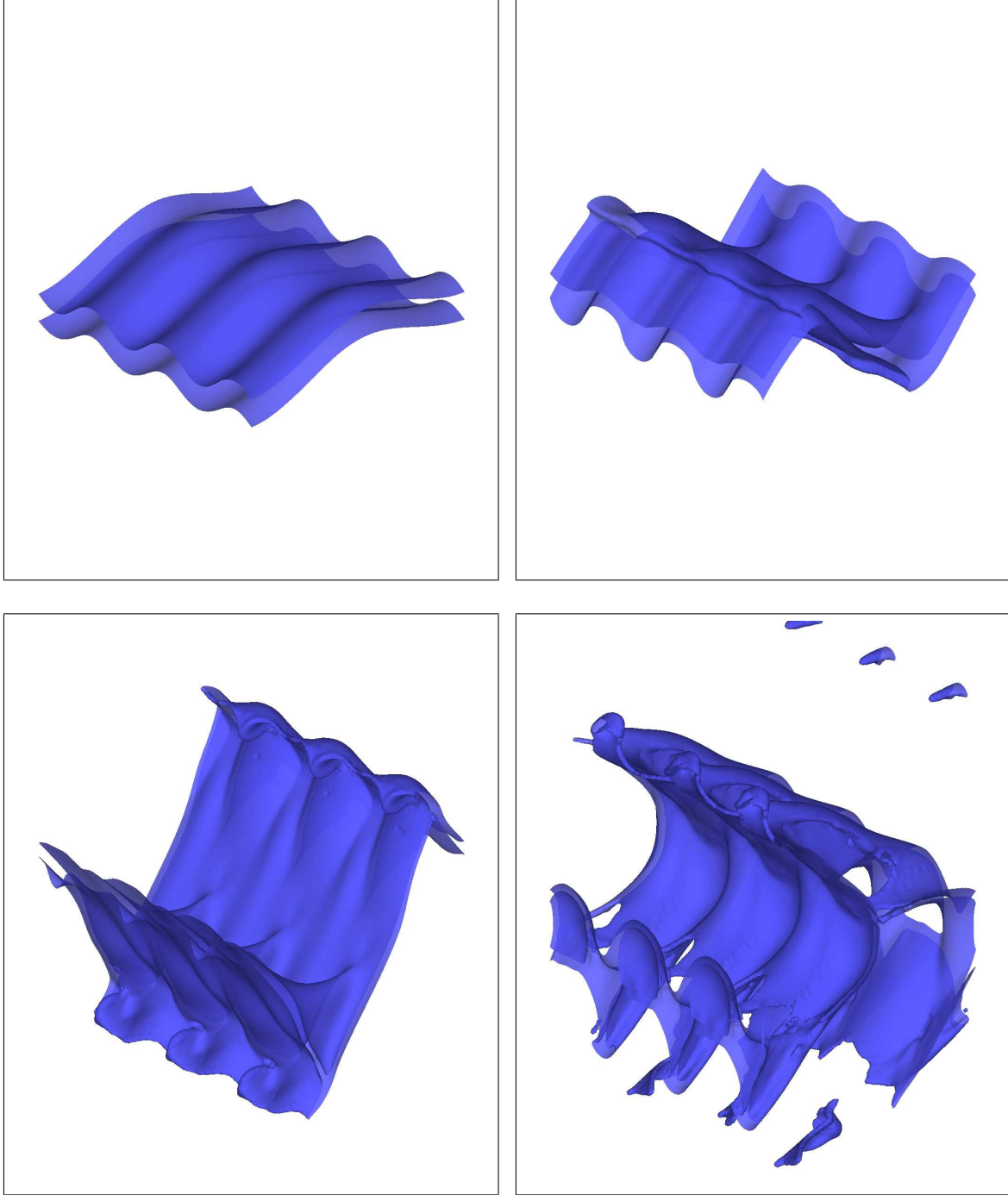


FIG. 8.5 – Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 30 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Première partie) • Maillage 128x128x256 •

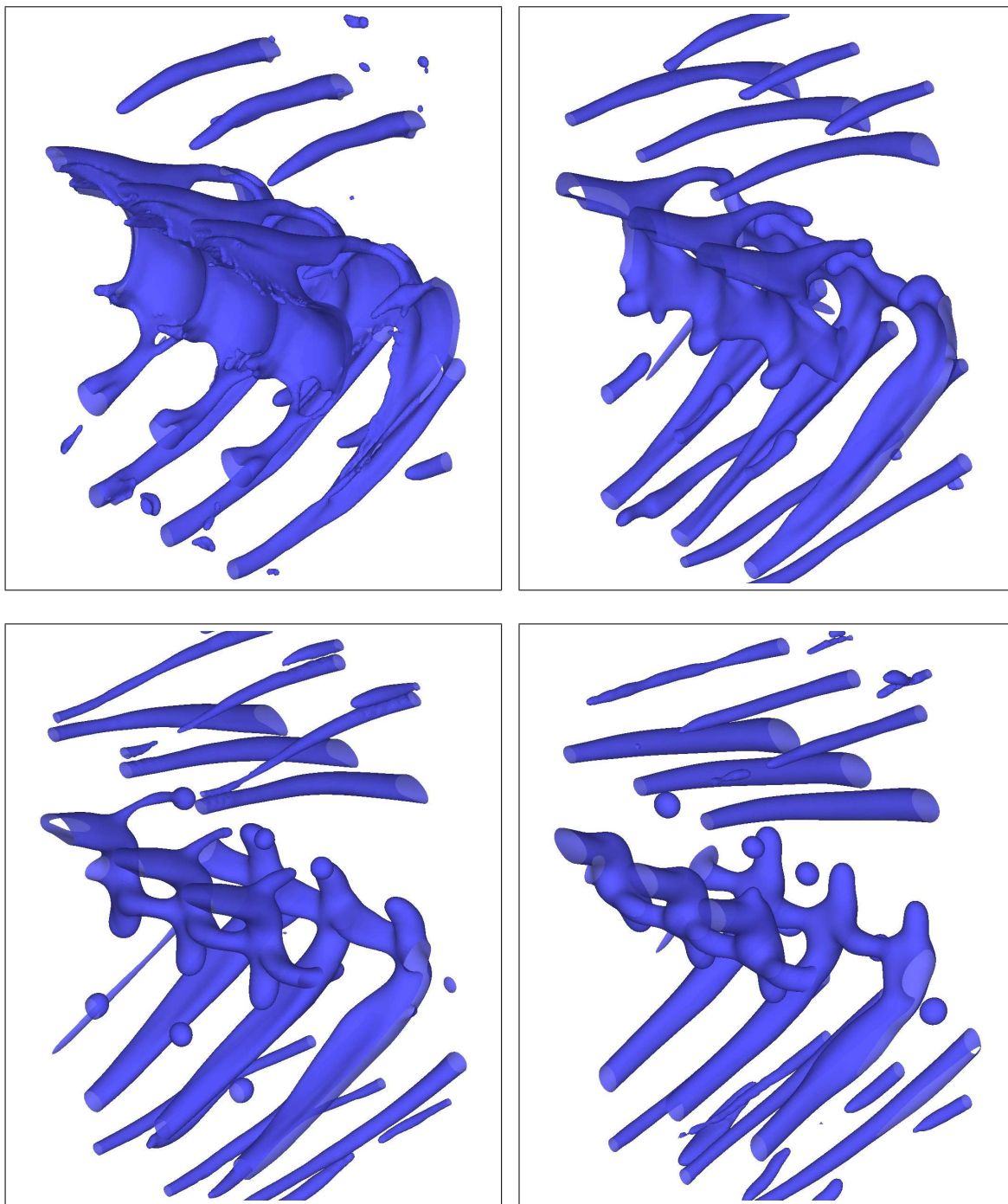


FIG. 8.6 – Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 30 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Seconde partie) • Maillage $128 \times 128 \times 256$ •

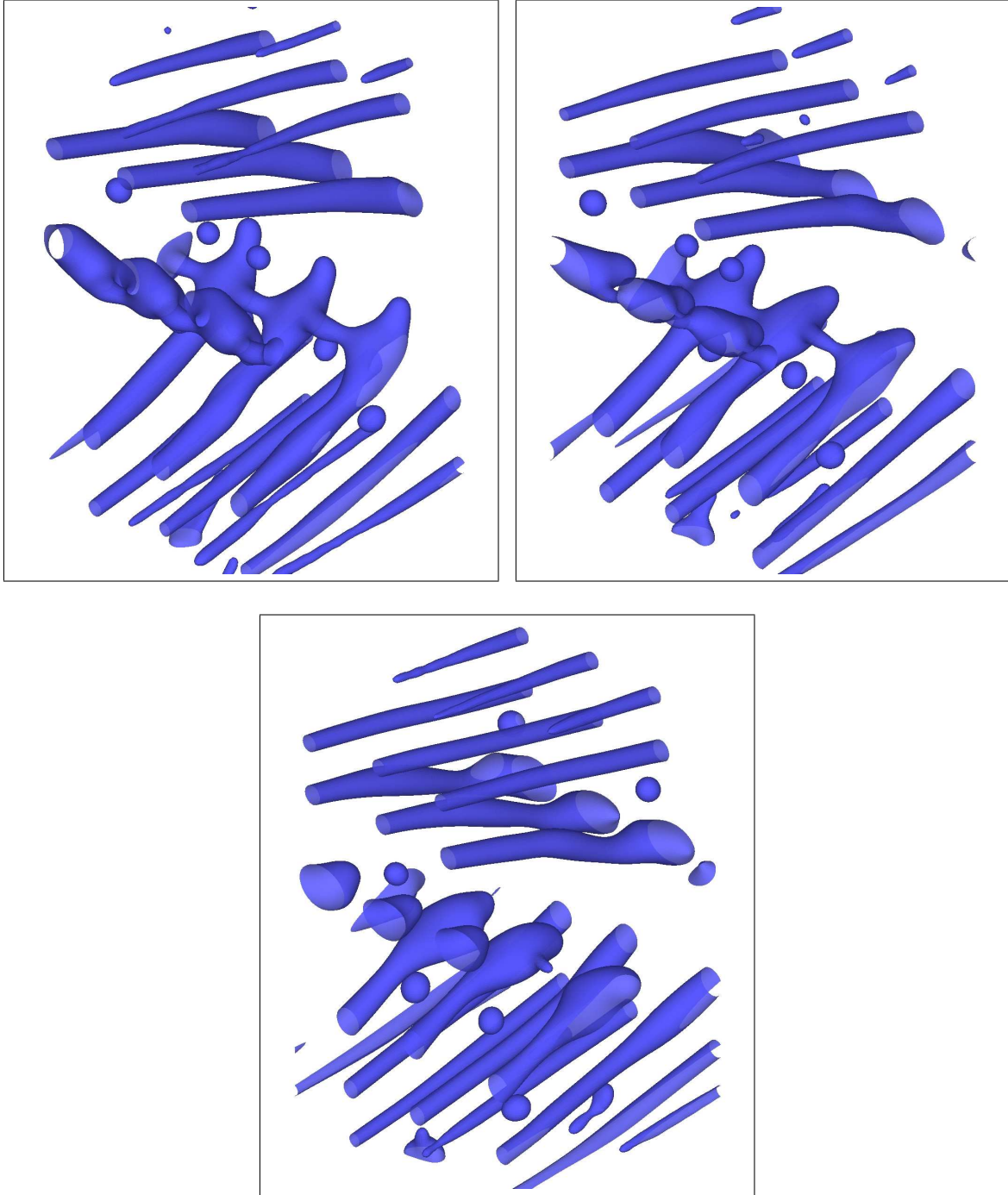


FIG. 8.7 – Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 30 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Troisième et dernière partie) • Maillage 128x128x256 •

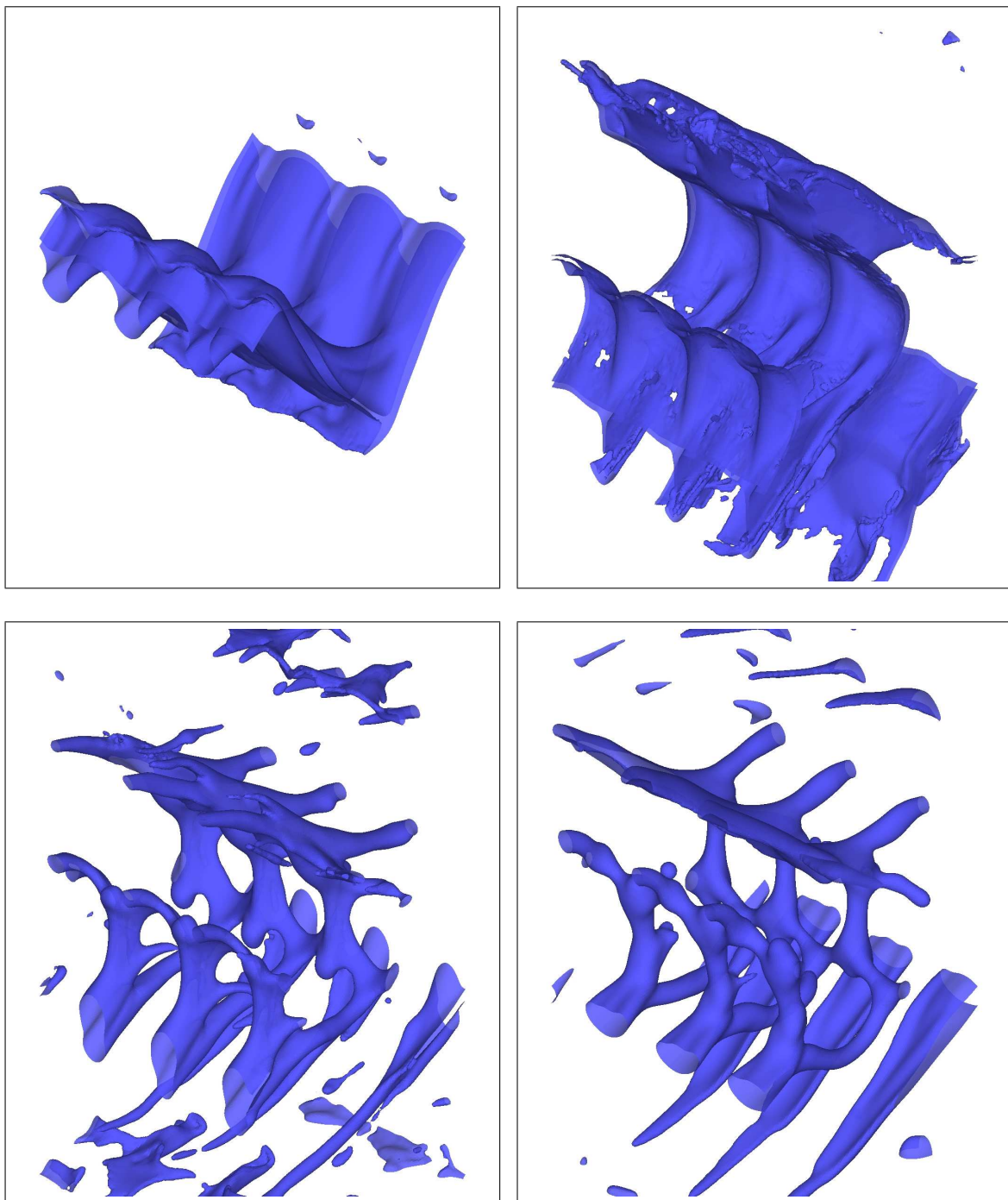


FIG. 8.8 – Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 40 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Première partie) • Maillage 128x128x256 •

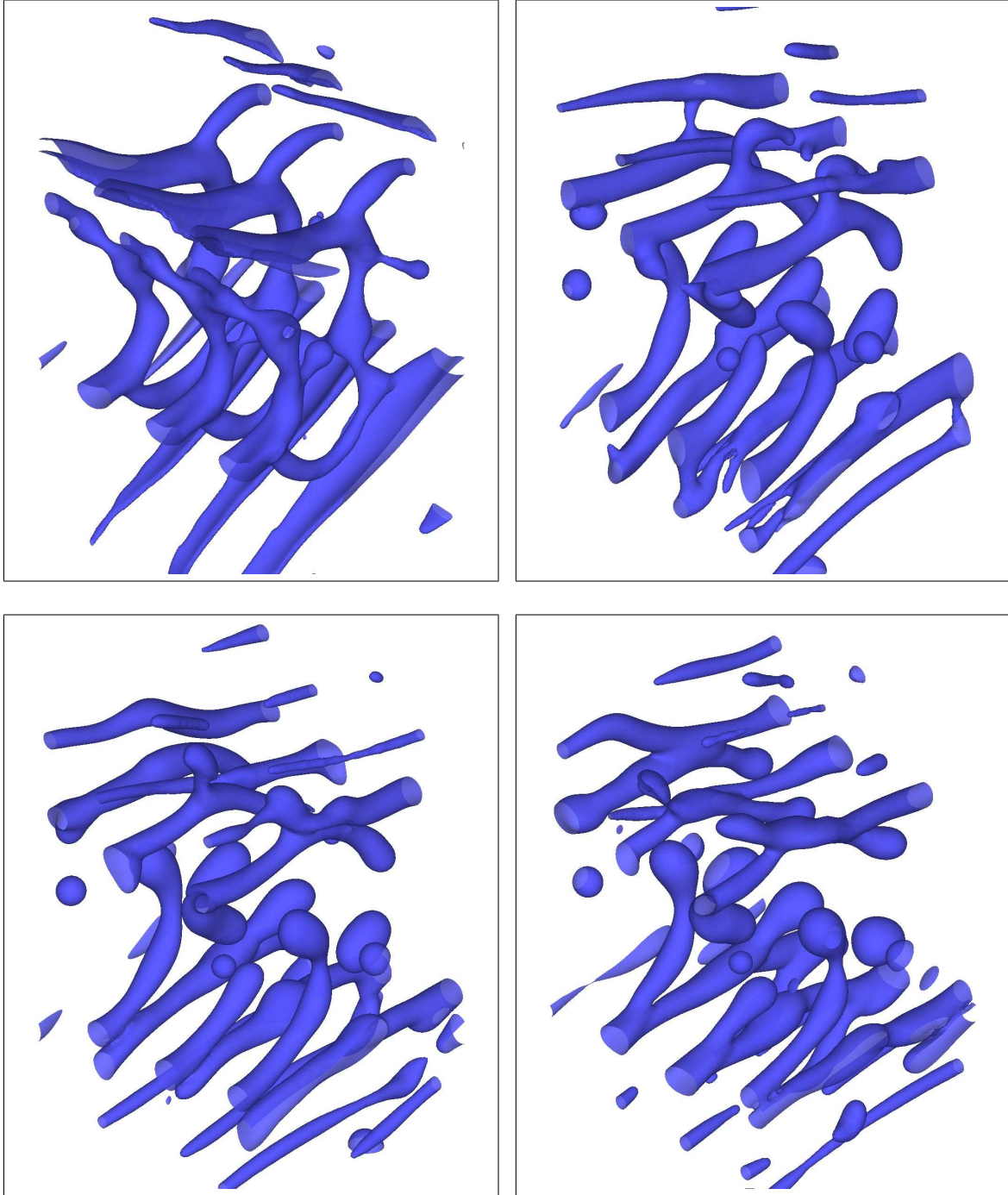


FIG. 8.9 – Simulation périodique tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide • $U_g = 40 \text{ m.s}^{-1}$ et $U_l = 2 \text{ m.s}^{-1}$ • (Seconde et dernière partie) • Maillage 128x128x256 •

Cette simulation ne peut donc être en concordance avec la réalité expérimentale puisque dans des conditions de laboratoire, la dimension transverse de la nappe est très largement supérieure vis à vis de son épaisseur (au moins 100 fois). Il aurait donc fallu considérer une dimension transverse pour la nappe bien supérieure mais le coût du calcul nous a freiné sachant que même dans ce cas le phénomène ligamentaire que nous recherchons n'est pas du tout évident à obtenir. En conclusion, il est très certainement préférable de revenir à une configuration axisymétrique pour réaliser des simulations spatiales tridimensionnelles qui exclue ce problème.

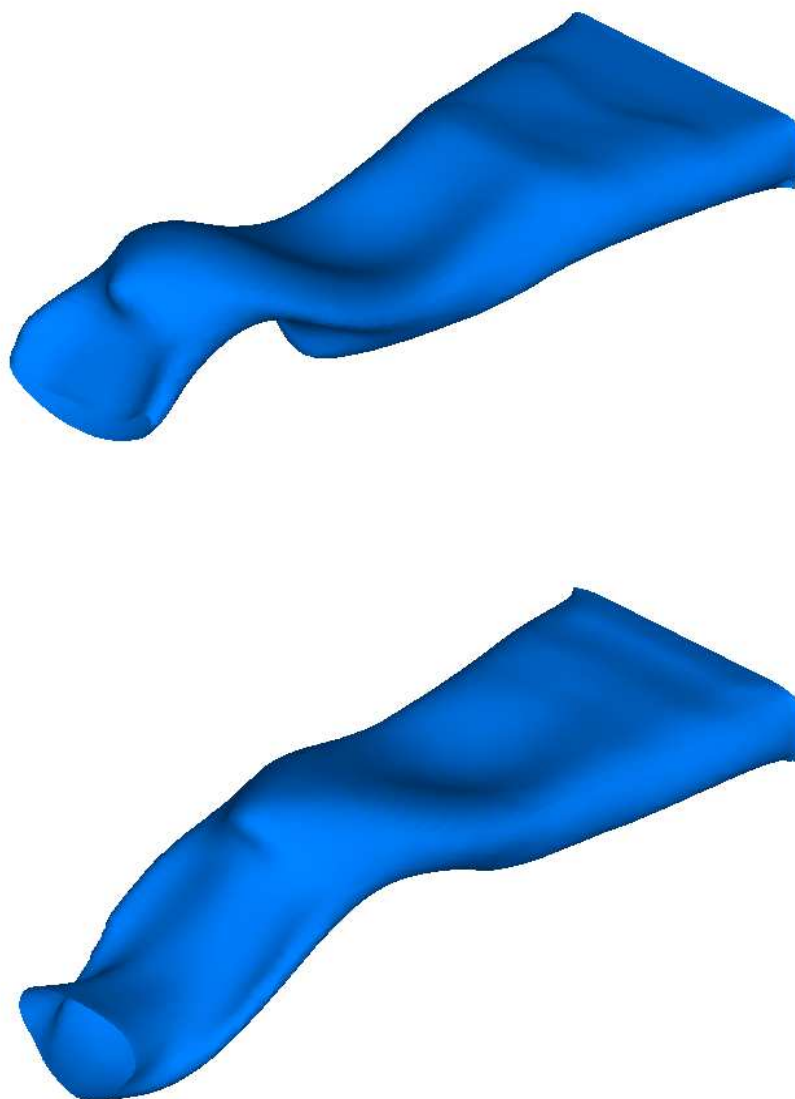


FIG. 8.10 – Simulation spatiale tridimensionnelle de la désintégration assistée d'une nappe liquide. On remarque la manifestation de l'oscillation globale et la formation d'un pseudo ligament • Maillage 128x128x256 •

Conclusion et Perspectives

Cette thèse menée au centre de l'ONERA Toulouse au laboratoire DMAE/MH s'inscrit dans le cadre des études de la fragmentation d'un jet liquide soumis au cisaillement d'un fort courant gazeux. Rappelons que l'objectif global de telles études est la détermination de la granulométrie finale en fonction des conditions amont d'injection car la qualité de la combustion au sein d'un foyer de turbomachine y est étroitement liée.

Le moyen d'étude employé, c'est à dire le développement d'un code de calcul adapté à la simulation du phénomène, est tout à fait original vis à vis des nombreuses études expérimentales et de stabilité qui ont déjà été réalisées à ce jour. En effet, nous avons pu voir que l'outil numérique peut apporter une lumière nouvelle quant aux mécanismes de désintégration.

La première partie du travail de thèse a donc consisté à développer un code de calcul permettant de simuler des écoulements diphasiques incompressibles à phases non miscibles puisque nous avons émis l'hypothèse que le phénomène de désintégration assistée d'un jet liquide rentre dans ce cadre, même si comme pour tout modèle ces hypothèses peuvent être soumises à critiques notamment sur la part compressible du gaz cisaillant. Or, la complexité de l'écoulement nous a contraint à être attentif à la meilleure qualité possible de l'ensemble des schémas et méthodologies numériques employés pour notre code de calcul. Ce travail de développement du code participe ainsi complètement aux recherches faites dans le domaine.

La démarche utilisée étant conforme à une approche à un fluide, la méthodologie numérique doit aussi bien prendre en compte les déformations d'une interface de type fluide/fluide et y compris les ruptures et reconnections que le phénomène de capillarité issu des conditions de saut à l'interface. Nous avons fait le choix du couple prometteur Level-Set/Ghost-Fluid, la fonction Level-Set permettant de réaliser la capture spatio-temporelle d'une interface et la méthode Ghost-Fluid de traiter les conditions de saut associées. La résolution numérique des équations de Navier-Stokes incompressibles est quant à elle assurée par une méthode de projection dans une version classique non incrémentale totalement explicite.

La résolution de l'équation de transport de la Level-Set nécessite l'emploi de schémas numériques d'ordre élevé sous peine de mal capturer les mouvements de l'interface et d'obtenir par voie de conséquence une mauvaise conservation de la masse puisque cette propriété n'est malheureusement pas intrinsèque à la méthode. Il a cependant été montré par la réalisation des cas tests du disque de Zalesak et du serpentín que l'association du schéma d'intégration temporelle Runge-Kutta au 3ème ordre au schéma d'intégration spatiale des termes non-linéaires Weno au 5ème ordre donne des résultats tout à fait satisfaisants voir meilleurs en comparaison des autres méthodes de suivi d'interface existantes. En particulier, il a été établi une version conservative du schéma Weno au 5ème ordre donnant des résultats de meilleure facture relativement à la version non conservative quant au transport de l'interface car la diffusion du schéma est moindre.

Notons à ce sujet qu'il existe aujourd'hui dans la littérature scientifique des classes de schémas Weno [86, 29, 8] encore plus performantes en situation de sous-résolution que celles utilisées dans le présent mémoire par la redéfinition des poids. Nous avons également souligné la nécessité de redistancier la Level-Set pour assurer un calcul correct de la courbure à l'interface par la résolution désormais classique d'une équation de type Hamilton-Jacobi à l'aide des mêmes schémas Runge-Kutta au 3ème ordre et Weno au 5ème ordre. Il est montré que la redistanciation a un effet cumulatif avec les schémas de transport de l'interface sur la précision et la diffusion.

Au final, nous obtenons une méthode de suivi d'interface performante même si la conservation de la masse n'est toujours pas assurée en l'état. Si la méthode Level-Set n'a pas connu à juste titre dans le passé autant de succès que la méthode VOF à cause de cette conservation de la masse, le problème est aujourd'hui largement minoré par l'emploi de schémas d'ordre élevé tels que les schémas Rk3/Weno5/n et Rk3/Weno5/c. Par ailleurs, la méthode Level-Set est connue pour être plus performante que la méthode VOF quant à la qualité du calcul de la courbure à l'interface. La position de l'interface à l'intérieur d'une cellule du maillage est également connue avec plus de précision. De plus, nous avons pu passer en revue différentes méthodologies permettant d'assurer cette conservation de la masse. Le couplage de la méthode Level-Set avec une méthode VOF ou une méthode de suivi de marqueurs en volume permet d'obtenir une méthode hybride assurant un bon compromis entre conservation de la masse et calcul de la courbure même si celui-ci est parasité par le couplage. La méthode par choix de contour semble être encore plus prometteuse par sa simplicité et son efficacité mais elle a par contre le défaut d'être difficilement applicable si l'on ne connaît pas la masse théorique totale de liquide en chaque instant lors d'une simulation.

La méthode Ghost-Fluid a été présentée et employée pour traiter les conditions de saut à l'interface. C'est une méthode explicite permettant d'obtenir des solutions discrètes discontinues à la traversée de l'interface. En comparaison de la méthode CSF qui s'appuie sur une régularisation des discontinuités, la méthode Ghost-Fluid est de toute évidence plus rigoureuse quant à la physique interfaciale. Concrètement, elle nous a permis de traiter explicitement le saut de pression ainsi que les sauts associés au tenseur des contraintes visqueuses dans notre méthode de projection en association avec la méthode Level-Set permettant de localiser finement la position du saut à l'intérieur d'une cellule du maillage. Nous avons pu valider les bonnes performances du code de calcul ainsi obtenu pour simuler des écoulements diphasiques incompressibles à phases non miscibles à travers la réalisation d'une batterie de cas tests académiques. Ils montrent globalement les très bonnes dispositions du code de calcul pour simuler des instabilités interfaciales. Nous avons souligné l'importance du calcul de la courbure à l'interface notamment par la réalisation du cas test des courants parasites. L'impact de la redistance a également été étudié et chiffré.

La seconde partie du travail de thèse a été d'appliquer le code de calcul développé à la simulation de la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux. Le choix de la configuration géométrique s'est porté naturellement sur la nappe liquide. La raison est double : non seulement il existe déjà un grand nombre de résultats expérimentaux et d'études de stabilité linéaire et non-linéaire sur cette configuration pour des raisons de simplicité de mise en oeuvre, mais la réalisation de simples simulations spatiales bidimensionnelles suffit pour étudier l'oscillation globale de la nappe liquide qui contrôle l'ensemble des mécanismes de désintégration. Nous avons ainsi pu valider le comportement du code de calcul vis à vis de ce phénomène en retrouvant des résultats expérimentaux malgré des restrictions numériques. En effet, le code de calcul en l'état nous impose toujours des restrictions sur les propriétés des fluides. En comparaison des propriétés de l'eau et de l'air, les viscosités dynamiques ont ainsi été surestimées tandis que l'air

cisaillant est considéré comme pressurisé à 10 bars. Toutefois, Nous retrouvons bien la dépendance linéaire de la fréquence d'oscillation avec la vitesse de gaz cisaillante et l'existence des zones de fonctionnement A, B et C en fonction des vitesses débitantes comme introduit par Mansour et Chigier [50, 51]. Après cette étape de validation, nous avons pu exploiter les avantages de l'outil numérique pour obtenir de nouveaux résultats,

- On montre par la simulation la forte interaction qui existe entre la dynamique de l'écoulement gazeux et les mouvements de la nappe. La nappe se comporte comme un obstacle solide pour l'écoulement gazeux et les couches limites ont tendance à suivre ses déplacements. En conséquence, de la vorticit   s'accumule aux maximums d'amplitude de la nappe liquide pour finalement cr  er en aval des structures tourbillonnaires dans les creux. Ce m  canisme contribue de fa  on non n  gligeable    l'  tablissement du r  gime   tabli d'oscillation par la cr  ation de zones de souspression relative.
- La libert   de choix des param  tres amont d'injection tels que les vitesses d  bitantes, l'  paisseur de la nappe liquide, la hauteur de la veine d'injection de gaz et surtout l'  paisseur de la couche limite gazeuse nous a permis de proposer une nouvelle expression de la fr  quence r  duite f^* de l'oscillation globale. Elle est trouv  e constante en fonction du rapport des flux de quantit   de mouvement int  gr  s M ,

$$\begin{aligned} \bullet \quad M &= \frac{\rho_g U_g^2 d}{\rho_l U_l^2 2 a} \\ \bullet \quad f^* &= \frac{f a \sqrt{\delta}}{U_g \sqrt{d}} \end{aligned}$$

On a donc d  termin   une d  pendance en racine carr  e de l'  paisseur de la couche limite gazeuse pour la fr  quence d'oscillation, un r  sultat qui    notre connaissance est compl  tement nouveau. En r  alit  , l'  paisseur de vorticit   est tr  s certainement une meilleure longueur pour dimensionner le probl  me par rapport    l'impact de la couche limite gazeuse mais rappelons qu'elle est dans nos simulations proportionnelle    l'  paisseur de la couche limite. Il est trouv  e   galement une influence non n  gligeable de la hauteur de veine de gaz quand celle-ci est de l'ordre de l'  paisseur de la nappe liquide.

En revanche, les simulations tridimensionnelles r  alis  es n'apportent pas autant de r  sultats quant    la dynamique ligamentaire intrins  que    la d  sint  gration assist  e d'un jet liquide. Nous nous heurtons dans ce cas    des co  ts de calcul trop importants car seules des simulations spatiales pourraient permettre de mettre en   vidence la d  pendance de la formation de l'onde transverse avec l'oscillation globale. Toutefois, la r  alisation de simulations temporelles nous a permis de retrouver artificiellement le m  canisme de formation ligamentaire par application d'une onde de perturbation longitudinale repr  sentant l'oscillation globale et d'une onde transverse modulant en   paisseur la nappe liquide. Il a   t   trouv  e une influence importante de la vitesse de l'  coulement gazeux sur le nombre, la forme et la taille des structures finales de liquide obtenues.

Ces simulations de la d  sint  gration assist  e d'une nappe de liquide ont   t   d  licates    r  aliser car elles poussent les possibilit  s du code de calcul dans ses retranchements. Cela d  montre tous les efforts qui restent    fournir pour am  liorer le code de calcul. Un trop fort rapport de densit  

met à mal la stabilité certainement temporelle du code et il est difficile d'avoir des certitudes sur la source du problème. Un nombre de Reynolds trop important dans le gaz met en évidence des problèmes de convergence spatiale en maillage car la dynamique tourbillonnaire est trop complexe. Toujours dans le cas d'un nombre de Reynolds trop important, la condition aux frontières du domaine de type sortie libre utilisée ici ne s'avère pas suffisamment performante. La mauvaise convection sur la frontière du domaine des vortex générés par la nappe provoque des rétroactions nocives sur l'écoulement suffisamment conséquentes pour détériorer la simulation dans des proportions inacceptables.

Il existe toutefois de nombreux axes de recherche qui pourraient permettre d'être encore plus fidèle à la réalité expérimentale. Les méthodes de maillage adaptatif permettraient d'assurer la convergence spatiale en maillage à moindre frais en terme de coût de calcul. La condition sortante sur les frontières du domaine peut être améliorée en trouvant par exemple un moyen de considérer une réelle condition de traction qui nécessite une condition non homogène pour la pression. Une reconsidération plus astucieuse des conditions normale et tangentielle de la vitesse prédite pourrait également apporter une amélioration.

Bien que le code de calcul doive subir des améliorations afin d'ouvrir un peu plus le champ d'investigation, il reste tout de même de nombreuses possibilités numériques à exploiter avec le code de calcul en l'état quant à la simulation de la désintégration assistée d'un jet liquide. Concernant les simulations bidimensionnelles de l'oscillation globale, nous nous sommes dans ce mémoire exclusivement concentré sur la fréquence mais il existe d'autres caractéristiques de l'instabilité à mesurer en détail : le taux de croissance spatial de l'enveloppe de l'oscillation, la longueur d'onde et la vitesse de convection sachant que ces deux dernières sont évolutives avec l'écoulement. Il serait également intéressant de faire le bilan des forces exercées sur la surface de la nappe sur toute une période d'oscillation pour mieux comprendre à la fois les mécanismes de déstabilisation initiaux et d'obtention d'un régime établi. Concernant la dynamique ligamentaire, une étude paramétrique plus détaillée doit être réalisée pour étudier l'influence sur les structures finales de liquide obtenues à l'aide des simulations temporelles tridimensionnelles telles que nous les avons définies. En particulier, l'influence avérée expérimentalement de la tension de surface doit être étudiée. Enfin, des puissances de calcul toujours de plus en plus importantes devraient pouvoir permettre de réaliser des simulations spatiales tridimensionnelles pertinentes sachant que la configuration géométrique axisymétrique pour le jet liquide est de toute évidence plus adéquate.

Bibliographie

- [1] T. Arai and H. Hashimoto. Disintegration of a thin liquid sheet in a concurrent gas stream. In *ICLASS*, 1985.
- [2] F. Barreras. *Experimental Study of the Break-up and Atomization of a planar Liquid Sheet*. PhD thesis, University of Zaragoza, 1998.
- [3] J.B. Bell, P. Colella, and H.M. Glaz. A second-order projection method for the incompressible navier-stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 85 :257–283, 1989.
- [4] A. Benkenida. *Développement et validation d’une méthode de simulation d’écoulements diphasiques sans reconstruction d’interface. Application à la dynamique des bulles de Taylor*. PhD thesis, INPT Toulouse, 1999.
- [5] A. Bourlioux. A coupled level-set volume-of-fluid method for tracking material interfaces. In *Proceedings of the 6th Annual Int. Symposium on Computational Fluid Dynamics, Lake Tahoe, CA, 1995*, 1995.
- [6] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100 :335–354, 1992.
- [7] N. Bremond. *Stabilité et atomisation des nappes liquides*. PhD thesis, Université de Provence - Aix-Marseille I - IRPHE, 2003.
- [8] S. Bryson and D. Levy. Mapped weno and weighted power eno reconstructions in semi-discrete central schemes for hamilton-jacobi equations. *Appl. Numer. Math.*, 56(9) :1211–1224, 2006.
- [9] H. Carentz. *Etude de la Pulvérisation d’une Nappe Liquide Mince*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2000.
- [10] Y.C. Chang, T.Y. Hou, B. Merriman, and S. Osher. A level set formulation of eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 124(2) :449–464, 1996.
- [11] A.J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Math. Comput.*, 22 :745–762, 1968.
- [12] A.J. Chorin. Flame advection and propagation algorithms. *J. Comput. Phys.*, 35 :1–11, 1980.
- [13] F. Couderc and J.L. Estivalezes. Sharp interface capturing method based on level-set method for incompressible flow with surface tension. In *ASME Annual Summer Meeting FEDSM2003-45151*, July 2003.
- [14] F. Couderc and J.L. Estivalezes. Numerical simulation of the air-blasted liquid sheet : development of a dns solver based on the level-set method. In *ILASS Europe Nottingham*, September 2004.

- [15] F. Couderc and J.L. Estivalezes. Direct numerical simulation of plane liquid sheet atomization : a parametric study. In *ILASS America Los Angeles*, June 2005.
- [16] J. Cousin and C. Dumouchel. Effect of viscosity on linear instability of a flat liquid sheet. *Atomization Spray*, 6 :563–576, 1996.
- [17] G.D. Crapper, N. Dombrowski, and G. Pyott. Large amplitude kelvin-helmholtz waves on thin liquid sheets. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 342 :209–224, 1975.
- [18] R. Croce, M. Griebal, and M.A. Alexander. A Parallel Level-Set Approach for Two-Phase Flow Problems with Surface Tension in Three Space Dimensions. Preprint 157, Université de Bonn, 2004.
- [19] B.J. Daly. Numerical study of two fluid rayleigh-taylor instability. *Physics of Fluids*, 10 :297–307, 1967.
- [20] B.J. Daly and A.E. Pracht. Numerical study of density current surges. *Physics of Fluids*, 11 :15–30, 1967.
- [21] R. DeBar. A method in two-d eulerian hydrodynamics. Technical report, Technical Report UCID-19683, Lawrence Livermore National Laboratory, 1974.
- [22] D. Enright, R. Fedkiw, J. Ferziger, and I. Mitchell. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *Journal of Computational Physics*, 183 :83–116, 2002.
- [23] H. Ergolu and N. Chigier. Liquid sheet instability in a coflowing airstream. In *ICLASS*, 1991.
- [24] P.M. Gresho. Minisymposium on outflow conditions for incompressible flow. *NASA STI/Recon Technical Report N*, 92, 1991.
- [25] J.L. Guermond, P. Mineev, and J. Shen. An overview of projection methods for incompressible flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195 :6011–6045, 2006.
- [26] W.W. Hagerty and J.F. Shea. A study of the stability of plane fluid sheets. *Trans. ASME : J. Appl. Mech.*, 22 :509–514, 1959.
- [27] F. Harlow and J. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of Fluids*, 8 :2182–2189, 1965.
- [28] H. Harten, B. Engquist, S. Osher, and S.R. Chakravarthy. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes iii. *J. Comput. Phys.*, 71(2) :231–303, 1987.
- [29] A.K. Henrick, T.D. Aslam, and J.M. Powers. Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes : achieving optimal order near critical points. *J. Comput. Phys.*, 207(2) :542–567, 2005.
- [30] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, 39 :201–225, 1981.
- [31] E.A. Ibrahim. Spatial instability of a viscous liquid sheet. *AIAA Paper 94-0562*, pages 1–7, 1994.
- [32] S.A. Jazayeri and X. Li. Nonlinear instability of plane liquid sheets. *Journal of Fluid Mechanics*, 406 :281–308, 2000.
- [33] G.-S. Jiang and D. Peng. Weighted ENO schemes for hamilton-jacobi equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21-6 :2126–2143, 2000.
- [34] J. Kim and P. Moin. Application of the fractional-step method to the incompressible navier-stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 108, 1985.

-
- [35] D. Kothe. Perspective on eulerian finite volume methods for incompressible interfacial flows. Technical report, Los Alamos National Laboratory, 1999.
- [36] B. Lafaurie, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with surfer. *Journal of Computational Physics*, 113(1) :134–147, 1994.
- [37] H. Lamb. *Hydrodynamics*. Cambridge University Press, 1975.
- [38] L. Lee. *Immersed Interface Methods for Incompressible Flow with Moving Interface*. PhD thesis, Uninersité de Washington, 2002.
- [39] A.H. Lefebvre. *Atomization and Sprays*. Hemisphere, 1989.
- [40] R.J. Leveque and L. Lee. An immersed interface method for incompressible navier-stokes equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 25 :832–856, 2003.
- [41] R.J. Leveque and Z. Li. The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. *SIAM J. Numer. Anal.*, 31(4) :1019–1044, 1994.
- [42] J. Li. Calcul d’interface affine par morceaux (piecewise linear interface calculation). *C. R. Acad. Sci. Paris, série IIb, (Paris)*, 320 :391–396, 1995.
- [43] X. Li and R.S. Tankin. On the temporal instability of a two-dimensional viscous liquid sheet. *J. Fluid Mechanics*, 226 :425–443, 1991.
- [44] X.D. Liu, S. Osher, and T. Chan. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *J. Comput. Phys.*, 115(1) :200–212, 1994.
- [45] E. Lopez-Pages, C. Dopazo, and N. Fueyo. Very-near-field dynamics in the injection of two-dimensional gas jets and thin liquid sheets between two parallel high-speed gas streams. *Journal of Fluid Mechanics*, 515 :1–31, 2004.
- [46] A. Lozano and F. Barreras. Experimental study of the gas flow in an air-blasted liquid sheet. *Experiments in Fluids*, 31 :367–376, 2001.
- [47] A. Lozano, F. Barreras, G. Hauke, and C. Dopazo. Longitudinal instabilities in an air-blasted liquid sheet. *Journal of Fluid Mechanics*, 437 :143–173, 2001.
- [48] M. Kang M., R. Fedkiw, and X.-D. Liu. A boundary condition capturing method for multiphase incompressible flow. *Journal of Scientific Computing*, 15 :143–173, 2000.
- [49] J. Magnaudet, M. Rivero, and J. Fabre. Accelerated flows past a rigid sphere or a spherical bubble. Part 1. Steady straining flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 284 :97–135, 1995.
- [50] A. Mansour and N. Chigier. Disintegration of liquid sheets. *Physics of Fluids A*, 2 :706–719, 1990.
- [51] A. Mansour and N. Chigier. Dynamic behaviour of liquid sheets. *Physics of Fluids A*, 3 :2971–2980, 1991.
- [52] P. Marmottant. *Atomisation d’un liquide par un courant gazeux*. PhD thesis, INPG, Grenoble, 2001.
- [53] P. Marmottant and E. Villersmaux. On spray formation. *Journal of Fluid Mechanics*, 498 :73–111, 2004.
- [54] M.L. Minion and D.L. Brown. Performance of under-resolved two-dimensional incompressible flow simulations. *J. Comput. Phys.*, 122(1) :165–183, 1995.
- [55] M.L. Minion and D.L. Brown. Performance of under-resolved two-dimensional incompressible flow simulations, ii. *J. Comput. Phys.*, 138(2) :734–765, 1997.

- [56] M.L. Minion, D.L. Brown, and R. Cortez. Accurate projection methods for the incompressible navier-stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 168(2) :464–499, 2001.
- [57] D.Q. Nguyen, R. Fedkiw, and M. Kang. A boundary condition capturing method for incompressible flame discontinuities. *J. Comput. Phys.*, 172(1) :71–98, 2001.
- [58] W.F. Noh and P.R. Woodward. Slic (simple line interface calculation). *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics Springer-Verlag New York*, 59 :330–340, 1976.
- [59] G.R. Nukiyama and Y. Tanasawa. Experiments on the atomization of liquids by means of air streams, parts ii and iv. *Trans. Soc. Mech. Eng. Japan*, 5(18) :63–75, 1939.
- [60] M. Oevermann, R. Klein, M. Berger, and J. Goodman. A projection method for two-phase incompressible flow with surface tension and sharp interface resolution, 2000.
- [61] S. Osher and R. Fedkiw. *Level Set Method and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer Applied Mathematical Sciences 153, 2003.
- [62] S. Osher and J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *J. Comput. Phys.*, 79 :12–49, 1988.
- [63] B.J. Parker and D.L. Youngs. Two and three dimensional eulerian simulation of fluid flow with material interfaces. Technical report, UK Atomic Weapons Establishment, Aldermaston, Berkshire, 1992.
- [64] D. Peng, B. Merriman, S. Osher, H. Zhao, and M. Kang. A PDE-based fast local level set method. *J. Comput. Phys.*, 155 :410–438, 1999.
- [65] C.S. Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of Computational Physics*, 25 :220–252, 1977.
- [66] J.E. Pilliod. *An analysis of piecewise linear interface reconstruction algorithms for volume-of-fluid methods*. PhD thesis, University of California, Davis, 1992.
- [67] J.E. Pilliod and E.G. Puckett. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *J. Comput. Phys.*, 199 :465–502, 2004.
- [68] J. Plateau. *Acad. Sci. Bruxelles Mém*, 23 :5, 1849.
- [69] S. Popinet. *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 surfaces libres*. PhD thesis, Uninersité Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2000.
- [70] S. Popinet and S. Zaleski. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 30 :775–793, 1999.
- [71] A. Prosperetti. Motion of two superposed viscous fluids. *Physics of Fluids*, 24 :1217–1223, 1981.
- [72] E. Puckett, A. Almgren, and W. Rider. A high-order projection method for tracking fluid interfaces in variable density incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 130 :269–282, 1997.
- [73] E.G. Puckett. A volume-of-fluid interface tracking algorithm with applications to computing shock wave refraction. In *Fourth International Symposium on Computational Fluid Dynamics, Davis, CA*, pages 933–938, 1991.
- [74] R. Rangel and W.A. Sirignano. The linear and non-linear shear instability of a fluid sheet. *Physics of Fluids A*, 3 :2392–2400, 1991.
- [75] J.W.S. Rayleigh. *Proc. R. Soc. London*, 29 :94, 1879.

-
- [76] J.W.S. Rayleigh. On the stability of jets. *Proc. London Math. Soc.*, 10 :4, 1879.
 - [77] L. Raynal. *Instabilité et entraînement à l'interface d'une couche de mélange liquide-gaz*. PhD thesis, Université Joseph Fourier, Grenoble, 1997.
 - [78] N.K. Rizk and A.H. Lefebvre. The influence of liquid film thickness on airblast atomization. *J. Engng Power*, 102 :706–710, 1980.
 - [79] G. Russo and P. Smereka. A remark on computing distance functions. *J. Comput. Phys.*, 163(1) :51–67, 2000.
 - [80] J.S. Saltzman and E.G. Puckett. A 3-d adaptive mesh refinement algorithm for multima-
terial gas dynamics. *Physica D*, 60 :84–104, 1992.
 - [81] F. Savart. Memoire sur la constitution des veines liquides lancees par des orifices circulaires
en mince paroi. *Ann. de chim.*, 53 :337–398, 1833.
 - [82] F. Savart. Memoire sur le choc d'une veine liquide lancee sur un plan circulaire. *Ann. de
chim.*, 54 :56–87, 1833.
 - [83] F. Savart. Mémoire sur le choc de deux veines liquides animees de mouvements directement
opposes. *Ann. de chim.*, 55 :257–310, 1833.
 - [84] F. Savart. Suite du memoire sur le choc d'une veine liquide lancee sur un plan circulaire.
Ann. de chim., 54 :113–145, 1833.
 - [85] S. Schaffer. A semicoarsening multigrid method for elliptic partial differential equations
with highly discontinuous and anisotropic coefficients. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(1) :228–
242, 1998.
 - [86] S. Serna and A. Marquina. Power eno methods : a fifth-order accurate weighted power eno
method. *J. Comput. Phys.*, 194(2) :632–658, 2004.
 - [87] C.W. Shu. ENO and WENO schemes for hyperbolic conservation laws. Technical report,
ICASE, 1997.
 - [88] C.W. Shu and S. Gottlieb. Total variation diminishing runge-kutta schemes. *Math. Com-
put.*, 67(221) :73–85, 1998.
 - [89] C.W. Shu and G.S. Jiang. Efficient implementation of weighted eno schemes. *J. Comput.
Phys.*, 126(1) :202–228, 1996.
 - [90] C.W. Shu and S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-
capturing schemes. *J. Comput. Phys.*, 77(2) :439–471, 1988.
 - [91] C.W. Shu and S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-
capturing schemes,ii. *J. Comput. Phys.*, 83(1) :32–78, 1989.
 - [92] C. Siegler, A. Lozano, F. Barreras, and D. Low. The effects of sheet thickness on the
oscillation of an air-blasted liquid sheet. *Experiments in Fluids*, 39 :127–139, 2005.
 - [93] H.B. Squire. Investigation of the instability of a moving film. *Brit.J. Appl. Phys.*, 4 :167–
169, 1953.
 - [94] B.E. Stapper and G.S. Samuelsen. An experimental study of the breakup of a two-
dimensional liquid sheet in the presence of co-flow air shear. In *AIAA Paper 89-0461*,
1990.
 - [95] B.E. Stapper and G.S. Samuelsen. An experimental study of the effects of liquid properties
on the breakup of a two-dimensional liquid sheet. In *Gas Turbine and Aeroengine Congress,
Belgium*, 1990.

- [96] M. Sussman. A second order coupled level-set and volume of fluid method for computing the growth and collapse of vapor bubbles. *Journal of Computational Physics*, 187 :110–136, 2003.
- [97] M. Sussman, A.S. Almgren, J.B. Bell, P. Colella, L.H. Howell, and M.L. Welcome. An adaptive level set approach for incompressible two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 148(1) :81–124, 1999.
- [98] M. Sussman and E. Fatemi. An efficient, interface-preserving level set redistancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(4) :1165–1191, 1999.
- [99] M. Sussman and E.G. Puckett. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 162(2), 2000.
- [100] M. Sussman, M. Smereka, and S. Osher. A level-set approach for computing solutions to incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 114 :146–159, 1994.
- [101] S. Tanguy. *Développement d’une méthode de suivi d’interface. Applications aux écoulements diphasiques*. PhD thesis, Université de Rouen - CORIA, 2004.
- [102] O. Tatebe. *MGCG Method, A Robust and Highly Parallel Iterative Method*. PhD thesis, University of Tokyo, 1996.
- [103] G.I. Taylor. The dynamics of thin sheets of fluid i. water bells. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 253 :280–296, 1959.
- [104] R. Temam. Sur l’approximation de la solution des équations de navier-stokes par la méthode des pas fractionnaires. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 33 :377–385, 1969.
- [105] A. Toutant. Interaction interfaces et turbulence : application une colonne à bulles isotherme. Technical report, Rapport de stage fin d’études, ENSTA-DTP/SMTH/LDTA, CEA/Grenoble, 2003.
- [106] U. Trottenberg and A. Schuller. *Multigrid*. Academic Press, Inc., 2001.
- [107] G. Tryggvason, B. Bunner, O. Ebrat, and W. Tauber. Computations of multiphase flows by a finite difference/front tracking method, i. ii. et iii. In *Von Karman Institute for Fluid Dynamics*, 1998.
- [108] G. Tryggvason, B. Bunner, D. Juric, and W. Tauber. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *J. Comput. Phys.*, 169(2) :708–759, 2001.
- [109] G. Tryggvason, W. Tauber, and S.O. Unverdi. The nonlinear behavior of a sheared immiscible fluid interface. *Physics of Fluids*, 14, 2002.
- [110] G. Tryggvason and S.O. Unverdi. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *J. Comput. Phys.*, 100(1) :25–37, 1992.
- [111] P. Wesseling. *An Introduction to Multigrid Methods*. R.T. Edwards, Inc., 1992.
- [112] J.L. York, H.E. Stubbs, and M.R. Tek. The mechanisms of disintegration of liquid sheets. *Trans. ASME*, pages 1279–1286, 1953.
- [113] T. Young. *Philos. Trans. R. Soc. London*, 95 :65, 1805.
- [114] S.T. Zalesak. Fully multidimensional flux-corrected transport. Technical report, 1978.
- [115] S. Zaleski and P. Yecko. Two-phase shear instability : Waves, fingers and drops. *Ann. N.Y. Acad. Sci.*, 898 :127–143, 2000.
- [116] S. Zaleski, P. Yecko, T. Boeck, J. Li, and E. Lopez-Pages E. Ligament formation in sheared liquid-gas layers. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 21 :59–76, 2007.

Résumé

L'objet de cette thèse a été de développer un code de calcul pour la simulation d'écoulements diphasiques de fluides non miscibles, incompressibles et isothermes afin de l'appliquer au phénomène de fragmentation d'un jet liquide, et plus particulièrement à la désintégration assistée d'une nappe de liquide par deux écoulements d'air portés à haute vitesse.

Les choix des hypothèses physiques et des schémas numériques associés ont été fait afin de respecter au mieux la physique complexe de brisure d'un jet liquide. La résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles est faite de façon directe par le biais d'une méthode de projection. La méthode naissante et prometteuse Level-Set assure quant à elle le suivi numérique de la surface de séparation entre deux fluides non miscibles. Enfin, la méthode Ghost Fluid permet un traitement correct des discontinuités à la traversée de l'interface en préservant au niveau discret les conditions de saut entre équilibre des forces de capillarité, de pression et de viscosité. Les bonnes aptitudes de tels schémas numériques sont montrées à travers une batterie de cas tests académiques.

Les mécanismes physiques mis en jeu lors de l'atomisation primaire d'un jet liquide ont fait l'objet de nombreuses études théoriques et expérimentales. Les instabilités se développant à la surface du liquide sont multiples et clairement tridimensionnelles. Actuellement et malgré beaucoup d'efforts de recherche, aucune théorie ou modèle ne rend compte rigoureusement de ce phénomène. Or, il est montré que l'outil numérique peut apporter une lumière nouvelle. Par exemple, l'impact de la couche limite gazeuse sur la fréquence d'oscillation est étudié. Nous avons également pu retrouver par la simulation la dynamique ligamentaire intrinsèque à la désintégration assistée d'un jet liquide.

Mots-clés: mécanique des fluides numérique, méthode de projection, méthode Level Set, méthode Ghost Fluid, atomisation, nappe liquide

Abstract

The object of this thesis was to develop a numerical code for the simulation of diphasic flow with immiscible, incompressible and isothermal fluids in the aim to apply it to the phenomenon of fragmentation of a liquid jet, and more particularly to the air-blasted liquid jet atomization.

Physical hypotheses and associated numerical schemes choices were made to respect in best the complex physic of a liquid jet atomization. The incompressible Navier-Stokes equations numerical resolution is made in a DNS way by means of a projection method. Afterwards, the rising and promising Level-Set method insures the numerical tracking of the surface between two immiscible fluids. Finally, the Ghost Fluid method allows a correct treatment of the discontinuities crossing the interface by respecting at the discret level jump conditions between balance of the capillarity, pressure and viscosity forces. The good capacities of such numerical schemes are shown through some academic tests cases.

The physical mechanisms involved during the primary atomization of a liquid jet made the object of numerous theoretical and experimental studies. The instabilities developing at the surface of the liquid are multiple and clearly three-dimensional. At present and in spite of many research efforts, no theory or model reports strictly this phenomenon. Now, it is shown that the numerical tool can throw a new light. For example, the impact of the gaz boundary layer on the oscillation frequency is studied. We were also able to find by the simulation the intrinsic ligament dynamics in the air-blasted atomization by a liquid jet.

Keywords: numerical fluid dynamics, projection method, Level Set method, Ghost Fluid method, atomization, liquid sheet

