Modélisation locale diphasique eau-vapeur des écoulements dans les générateurs de vapeur

Romain Denèfle

▶ **To cite this version:**

Romain Denèfle. Modélisation locale diphasique eau-vapeur des écoulements dans les générateurs de vapeur. Autre. Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, 2013. Français. NNT : 2013BOR14901 . tel-00919975

HAL Id: tel-00919975

https://theses.hal.science/tel-00919975

Submitted on 17 Dec 2013

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.

THÈSE

PRÉSENTÉE À

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1

ÉCOLE DOCTORALE DES SCIENCES PHYSIQUES DE L'INGÉNIEUR

Par Romain DENÈFLE

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : MÉCANIQUE

Modélisation locale diphasique eau-vapeur des écoulements dans les générateurs de vapeur

Directeur de recherche : Jean-Paul CALTAGIRONE

Soutenue le : 14 novembre 2013

Devant la commission d'examen formée de :

M SIMONIN, Olivier	Professeur	IMFT	Président
M ZALESKI, Stéphane	Professeur	UMPC Paris 6	Rapporteur
M LEGENDRE, Dominique	Professeur	IMFT	Rapporteur
M COLIN, Thierry	Professeur	IPB	Examinateur
M CALTAGIRONE, Jean-Paul	Professeur	IPB	Directeur de Thèse
M VINCENT, Stéphane	Directeur de Recherche	IPB	Co-directeur
M MIMOUNI, Stéphane	Ingénieur chercheur	EDF R&D	Tuteur Industriel

Université Bordeaux 1
Les Sciences et les Techniques au service de l'Homme et de l'environnement

Abstract

Local two-phase modeling of the water-steam flows occurring in steam generators

The present study is related to the need of modeling the two-phase flows occurring in a steam generator (liquid at inlet and vapour at outlet). The choice is made to investigate a hybrid modeling of the flow, considering the gas phase as two separated fields, each one being modeled with different closure laws. In so doing, the small and spherical bubbles are modeled through a dispersed approach within the two-fluid model, and the distorted bubbles are simulated with an interface locating method. The main outcome is about the implementation, the verification and the validation of the model dedicated to the large and distorted bubbles, as well as the coupling of the two approaches for the gas, allowing the presentation of demonstration calculations using the so-called hybrid approach.

Keywords : Multiphas flows, two-fluid model, multiphase approach, surface tension, dispersed field, model coupling.

Résumé

Ce travail de thèse est lié au besoin de modélisation des écoulements diphasiques en générateurs de vapeur (entrée liquide et sortie vapeur). La démarche proposée consiste à faire le choix d'une modélisation hybride de l'écoulement, en scindant la phase gaz en deux champs, modélisés de manières différentes. Ainsi, les petites bulles sphériques sont modélisées avec une approche dispersée classique avec le modèle eulérien à deux fluides, et les bulles déformées sont simulées à l'aide d'une méthode de localisation d'interface. Le travail effectué porte sur la mise en place, la vérification et la validation du modèle dédié aux larges bulles déformées, ainsi que le couplage entre les deux approches pour le gaz, permettant des premiers calculs de démonstration utilisant l'approche hybride complète.

Mots clés : Écoulements diphasiques, modèle à deux fluides, approche multiphasique, tension de surface, champ dispersé, couplage de modèles.

Remerciements

Je remercie en premier lieu Dominique Legendre et Stéphane Zaleski pour avoir accepté d'être les rapporteurs de mes travaux de thèses. Merci également à Thierry Colin et Olivier Simonin pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Un grand merci à Jean-Paul Caltagirone et Stéphane Vincent, ainsi qu'à toute l'équipe du laboratoire TREFLE qui a pu m'accompagner lors de mes passages du coté de Bordeaux.

Merci au groupe I81, l'équipe NEPTUNE, mais aussi les autres, pour l'ambiance à Chatou. Je pense plus particulièrement à Stéphane qui m'a encadré pendant ces trois ans, que la force reste avec toi (sans te coller à la paroi !), Jérôme pour ses explications qui rendent moins floues les flux (et conservatifs en plus !), Cyril pour sa précieuse aide en poésie C/C++ et autres langues musicales.
Merci à l'équipes des thésard(e)s, Clara, Avner, Sana, Katerina, Christophe, Bertrand et Khaled pour toutes les discussions, repas et sorties que nous avons pu partager.

Merci à mes parents et aux proches qui ont fait le déplacement (et ont pour certains subi le poids du décalage horaire) pour assister à ma soutenance. Merci notamment à l'équipe d'enfer qui a organisé le buffet de ma soutenance !

Merci à Claire, enfin, qui a su me supporter et s'occuper de Zazie et de moi-même pendant les derniers mois !

Sans oublier bien sûr, tous ces petits utilitaires que l'on ne nomme plus, qui m'ont été plus qu'utiles pour mener à bien ces travaux...

Sommaire

Nomenclature **ix**

Introduction **1**
1 Contexte Industriel . . . 1
1.1 Principe d'un réacteur nucléaire à eau . . . 2
1.2 Cadre de la thèse . . . 4
2 Modélisation des écoulements diphasiques . . . 5
2.1 Notions . . . 5
2.2 Topologie des Écoulements diphasiques . . . 6
2.3 Modèles 2-phases, 2-champs . . . 7
2.4 Modèles 2-phases, n-champs . . . 12
Chapitre I : Modèles . . . 17
Chapitre II : Vérification du modèle d'interface localisée sur des cas analytiques . . . 17
Chapitre III : Modélisation d'interfaces localisées - Montée de bulles . . . 18
Chapitre IV : Simulations à l'aide du modèle hybride multichamp . . . 18

I Modèles **19**
1 Formalisme à deux fluides . . . 19
1.1 Opérateur de moyenne volumique . . . 19
1.2 Équations moyennées en volumique . . . 20
2 Bulles sphériques - gaz dispersé . . . 23
2.1 Force de traînée . . . 23
2.2 Force de lift . . . 24
2.3 Force de masse ajoutée . . . 24
2.4 Dispersion turbulente . . . 25
3 Larges bulles - gaz continu . . . 25
3.1 Frottement interfacial . . . 25
3.2 Force de tension de surface . . . 26
3.3 Compression artificielle de l'interface . . . 27
3.4 Vers le dispersé : cas d'interfaces mal résolues . . . 30
4 Transferts entre champs . . . 32

4.1 Échanges entre deux champs gaz coexistants . . . 33
4.2 Transition d'un champ dispersé vers un champ continu . . . 34
4.3 Transition d'un champ continu vers un champ dispersé . . . 35
4.4 Approche hybride complète . . . 36
4.5 Échanges thermiques . . . 37
5 Modélisation de la turbulence . . . 37
5.1 Simulation numérique directe : DNS . . . 37
5.2 Approches moyennées . . . 38

II Vérification du modèle d'interface localisée sur des cas analytiques 45
1 Étape de compression artificielle . . . 45
1.1 Compression 1D . . . 46
1.2 Compression 2D . . . 48
1.3 Compression 3D . . . 49
1.4 Conclusion . . . 50
2 Bulle statique . . . 51
2.1 Étude sur maillages réguliers carrés . . . 51
2.2 Reconstruction . . . 53
2.3 Courants parasites . . . 54
2.4 Résultats . . . 55
3 Oscillations de bulles . . . 58
3.1 Théorie . . . 58
3.2 Modélisation numérique . . . 59
3.3 Résultats . . . 59
4 Conclusion . . . 62

III Modélisation d'interfaces localisées - Montée de bulles 63
1 Benchmark de Hysing . . . 63
1.1 Cas test numéro 1 . . . 66
1.2 Cas test numéro 2 . . . 68
2 Expériences de Raymond & Rosant . . . 72
2.1 Présentation des conditions expérimentales . . . 72
2.2 Modélisation numérique . . . 73
2.3 Résultats . . . 75
3 Expériences de Bhaga & Weber . . . 76
3.1 Présentation des conditions expérimentales . . . 77
3.2 Modélisation numérique . . . 77
3.3 Résultats . . . 78
4 Coalescence . . . 79
4.1 Test de séparation d'interfaces . . . 80
4.2 Expérience de Chen *et al.* . . . 80
4.3 Expérience de Brereton et Korotney (1991) . . . 84
4.4 Conclusion . . . 88
5 Colonne de bulles - Deen *et al.* . . . 88

5.1 Description de l'expérience . . . 88
5.2 Modélisation numérique . . . 89
5.3 Résultats . . . 90
5.4 Conclusion . . . 94
6 Vers le cas industriel - Conditions GV . . . 94
6.1 Montée d'une bulle isolée . . . 94
6.2 Interaction d'une bulle avec un obstacle . . . 95
6.3 Conditions aux limites périodiques . . . 97
6.4 Conclusion . . . 97
7 Conclusion . . . 98

IV Simulations à l'aide du modèle hybride multichamp 99
1 Cas de démonstration . . . 99
2 De l'approche dispersée vers le continu . . . 101
2.1 Interaction d'un panache avec une interface . . . 101
2.2 Activation de la création de bulles localisées . . . 102
3 De l'approche continue vers le dispersé . . . 103
3.1 Glissement interfacial . . . 103
3.2 Jet impactant . . . 105
3.3 Conclusion . . . 108
4 Comparaisons expérimentales . . . 108
4.1 Jet de bulles - Castillejos . . . 108
4.2 Jet pénétrant - Cummings & Chanson . . . 114
4.3 Conclusion . . . 116
5 Conclusion . . . 118

Conclusions et perspectives 119
Perspectives . . . 121
Communications & visibilité . . . 122

A Extension à l'étude des surfaces libres 125
1 Cas de l'écoulement autour d'un bump . . . 125
2 Instabilité de Rayleigh-Taylor . . . 126
2.1 Théorie . . . 126
2.2 Simulation numérique . . . 127
3 Conclusion . . . 128

B Thermique 131
1 Transferts thermiques interfaciaux . . . 131
1.1 Bulles dispersées . . . 132
1.2 Modèle de larges interfaces - LIM . . . 132
2 Transferts thermiques (conduction) . . . 132
2.1 Théorie . . . 132
2.2 Étude numérique . . . 133
3 Changement de phase - Ébullition d'une bulle sphérique . . . 134

4 Conclusion 136

Bibliographie **147**

Nomenclature

Lettres latines

A_i	m^{-1}	Densité volumique d'aire interfaciale
$\mathscr{A}$	m^2	Aire
C	$-$	Coefficient multiplicatif
d	m	Diamètre
g	$m \cdot s^{-2}$	Accélération de pesanteur
H	$J \cdot kg^{-1}$	Enthalpie
K	$m^2 \cdot s^{-1}$	Coefficient de diffusion
$\mathbf{M}$	$kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-2}$	Transfert de quantité de mouvement
$\mathbf{n}$	$-$	Normale à une surface (unitaire)
P	Pa ou bar	Pression
$\mathbf{q}$	$W \cdot m^{-2}$	Flux thermique
R	m	Rayon
S	m^2	Surface
t	s	Temps
T	K	Température
$\mathbb{T}$	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-2}$	Tenseur des contraintes visqueuses
$\mathbf{U}$	$m \cdot s^{-1}$	Vitesse
$\mathbf{x}$	m	Vecteur position

Lettres Grecques

α	$m^3 \cdot m^{-3}$	Fraction Volumique
β	$-$	Coefficient de phase/champ
Γ	$kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$	Transfert de masse interfacial
ϵ	$J \cdot kg^{-1}$	Dissipation turbulente
ε	$m^2 \cdot s^{-1}$	Coefficient de diffusion de compression artificielle
ζ	$W \cdot m^{-3} \cdot K^{-1}$	Coefficient d'échange thermique
κ	m^{-1}	Courbure
λ	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	Conductivité thermique
μ	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$	Viscosité dynamique
ν	$m^2 \cdot s^{-1}$	Viscosité cinématique
ξ	$-$	Circularité
Π	$W \cdot m^{-3}$	Transfert thermique interfacial
ρ	$kg \cdot m^{-3}$	Masse volumique
σ	$N \cdot m^{-2}$	Tension de Surface
τ	(s)	Temps caractéristique (physique ou non)
ω	s^{-1}	Pulsation
Ω	m^3	Volume

Nombres sans dimension

Re	$\frac{\rho d U}{\mu}$	Nombre de Reynolds
We	$\frac{\rho d U_r^2}{\sigma}$	Nombre de Weber
Mo	$\frac{g\mu^2}{\rho\sigma^3}$	Nombre de Morton
Eo	$\frac{gd^2\Delta\rho}{\sigma}$	Nombre d'Eötvös
Co	$\frac{\mathbb{U} \cdot \Delta t}{\Delta x}$	Nombre de Courant

Opérateurs

∇	Nabla : $(\partial_x, \partial_y, \partial_z)$
∂_x	Dérivation par rapport à la variable x
δ	Discrétisation
Δ	Différence
$\|.\|$	Norme vectorielle
$\wedge$	Produit vectoriel
$\cdot$	Produit scalaire
$\overline{\varphi}$	Moyenne de φ
$\mathbf{u}$	Notation vectorielle ($u = \|\mathbf{u}\|$)

Indices et exposants

$i,\ j,\ k$	Directions spatiales (resp. selon x, y et z)
$I,\ J$	Indices de discrétisation spatiale
$k,\ p$	Phases ou champs
l	Phase liquide
v	Phase vapeur
cg	Champ gaz continu
dg	Champ gaz dispersé
cl	Champ liquide continu
dl	Champ liquide dispersé
A	Masse ajoutée
D	Traînée
L	Lift
TD	Dispersion turbulente
Int	Interfacial(e)
SM	Sous-maille
T	Turbulent
n	Variable pour le pas de temps courant
$n+1$	Variable pour le pas de temps suivant

Acronymes

CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant - Friedrich - Lewy
CSF	Continuum Surface Force
CPU	Central Processing Unit
DNS	Direct Numerical Simulation
GV	Générateur de Vapeur
ITM	Interface Tracking Method
LES	Large Eddy Scales
LIM	Large Interface Model
RANS	Reynolds Average Navier-Stokes equation
TKE	Turbulent Kinetic Energy
URANS	Unsteady Reynolds Average Navier-Stokes equation
VOF	Volume Of Fluid

Introduction

Cette première partie, basée sur des publications scientifiques, collige l'état de l'art dans le domaine de la modélisation numérique des écoulements diphasiques eau-vapeur. Une attention plus particulière sera portée aux méthodes locales avec traitement de l'interface liquide-gaz, notamment pour les applications en générateur de vapeur.

Mon travail de thèse a été mené dans le cadre du project NEPTUNE, financé par le CEA (Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives), EDF, l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire) et AREVA-NP, en collaboration CIFRE avec le laboratoire TREFLE (TRansferts Écoulements FLuides Énergétiques, UMR 8508) à I2M (Bordeaux, France). Le sujet de ce travail est :

Modélisation locale diphasique eau-vapeur des écoulements dans les générateurs de vapeur

Cette introduction s'articule comme suit autour de quatre parties. Dans un premier temps, le contexte industriel dans lequel s'inscrit cette thèse est présenté. Ensuite, on rappelle les différentes approches possibles, d'une part pour l'étude numérique des écoulements diphasiques, d'autre part pour la modélisation des termes de turbulence. Puis, on expliquera la logique des choix de méthode qui ont été fait en amont et au cours de ce travail, en présentant de manière plus aboutie l'approche et la démarche qui seront retenues. Enfin, le contenu de chaque chapitre sera succinctement présenté.

1 Contexte Industriel

Les écoulements diphasiques interviennent dans de nombreux équipements industriels tels que les centrales nucléaires, les échangeurs de chaleurs et les réacteurs chimiques, par exemple. Se posent alors des problèmes à la fois dans des géométries complexes, et pour des conditions physiques (pression, température) assez contraignantes. Le besoin de compréhension dans ce domaine de la mécanique des fluides a permis de nombreuses études tant expérimentales que numériques. Ce travail est lié aux besoins des centrales nucléaires et plus particulièrement à la compréhension des écoulements diphasiques en générateurs de vapeur.

1.1 Principe d'un réacteur nucléaire à eau

Les réacteurs à eau pressurisée (REP) ou bouillante (REB) ont un fonctionnement relativement similaire. Le principe est celui d'une centrale thermique, où la finalité est de porter un fluide à ébullition à l'aide d'une source de chaleur afin de faire tourner les pales d'un alternateur, lequel produit le courant électrique. La source de chaleur est ici la fission nucléaire. Dans les réacteurs à eau, on se sert du fait que l'eau combine les propriétés de fluide caloporteur, c'est-à-dire d'extracteur de l'énergie thermique de la source, et de modérateur du flux neutronique de cœur. La principale différence entre REP et REB réside dans le fait que pour les réacteurs à eau pressurisée, le circuit réfrigérant le cœur et le circuit actionnant la rotation des pales des turbines sont séparés en un circuit primaire et un circuit secondaire. Dans le cas d'un réacteur à eau pressurisée (figure 1), les transferts thermiques entre ces deux circuits ont lieu dans un composant : le générateur de vapeur (GV).

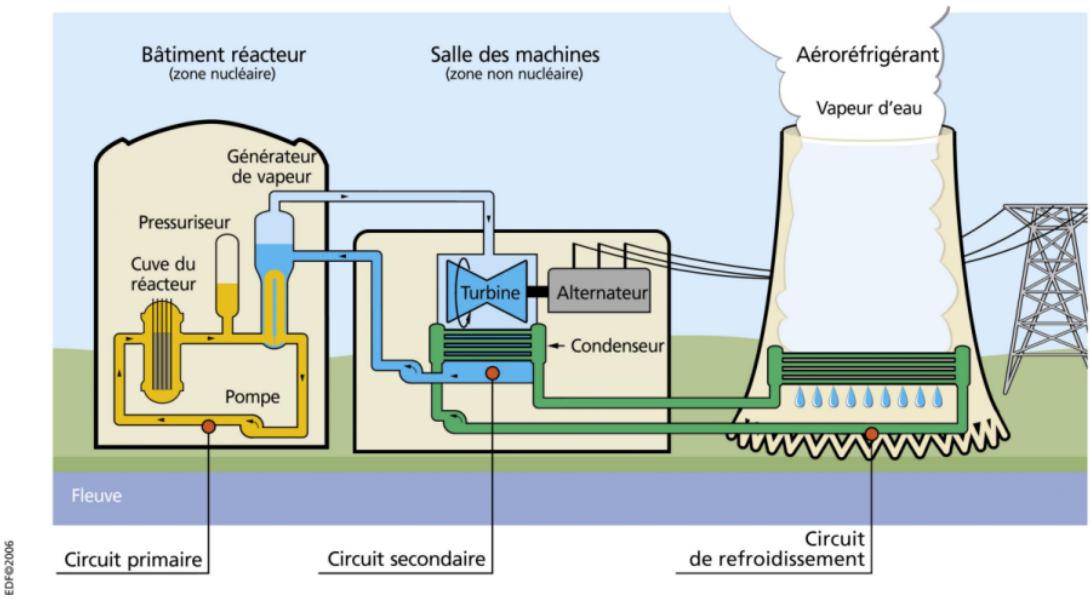


FIGURE 1 – *Représentation schématique ouverte d'une centrale nucléaire à eau pressurisée illustrant son fonctionnement (Source EDF).*

1.1.1 Rôle du générateur de vapeur

En fonctionnement normal, le circuit primaire est maintenu liquide à l'aide du pressuriseur. En entrée de générateur de vapeur, l'eau du circuit primaire atteint $P_1 = 155\ bar$ pour une température $T = 593\ K$. Cette eau parcours un faisceau de tubes en "U" (figure 2) et cède son énergie thermique au circuit secondaire pour ressortir autour de $553\ K$. Le circuit secondaire a une pression $P_2 = 70\ bar$ et donc une température d'ébullition beaucoup plus basse que celle du circuit primaire ($T^{eb}_{70\ bar} = 560\ K$). L'eau du circuit secondaire est ainsi portée à ébullition par la chaleur du circuit primaire. L'objectif étant d'alimenter la turbine en vapeur sèche, le taux de vide en fin d'ébullition est important. Outre ce rôle d'échangeur de chaleur

entre les circuits primaire et secondaire, le générateur de vapeur fait partie des trois barrières entre les substances radioactives (issues des réactions nucléaires au sein du cœur) et l'environnement : les gaines métalliques des crayons combustibles, l'enveloppe du circuit primaire et l'enceinte de confinement que constitue le bâtiment réacteur. Parmi ces barrières, le générateur de vapeur constitue un point sensible. Il fait partie de l'enveloppe du circuit primaire et le circuit secondaire présente une sortie de l'enceinte réacteur vers le bâtiment générateur où se trouve la turbine. En cas de perte de l'étanchéité entre les circuits primaire et secondaire à l'intérieur du GV, l'eau du circuit primaire peut gagner la salle des machines et ainsi franchir d'un coup la deuxième et la troisième barrière. La fissuration ou rupture des tubes en "U", barrière dans le générateur de vapeur entre les circuits primaire et secondaire, est donc quelque chose de particulièrement surveillé.

1.1.2 Dimension et géométrie du GV

Selon les types de réacteurs, il existe différents types de générateurs de vapeur sur le parc nucléaire français. Généralement, un GV mesure environ 20 mètres de hauteur, 3 mètres de diamètre, et pèse de 300 à 400 tonnes à vide.

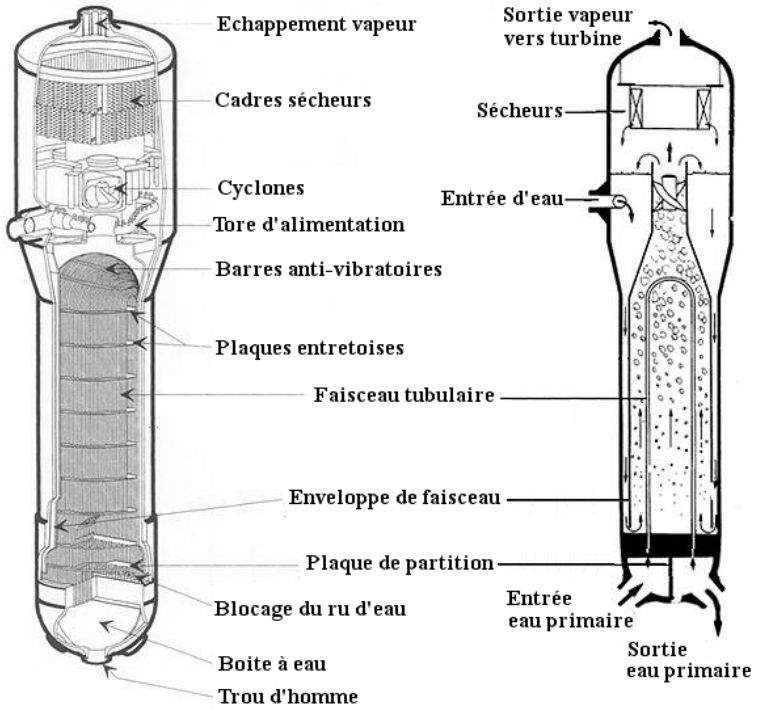


FIGURE 2 – *Représentation schématique ouverte d'un générateur de vapeur et coupe illustrant son fonctionnement (Source ASN).*

Chaque type de GV est caractérisé par deux nombres qui représentent le nombre de centaines de mètres carrés composant la surface d'échange du faisceau tubulaire, et le diamètre en millimètres des tubes en "U". Par exemple, pour une centrale d'une puissance électrique de 900 MWe, les GV peuvent être de type 47/22, ce qui signifie qu'ils possèdent une surface d'échange de chaleur de 4700 m^2 et un diamètre de

tubes de 22 *mm*. Une description détaillée des différents types de GV des tranches REP est proposée dans le rapport de Bertin et Percout [10]. Le faisceau de tubes en "U" est maintenu par des plaques de maintient : la plaque tubulaire, des plaques entretoises et des barres anti-vibratoires. La plaque tubulaire est le support inférieur du faisceau. Les plaques entretoises dont le nombre diffère selon le type de GV ont deux rôles : maintenir les tubes en place et homogénéiser l'écoulement au sein du fluide du circuit secondaire. Au niveau de ces plaques, l'eau du secondaire s'écoule par des interstices nommés *passages foliés* répartis autour des tubes (figure 3).

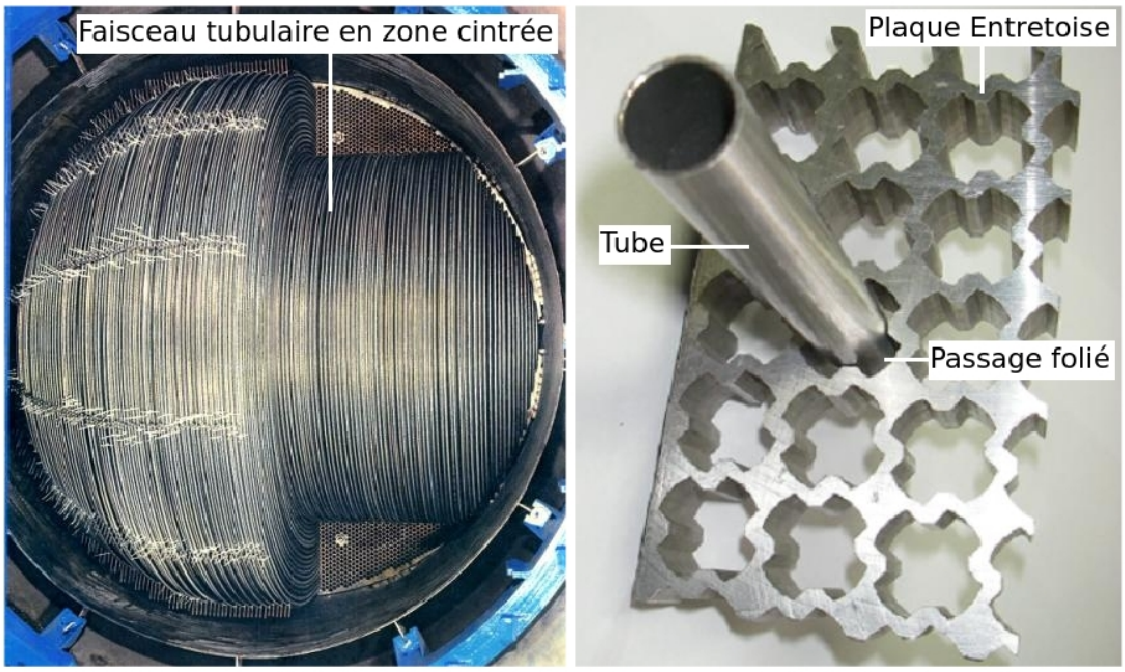


FIGURE 3 – *Photos d'éléments du générateur de vapeur : Vue de dessus du faisceau tubulaire au niveau de sa partie cintrée (à gauche) et section de tube et plaque entretoise d'un générateur de vapeur de type 47/22 (à droite) (Source EDF CEIDRE).*

Dans le cadre de ces travaux de thèse, il faut retenir que l'écoulement qui nous intéresse est l'écoulement bouillant coté fluide secondaire. Celui-ci s'effectue autour d'un faisceau de tubes dont le diamètre est de l'ordre de 2 *cm*, l'écart entre les tubes étant de l'ordre du centimètre. L'écart entre deux plaques entretoises est de l'ordre du mètre.

1.2 Cadre de la thèse

Les régimes d'écoulements diphasiques qui interviennent au cours de cette ébullition sous haute pression et température sont encore mal définis. Cette méconnaissance trouve deux origines. D'une part, la géométrie du faisceau de tubes dans l'enceinte des générateurs de vapeur est complexe (figure 3). D'autre part, il est très difficile de procéder à des campagnes de mesures dans les générateurs de vapeur, ou de monter une installation expérimentale dans ces conditions. Les moyens à disposi-

tion pour étudier ce type de configurations particulières d'écoulements diphasiques sont la simulation numérique et les essais expérimentaux en similitude.

Dans le cadre du projet NEPTUNE, un groupe de travail a été ouvert sur l'étude des fissures et ruptures de tubes en générateur de vapeur, problème dont les origines sont encore aujourd'hui mal connues. Une des hypothèses d'étude de ces phénomènes couplant mécanique du solide et des fluides, est une vibration des tubes en U du faisceau tubulaire présenté sur la figure 2, causée par l'impact des bulles de vapeur. Connaître avec plus de précision la taille, la forme et la vitesse d'impact de ces bulles de vapeur sur les tubes permettrait de fournir des informations plus détaillées aux codes de mécanique du solide tel que *Code_Aster* (http ://www.code-aster.com). Au final, il s'agit de quantifier la part des bulles dans ces vibrations.

L'utilisation de codes de mécanique des fluides numériques (CFD) pour approfondir nos connaissances et appréhender des mécanismes physiques complexes est à l'heure actuelle un moyen qui fait ses preuves. De fait, EDF R&D s'est doté de ses propres outils, dédiés à la modélisation numérique mono- ou poly-phasiques (respectivement *Code_Saturne* [4] et NEPTUNE_CFD [39, 69, 70]).

Cette thèse, qui a pour sujet la *modélisation locale diphasique eau-vapeur des écoulements dans les générateurs de vapeur*, s'inscrit dans la recherche de la modélisation tout régime pour les écoulements diphasiques. Autrement dit, sans a priori sur le régime d'écoulement local.

2 Modélisation des écoulements diphasiques

L'étude des écoulements diphasiques ou multiphasiques est à l'heure actuelle un sujet de recherche très ouvert en mécanique des fluides et de fait en CFD. Deux points de vue co-existent, selon que l'on s'attache à observer ce qui se passe en un point de l'espace (approche Eulérienne) ou que l'on suive le parcours d'une particule fluide (approche Lagrangienne). Ces deux approches amènent le physicien numéricien à se positionner par rapport au problème à résoudre, chaque méthode ayant ses avantages et ses limites qui la rendent plus ou moins adaptée à chaque situation.

L'objectif de ce document n'étant pas de faire une description exhaustive de toutes les approches possibles pour la modélisation des écoulements diphasiques, nous nous contenterons d'évoquer ici les principales idées qui servent de supports à ces méthodes, pour expliquer la stratégie mise en place.

2.1 Notions

Commençons par rappeler divers termes qui nous serons utiles au cours de cette recherche. Le terme de *phase* est ici utilisé dans sa définition thermodynamique, il décrit donc un état de la matière qui peut être solide, liquide ou gazeux. Dans un écoulement multiphasique, plusieurs phases interagissent. Ces phases peuvent contenir une même espèce chimique sous différentes formes physiques comme pour les écoulements eau-vapeur.

Dans la terminologie des écoulements multiphasiques, une phase peut être identifiée comme *continue* si elle occupe des zones connexes de l'espace discret et comme *dispersée* lorsqu'elle occupe des zones discontinues à l'échelle de la discrétisation du problème. On considère les phases dites dispersées comme constituées de particules. Le terme particule comprend ici les particules rigides et les particules fluides. Ces dernières étant plus connues sous le nom de gouttes lorsque le fluide est sous forme liquide et bulles lorsque le fluide est dans l'état gazeux.

On distingue le terme de *champ* de celui de *phase*, en considérant que les champs peuvent être un découpage des phases physico-chimiques choisi par la méthode numérique. On pourra ainsi parler de champs dans le cas d'un écoulement à bulles impactant une surface libre si l'on décide pour des raisons de modélisation numérique de découper la phase gazeuse en un champ dispersé (les bulles) et un champ continu (le gaz au-dessus de la surface libre). Il sera utile dans ce document de pouvoir parler de modèles à n-phases et m-champs avec $m \geqslant n$.

2.2 Topologie des Écoulements diphasiques

Les écoulements diphasiques ou multiphasiques désignent des mélanges de deux ou plusieurs phases non miscibles, dont au moins une est fluide, formant ainsi des interfaces. Les caractéristiques géométriques de ces interfaces permettent de distinguer différents régimes d'écoulement, dont on peut retrouver une description détaillée dans l'ouvrage de Faghri & Zhang [41].

Basée sur la structure de l'interface, la classification topologique sépare communément ces écoulements en trois groupes :

- ▷ Les écoulements séparés tels que les écoulements annulaires, en film ou stratifiés ;
- ▷ Les régimes de transition comme les écoulements annulaires à bulles, les écoulements à poches turbulents ;
- ▷ Les écoulements à phases dispersées tels que les écoulements à bulles, à gouttes ou à particules.

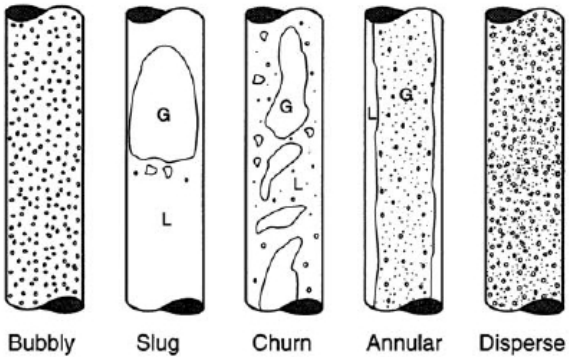


FIGURE 4 – *Schéma des régimes d'écoulements diphasiques en tube vertical (Source Brennen [18]).*

Ces régimes sont répertoriés expérimentalement depuis plusieurs décennies, donnant lieu à des cartes d'écoulement en fonction des flux massiques ou volumiques du liquide et du gaz pour des géométrie tubulaires [6, 136]. Pour autant, leur modélisation numérique reste difficile dans de nombreuses situations. En particulier, la voie d'un modèle universel dit *tout régime* pour la description de l'ensemble des régimes d'écoulement est toujours un problème ouvert.

Theofanous & Hanratty [123] dressent l'état de l'art sur la modélisation multiphasique en 2003, avec comme ligne directrice la modélisation des divers régimes d'écoulement diphasiques. Ils mettent en évidence le besoin de réaliser des simula-

tions de régimes autres que dispersés.

Si l'on se reporte aux travaux plus récents de Bestion [11], on peut classer les diverses méthodes de modélisation des écoulements multiphasiques selon les choix effectués par le physicien numéricien :

- ▷ Moyenne de phase ou de champ :
  - ○ Homogène
  - ○ Modèle à deux fluides
  - ○ Modèle multi-fluides
- ▷ Filtrage des échelles de turbulence :
  - ○ RANS (modélisation de toutes les échelles, spatiales et temporelles)
  - ○ LES diphasique (filtrage spatial en dessous d'une échelle caractéristique)
  - ○ DNS (Simulation de toutes les échelles)
- ▷ Traitement des interfaces :
  - ○ Capture d'interface
  - ○ Traitement statistique des interfaces
  - ○ Identification locale des interfaces
  - ○ Caractérisation de l'interface (fonction couleur).

En ce qui concerne l'objectif d'une méthode numérique pour le tout régime d'écoulement, plusieurs voies existent. Dans le cadre des écoulements en générateurs de vapeur, nous nous limiterons aux régimes d'écoulements convectifs ascendant, en commençant par le régime à bulles dispersées pour aller vers des taux de vide plus élevés, suivant la progression dans un tube chauffant représenté en figure 5.

Dans un premier temps, notre étude se portera sur les écoulements liquide - gaz en se focalisant sur l'aspect traitement de l'interface pour les bulles. On se limitera donc pour cette partie aux cas d'écoulements diphasiques adiabatiques où le liquide reste une phase continue. En revanche, nous ne restreindrons pas la fraction volumique du gaz, ce qui permet un spectre de modélisation allant des bulles dispersées aux poches déformées.

2.3 Modèles 2-phases, 2-champs

2.3.1 Écoulements à bulles

Concernant la modélisation des écoulements diphasiques à l'aide d'un formalisme à deux champs mis en place par Ishii [58], de nombreux travaux existent. Mais le plus souvent ceux-ci portent sur la modélisation d'un régime particulier et les études traitant les écoulements de transition sont très peu nombreuses. Les cas d'écoulements à phases dispersées sont les plus largement documentés dans la littérature [5, 18, 39], et de fait, de nombreux auteurs se sont intéressés à l'ajout de modèles

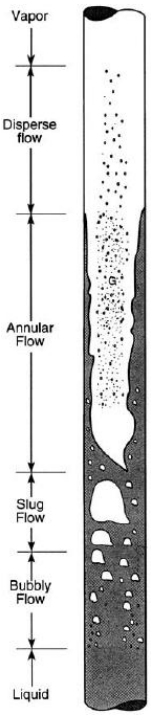


FIGURE 5 – *Évolution d'un écoulement eau/vapeur en tube chauffé vertical (Source Brennen [18]).*

afin de prendre en compte les phénomènes de coalescence et de fractionnement. Dans le cadre eulérien, trois méthodes sont principalement utilisées pour le modélisation de la polydispersion en diamètres et en vitesse des bulles. Une première méthode consiste à transporter l'aire interfaciale du champ dispersé. Une autre approche consiste à résoudre une équation de transport pour un nombre donné de moments de la distribution, le premier étant l'aire interafciale [57, 64, 79]. Il présuppose une forme pour la distribution en taille, et transporte uniquement les moments de cette distribution. Cette méthode possède l'inconvénient du choix de la fonction de distribution. Une deuxième méthode est l'utilisation d'une approche polydispersée pour la phase dispersée qui est décrite par un certain nombre de classes [26, 84]. Chaque champ correspondant à une moyenne statistique effectuée entre deux diamètres fixés par la classe de diamètre. La coalescence et le fractionnement sont alors modélisés par des transferts entre champs bulle issus de prédictions statistiques des chocs. Les classes peuvent avoir soit une vitesse commune, soit chacune leur propre équation de quantité de mouvement [65, 72]. Ce qui s'apparente alors à une modélisation multichamp avec une phase continue (liquide) et plusieurs champs pour la phase dispersée, séparée en un jeu de classes sur un critère de diamètre. L'essentiel n'est pas de résoudre les détails de la distribution en taille, mais plutôt les statistiques de la population. Une troisième catégorie est la méthode DQMOM, généralisée par Belt & Simonin [9]. Elle découle de la méthode de la forme présumée, mais permet une plus grande souplesse dans l'évolution de la forme de la distribution à la fois en taille et en vitesse. Pour chaque classe de masse ou de diamètre, une distribution de vitesse est attribuée.

Sur le même principe que la méthode de polydispersion, Sun *et al.* [116] proposent

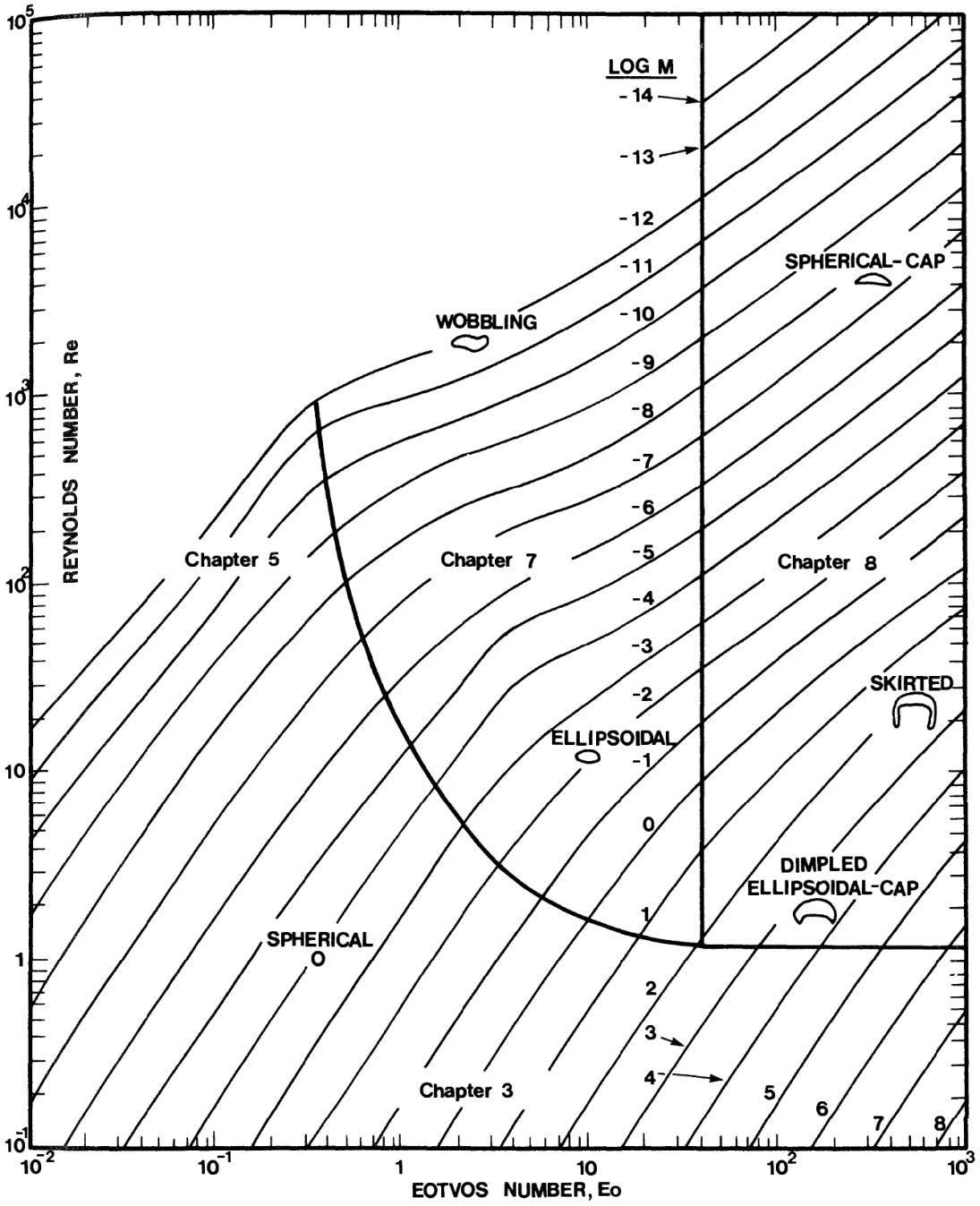


FIGURE 6 – *Cartographie de la forme d'une bulle 3D en ascension dans un fluide au repos en fonction des caractéristiques de l'écoulement et des propriétés fluides (Source Clift et al. [28])*

une description multi-champ où le critère de séparation des champs est le taux de déformation des bulles. La phase vapeur est alors traitée en deux champs, un pour les bulles sphériques, l'autre pour les poches. L'écoulement étudié est entre deux plaques pour l'adéquation avec une modélisation en 2D. Les différentes interactions entre les deux champs de bulles sont modélisées (coalescence, entraînement, fragmentation).

Les auteurs font des hypothèses sur la forme des bulles dans le cas de cet écoulement particulier entre deux plaques. Cela permet de fermer le système d'équations à l'aide de corrélations particulières, qui ne peuvent pas être étendues à d'autres type de régimes d'écoulement diphasiques.

L'étude de la transition entre deux régimes, comme par exemple la transition entre un écoulement à bulles et annulaire [60] peut difficilement être prise en compte. Et ce, autant pour des raisons de complexité et de compréhension des phénomènes physiques, que pour des raisons de méthodes numériques. Sur ce dernier point, en effet, plusieurs possibilités s'offrent au numéricien. Pour la transition d'un écoulement à bulles vers un écoulement à poches très déformées, il existe deux voies dont la mise en place est assez différente. Lorsque les bulles coalescent et grossissent, il apparaît que les corrélations permettant d'utiliser des lois de fermeture pour la traînée ou le lift ne suffisent plus. La capture ou le suivi d'interfaces est alors inévitable pour modéliser la transition entre petites bulles sphériques et grosses bulles fortement déformées. C'est alors qu'intervient le choix de conserver un modèle 2-phases, 2-champs ou de passer à un calcul multi-champs. Le premier choix oblige à mettre en place un ou plusieurs critères de reconnaissance de l'interface pour décider si dans une cellule on est dans le cas dispersé ou dans le cas de suivi d'interface avant de choisir les fermetures adaptées. Le second permet de séparer complètement les différents cas et leurs fermetures respectives, en contrepartie de la définition de termes de transport entre les différents champs. C'est ce second choix que nous avons fait pour les présents travaux, nous amenant à la mise en place d'une approche hybride 2-phases, 3-champs, avec une localisation de l'interface des larges bulles déformées.

2.3.2 Écoulements à interfaces

Du fait de la stratégie décrite ci-dessus, on s'intéresse aux différentes méthodes de localisation ou de capture d'une interface avec maillages. La plupart de ces techniques ont été pensées en prenant en compte deux aspects principaux :

- La précision de capture/localisation de l'interface ;
- La stabilisation du solveur numérique pour la prise en compte des discontinuités des propriétés du fluide à l'interface.

De manière générale, cela induit un compromis entre la volonté d'avoir une interface plus proche de la physique, c'est-à-dire d'épaisseur la plus fine possible, et la difficulté de stabilisation du solveur numérique (généralement stabilisé par la diffusion). Le deuxième point vient du fait que la plupart des méthodes numériques avec localisation d'interface ont été développées avec une approche mono-fluide. Dans cette dernière approche la résolution n'est faite que pour un seul champ de vitesse et un seul champ de pression, les propriétés de ce fluide unique variant au passage de l'interface.

Il existe plusieurs méthodes de localisation/capture d'interface. On illustre ici les trois principales approches en figure 7. Une première catégorie comprend les techniques de *front tracking* [128]. L'équation de quantité de mouvement est résolue sur une grille fixe et la position de l'interface est suivie explicitement à l'aide de marqueurs distribués sur la surface. L'ensemble des marqueurs fait office de second

maillage mobile décrivant la totalité de l'interface. La difficulté principale réside dans le fait qu'il faut s'assurer qu'après advection, la répartition des marqueurs soit toujours relativement uniforme sur la surface. De plus, l'interaction des marqueurs avec le maillage fixe Eulérien nécessite un peu d'attention.

La seconde est la méthode sur maillage mobile ou *Lagragian grid* [53]. Les mailles suivent l'interface par des déformations, des déplacements ou une adaptation des points de la grille. Cette méthode permet de localiser l'interface avec une très grande précision. Mais, dans le cas de larges déformations ou si la géométrie est trop complexe, des cellules doivent être éliminées ou ajoutées, ce qui réduit la précision de la méthode. La principale limitation restant le fait que cette méthode est incapable de suivre des surfaces qui fractionnent ou coalescent. Elle est généralement utilisée pour modéliser les cas où un des fluides domine l'écoulement, dont la vitesse est simulée.

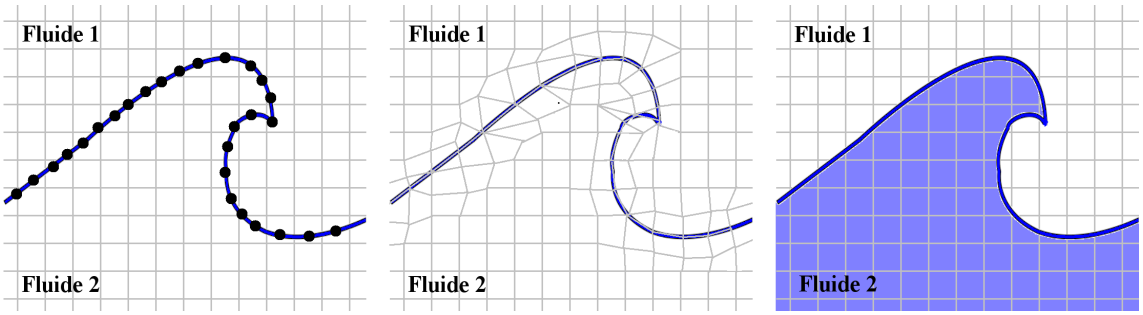


FIGURE 7 – *Schéma de principe de différentes méthodes de représentation d'une interface. De gauche à droite, marqueur d'interface, maillage suivant l'interface et fonction indicatrice.*

La troisième catégorie est celle des méthodes de capture d'interface à l'aide d'indicateurs permettant de savoir de quel coté de l'interface l'on se trouve. Les catégories de méthodes utilisant des fonctions volumiques sur un maillage Eulérien sont les méthodes *Volume of Fluid* (VOF) [50] et *level-set* [93, 119]. Le fait que ce genre de méthode puisse être appliqué sur le même maillage que le solveur numérique simplifie leur implémentation par rapport aux méthodes avec marqueurs ou à maillage mobile. Ces méthodes VOF et *level-set* utilisent une fonction scalaire définissant l'interface. Pour les méthodes VOF, le principe est de transporter comme grandeur descriptive de l'interface le taux de vide local. Une étape de reconstruction de l'interface, basée sur la fraction volumique et ses gradients locaux est alors utilisée. Une méthode classique pour cette étape de reconstruction, connue sous le nom de *piecewise linear interpolation* a été proposée par Scardovelli & Zaleski [109]. Les méthodes VOF conservent exactement la masse du fait de l'utilisation directe de la fraction volumique, mais l'étape de reconstruction des grandeurs interfaciales est complexe, en particulier en 3 dimensions et pour des maillages non structurés. Les méthodes *level-set* sont basées sur le calcul d'une fonction distance à l'interface, elle-même obtenue à partir des fractions volumiques. L'utilisation de cette fonction simplifie l'obtention des grandeurs interfaciales mais n'assure pas la conservation de la masse. Il est donc recommandé d'utiliser une méthode de correction de l'inter-

face, comme une correction de volume (ce qui revient à corriger la masse dans le cas incompressible), ou une méthode permettant de conserver la pente de la fonction level-set [1].

Plusieurs techniques comme le couplage *level-set-VOF* [118], ou la méthode du Lagrangien augmenté couplée à une méthode VOF [133], ont été développées afin d'obtenir une méthode à la fois conservative et moins complexe. Olsson & Kreiss [91] introduisent une méthode *level-set* couplée à une méthode de compression artificielle de l'interface. Cette dernière est réalisée lors d'une étape de reconstruction hors du pas de temps physique pour assurer une épaisseur d'interface constante après advection de la fonction *level-set*. La conservation est alors assurée, au moins du point de vue volumique. Il faudra dans le cadre d'écoulements eau-vapeur faire attention lors de l'utilisation de cette méthode. Les masses volumiques des fluides ne seront dans ce cas plus constantes en espace, du fait de la prise en compte de la thermique. Il faudra sans doute modifier l'écriture du transport aux faces de la compression en tenant compte de cette variation des masses volumiques.

Une technique souvent utilisée de paire avec les méthodes de capture d'interface eulériennes est le raffinement de maillage automatique. Ces méthodes d'*Adaptive mesh refinement* (AMR) [3, 37, 102, 117, 141] permettent d'obtenir une précision identique à celle d'un maillage très raffiné, pour un coût CPU inférieur. Mais dans un cas où les interfaces sont très nombreuses dans l'écoulement, ces méthodes perdent leur avantages, le besoin de raffinement faisant alors tendre le maillage résultant vers un maillage très résolu, présentant peu de gain en temps CPU.

2.4 Modèles 2-phases, n-champs

L'idée de modéliser un écoulement diphasique à l'aide d'une approche multi-champ n'est pas nouvelle et a donné lieu à plusieurs travaux de réflexion sur la mise en place d'une telle approche au cours de la dernière décennie. Ainsi, Lahey & Drew [67] ont proposé un découpage de l'écoulement diphasique général en quatre champs permettant de modéliser les différents régimes, comme exposée en figure 8. On retrouve sur cette figure l'illustration du découpage des phases pour chaque régime, les champs identifiés étant le liquide continu (cl) ou dispersé (dl) et la vapeur continue (cv) ou dispersée (dv).

Maeda *et al.* [75] proposent également d'avoir recours à un couplage entre un modèle dispersé, un modèle de localisation de bulles basé sur une formulation Euler/Lagrange (PTM) et un modèle de localisation d'interface pour la modélisation de panaches de bulles avec une très large gamme de diamètres. Leur concept est basé sur le choix d'un modèle pour chaque bulle en fonction du rapport entre son diamètre et la taille locale du maillage $d^* = d_b/\Delta x$, avec une limite pour les interfaces résolues choisie à $d^* > 8$. Pour $d^* < 1$ la bulle est modélisée avec une approche dispersée, pour $1 \leq d^* \leq 8$ la méthode PTM est utilisée et pour $d^* > 8$, on utilise une méthode de localisation d'interface. Seul des résultats avec une seule méthode sont présentés pour différents diamètres de bulles et il n'est pas question dans l'article des termes de couplage à utiliser pour passer d'un modèle à un autre.

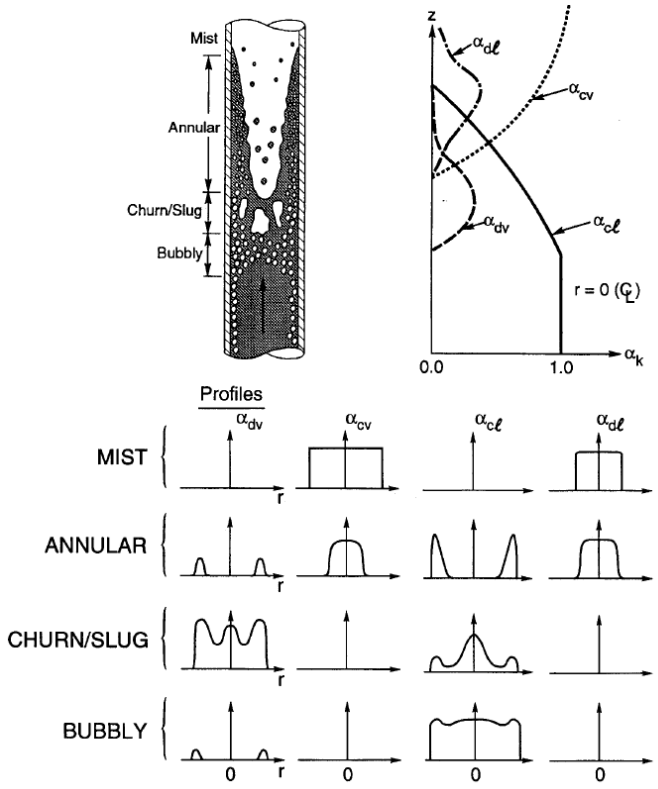


FIGURE 8 – *Principe du modèle à quatre champs pour le diphasique tout-régime, ici présenté pour l'exemple d'une ébullition complète en tube vertical (Source Lahey et Drew [67]).*

Morel [83] part du modèle à quatre champs imaginé par Lahey & Drew [67]. Au vu de la complexité de la mise en place d'un tel modèle et du nombre de termes de fermeture à modéliser, il propose deux approches. La première (1) consiste à regrouper par région les 12 équations du système à quatre champs complet pour aboutir à un système à 6 équations avec une première région traitée comme un mélange de liquide continu et de bulles dispersées et une seconde comme un mélange de gaz continu et de gouttes dispersées. La seconde approche (2) consiste à regrouper les champs par phase, conduisant à un système proche du modèle 2-phases, 2-champs, mais avec des termes additionnels provenant des termes d'interaction entre champs. Il dresse les tableaux suivants, permettant d'identifier les efforts de modélisation à réaliser pour la mise en œuvre de chaque approche :

Vincent *et al.* [132] proposent une méthode hybride Eulérienne-Lagrangienne, basée sur un maillage particulaire inspiré des méthodes MAC de la grille eulérienne. Cette approche, dénommée *Volume Of Fluid Sub Mesh method* (VOF-SM), permet de transporter des informations de phase avec les particules qui sont récupérées par projection sur le maillage Eulérien à chaque pas de temps afin d'actualiser le champ de fraction volumique. Les particules sont transportées de façon Lagrangienne à partir du champ de vitesse Eulérien interpolé. Cette méthode peut traiter par extension des problèmes d'écoulements diphasique avec arrachement, les plus petites gouttes ou bulles pouvant être localisées par les particules lorsqu'elles deviennent

Modèle	Équations de conservation	Relations de définition	Équations d'État	Modèle de glissement	Relations de Fermeture
4-champs	12	0	4	0	28
2-phases (1)	6	16	4	2	18
2-phases (2)	6	19	6	2	17

TABLE 1 – *Comparaison des équations constituants les différents systèmes d'équations pour les trois modèles multichamps (source [83]).*

Modèle	$\alpha_{cg} = 0$	$\alpha_{cl} = 0$	$\alpha_{dl} = 0, \alpha_{dg} = 0$
4-champs	2-phases à bulles	2-phases à gouttes	Modèle phases séparées
2-phases (1)	Homogène bulles	Homogène gouttes	Modèle phases séparées
2-phases (2)	2-phases à bulles	2-phases à gouttes	Modèle phases séparées

TABLE 2 – *Dégénération des trois modèles multichamps (source [83]).*

trop petites pour la grille eulérienne, par exemple, pour la simulation de l'atomisation d'un jet [94]. Des travaux sont en cours sur les termes de traitement de l'information sous-maille, en particulier l'éjection de particules fluides.

Bestion [11] dresse l'état des capacités de modélisations actuelles pour les écoulements diphasiques. Des recommandations sont fournies pour guider l'utilisateur entre la DNS-diphasique, les méthodes LES avec une représentation déterministe des interfaces (localisation et simulation), les méthodes LES avec représentation statistique des interfaces (modélisation) et les méthodes RANS, selon le type de problème qu'il souhaite simuler. Pour la modélisation d'écoulements diphasiques complexes, le développement d'un modèle *hybrid LES* avec à la fois des interfaces simulées et modélisées, avec une modélisation LES de la turbulence utilisant la même taille de coupure est, d'après l'auteur, la voie la plus prometteuse pour les applications à destinées industrielles, ainsi que pour la simulation du *tout régime* [12]. Il faut toutefois noter que la modélisation d'interfaces, aussi bien simulées que sous-maille (dispersées), avec un modèle LES pour le traitement de la turbulence reste à l'heure actuelle un problème complexe. Outre la question du traitement des interfaces résolues analogue à celui de parois qui est un problème déjà bien identifié en turbulence monophasique, des termes sous-maille supplémentaires doivent être pris en compte pour les interfaces résolues, tels que la tension de surface et le transport interfacial [68, 73]. On reviendra sur ce point lors de la discussion des modèles de turbulence au chapitre suivant.

Hänsch *et al.* [46] travaillent sur une voie similaire à la notre. Ils ont commencé leur travail par le couplage de méthodes. Des résultats sont présentés avec des couplages dans les deux sens entre les champs gaz dispersé et continu. Si le terme de transfert du dispersé vers le continu est explicité dans l'article, l'expression du transfert du champ continu vers le dispersé n'est pas fourni. Leur traitement de l'interface provient des écoulements à surface libre industriels et ne prend pas en compte la

tension de surface. L'intégrité volumique de leurs larges bulles n'est donc due qu'à des procédés numériques, tels que la force de *clustering* dont le rôle est d'agréger les masses de gaz continu pour former des interfaces.

Ces méthodes sont actuellement en cours de développement dans plusieurs équipes de recherche. Ma participation à la dernière conférence internationale sur les écoulements multiphasiques (ICMF), qui s'est tenue à Jeju en Corée du Sud fin mai 2013 a ainsi été l'occasion de découvrir ces travaux pour la plupart encore non publiés. Hua [51] travaille au couplage de sa variante de la méthode VOF [52] avec un modèle de particules discrètes permettant de modéliser des petites bulles. Ce modèle discret ne permet pas pour le moment de modéliser les interactions entre particules qui conservent un diamètre constant. À l'heure actuelle, seul le transfert de la phase dispersée vers la phase continue est effectif. Un test sur le nombre de Weber local lors de l'impact de bulles dispersées sur l'interface localisée est proposé pour décider de la coalescence ou du rebond entre la particule et l'interface. En pratique, seul le rebond est activé dans les cas de démonstration présentés.

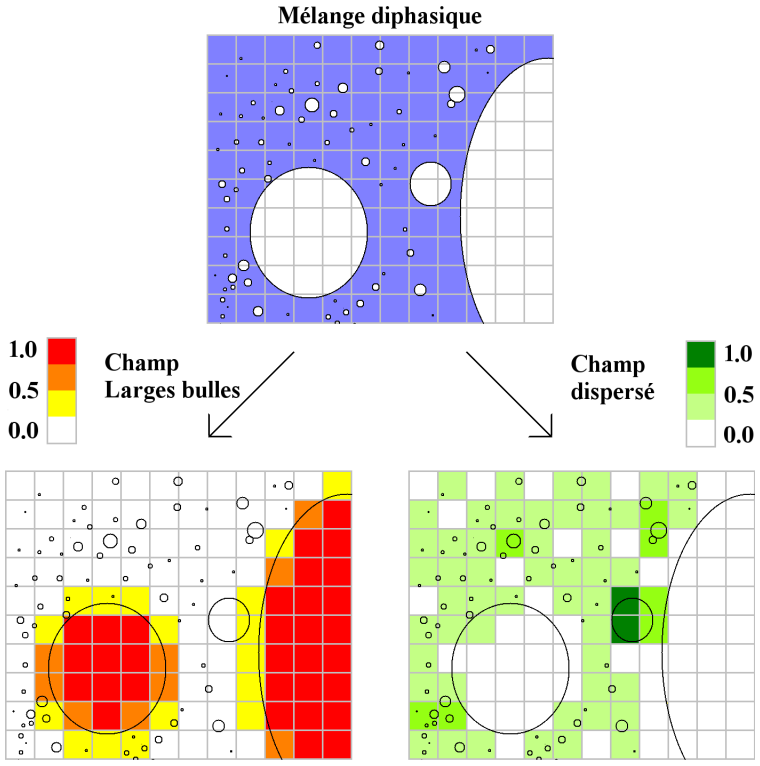


FIGURE 9 – *Principe du modèle à trois champs pour le diphasique. On représente la détection cellule par cellule des fractions volumiques des deux gaz, continu (rouge) et dispersé (vert).*

Le choix est fait de se diriger vers une approche à quatre champs, en modélisant séparément les phases dispersées (bulles et gouttes) et les phases continues (liquide et gaz). Les premières seront modélisées, tandis que les secondes seront simulées. Le modèle dédié aux écoulements de phases dispersées a déjà fait l'objet de validations [39, 79, 80]. Nous porterons donc ici plus d'attention au cas des bulles très déformées

pour lesquelles l'interface est localisée, afin de construire un modèle à 2-phases, 3-champs dans un premier temps. La quatrième phase, correspondant au liquide dispersé, est écartée pour le moment. Un modèle dédié sera notamment mis en place pour le cas adiabatique. La limite entre la modélisation sous forme de bulles sphériques et la localisation de l'interface des bulles déformées sera à définir. Si l'on prend le cas illustré en figure 9, le mélange diphasique peut être séparé en trois champs : un pour le liquide qui n'est pas représenté ici et deux pour le gaz (continu en rouge et dispersé en vert). A l'aide d'un critère portant par exemple sur le diamètre des bulles, on identifie le champ dispersée et le champ larges bulles que l'on considérera comme un champ continu.

Ces deux champs de même composition physique et chimique sont donc modélisés de manières complètement différentes. Les forces agissant sur le champ dispersé sont entièrement définies à l'aide de termes moyennés tels que la force de traînée, le lift, la dispersion turbulente. Les grandeurs telles que l'aire interfaciale sont transportées. Les équations de bilan sur la phase continue sont en revanche fermées par des termes locaux comme la tension superficielle et le terme de traînée, qui représente alors une loi de paroi interne à l'interface.

Dans le modèle présenté ici, on conserve la stratégie Eulérienne du code NEPTUNE_CFD pour tous les champs, y compris l'interface entre les champs liquide et gaz continu. Le formalisme du modèle d'équations à deux fluides étendu à n-champs est également conservé. Le choix d'un traitement de l'interface par une méthode Eulérienne est donc celle qui paraît la plus adéquate et naturelle. L'interface entre les champs *liquide continu* et *larges bulles* est suivie par une méthode de localisation inspirée de la technique du *level-set* conservatif, adaptée à la description Eulérienne des équations du modèle à deux fluides. La différence importante de notre approche est que l'on prend le taux de vide brut ou moyenné comme fonction indicatrice de l'interface, tout en bénéficiant du modèle à deux fluides pour l'étape d'advection de la fraction volumique. Cette étape de transport de masse étant par construction conservative dans le code, l'utilisation d'une étape de compression n'est pas nécessaire pour la conservation de la masse mais pour éviter une diffusion de l'interface trop importante. Dans ce cas, la méthode d'Olsson & Kreiss semble assez prometteuse.

Des implémentations de la tension de surface dans le modèle d'équations à deux fluides ont déjà été réalisées en 2008 par Bartosiewicz *et al.* [8] et plus récemment, par Štrubelj [135] en 2010. Ce dernier utilise également la compression artificielle de l'interface, mais sous l'hypothèse de fluides incompressibles, en ne résolvant qu'une seule des deux équations de transport de masse.

Le point de départ de ce travail est la version standard du code multiphasique NEPTUNE_CFD. Celui-ci est muni d'un modèle bi-fluide vérifié et validé pour la simulation de phases dispersées, liquides ou gazeuses, ainsi que d'une approche de grandes interface (LIM) [29, 30], capable de traiter des problèmes de surface libres. Notre démarche se décompose donc en l'implémentation d'un modèle pour le régime à poches de gaz fortement déformées, la vérification et la validation de ce modèle

sur des cas analytiques et expérimentaux et enfin de proposer une extension à trois champs avec un couplage du modèle pour poches déformées avec l'approche pour bulles dispersée existante dans le code. Cette démarche est organisée comme suit :

Chapitre I : Modèles

L'objectif de ce travail de thèse est dans un premier temps d'implémenter dans le code NEPTUNE_CFD un modèle prédictif pour la modélisation des écoulements diphasiques dans le régime de poches de gaz fortement déformées. Ce modèle a ensuite pour vocation d'être inscrit dans une approche multichamp comprenant à terme au moins quatre champs :

- ▷ Deux champs continus :
  - ○ Liquide continu
  - ○ Larges poches de gaz et/ou gaz continu.
- ▷ Deux champs dispersés :
  - ○ Petites bulles sphériques
  - ○ Petites gouttes sphériques.

Cette démarche inclut la mise en œuvre du couplage dans chaque phase d'une approche d'interface localisée avec une approche dispersée. Dans ce chapitre, on rappellera le formalisme à deux fluides et son extension à une description multi-champs. On détaillera ensuite la modélisation utilisée pour les interfaces localisées. Le couplage des approches localisée et dispersée sera ensuite étudié pour le cas d'un modèle à trois champs : une phase liquide continue et deux champs pour la phase gaz (continu et dispersé).

Chapitre II : Vérification du modèle d'interface localisée sur des cas analytiques

Le modèle d'interface localisée précédemment décrit est vérifié sur des cas analytiques. Des validations seront menées sur des cas analytiques tels que des mesures de pressions de Laplace ou des cas d'oscillations de bulles initialement perturbées, régi par l'équation de Rayleigh-Plesset [100]. Dans le cadre de l'application future de ces modèles à des cas industriels, des essais seront réalisés sur différents maillages, notamment non-orthogonaux.

Chapitre III : Modélisation d'interfaces localisées - Montée de bulles

Les résultats du modèle sont ensuite comparés à des résultats expérimentaux. On choisi pour cela des expériences de montée de bulles dans un liquide au repos. Bien que très étudiée de manière théorique [28], expérimentale [13, 104], et plus récemment numérique [52, 63], cela reste un sujet au cœur des problématiques actuelles permettant une évaluation de la capacité d'un code de CFD à simuler un écoulement avec une interface fortement déformée.

On s'intéressera également à des problématiques de coalescence et fractionnement locaux de ces interfaces, en se basant notamment sur les travaux expérimentaux de Brereton et Korotney [19].

En localisant au moins une partie de l'interface, on rend intrinsèquement la modélisation instationnaire. On se penchera sur le choix du modèle de prise en compte de la turbulence dans le liquide, entre URANS et LES. L'observation expérimentale de panaches de bulles turbulents de Deen [35] nous permettra de tester ces choix.

Enfin, nous aborderons le cas d'écoulements avec les propriétés des fluides qui nous intéressent, c'est-à-dire le mélange diphasique eau-vapeur à pression et température de fonctionnement du générateur de vapeur, bien que non disponible dans la littérature expérimentale.

Chapitre IV : Simulations à l'aide du modèle hybride multichamp

Les résultats expérimentaux concernant des écoulements diphasiques présentant des domaines de taille adaptée à une étude locale (dimension caractéristique de quelques dizaine de centimètre au plus) et abondamment instrumentés sont assez restreints. L'approche hybride développée est donc difficile à valider faute de cas simples, entre autres permettant de tester séparément les différents transferts entre champs. Des expériences de panache turbulents et d'entrainement d'air sont simulées avec une approche à deux et à trois champs pour esquisser des premières conclusions.

Chapitre I

Modèles

1 Formalisme à deux fluides

NEPTUNE_CFD est un code de CFD multiphasique basé sur une description Eulérienne des écoulements utilisant le formalisme à deux fluides décrit par Ishii [55], étendu à n champs. Ce modèle décrit chaque champ avec une approche continue s'appuyant sur une description moyennée. Ce qui peut être réalisé à l'aide de moyennes temporelles [55], de moyennes volumiques [137] ou de moyennes d'ensemble [40]. Cette dernière est la méthode la plus générale. Nous nous restreignons ici à la moyenne volumique, utilisée dans NEPTUNE_CFD.

1.1 Opérateur de moyenne volumique

Considérons un élément de volume Ω, invariant dans le temps et l'espace, occupé par, au moins, deux champs. Soit X_k la fonction indicatrice de champ ou fonction caractéristique pour le champ k qui vaut l'unité lorsque le vecteur position x est dans le champ k à l'instant t et zéro sinon. On définit la fraction volumique du champ k dans l'élément volumique Ω par la relation :

$$\alpha_k = \frac{1}{\Omega}\int_\Omega X_k(x,t)d\Omega = \frac{\Omega_k}{\Omega} \tag{1.1}$$

La méthode de moyenne volumique [40, 137] introduit deux moyennes pour toute grandeur φ_k, une sur le volume Ω et une sur le volume Ω_k, occupé uniquement par le champ k. On notera :

$$\overline{\varphi}^{\Omega} = \frac{1}{\Omega}\int_\Omega \varphi_k(x,t)X_k(x,t)d\Omega \tag{1.2}$$

$$\overline{\varphi}^{k} = \frac{1}{\Omega_k}\int_\Omega \varphi_k(x,t)X_k(x,t)d\Omega \tag{1.3}$$

ce qui fournit immédiatement la relation suivante :

$$\overline{\varphi}^{\Omega} = \alpha_k\overline{\varphi}^{k} \tag{1.4}$$

Notons, afin de préparer le calcul de moyenne pour des termes de dérivation, que l'opérateur de moyenne fait alors apparaître des termes supplémentaires, dus aux règles de Gauss (1.5) et Leibniz (1.6) [40] :

$$\overline{X_k \nabla \varphi_k}^{\Omega} = \nabla \overline{X_k \varphi_k}^{\Omega} - \overline{\varphi_k \nabla X_k}^{\Omega} \tag{1.5}$$

$$\overline{X_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial t}}^{\Omega} = \frac{\partial}{\partial t} \overline{X_k \varphi_k}^{\Omega} + \overline{\varphi_k \mathbf{U}_{Int} \cdot \nabla X_k}^{\Omega} \tag{1.6}$$

L'intervention d'une vitesse interfaciale dans la règle (1.6) vient de l'équation topologique, exprimant le fait que la dérivée particulaire de X_k est nulle [40] :

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \mathbf{U}_{Int} \cdot \nabla X_k = 0 \tag{1.7}$$

1.2 Équations moyennées en volumique

Au sein d'un fluide k, et donc du volume associé Ω_k, on a les relations de conservation locales de masse, de quantité de mouvement et d'énergie suivantes :

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_k \mathbf{U}_k = 0 \tag{1.8}$$

$$\frac{\partial (\rho_k \mathbf{U}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k) = -\nabla P_k + \rho_k \mathbf{g} + \nabla \cdot \mathbb{T}_k \tag{1.9}$$

$$\frac{\partial (\rho_k H_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k H_k \mathbf{U}_k) = -\nabla \cdot \mathbf{q_k} + \frac{\partial P_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbb{T}_k \cdot \mathbf{U}_k) + \rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{U}_k \tag{1.10}$$

L'équation sur l'énergie fait intervenir la variable d'enthalpie totale :

$$H_k = e_k + \frac{1}{2}\mathbf{U}_k^2 + \frac{P_k}{\rho_k} \tag{1.11}$$

En passant à la moyenne volumique, le système précédent devient :

$$\frac{\partial (\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k \overline{\mathbf{U}_k}^k = \sum_{p \neq k} \Gamma_{p \to k} \tag{1.12}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\alpha_k \rho_k \overline{\mathbf{U}_k}^k)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha_k \rho_k \overline{\mathbf{U}_k \mathbf{U}_k}^k \right) = & -\nabla \left(\alpha_k \overline{P_k}^k \right) + \alpha_k \rho_k \mathbf{g} \\ & + \nabla \cdot \alpha_k \overline{\mathbb{T}_k}^k + \sum_{p \neq k} \mathbf{M}_{p \to k} \end{aligned} \tag{1.13}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\alpha_k \rho_k \overline{H_k}^k)}{\partial t} + \nabla \left(\alpha_k \rho_k \overline{H_k \mathbf{U}_k}^k \right) = & -\nabla \left(\alpha_k \overline{\mathbf{q_k}}^k \right) + \nabla \left(\alpha_k \overline{\mathbb{T}_k \cdot \mathbf{U}_k}^k \right) \\ & + \frac{\partial (\alpha_k \overline{P}^k)}{\partial t} + \nabla \alpha_k \overline{P_k \cdot \mathbf{U}_k}^k \\ & + \alpha_k \rho_k \mathbf{g} \cdot \overline{\mathbf{U}_k}^k + E_{p \to k} \end{aligned} \tag{1.14}$$

Les règles de Gauss (1.5) et de Leibniz (1.6) font apparaître les termes $\Gamma_{p\to k}$, $\mathbf{M}_{p\to k}$ et $E_{p\to k}$. Ces termes représentent respectivement les transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie à travers l'interface entre les phases k et p. Pour assurer la conservation de la masse et de la quantité de mouvement, ces termes supplémentaires satisfont des relations de saut au passage de l'interface entre deux champs k et p :

$$\Gamma_{p\to k} + \Gamma_{k\to p} = 0 \tag{1.15}$$

$$\mathbf{M}_{p\to k} + \mathbf{M}_{k\to p} = \frac{1}{\Omega}\int_{Int} (\sigma_{kp}\kappa_{kp}^{Int}\mathbf{n}_{kp}^{Int})dS \tag{1.16}$$

$$E_{p\to k} + E_{k\to p} = 0 \tag{1.17}$$

Le terme de convection non linéaire $\overline{\mathbf{U}_k\mathbf{U}_k}^k$ dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement peut être décomposé en faisant apparaître un terme de sous-maille, sur lequel on reviendra dans le cadre de la modélisation de la turbulence au paragraphe 5 :

$$\alpha_k\rho_k\overline{\mathbf{U}_k\mathbf{U}_k}^k = \alpha_k\rho_k\overline{\mathbf{U}_k}^k\overline{\mathbf{U}_k}^k - \alpha_k\mathbb{T}_k^{SM} \tag{1.18}$$

Pour un problème adiabatique à deux champs, on résout donc un système composé de 13 équations scalaires : l'équation scalaire sur la conservation de la masse (1.12) et l'équation vectorielle de conservation de la quantité de mouvement (1.13) pour chaque champ, la condition sur la somme des fractions volumiques ($\alpha_1 + \alpha_2 = 1$), une relation vectorielle de saut à l'interface, et la condition interfaciale de conservation de la masse ($\Gamma_1 + \Gamma_2 = 0$).

On suppose les propriétés physiques des champs (densité, viscosité et tension de surface) connues. Les inconnues du problème pour un champ sont les fractions volumiques, les vitesses moyennes de chaque champ (3 scalaires/champ), les pressions moyennes, le transfert de quantité de mouvement (3 scalaires), le transfert de masse et le tenseur des contraintes de sous-maille (6 scalaires). Soit un total de 15 inconnues scalaires par champ.

Dans le cas à deux champs, on obtient ainsi un système de 13 équations pour un total de 30 inconnues. Le système est donc un système ouvert qui nécessite l'introduction d'équations supplémentaires pour être résolu. Nous nous placerons ici dans le cadre de l'hypothèse que localement, tous les champs ont la même pression.

$$\forall k,\ \overline{P_k}^k = P \tag{1.19}$$

La fermeture des autres termes est réalisée par l'ajout de modèles pour la turbulence et pour les relations de saut. La modélisation de la turbulence est traitée au paragraphe 5. Différents concepts existent pour la modélisation des relations de saut, on en présente deux dans les paragraphes suivants. Pour simplifier l'écriture, les barres des moyennes volumiques seront désormais implicites.

1.2.1 Modèle homogène

Le modèle homogène est le modèle le plus simple. Il suppose que les champs sont à l'équilibre mécanique et ont une vitesse moyenne locale identique. En l'absence de transfert de masse entre les champs ($\forall(k,p),\ \Gamma_{k\to p}=0$), cela suffit à fermer le système. On peut définir des quantités dites de mélange :

$$\rho_m = \sum_k \alpha_k \rho_k \tag{1.20}$$

$$\mathbf{U}_m = \frac{1}{\rho_m}\sum_k \alpha_k \rho_k \overline{\mathbf{U}_k}^k \tag{1.21}$$

Dans le cas d'un système bi-champs, cela permet de réduire le système homogène à une équation de conservation de masse (1.22) et une équation de conservation de la quantité de mouvement du mélange (1.23) :

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_m \mathbf{U}_m = 0 \tag{1.22}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\rho_m \mathbf{U}_m)}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho_m \mathbf{U}_m \mathbf{U}_m) = \ & -\nabla P_m + \rho_m \mathbf{g} + \nabla\cdot(\mathbb{T}_m + \mathbb{T}_m^{SM}) \\ & + \frac{1}{\Omega}\int_{Int}(\sigma\kappa^{Int}\mathbf{n}^{Int})dS\end{aligned} \tag{1.23}$$

Dans le cas où un champ est continu et tous les autres dispersés, le terme de tension de surface disparaît de l'équation (1.23). Cela revient alors à traiter le transport d'un seul champ dont la densité et la viscosité sont variables. L'hypothèse du modèle homogène est assez raisonnable dans deux situations. La première correspond au cas de phases très dispersées avec l'ajout d'une vitesse relative, la deuxième, au cas d'écoulement à phases séparées où le glissement interfacial peut être négligé. Ces restrictions topologiques dépendent donc essentiellement des échelles spatiales caractéristiques de l'écoulement par rapport à l'échelle de la moyenne volumique.

Ce modèle homogène est souvent généralisé par l'ajout d'une relation supplémentaire pour la vitesse relative, supprimant l'hypothèse d'équilibre mécanique entre les phases. Cette relation peut être une loi constitutive directe sur la vitesse relative (1.24).

$$\mathbf{U}_r = \mathbf{U}_r(\rho_k, \rho_p, \mu_k, \mu_p, \sigma, \|\mathbf{U}_k\|, ...) \tag{1.24}$$

Ce qui ajoute au système d'équations du mélange {(1.22),(1.23)} une équation de continuité pour la phase transportée p (1.25), le rôle de la vitesse relative est alors analogue à celui d'un coefficient de diffusion, d'où le nom de *modèle de diffusion* [114].

$$\frac{\partial(\alpha_p\rho_p)}{\partial t} + \nabla\cdot\alpha_p\rho_p\mathbf{U}_m = -\nabla\cdot\left(\alpha_k\alpha_p\frac{\rho_k\rho_p}{\rho_m}\mathbf{U}_r\right) \tag{1.25}$$

Il existe de manière similaire d'autres généralisation adaptées à différents types d'écoulement, comme par exemple le modèle de *drift-flux* introduite par Zuber & Findlay [140]. Ce type de modèle est utilisé pour des écoulements ou une phase est dispersée.

1.2.2 Modèle bi-fluide

Les deux équations de conservation (1.12) et (1.13) sont résolues pour chaque champ.

$$\frac{\partial(\alpha_k\rho_k)}{\partial t} + \nabla\cdot(\alpha_k\rho_k\mathbf{U}_k) = \sum_{p\neq k}\Gamma_{p\to k} \tag{1.26}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\alpha_k\rho_k\mathbf{U}_k)}{\partial t} + \nabla\cdot(\alpha_k\rho_k\mathbf{U}_k\mathbf{U}_k) = \quad & -\nabla(\alpha_k P) + \alpha_k\rho_k\mathbf{g} \\ & +\nabla\cdot\left(\alpha_k\mathbb{T}_k + \alpha_k\mathbb{T}_k^{SM}\right) + \sum_{p\neq k}\mathbf{M}_{p\to k}\end{aligned} \tag{1.27}$$

Ce système d'équations général est un système ouvert auquel il faut ajouter des lois de fermeture, notamment sur les termes de transferts interfaciaux. Pour le terme de transfert de quantité de mouvement, on peut isoler la partie liée au transfert de masse et la partie liée aux forces hydrodynamiques :

$$\mathbf{M}_{p\to k} = \mathbf{M}_{p\to k}^{hydro} + \Gamma_{p\to k}\mathbf{U}_{kp}^{Int} \tag{1.28}$$

Pour l'approche multi-champs multi-échelles visée, ce terme de transfert hydrodynamique va être différent selon la modélisation du champ associé. Ainsi entre un champ continu et un champ dispersé il sera composé des différentes contributions des particules sur le fluide : la traînée, le lift, la masse ajoutée et la dispersion turbulente. Entre deux champs continus en revanche, il fera apparaître des termes locaux comme la tension de surface ou le frottement interfacial. Les modélisations de ces termes hydrodynamiques sont définies dans les deux paragraphes suivants (2 et 3), tandis que les transferts de masse entre champs seront abordés plus tard au paragraphe 4.

2 Bulles sphériques - gaz dispersé

Pour un champ k dispersé, les forces hydrodynamiques modélisées sont la trainée (D), le lift (L), la masse ajoutée (VM), et la dispersion turbulente (TD) :

$$\mathbf{M}_{p\to k}^{hydro} = \mathbf{M}_{p\to k}^{D} + \mathbf{M}_{p\to k}^{L} + \mathbf{M}_{p\to k}^{VM} + \mathbf{M}_{p\to k}^{TD} \tag{1.29}$$

Pour le cas de champs dispersés comme les bulles ou les gouttes, des lois de fermeture sont déjà implémentées dans le code NEPTUNE_CFD et ont fait l'objet de validations sur des cas industriels [80, 39]. Pour les bulles de forme sphérique à ovoïde, on dispose ainsi d'un ensemble de lois de fermeture éprouvé, que l'on détaillera pour les bulles dans les paragraphes suivants.

2.1 Force de traînée

La force de traînée est la composante de la force exercée par le fluide sur un obstacle dans la direction de l'écoulement. L'expression donnée par Ishii [58] est

utilisée pour les bulles faiblement déformées (ovoïdes) :

$$\mathbf{M}^{D}_{cl\to dg} = -\frac{1}{8}A_i\rho_{cl}C_D|\mathbf{U}_{dg}-\mathbf{U}_{cl}|(\mathbf{U}_{dg}-\mathbf{U}_{cl}) \tag{1.30}$$

où A_i est l'aire interfaciale et le coefficient C_D est donné pour des bulles ovoïdes :

$$C_D = \frac{2}{3}d_{dg}\sqrt{\frac{g|\rho_{dg}-\rho_{cl}|}{\sigma}}\left(\frac{1+17.67(1-\alpha_{dg})^{9/7}}{18.67(1-\alpha_{dg})^{3/2}}\right) \tag{1.31}$$

Il existe des extensions de ce coefficient de traînée pour d'autres régimes que le régime dispersé, comme le régime de *churn* par exemple, mais l'utilisation du modèle dispersé dans notre approche hybride se restreint aux bulles peu déformées.

2.2 Force de lift

La force de lift, ou portance, est la composante perpendiculaire à la direction de l'écoulement de la force fluide. Sa forme générale s'exprime de la manière suivante dans le modèle à deux fluides :

$$\mathbf{M}^{L}_{l\to dg} = -C_L\alpha_{dg}\rho_{cl}(\mathbf{U}_{dg}-\mathbf{U}_{cl})\wedge(\nabla\wedge\mathbf{U}_{cl}) \tag{1.32}$$

Si pour des bulles sphériques le coefficient $C_L = 0.5$ est satisfaisant, on utilise le coefficient de lift de Tomiyama [124], basé sur le nombre d'Eötvos modifié pour des bulles ovoïdes :

$$E_{oH} = \frac{g(\rho_{dg}-\rho_{cl})d_H^2}{\sigma} \text{ avec } d_H = d_{dg}\sqrt[3]{1+0.163E_o^{0.757}} \tag{1.33}$$

si $E_{oH} < 4$:

$$C_L = min\{0.288tanh(0.121Re), 0.00105E_{oH}^3 - 0.0159E_{oH}^2 - 0.0204E_{oH} + 0.474\} \tag{1.34}$$

si $4 < E_{oH} < 10$:

$$C_L = 0.00105E_{oH}^3 - 0.0159E_{oH}^2 - 0.0204E_{oH} + 0.474 \tag{1.35}$$

si $E_{oH} > 10$:

$$C_L = -0.27 \tag{1.36}$$

Le changement de sens du coefficient de lift pour des bulles très aplaties ($E_{oH} > 10$) est expliqué par les travaux de thèse d'Adoua, encadrés par Legendre & Magnaudet [2].

2.3 Force de masse ajoutée

La force de masse ajoutée, ou masse virtuelle, décrite par Zuber [139] est la force générée par le déplacement d'un volume de fluide par les particules dispersées en accélération (ou décélération) par rapport au fluide :

$$\mathbf{M}^{A}_{l\to dg} = -C_A \frac{1+2\alpha_{dg}}{1-\alpha_{dg}} \alpha_{dg}\rho_l \frac{dU_r^{dg,l}}{dt} \tag{1.37}$$

où l'on peut exprimer le terme d'accélération relative de façon symétrique :

$$\frac{dU_r^{dg,l}}{dt} = \left(\frac{\partial \mathbf{V}_{dg}}{\partial t} + \mathbf{V}_{dg}\cdot\nabla\mathbf{V}_{dg}\right) - \left(\frac{\partial \mathbf{V}_{cl}}{\partial t} + \mathbf{V}_{cl}\cdot\nabla\mathbf{V}_{cl}\right) \tag{1.38}$$

où C_A le coefficient de masse ajoutée est égal à 0.5 pour des bulles sphériques.

2.4 Dispersion turbulente

La force de dispersion turbulente est la modélisation de l'interaction entre la turbulence et les bulles, l'expression utilisée est la suivante [64] :

$$\mathbf{M}^{TD}_{dg} = -\mathbf{M}^{TD}_{cl} = -\frac{3C^{TD}}{4d}\rho_{cl}\nu^{T}_{cl}|\mathbf{U}_{cl}-\mathbf{U}_{dg}|\nabla\alpha_{dg} \tag{1.39}$$

On considérera ce jeu de lois de fermeture entre une phase continue liquide et une phase dispersée gaz comme acquis (validé par les applications visées dans le code NEPTUNE_CFD). L'essentiel du travail réside donc dans la mise en place de lois de fermeture pour les larges bulles (ITM), ainsi que le coupage entre ces deux approches. Ce sont ces deux aspects que nous allons nous efforcer de détailler dans la fin du chapitre.

3 Larges bulles - gaz continu

3.1 Frottement interfacial

Au passage de l'interface entre les deux champs continus (liquide et gaz), il faut fixer une relation entre les vitesses des deux champs pour fermer le système. En pratique cela revient à donner une expression à la force de traînée qui jouera alors le rôle de loi de paroi interne. Dans le cas d'une interface bien résolue, il convient d'appliquer une condition de glissement nul dans les cellules contenant l'interface.

$$\mathbf{F}_{D,kp} = \frac{\alpha_k\alpha_p(\mathbf{U}_k-\mathbf{U}_p)(\alpha_k\rho_k+\alpha_p\rho_p)}{\tau} \tag{1.40}$$

Si l'on considère un cas où la force de traînée serait le terme dominant, on peut réduire l'équation de la dynamique à l'équation suivante :

$$\begin{cases} \alpha_1\rho_1\dfrac{U_1^{n+1}-U_1^{n}}{\Delta t} = \dfrac{\alpha_1\alpha_2(U_2^{n+1}-U_1^{n+1})(\alpha_1\rho_1+\alpha_2\rho_2)}{\tau} \\ \\ \alpha_2\rho_2\dfrac{U_2^{n+1}-U_2^{n}}{\Delta t} = \dfrac{\alpha_1\alpha_2(U_1^{n+1}-U_2^{n+1})(\alpha_1\rho_1+\alpha_2\rho_2)}{\tau} \end{cases} \tag{1.41}$$

Le système précédent peut être résolu analytiquement, avec la solution suivante pour la vitesse de la phase 2 U_2^{n+1} :

$$U_2^{n+1} = \frac{U_2^n \left(1 + \alpha_2 \frac{\Delta t}{\tau} \frac{\rho_m}{\rho_1}\right) + U_1^n \left(\alpha_1 \frac{\Delta t}{\tau} \frac{\rho_m}{\rho_2}\right)}{1 + \alpha_1 \frac{\Delta t}{\tau} \frac{\rho_m}{\rho_2} + \alpha_2 \frac{\Delta t}{\tau} \frac{\rho_m}{\rho_1}} \tag{1.42}$$

Afin que la vitesse de la phase 1 domine lorsqu'elle est la seule phase en présence, le temps de relaxation τ doit vérifier $\Delta t/\tau >> 1$ (ce qui amène $U_2^{n+1} = U_1^n$ sous ces conditions).

Comme on considère ici des écoulements à phases séparées dans le modèle à deux fluides, la force de traînée pour les larges bulles est une condition de non-glissement à l'interface, assurant l'égalité locale des vitesses des deux phases à l'interface. On choisit la loi de fermeture (1.40) avec un temps de relaxation τ très petit devant le pas de temps de la simulation ($\tau = \Delta t/100$).

3.2 Force de tension de surface

Les larges bulles n'étant plus considérées comme un champ dispersé, la force de tension de surface (1.43) doit être prise en compte [28].

$$\mathbf{F}_{sta} = \sigma \kappa \mathbf{n} \tag{1.43}$$

Pour le modèle Eulérien de NEPTUNE_CFD, l'approche volumes finis implique que les forces surfaciques doivent être implémentées comme des forces volumiques. La courbure κ peut être définie comme la divergence du vecteur normal à l'interface $\mathbf{n}$. À l'instar de la méthode *level-set*, on utilise une fonction couleur c localisant l'interface comme descripteur de ce vecteur d'interface. En pratique, cette fonction couleur est le taux de vide, diffusé ou non pour obtenir une fonction régulière. On calcule alors le vecteur normal à l'interface et la courbure à l'aide de cette fonction couleur. La courbure peut être exprimée de deux manières différentes (1.44) [**?**, 109]. A priori, le calcul d'une divergence de gradient est plus adapté à une discrétisation par une méthode de volumes finis, on utilisera donc l'expression de gauche. Cette hypothèse sera vérifiée par la suite 2.13.

$$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla c}{\|\nabla c\|}\right) \quad \text{ou} \quad \kappa = \frac{1}{\|\nabla c\|} \left[\frac{\nabla c \cdot \nabla}{\|\nabla c\|} \|\nabla c\| - \nabla \cdot (\nabla c)\right] \tag{1.44}$$

La discrétisation de (1.43) sur une interface de largeur finie fournit l'expression (1.45), on retrouve bien la même expression lorsque la largeur de l'interface et le pas du maillage tendent vers 0.

$$\mathbf{F}_{stv} = \sigma \left[\nabla \cdot \left(\frac{\nabla c}{\|\nabla c\|}\right)\right] \frac{\nabla c}{\|\nabla c\|} \tag{1.45}$$

La méthode *Continuum Surface Force* (CSF) introduite par Brackill *et al.* [17] permet une reformulation de la force de tension de surface en une force volumique

équivalente qui peut être ajoutée dans l'équation de la quantité de mouvement. Dans le modèle à deux fluides, cette force est répartie sur les deux phases occupant les cellules, étant donné que deux équations sont résolues :

$$\mathbf{F}_{st}^{k} = \beta_k \sigma \left[\nabla . \left(\frac{\nabla c}{\|\nabla c\|} \right) \right] \nabla c \, dV \tag{1.46}$$

où β_k est ici un facteur de pondération vérifiant $\sum_k \beta_k = 1$. Bartosiewicz *et al.* [8] proposent deux modèles pour ce coefficient, suivant que l'on choisit une pondération basée sur la masse ou sur le volume :

$$\begin{array}{ll} \text{Moyenne volumique} & \beta_k = \alpha_k \\ \text{Moyenne massique} & \beta_k = \dfrac{\alpha_k \rho_k}{\sum \alpha_p \rho_p} \end{array} \tag{1.47}$$

Štrubelj [135] simule des cas où le rapport de masse volumique entre les phases est élevé, et où la tension de surface domine. Il établit que dans ce cas, l'utilisation de la moyenne volumique donne de meilleurs résultats, en notant toutefois que les écarts entre les deux types de moyennes sont minimes. Nous allons donc par la suite utiliser la moyenne volumique pour implémenter la tension de surface dans NEPTUNE_CFD.

3.3 Compression artificielle de l'interface

L'idée de compression artificielle a été introduit par Harten [47] pour le suivi d'ondes de choc en discrétisation par différences finies :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} + \nabla \cdot \mathbf{g}(\alpha) = \varepsilon \nabla \cdot (\nabla \alpha) \tag{1.48}$$

Le flux de compression $\mathbf{g}(\alpha)$ introduit par Harten doit vérifier les conditions suivantes :

- ▷ $g(\alpha) = 0$ à droite et à gauche de l'interface
- ▷ $g(\alpha) > 0$ sur l'interface

Le flux proposé par Olsson et Kreiss [91], $\mathbf{g}(\alpha) = \alpha(1-\alpha)\mathbf{n}$ remplit bien toutes ces conditions. L'étape de compression artificielle consiste donc à résoudre jusqu'à convergence l'équation suivante :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} + \nabla \cdot (\alpha(1-\alpha)\mathbf{n}) = \varepsilon \nabla \cdot (\nabla \alpha) \tag{1.49}$$

On calcule dans un premier temps le vecteur interface $\mathbf{n}$ au pas de temps courant n (avant compression). Celui-ci est utilisé pour toute l'étape de compression, l'hypothèse étant que l'on cherche à comprimer l'interface sans pour autant modifier sa forme. La direction normale à l'interface est donc une constante de l'équation locale de compression artificielle :

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\alpha}{\|\nabla\alpha\|}^{n} \tag{1.50}$$

Deux schémas de résolution numérique sont testés. Le premier est un schéma de type *upwind*, proposé par Harten [47], tenant compte à la fois du sens du flux et du gradient (*sgn* est ici la fonction signe). Le second est le schéma centré classique. La résolution du système est effectuée de manière explicite :

$$\begin{aligned}
&\alpha_j^{n+1} = \alpha_j^n - \frac{1}{2}\left(G_{j+1/2}^n - G_{j-1/2}^n\right)\\
&\text{Schéma de Harten :}\\
&G_{j+1/2}^n = g(\alpha_j^n) + g(\alpha_{j+1}^n) - |g(\alpha_{j+1}^n) - g(\alpha_j^n)|sgn(\alpha_{j+1}^n - \alpha_j^n)\\
&\text{Schéma centré :}\\
&G_{j+1/2}^n = g(\alpha_j^n) + g(\alpha_{j+1}^n)
\end{aligned} \tag{1.51}$$

On utilise ensuite la méthode du Jacobi pour l'inversion matricielle du système et le calcul de α dans le cas d'une résolution explicite. Les paramètres de l'équation (1.49) sont ε et $\Delta\tau$. La valeur de ε permet de jouer sur l'équilibre entre la partie *compression* et la partie *diffusion* de l'équation à convergence, c'est-à-dire lorsque $\partial\alpha/\partial\tau$ tend vers 0. C'est donc la valeur de ε qui contrôle l'épaisseur de l'interface à la fin de l'étape de compression artificielle. La valeur de $\Delta\tau$ influe sur les nombres CFL et de Fourier de l'équation. Ces derniers doivent être petits (en l'occurence inférieurs à 0.5) pour assurer que l'on effectue une compression conservant une normale à l'interface $\mathbf{n}$ inchangée. On fixe les valeurs suivantes pour ε et $\Delta\tau$, correspondantes aux préconisations de Štrubelj [135] :

$$\varepsilon = \frac{\Delta x}{2} \quad \text{et} \quad \Delta\tau = \frac{\Delta x}{32} \tag{1.52}$$

Pour une interface résolue, on obtient à convergence de l'étape de compression une interface d'une épaisseur de 2 cellules de chaque coté, soit 5 cellules en tout. Contrairement au critère de convergence utilisé par Štrubelj (1.53), on cherche en pratique à mesurer la variation d'une grandeur mesurant la quantité d'interface présente dans le domaine. L'étape de compression est répété jusqu'à ce que notre critère de convergence devienne inférieure à un seuil.

$$\sum_{I}^{ncel} |\delta\alpha^I| < seuil \times \Delta\tau \tag{1.53}$$

Le critère de convergence pour l'étape de compression artificielle basé sur le volume de la bulle n'est pas forcément pertinent compte tenu du fait que l'on ne modifie pas ici la forme de la bulle, mais la largeur de son interface. Pour une bulle qui se déforme fortement, la quantité de l'interface augmente sans pour autant que

son volume ne soit modifié. Il est jugé ici préférable d'avoir un critère de convergence basé sur la quantité d'interface, représentée par :

$$\int_{\Omega} \alpha_1 \alpha_2 dV \tag{1.54}$$

Le critère suivant est utilisé, en prenant la quantité d'interface totale comme valeur de référence pour le critère de convergence :

$$\sum_{I}^{ncel} |\delta\alpha_2^I(1-2\alpha_2^I)| d\Omega^I < seuil \times \sum_{I}^{ncel} \alpha_1^I \alpha_2^I d\Omega^I \tag{1.55}$$

L'étape de compression artificielle doit permettre de conserver une épaisseur d'interface constante au cours de la simulation, sans pour autant modifier la physique. Pour éviter l'ajout de vitesses parasites (le transport des fractions volumiques n'étant pas repris au niveau des vitesses des champs), il faut que la correction reste petite devant le transport de l'étape physique (cycle $\alpha - P$). Ce qui implique d'avoir un nombre d'itérations de compression artificielle faible par pas de temps physique et donc un seuil de convergence assez élevé (en pratique on retiendra la valeur de 10^{-3}).

Modification de l'étape de compression Sato & Niceno [107] montrent que l'expression proposée par Olsson & Kreiss [91] pour la compression artificielle de l'interface, déforme cette dernière dans le cas où la compression est itérée un trop grand nombre de fois. Leurs travaux présentent une expression tenant compte de la vitesse locale de l'interface, permettant de quantifier la compression à appliquer en estimant un indice de diffusion local :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} + \beta \nabla \cdot (\alpha(1-\alpha)\mathbf{n}) = \beta\varepsilon \nabla \cdot (\nabla\alpha) \tag{1.56}$$

Avec β un coefficient local compris entre 0 et 1, permettant de contrôler l'effet de compression. L'indice de diffusion local $i_D = \nabla(\mathbf{u}\cdot\mathbf{n})\cdot\mathbf{n}$ est utilisé pour la définition de β :

$$\beta = \begin{cases} \beta_{min} & i_D \leq 0 \\ \dfrac{1-\beta_{min}}{i_D^{sat}} i_D + \beta_{min} & 0 < i_D < i_D^{sat} \\ 1 & i_D > i_D^{sat} \end{cases} \tag{1.57}$$

Reste alors à renseigner les paramètres β_{min} et i_D^{sat} (respectivement 0.01 et 2.0 d'après Sato & Niceno). Cette approche montre une limite de l'étape de compression artificielle qui ne doit pas devenir un terme dominant par rapport au déplacement de l'interface par l'étape physique d'advection-diffusion. L'application du modèle de Sato & Niceno est principalement le suivi du départ d'ébullition, donc des bulles sphériques. Il ne nous semble pas que cette solution, basée sur une diminution de la compression soit la meilleure méthode pour les bulles déformées. Si l'étape de

compression pose des problèmes, c'est le signe d'une mauvaise discrétisation du problème, mal résolu par l'échelle spatiale ou temporelle de la simulation.

L'exemple suivant illustre cet effet. L'ascension d'une bulle 2D est modélisée avec une approche sans compression de l'interface, la compression de Olsson & Kreiss avec un seuil de convergence faible (donc potentiellement beaucoup d'itérations de compression), et la compression proposée par Sato & Niceno. Au bout de 0.5 s d'ascension, les bulles avec compression de l'interface ont atteint une forme finale. Les trois formes obtenues sont comparées en figure 1.1.

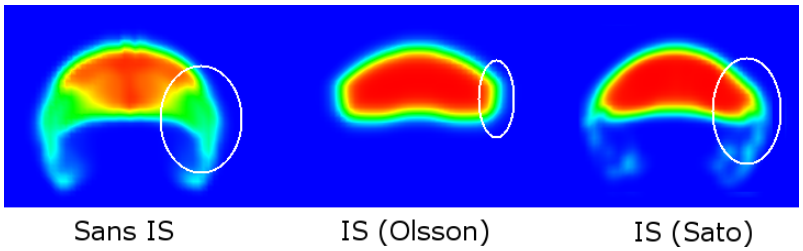


FIGURE 1.1 – *Observation de la forme d'une bulle avec des modèles sans compression, avec la compression artificielle de l'interface de Olsson & Kreiss et avec la modification de Sato & Niceno. La "jupe" des différentes bulles est entourée en blanc.*

On constate que la modélisation avec une compression artificielle importante présente une forme presque anguleuse de la "jupe" de la bulle, tandis que pour les cas sans compression et avec la modification de Sato & Niceno, on observe une part de fragmentation à cet endroit. Il nous paraît alors plus judicieux de parler de sous-résolution de l'interface, et d'adapter le modèle complet de localisation de l'interface plutôt que la seule étape de compression artificielle. C'est ce que nous allons maintenant aborder.

3.4 Vers le dispersé : cas d'interfaces mal résolues

Dans le cas d'interfaces sous-résolues, il semble trop contraignant d'imposer une condition de non- glissement stricte à l'interface. En effet, si cette dernière est sous-résolue, on se retrouve exactement dans le cas d'une paroi où le maillage n'est pas assez raffiné. On se propose alors d'ajouter un glissement interfacial similaire à l'approche du *Large Interface Method*, (LIM) qui est le modèle dédié aux surfaces libres dans NEPTUNE_CFD [30]. Ce qui requiert d'être capable de détecter ces zones où l'interface est sous-résolue.

3.4.1 Détection

Le fait que l'interface soit sous-résolue est directement liée au choix de la résolution spatiale, autrement dit, à la taille du pas d'espace du maillage. On pourrait évidemment raffiner le maillage afin de retrouver une résolution correcte de l'interface. Mais, cela reviendrait à tendre vers une modélisation de type DNS-diphasique, ce qui n'est absolument pas l'objectif du modèle présenté.

La recherche d'un critère basé sur ce pas de maillage paraît donc pertinent. Pigny *et al.* [97] proposent une méthode hybride diphasique, avec des lois de fermetures dépendante du diamètre détecté des bulles. Ainsi, pour un diamètre de bulle détectée $d_{cg} > 8 \times \Delta x$ avec Δx le pas du maillage, la tension de surface est prise en compte dans les lois de fermeture locales.

3.4.2 Glissement

Pour permettre le glissement à l'interface dans les zones de sous-résolution détectées, décrit au paragraphe précédent, on récupère dans ce domaine le vecteur normal à l'interface. Une première étape consiste à supprimer le frottement (*i.e.* le terme de trainée) dans la direction tangentielle à l'interface, ce qui va permettre de continuer à avoir une contrainte forte de non-glissement dans la direction de la normale à l'interface.

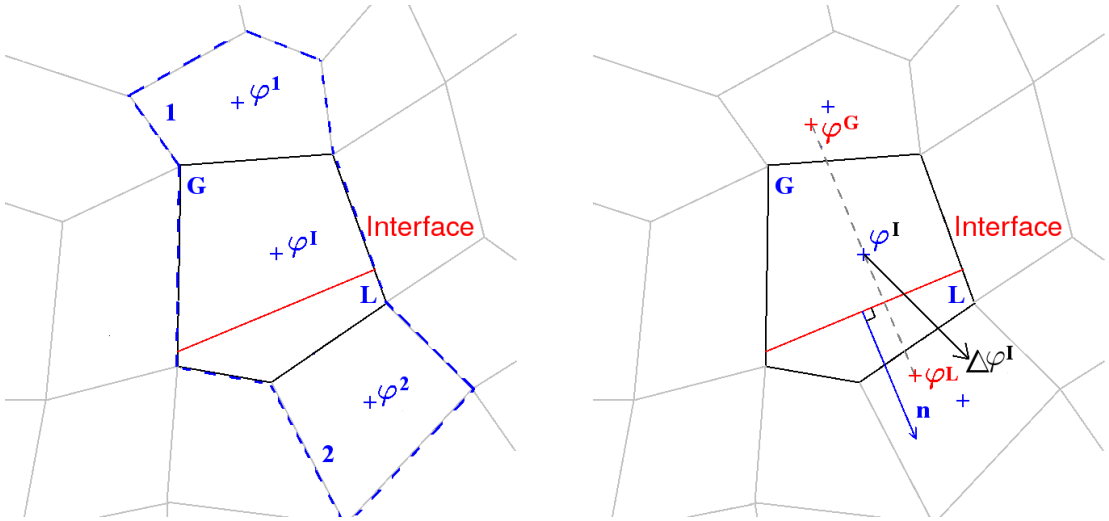


FIGURE 1.2 – *Principe et différence entre le calcul de la valeur d'une grandeur φ à l'interface, pour le modèle LIM dédié aux surfaces libres, et pour le modèle de grande interface ITM.*

Une fois la zone sous-résolue détectée, il faut calculer la vitesse de glissement locale. La différence majeure entre l'approche LIM et notre approche ITM réside dans la localisation de l'interface. En LIM, l'interface est localisé sur un bloc de trois cellules : une cellule gaz, une cellule liquide et une cellule contenant l'interface (*Cf.* figure 1.2). Les deux cellules "monophasiques" servent alors pour l'extrapolation des grandeurs physiques locales telles que la vitesse de chaque phase, afin de calculer à l'interface la vitesse relative entre les phases. Avec la méthode ITM en revanche, l'interface est localisée par la fonction couleur et les grandeurs interfaciales sont extrapolées directement à partir des gradients locaux :

$$\begin{aligned} \varphi_{cl} &= \varphi_{Int} - \nabla\varphi_{Int} \cdot (h\mathbf{n}) \\ \varphi_{cg} &= \varphi_{Int} + \nabla\varphi_{Int} \cdot (h\mathbf{n}) \end{aligned} \tag{1.58}$$

où h est une distance dépendante de la largeur de l'interface. Cette approche présente l'avantage de ne pas avoir besoin de savoir si le liquide est au dessus ou en dessous de l'interface, et ne requiert pas d'avoir un maillage qui "suit" la forme de l'interface (par exemple, dans le cas d'un écoulement descendant une marche).

3.4.3 Compression

Dans une cellule où l'interface est détecté comme sous-résolue, on ne peut pas prétendre appliquer une étape de compression artificielle de l'interface sans être sûr de ne pas modifier la topologie de l'écoulement local. Dans ces zones intermédiaires entre les modélisations locales et dispersées, la méthode de compression n'est pas utilisée.

Cette première étape du champ continu vers le dispersé permet de supprimer la contrainte forte sur les vitesses pour une interface qui commence à ne plus être assez résolue par rapport à la taille de maille. Nous verrons par la suite, toujours avec la même idée de critère de résolution, que l'on peut détecter des zones de glissement et des zones où le champ continu est transféré vers le dispersé.

4 Transferts entre champs

Différents types de transferts interviennent dans le modèle hybride 2-phases, 3-champs proposé :

Transferts entre le liquide et la phase dispersée :

- Ébullition/condensation : ces modèles sont déjà implémentés et validés dans le code NEPTUNE_CFD, les expressions sont synthétisées en annexe B.

Transferts entre champs continus :

- Ébullition/condensation sur une interface : modèles existant dans NEPTUNE_CFD pour le modèle LIM à l'heure actuelle. Ces modèles pourront être généralisés, d'autres idées existent aussi dans la littérature [108].

Transferts entre champs gaz :

- À l'interface entre champs coexistants localement (modélisation de la coalescence ou du rebond de bulles ou gouttes dispersées sur l'interface).
- Création d'une poche à partir du champ à bulles dispersées, issu de la coalescence au sein du champ dispersé ou de l'augmentation du diamètre des bulles dispersées lors de l'ébullition.
- Création de bulles dispersées à partir d'une poche localisée par fractionnement ou condensation de l'interface.

La dernière catégorie est celle qui nous intéresse ici. En effet, les termes de transfert entre phase sont essentiellement dus au changement de phase, qui n'est pas pris en compte pour le moment. Les transferts entre les champs gaz résultants du découpage de notre approche hybride sont en revanche les termes clés du couplage entre la modélisation dispersée et le modèle de localisation d'interface. En pratique, ces transferts sont effectués au travers de termes de transferts de masse. On présente ici les expressions mises en place durant le temps de la thèse ainsi que les idées qui restent à mettre en œuvre pour ce type d'approche multiphasique.

Il existe peu de travaux expérimentaux traitant de l'interaction locale entre des grosses bulles déformées et des petites bulles sphériques. Les travaux de Tsuchiya *et al.* [127] peuvent à ce titre être une piste de validation. Le manque de vérification et de validation de cas d'interactions élémentaires est un problème important pour la validation de l'approche hybride complète.

4.1 Échanges entre deux champs gaz coexistants

Un premier problème se pose lorsque l'on implémente pour la première fois une approche couplant un champ dispersé et un champ localisé appartenant à la même phase : que faire concrètement lorsque les trois champs sont présents dans une même cellule ?

Se posent essentiellement au travers de cette question deux problèmes : prendre en compte un modèle de coalescence/rebond des bulles dispersées sur l'interface, et éviter que numériquement l'étape de compression artificielle ne se retrouve avec une fraction volumique de la phase liquide négative. Le premier point concerne le domaine de la physique. Dans un premier temps, on ne considère que la coalescence. Le choix entre rebond et coalescence pourrait être envisagé en évaluant localement un nombre de Weber et une probabilité de rebond pour une partie de la phase dispersée.

La coalescence est assurée à partir du moment où la phase dispersée pénètre l'interface (isosurface $\alpha_{cg} = 0.5$). Du point de vue numérique, l'implémentation de la compression artificielle de l'interface est modifiée, l'équation (1.49) est résolue pour le champ gaz continu et pour le mélange diphasique de fraction volumique :

$$\alpha_m = \alpha_{cl} + \alpha_{dg} \tag{1.59}$$

Suite à la compression, on fait l'hypothèse (qui peut être vérifiée) que la phase dispersée a conservé son volume, ce qui nous donne les relations suivantes pour la reconstruction de chaque champ (les quantités marquées d'un astérisque sont issues de l'étape de compression) :

$$\begin{cases} \alpha^*_{dg} = \alpha_{dg} \\ \alpha^*_{cl} = \alpha^*_m - \alpha_{dg} \end{cases} \tag{1.60}$$

Dans le cas où $\alpha_{dg} > \alpha^*_m$, on "coalesce" les champs gaz, et on reprend l'étape de compression artificielle depuis le début.

4.2 Transition d'un champ dispersé vers un champ continu

Dans le cadre de la modélisation multiphasique présentée, la transition de l'approche dispersée vers l'approche continue intervient lorsque les bulles dispersées coalescent pour atteindre une taille supérieure à la dimension du filtre spatial. Cette situation se produit lorsque le modèle de coalescence/fractionnement du champ dispersé prédit un diamètre moyen de l'ordre de la taille du filtre spatial, sous réserve que le champ en question soit suffisamment présent localement.

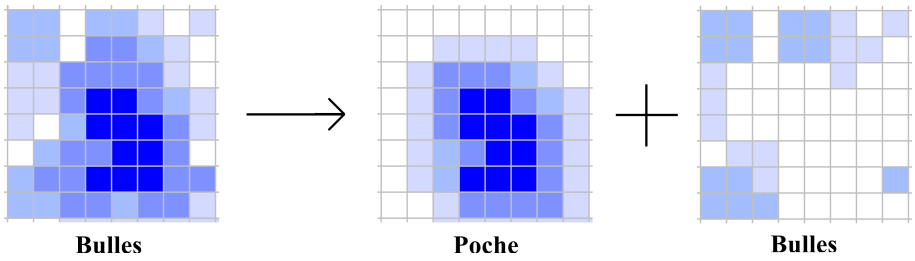


FIGURE *1.3 – Schéma de principe de la création d'une poche dont l'interface est localisée à partir du champ gaz dispersé.*

4.2.1 Approche développée durant la thèse

Afin de simplifier le couplage dans un premier temps, on traite le champ dispersé avec une approche monodispersée. Le critère de transition du champ dispersé vers le champ gaz continu est donc uniquement basé sur la fraction volumique du champ dispersé et son gradient.

$$\Gamma_{\text{création } cg} = \alpha_{dg}\alpha_{cg}\frac{\rho_g}{\Delta t}C_{dg\to cg}H(\alpha_{dg}-\alpha_{\text{crit}})H(\nabla\alpha_{dg}-\nabla\alpha_{\text{crit}}) \tag{1.61}$$

où H est la fonction Heaviside, et $C_{dg\to cg}$ une constante contrôlant la vitesse du transfert de masse. Le critères de transition sur le taux de vide est fixé à $\alpha_{\text{crit}} = 0.3$, valeur moyenne de ce que l'on peut trouver dans la littérature pour la limite des écoulements à bulles [85, 121]. Le critères de transition sur le gradient du taux de vide est ici plus arbitraire, il est fixé à $\nabla\alpha_{\text{crit}} = 1/(10\Delta x)$, soit un gradient deux fois plus petit que celui que l'on peut calculer à l'interface d'une bulle simulée.

4.2.2 Réflexions et perspectives

À terme, l'objectif est d'utiliser une approche polydispersée pour le champ dispersé. Le transfert serait alors ciblé sur la classe contenant les plus grands diamètres, avec un critère de transition sans doute basé sur la fraction volumique et le diamètre plutôt que sur le gradient.

Une autre idée qui n'a pas été explorée est d'appliquer un critère de transition non plus en local sur les cellules, mais sur un maillage plus grossier ou un stencil beaucoup plus large, comme illustré sur la figure 1.4. Ces transformations, revenant à prendre une moyenne spatiale locale, devrait permettre de détecter la présence d'une poche avec une plus grande flexibilité que l'usage seul de gradients locaux

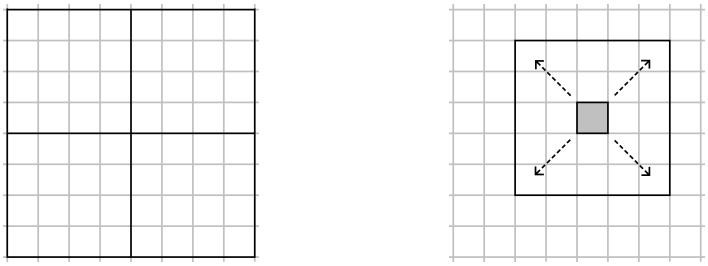


FIGURE 1.4 – *Idées de découpage pour l'application du critère de localisation de la création d'interface à partir des propriétés du champ gaz dispersé.*

(gradients qui ne vont chercher des informations que dans les cellules voisines, voire au voisinage étendu).

4.3 Transition d'un champ continu vers un champ dispersé

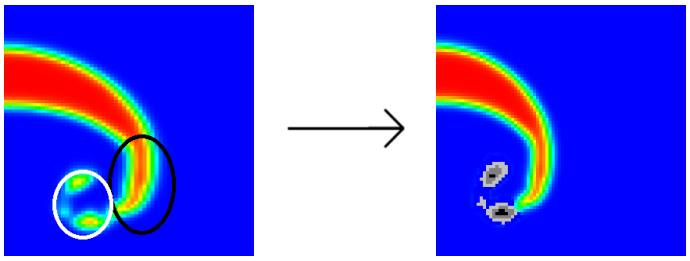


FIGURE 1.5 – *Illustration de la localisation des interfaces sous-résolues, et transfert vers le champ dispersé.*

Un critère de coupure à $8\Delta x$, proposée par Maeda *et al.* [75], est utilisée par Pigny & Coste [97] pour identifier les interfaces résolues. Ce critère semble raisonnable avec un calcul de gradient qui tire son information sur un voisinage direct, la courbure étant alors calculée à partir d'un stencil de 5 cellules comme illustré en figure 1.6. Pour une bulle de diamètre égal à $8\Delta x$, on observe que ce stencil peut couvrir le rayon de la bulle dans le cas d'un voisinage étendu.

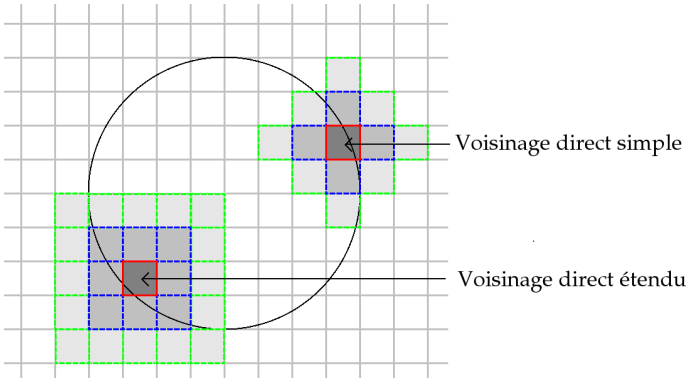


FIGURE 1.6 – *Illustration des stencil pour le calcul de la courbure avec une méthode de gradient utilisant un voisinage direct simple (une face en commun) ou un voisinage direct étendu (une face ou sommet en commun).*

Ce qui pour le diamètre local dans notre approche, nous donne un critère sur la courbure locale : $\kappa_{\text{résolution}} = 1/(4\Delta x)$. Avec la méthode de compression artificielle utilisée dans notre approche d'interface localisée, le paramètre ε fixe l'épaisseur de l'interface à 5 cellules de large (diffusion sur deux cellules de chaque coté de l'interface). La fraction volumique du champ gaz continu variant entre 0 et 1, on obtient un gradient local pour une interface résolue de $1/(5\Delta x)$. La combinaison de ces différents critères donne le critère proposé pour la transition d'un champ gaz continu mal résolu vers le champ dispersé :

$$C^{Int}_{\text{résolution}} = \kappa_{\text{résolution}} \nabla \alpha_{cg,\text{résolution}} d\Omega = \frac{l}{20} \tag{1.62}$$

où l est la dimension caractéristique de la grille du maillage, avec $l = \sqrt[3]{(\overline{d\Omega})}$, soit $l = \Delta x$ pour les maillages cubiques.

4.3.1 Approche développée durant la thèse

L'utilisation du critère énoncé au paragraphe précédent donne le transfert de masse interfacial suivant :

$$\Gamma_{\text{création } dg} = \alpha_{dg}\alpha_{cg}\frac{\rho_g}{\Delta t} C_{cg\to dg} H \left(\kappa \nabla \alpha_{cg} d\Omega - C^{Int}_{\text{résolution}}\right) \tag{1.63}$$

On conserve dans cette expression le volume local $d\Omega$ bien que les simulations avec l'approche hybride seront en pratique toutes menées sur des maillages à grille cubique. Même si cela n'a pas été testé dans ces travaux, nous pensons que le critère doit effectivement être plus strict dans les cellules de grand volume (et inversement moins strict dans les cellules de petit volume), ce qui est le cas avec ce critère incluant le volume moyen des cellules.

4.3.2 Réflexions et perspectives

Le critère ainsi que le transfert mis en place ne conserve aucune information sur le diamètre des bulles, l'approche simpliste d'un diamètre constant pour la phase dispersée ne le permettant pas. Dans l'idée d'utiliser une approche tenant compte du diamètre local à l'avenir, on peut imaginer transférer en plus de la masse une information sur le diamètre des bulles continues qui passent dans le champ dispersé. Celle-ci pourra être établie à partir de la courbure locale des fragments sous-résolus. Ce qui, avec une loi de coalescence/fractionnement pour la phase dispersée, que ce soit dans une approche polydispersée ou plus simplement une loi de transport de l'aire interfaciale, devrait permettre d'obtenir un diamètre plus réaliste.

4.4 Approche hybride complète

Dans les cas de l'approche complète, le terme de transfert de masse est la somme des deux termes précédents :

$$\Gamma_{dg \to cg} = \Gamma_{\text{création } cg} - \Gamma_{\text{création } dg} \tag{1.64}$$

Ce qui donne un équilibre entre la création et la disparition d'un champ, notamment dans les cellules où les trois champs coexistent.

4.5 Échanges thermiques

Les échanges thermiques, bien qu'au cœur de notre objectif ne sont pas traités ici. On mentionnera que la principale difficulté se trouve certainement dans les échanges à l'interface. Des pistes pour l'initiation des cas tests unitaires pour de tels transferts peuvent être trouvés dans les travaux de Legendre [71] ou plus spécifiquement pour une interface localisée sur une grille eulérienne, dans les travaux de Sato *et al.* [108]. Des informations sur les modèles existant dans NEPTUNE_CFD sont disponibles en annexe B.

5 Modélisation de la turbulence

Si l'on se restreint aux méthodes basées sur un maillage Eulérien, deux approches sont élaborées conjointement pour la prise en compte de la turbulence : la simulation directe (DNS) des équations de Navier-Stokes qui prend en compte toutes les échelles de la physique étudiée et l'approche moyennée qui consiste à modéliser les phénomènes issus des plus petites échelles.

5.1 Simulation numérique directe : DNS

En 1941, Kolmogorov introduit une vision statistique de la turbulence, encadrant la taille des tourbillons dans un écoulement entre la plus grande échelle L de l'écoulement imposée par la géométrie, et la plus petite η imposée par la viscosité du fluide, appelée échelle de Kolmogorov ou échelle de dissipation visqueuse. L'ordre de grandeur entre L et η est donné en monophasique par :

$$\frac{L}{\eta} \propto Re^{3/4} \tag{1.65}$$

Ce qui implique que la réalisation d'une simulation monophasique, représentant toutes les échelles de la turbulence d'un cube de dimension L^3, nécessitera un nombre de mailles proportionnel à $Re^{9/4}$. Il est donc très difficile voire impossible à l'heure actuelle de modéliser des écoulements à $Re > 1000$.

À proprement parler, le terme simulation numérique directe ne s'applique que dans les cas d'études monophasiques et les simulations avec un maillage non structuré suivant l'interface [43, 105]. En pratique, dans le cas diphasique sur maillage eulérien, les deux fluides sont traités comme un fluide unique dont les propriétés subissent une discontinuité à l'interface [126]. Des modèles sont généralement ajoutés, pour la simulation de films liquides entre deux bulles lors de phénomènes de coalescence par exemple. On parle alors de pseudo-DNS.

5.2 Approches moyennées

Avec ce type d'approche, on doit modéliser tous les phénomènes intervenants à des échelles inférieures à celles de la simulation. Il existe deux types de moyennes, spatiales et temporelles, qui conduisent à deux familles de méthodes de modélisation de la turbulence :

- ▷ *Reynolds Average Navier-Stokes (RANS)*, est une approche statistique avec des moyennes en temps et en espace. Elle nécessite la modélisation de toutes les échelles de la dissipation turbulente mais permet d'utiliser des maillages simplifiés. C'est actuellement la plus utilisée dans le monde industriel.
- ▷ *Large Eddy Scales (LES)* consiste à simuler les grandes échelles et modéliser les plus petites dans un terme dit de *sous-maille*. Seules ces petites échelles (inférieures à une échelle de coupure) sont filtrées spatialement.

On peut distinguer parmi les méthodes RANS, une famille parfois reclassée sous le nom de URANS, pour *Unsteady Reynolds Average Navier-Stokes*. L'ajout de la mention "instationnaire" précise que la moyenne temporelle est réalisée sur un temps fini. Ce qui en pratique permet d'observer des fluctuations de larges échelles spatiales et temporelles au sein de l'écoulement.

5.2.1 RANS et URANS

Les approches RANS consistent à ne simuler que l'écoulement moyen en temps et en espace (*Cf.* figure 1.7). Les moyennes peuvent être calculées de deux manières :

- ▷ *Moyenne d'ensemble* : on effectue N fois la même expérience et on moyenne les résultats ;
- ▷ *Moyenne temporelle* : on effectue une expérience sur un temps long sur lequel on moyenne.

Dans le cadre RANS strict, on se place dans l'hypothèse que le temps de moyenne est suffisamment long pour que les moyennes temporelles soient indépendantes du temps. On suppose également que les moyennes d'ensemble et temporelles sont égales, c'est-à-dire que le système vérifie l'hypothèse d'ergodicité. Cela permet de rechercher directement des solutions stationnaires aux équations moyennées.

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \langle u(x,t)\rangle_c + u'(x,t) \\ &\approx \overline{u}(x,t) + u'(x,t) \end{aligned} \tag{1.66}$$

avec

$$\overline{u}(x,t) = \lim_{T\to\infty}\left[\frac{1}{T}\int_0^T u(x,t)dt\right] \tag{1.67}$$

Dans le cas où le temps de moyenne est court devant au moins un des phénomènes physiques, les moyennes temporelles restent fonctions du temps. On conserve

alors les dérivations temporelles dans les équations moyennées et on parle d'approche URANS. Ce type d'approche permet de simuler certaines fluctuations de l'écoulement, les autres étant modélisées comme illustrée en figure 1.8

$$u(x,t) = \overline{u}(x,t) + \langle u(x,t)\rangle_c + u'(x,t) \tag{1.68}$$

Où $\langle u(x,t)\rangle_c$ est la contribution de modes cohérents à la dynamique de l'écoulement, par exemple une oscillation forcée de fréquence plus faible que la fréquence de moyenne temporelle. Pour simplifier, on conserve le découpage $u(x,t) = \overline{u}(x,t) + u'(x,t)$, sachant que $\overline{u}(x,t)$ ne converge pas forcément vers une fonction indépendante du temps. Le terme de fluctuations est entièrement modélisé à l'aide de l'hypothèse de Reynolds.

$$R = \overline{u'u'} = \nu^T \nabla u + \frac{2}{3} kI \tag{1.69}$$

La partie diagonale est interprétée comme une modification de la pression. L'action du tenseur de sous-maille est ainsi assimilé à celui d'une viscosité turbulente ν^T qui reste alors la grandeur à modéliser. Plusieurs modèles existent pour exprimer ce terme de viscosité turbulente [106], parmi les plus courant on trouve le modèle $k-\epsilon$ au premier ordre, et le modèle $R_{ij}-\epsilon$ au second ordre. On transporte alors l'énergie cinétique de la turbulence ϵ et soit le taux de dissipation de la turbulence k, soit chaque terme du tenseur de Reynolds (6 équations). Pour le modèle $k-\epsilon$ par exemple, on obtient une modélisation de viscosité turbulente :

$$\nu^T \propto \frac{k^2}{\epsilon} \tag{1.70}$$

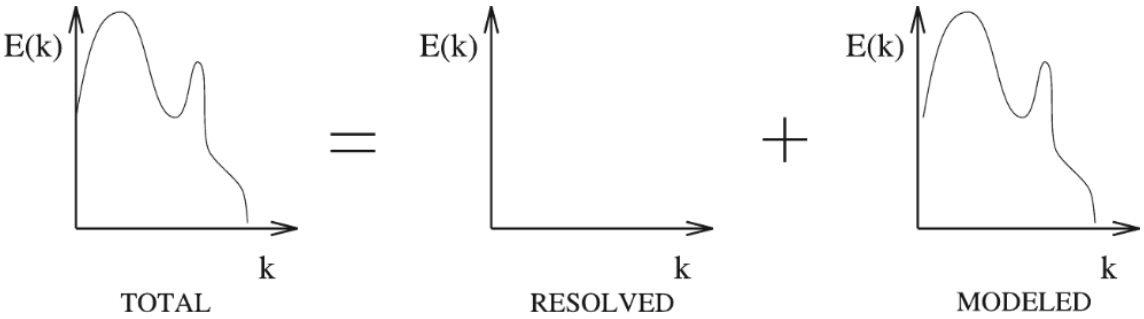


FIGURE 1.7 – *Représentation symbolique de la décomposition du spectre d'énergie en partie résolue et modélisée, associée au modèle RANS (Source : Sagaut [106]).*

5.2.2 LES

Le principe de la Simulation des Grandes Échelles, ou *Larges Eddy Scales* [106] repose sur la simulation des grandes échelles turbulentes, tandis que les plus petites échelles dissipatives sont modélisées à l'aide de termes dits de sous-maille (SM), comme illustré sur la figure 1.9.

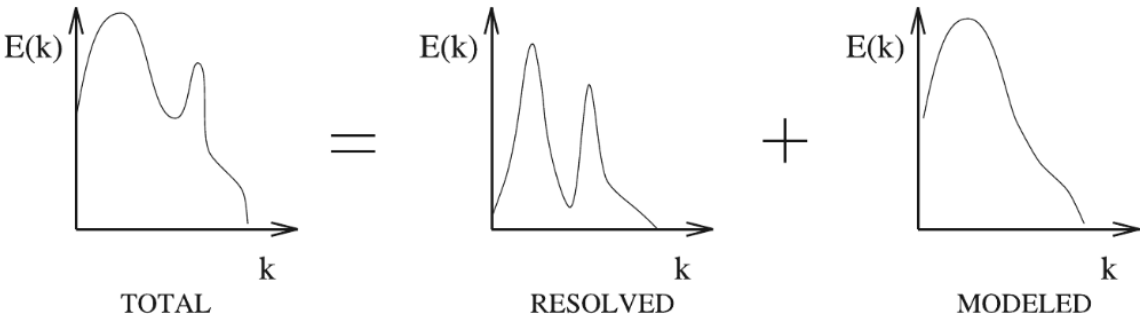


FIGURE 1.8 – *Représentation symbolique de la décomposition du spectre d'énergie en partie résolue et modélisée, associée au modèle URANS (Source : Sagaut [106]).*

Équations de Navier-Stokes (sous l'hypothèse de fluides incompressibles) sur la composante i :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_i}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial x_j}(u_i u_j) = -\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial P}{\partial x_i} + \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\nu \dfrac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \\ \dfrac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \end{cases} \tag{1.71}$$

Ce qui donne après application du filtre :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial x_j}(\overline{u_i u_j}) = -\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\nu \dfrac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}\right) \\ \dfrac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_i} = 0 \end{cases} \tag{1.72}$$

Il faut donc exprimer le terme $\overline{u_i u_j}$ comme une fonction de $\overline{u}$ et u'. En décomposant linéairement cette moyenne :

$$\begin{aligned} \overline{u_i u_j} &= \overline{(\overline{u}_i + u'_i)(\overline{u}_j + u'_j)} \\ &= \overline{\overline{u}_i \overline{u}_j} + \overline{\overline{u}_i u'_j} + \overline{u'_i \overline{u}_j} + \overline{u'_i u'_j} \end{aligned} \tag{1.73}$$

Dans le cas où le filtre utilisé est un opérateur de Reynolds,

$$\begin{cases} \overline{\overline{u}} = \overline{u} \\ \overline{u'} = 0 \end{cases} \tag{1.74}$$

On obtient alors $\overline{u_i u_j} = \overline{u'_i u'_j} + \overline{u}_i \overline{u}_j$, ce qui permet d'exprimer une équation sur l'énergie turbulente résolue $q_r^2 = \overline{u}_i \overline{u}_i / 2$, les termes faisant intervenir les échelles de

sous-maille étant des termes à modéliser :

$$\begin{aligned}\frac{\partial q_r^2}{\partial t} = & \underbrace{\overline{\overline{u}_i\overline{u}_j}\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}}_{\text{production}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}(\nu\frac{\partial q_r^2}{\partial x_i})}_{\text{diffusion visqueuse}} - \underbrace{\nu\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}}_{\text{dissipation visqueuse}} \\ & - \underbrace{\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{u}_i\overline{P})}_{\text{diffusion par pression}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{u}_i\,\overline{\overline{u}_i\overline{u}_j})}_{\text{dissipation par échelles résolues}} \\ & + \underbrace{\overline{u_i'u_j'}\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j}}_{\text{dissipation SM}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{u}_i\overline{u_i'u_j'})}_{\text{diffusion SM}}\end{aligned} \tag{1.75}$$

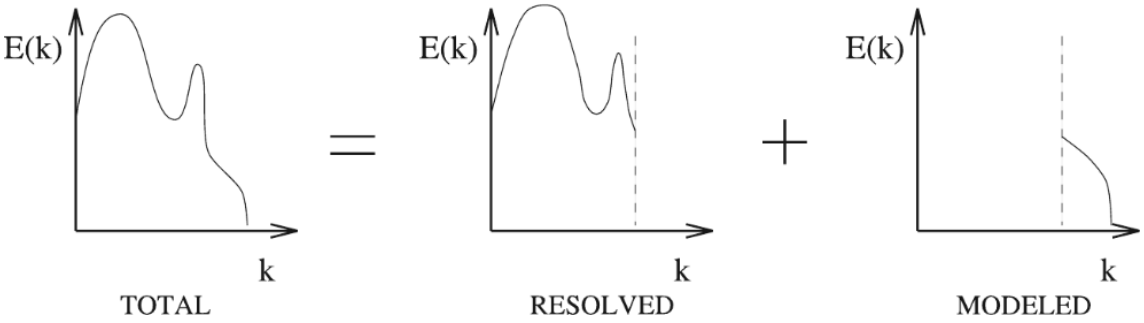


FIGURE 1.9 – *Représentation symbolique de la décomposition du spectre d'énergie en partie résolue et modélisée, associée au modèle LES (Source : Sagaut [106]).*

De la même façon qu'avec une approche RANS de la turbulence, on modélise le tenseur des contraintes de Reynolds $\overline{u_i'u_j'}$ par un tenseur de contraintes visqueuses de sous-maille avec une viscosité de sous-maille ν^T. Cette nouvelle variable dans les équations de Navier-Stokes pose un problème de fermeture que l'on résout par un modèle de turbulence. L'objectif de ce travail n'étant pas d'élaborer un modèle de LES, on se contentera ici de tester le modèle le plus simple : le modèle de Smagorinsky classique (1.76) [113, 106]. Des modèles plus élaborés tels que le modèle de Smagorinsky dynamique, ou le modèle de Germano [106] pourront être étudiés et implémentés par la suite.

$$\nu^T = \sqrt{2}(C_S\overline{\Delta})^2\|S_{ij}| \tag{1.76}$$

Dans sa version classique, C_S est une constante, dont la valeur est estimée à partir de l'hypothèse que le spectre d'énergie non résolue suit la loi de Kolmogorov :

$$C_S = \frac{1}{\pi}\left(\frac{2}{3C_K}\right)^{3/4} \approx 0.18 \tag{1.77}$$

où $C_K \simeq 1.5$ est la constante de Kolmogorov. En pratique, ces valeurs de C_S et C_K conviennent pour des modélisations de turbulence homogène isotrope en monophasique, et doivent être révisées pour d'autres configurations d'écoulements. En particulier pour une application à un cas d'écoulement diphasique avec une phase dispersée, Tran recommande une valeur $C_S = 0.12$ [125].

5.2.3 Turbulence diphasique

Dans le cadre des écoulements diphasiques qui nous intéressent, nous serons amenés à simuler l'évolution d'interfaces entre phases continues, ce qui rend intrinsèquement l'écoulement étudié instationnaire. Pour des raisons de coût en temps de calcul nous écartons la simulation directe. La modélisation de la turbulence devra donc être modélisée soit en URANS soit en LES. On se contentera ici de répertorier différentes idées pour aborder cette modélisation avec l'approche hybride mise en place.

Pour ce qui est du cas d'écoulements avec interface libres ou phases séparées, la modélisation des termes turbulents à l'interface est réalisée dans l'approche LIM, par exemple. Dans les mailles contenant l'interface, on ajoute un flux de diffusion et un terme de production dans les équations de transport de la turbulence. Ces termes sont calculés à partir des vitesses de frottement coté gaz et coté liquide, ainsi que de la distance entre la maille de calcul et l'interface. Pour l'approche ITM, une méthode similaire pourrait être utilisée si l'on conserve une modélisation de la turbulence URANS. Le flux de diffusion et de production dans les équations du transport de la turbulence pouvant, à l'instar du glissement interfacial être calculé à partir de gradients, plutôt que des trois cellules propre au modèle LIM. L'approche hybride 2-phases, 3-champs pourrait alors prendre en compte un modèle de transport de turbulence de type $k - \epsilon$ ou $R_{ij} - \epsilon$ avec dans chaque champ continu un terme de dissipation turbulente due à la présence de gouttes ou de bulles dispersées.

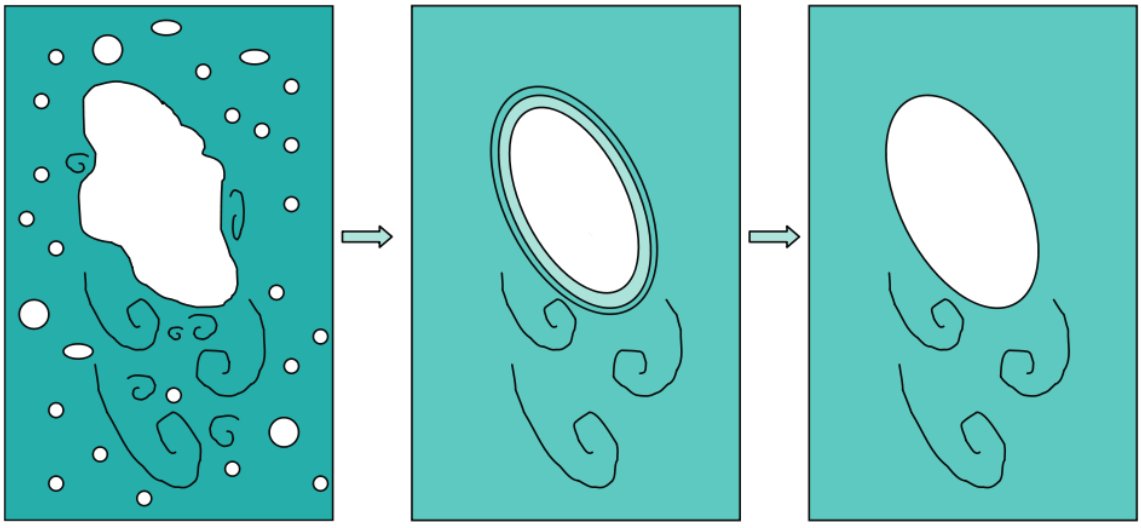


FIGURE 1.10 – *Traitement d'un écoulement diphasique avec une méthode de LES hybride (Source Bestion [11]).*

Si en revanche le choix est fait de prendre une méthode LES pour la modélisation de la turbulence, le problème est assez différent. L'approche hybride 2-phases, 3-champs pourrait inclure une modélisation de la turbulence diphasique dans chaque champ continu, à supposer que l'on trouve un compromis entre le raffinement de la LES et la prise en compte des structures dispersées. Par contre, la présence d'une interface ajoute des parois et des termes de sous-maille pour le modèle de LES.

Loi de paroi pour la LES Pour éviter de raffiner le maillage près des parois, les méthodes LES nécessitent l'utilisation de lois de parois. Cela permet de modéliser la diminution de la viscosité turbulente dans la couche limite plutôt que de simuler ces échelles. Étant donné l'approche choisie pour la modélisation des écoulements diphasiques, l'interface des grosses structures résolue peut être considérée comme autant de paroi internes à l'écoulement. C'est à l'heure actuelle un des problèmes qui rendent les méthodes LES compliquées à utiliser dans une configuration quelconque. En effet, si l'on veut résoudre correctement les couches limites, il faut, soit fortement raffiner près de toutes les parois, soit utiliser des lois de parois, qui ne seront certainement pas les mêmes selon que l'on est près de la paroi du domaine de calcul ou près d'une interface. La fonction d'amortissement de Van Driest (1.78) est un exemple de loi de paroi très utilisée comme coefficient multiplicateur de la viscosité turbulente pour la modélisation des écoulements monophasiques [106].

$$f_{VD} = \left(1 - e^{-y^+/A^+}\right)^2 \tag{1.78}$$

Cette modélisation reste un sujet ouvert à l'heure actuelle.

Termes sous-maille supplémentaires Outre les termes sous-mailles énoncés précédemment provenant du filtrage du tenseur de Reynolds, le filtrage des termes interfaciaux font également apparaître des termes non-résolus dans l'équation de quantité de mouvement. L'évaluation de ces termes [68, 73, 134] montre l'utilité de leur prise en compte, la tension de surface sous-maille pouvant être du même ordre de grandeur que les termes visqueux sous- maille. La modélisation de ces termes pour le cas de l'atomisation de jet a été proposée par Chesnel *et al.* [27] et présente des résultats justifiant l'utilisation de ces termes supplémentaires.

Pour autant, la modélisation de ces termes de sous-maille reste un effort important à fournir, en plus de la modélisation des couches limites, pour la mise en place d'une approche LES prenant en compte de manière complète les écoulements diphasiques [20, 21].

Chapitre II

Vérification du modèle d'interface localisée sur des cas analytiques

Au cours de ce chapitre, nous proposons de comparer les résultats de simulations numériques avec des cas analytiques classiques pour l'étude d'interfaces diphasiques. Le code NEPTUNE_CFD est doté du modèle de localisation d'interfaces décrit au chapitre précédent.

1 Étape de compression artificielle

En premier lieu, on vérifie la convergence de l'étape de compression artificielle de l'interface. Pour cela, on simule des bulles statiques dans un champ de gravitation nul, pour des domaines à une, deux ou trois dimensions. Les interfaces étudiées sont toutes dans leurs espaces respectifs des sphères de diamètre 1 cm. Les maillages consistent en un assemblage de cubes d'arête 1 mm formant selon la dimension de l'espace étudié, une ligne, un carré ou un cube.

La compression artificielle consiste en la résolution itérative de l'équation (2.1). Cette résolution peut être réalisée avec différents schémas et méthodes numériques. On utilisera ici des schémas centrés et *upwind* avec une méthode explicite ou implicite.

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} + \nabla \alpha (1-\alpha)\mathbf{n} = \varepsilon \nabla \cdot (\nabla \alpha) \tag{2.1}$$

Quel que soit le nombre de dimension du domaine de calcul, la méthode mise en place consiste à diffuser la bulle initiale puis à appliquer la méthode de compression artificielle. La diffusion est réalisée par la résolution de l'équation (2.2) avec comme paramètres $\Delta\tau = 10^{-5}\ s$ et $K = 0.1\ m^2 \cdot s^{-1}$, soit une distance caractéristique de diffusion par itération $l_0 = \sqrt{K\Delta\tau} = 1\ mm$ qui correspond ici au pas du maillage.

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = K \nabla \cdot (\nabla \varphi) \tag{2.2}$$

Le fait d'avoir $l_0 = \Delta x$ permet de contrôler la diffusion finale par le nombre d'itération de résolution de l'équation de diffusion. On compare ensuite les profils obtenus au profil attendu, c'est-à-dire une bulle dont l'épaisseur d'interface est contrôlée par le paramètre ε de l'équation (2.1), soit 4 cellules avec $\varepsilon = \Delta x/2$.

1.1 Compression 1D

Le maillage consiste ici en une ligne de $50 \times 1 \times 1$ cellules de volume 1 mm^3 chacune. Le seuil de convergence (2.3) de l'étape de compression est fixé ici à 10^{-7}.

$$\sum_{I}^{ncel} |\delta\alpha_2^I(1-2\alpha_2^I)|d\Omega^I < seuil * \sum_{I}^{ncel} \alpha_1^I\alpha_2^I d\Omega^I \tag{2.3}$$

Une première vérification est de comparer les profils obtenus après compression artificielle de bulles plus ou moins diffusées. Un schéma upwind explicite est utilisé ici. C'est ce qui est réalisé et présenté au travers des profils de la figure 2.1.

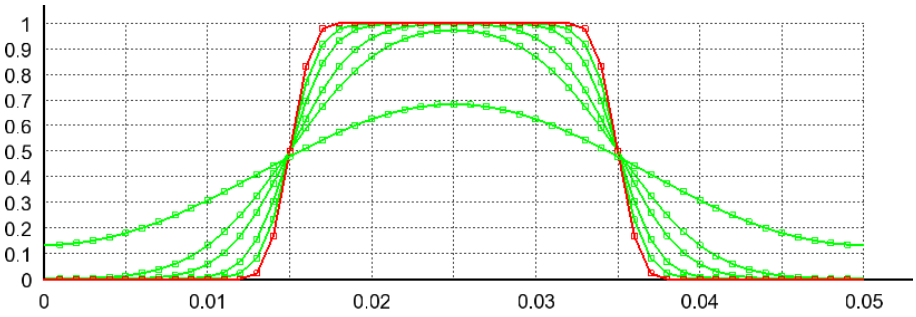


FIGURE 2.1 – *Convergence de la compression artificielle (en rouge) pour cinq taux de diffusion initiaux, ici 2, 5, 10, 20 et 50 étapes (en vert).*

Cette étape de diffusion est itérée entre 10 et 500 fois. On retrouve bien, après compression, le même profil identifié en rouge sur la figure 2.1. Cela montre que le profil obtenu après l'étape de compression artificielle ne dépend pas de l'état de diffusion initial. On compare maintenant les compressions obtenues avec le schéma upwind et le schéma centré, présentées en figure 2.2.

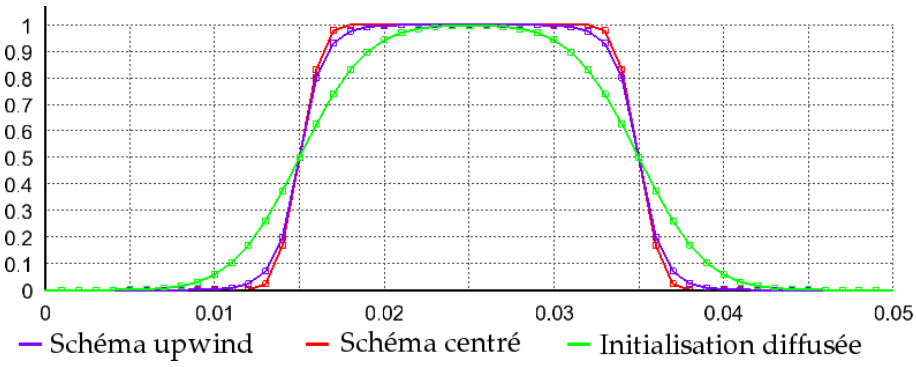


FIGURE 2.2 – *Comparaison entre le schéma centré (rouge) et upwind (violet), après convergence de l'étape de compression à partir d'un état diffusé (vert).*

On peut noter l'utilité de la partie diffusive ajoutée par Olsson à l'équation de compression artificielle, qui permet de stabiliser les schémas non diffusifs tel que le schéma centré présentant des oscillations (*over-* et *under-shot*). En effet, si l'on compare les deux schémas upwind et centré dans le cas d'une équation sans diffusion comme cela est présenté en figure 2.3, les conclusions sont bien différentes. Pour le schéma upwind, on retrouve à convergence la bulle initiale non diffusée. Par contre, le schéma centré diverge, propageant des amplitudes d'oscillations croissantes. On peut observer cet effet sur la partie zoomée à droite de la figure 2.3 avec une augmentation de l'amplitude des *over-* et *under-shot* avec le nombre d'itérations de compression. Il est alors clair que l'étape de compression ne converge plus dans ce cas.

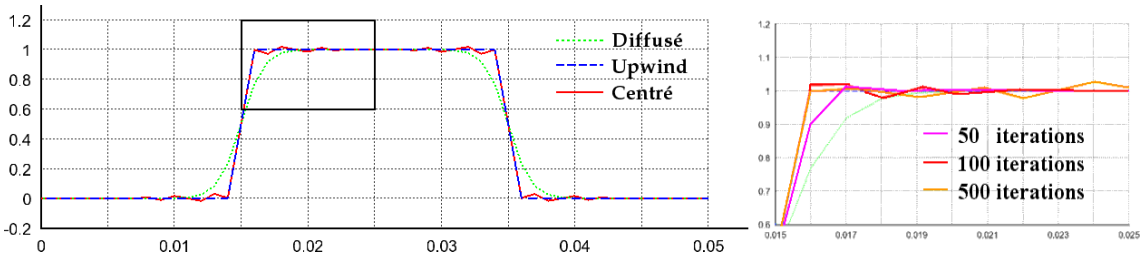


FIGURE 2.3 – *Comparaison entre le schéma centré (rouge) et upwind (pointillés bleus) pour une compression sans terme diffusif. Le schéma upwind permet de retrouver la bulle initiale tandis que le schéma centré diverge, propageant des oscillations d'amplitude croissante comme le montre la figure de gauche, zoom de la zone entourée par un rectangle noir. On peut y observer l'évolution pour 50, 100 et 500 itérations de l'étape de compression artificielle qui ne converge plus.*

On teste alors la vitesse de convergence de l'étape de compression au seuil de convergence donné en fonction du schéma utilisé. Le seuil de convergence de l'étape de compression est toujours fixé à 10^{-7}. La quantité $\alpha_{cl}\alpha_{cg}$ est ici encore choisie comme quantifieur de l'interface. Avec l'hypothèse de conservation du volume, on a toujours $\alpha_{cl} + \alpha_{cg} = 1$, la modification d'interface à chaque itération peut donc être évaluée par l'incrément de notre quantifieur, soit $\delta(\alpha_{cl}\alpha_{cg}) = \delta(\alpha_{cg}(1-\alpha_{cg})) = \delta\alpha_{cg}(1-2\alpha_{cg})$. Le rapport (2.4) est calculé à chaque itération de compression artificielle pour observer l'évolution (convergence ou non) de la quantité d'interface par rapport à l'instant initial (la mesure de $\alpha_{cl}\alpha_{cg}$ n'est réalisée que pour la bulle initiale).

$$\frac{\sum_{I}^{ncel} |\delta\alpha_2^I(1-2\alpha_2^I)| d\Omega^I}{\sum_{I}^{ncel} \alpha_1^I\alpha_2^I d\Omega^I} \tag{2.4}$$

Sur la figure 2.4, on compare la valeur du rapport (2.4) en fonction du nombre d'itérations de compression effectuée. On observe d'une part que pour cette équation de compression (2.1), le fait d'utiliser une résolution explicite ou implicite n'a que très peu d'incidence sur le nombre d'étapes à effectuer pour atteindre un seuil de convergence donné. D'autre part, on constate l'efficacité du schéma centré par

rapport au schéma upwind de Harten [47] lorsque l'on souhaite obtenir un seuil de convergence très faible (inférieur à 10^{-4}).

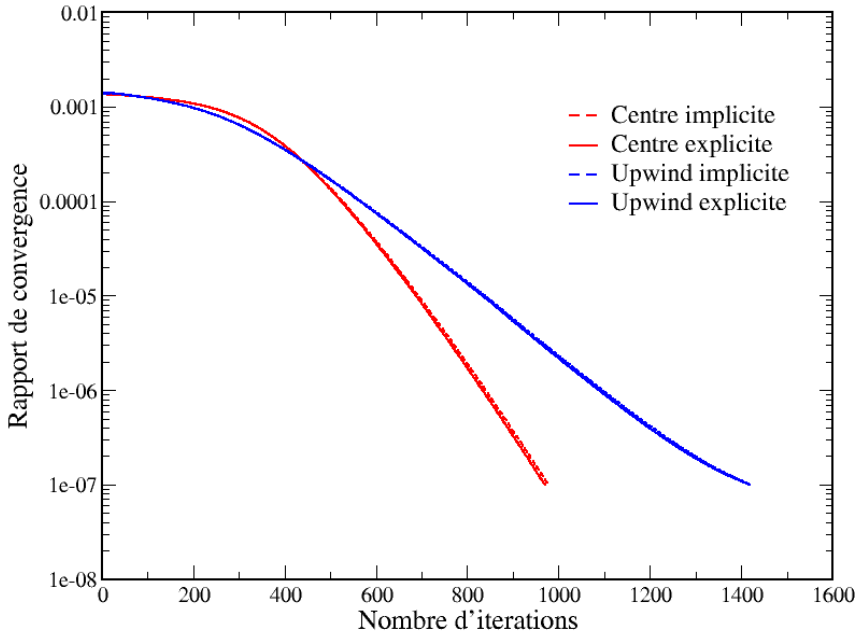


FIGURE 2.4 – *Comparaison du rapport de convergence entre les schémas upwind et centré, en explicite et en implicite, pour un seuil de* 10^{-7}.

Pour un seuil plus élevé (supérieur à 10^{-4}), on retiendra que les différentes méthodes se valent.

1.2 Compression 2D

Le maillage consiste cette fois-ci en un carré de $50 \times 50 \times 1$ cellules cubiques de volume 1 mm^3. En procédant de la même manière que pour le cas unidimensionnel, on initialise une bulle ronde de diamètre 1 cm que l'on diffuse à l'aide de l'équation (2.2). La figure figure 2.5 présente la bulle diffusée (à gauche) et la bulle après l'étape de compression artificielle (à droite).

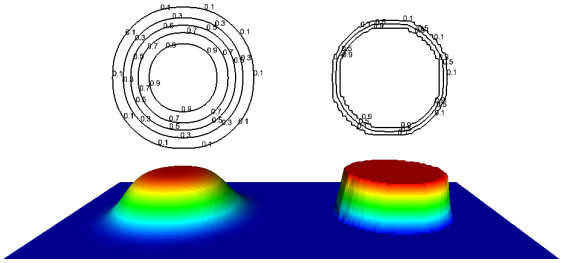


FIGURE 2.5 – *Bulle diffusée initiale (à gauche), puis après étape de compression artificielle (à droite). En haut, on a représenté les isosurfaces de taux de vide* $\alpha_b = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$ *et* 0.9 *pour la bulle diffusée et* $\alpha_b = 0.1, 0.5$ *et* 0.9 *pour la bulle recompactée. En bas, on représente le taux de vide en projection sur la troisième dimension.*

On trace alors les mêmes courbes que précédemment en figure 2.6. De façon surprenante, on remarque que cette fois-ci, le schéma upwind a une vitesse de convergence très faible au-delà d'un seuil de 3.1×10^{-5}.

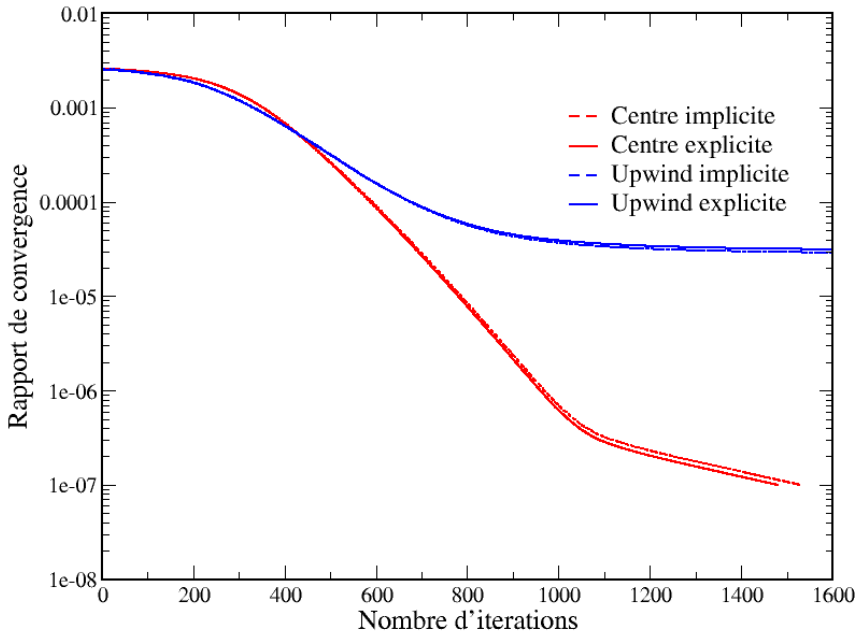


FIGURE 2.6 – *Comparaison du rapport de convergence entre les schémas upwind et centré, en explicite et en implicite, pour un seuil de* 10^{-7}.

1.3 Compression 3D

Le maillage utilisé est un cube contenant $50 \times 50 \times 50$ cellules cubiques de volume 1 mm^3. Les deux schémas upwind et centré convergent sur cette géométrie comme le montre la figure 2.8.

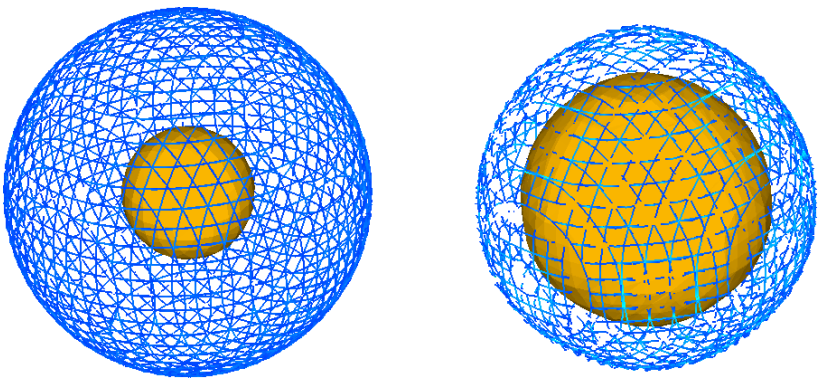


FIGURE 2.7 – *Bulle 3D diffusée (à gauche) puis recompactée (à droite) par compression artificielle. La grille bleue représente l'isosurface* $\alpha = 0.1$ *et la surface jaune l'isosurface* $\alpha = 0.9$.

On vérifie que l'étape de compression artificielle, qui conserve la forme d'une bulle initialement sphérique (*Cf.* figure 2.7), conserve également d'autres géométrie d'interfaces moins symétriques comme, par exemple, une ellipsoïde ou un cube :

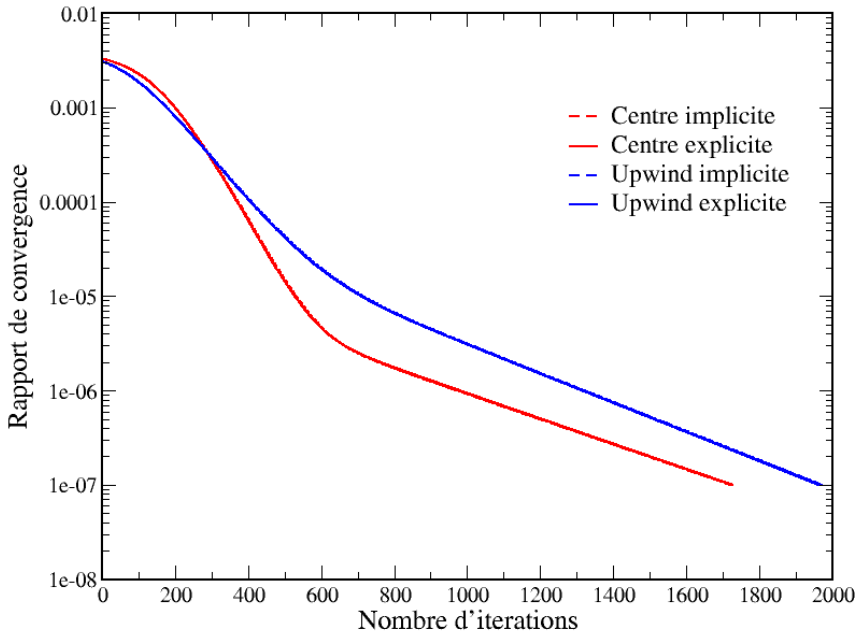


FIGURE 2.8 – *Comparaison du rapport de convergence entre les schémas upwind et centré, en explicite et en implicite, pour un seuil de* 10^{-7}.

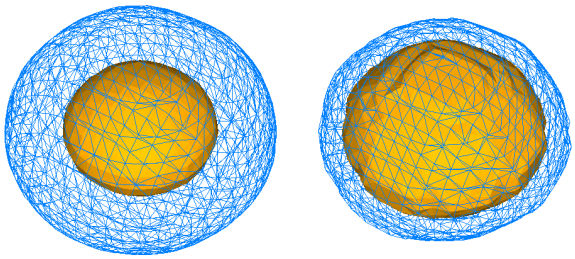


FIGURE 2.9 – *Bulle ellipsoïdale diffusée (à gauche) puis recompactée (à droite) par compression artificielle. La grille bleue représente l'isosurface* $\alpha = 0.1$ *et la surface jaune l'isosurface* $\alpha = 0.9$.

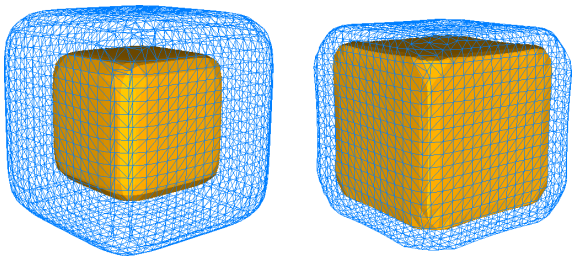


FIGURE 2.10 – *Bulle cubique diffusée (à gauche) puis recompactée (à droite) par compression artificielle. La grille bleue représente l'isosurface* $\alpha = 0.1$ *et la surface jaune l'isosurface* $\alpha = 0.9$.

1.4 Conclusion

La première chose que l'on peut noter est l'apport négligeable de la résolution semi-implicite pour la résolution de l'équation de compression artificielle par rapport à la résolution explicite.

On note également la difficulté de convergence du schéma upwind de Harten en deux dimensions, observation non répétée en trois dimensions et que l'on n'explique pas. Ce phénomène pourrait être dû à une particularité géométrique du cas à deux dimensions.

2 Bulle statique

La loi de Laplace ou équation de Laplace-Young (2.5) relie la courbure locale de l'interface séparant deux milieux à la différence de pression entre ces deux milieux. Cette différence de pression est communément appelée la pression de Laplace.

Deux milieux non miscibles sont séparés par une interface. Dès que cette interface est courbée, il y a une différence de pression entre les deux milieux. Cette différence de pression dépend essentiellement de la tension de surface, qui mesure l'énergie nécessaire à la création d'une interface. Lorsqu'il n'y a pas transfert de matière au travers de l'interface et que les deux milieux sont au repos, la différence de pression entre ces deux milieux intérieur (int) et extérieur (ext) s'écrit :

$$P_{int} - P_{ext} = \Delta P_{Laplace} = \sigma\kappa \tag{2.5}$$

Dans un espace de dimension 3, l'interface est une surface. Sa courbure peut alors être explicitée en tout point par deux rayons de courbure suivant deux axes d'un repère local lié à la surface :

$$\Delta P_{Laplace} = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \tag{2.6}$$

Dans les cas particuliers d'une bulle ronde en deux dimensions, $R_2 = \infty$, ou d'une bulle sphérique en trois dimensions, $R_2 = R_1$, l'équation précédente est simplifiée.

2.1 Étude sur maillages réguliers carrés

Dans la description de la méthode de calcul des grandeurs interfaciales au chapitre I, nous avions introduit la fonction couleur c. En pratique dans la description eulérienne de l'interface mise en œuvre, cette fonction localisant l'interface est directement issue de la fraction volumique. La régularisation du taux de vide par diffusion est illustrée en figure 2.11. On calcule la courbure locale à partir de la fonction couleur pour une bulle ronde non diffusée dans un maillage carré. Si on prend le taux de vide comme fonction couleur, celui-ci étant binaire (1 dans la bulle, 0 sinon), la courbure est très mal calculée sur la grille carrée. Plus on prend pour fonction couleur un état diffusé du taux de vide, plus la courbure est régulière le long de l'interface, et plus on tend vers la valeur attendue de la courbure (ici 100 m^{-1} pour une bulle ronde de rayon 1 cm). Le nombre d'itérations n correspondant à une diffusion du taux de vide sur n cellules dans la direction orthogonale à l'interface, il faudra avoir une diffusion de l'ordre de dix cellules pour obtenir une courbure locale bien calculée.

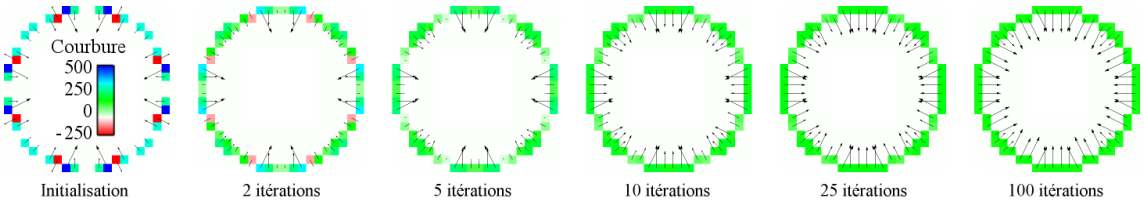


FIGURE 2.11 – *Représentation de la courbure locale calculée dans les cellules traversées par l'interface* ($\alpha = 0.5$).

Pour étudier les prédictions du modèle dédié aux interfaces localisées décrit au chapitre I, on simule une bulle ronde en pseudo-2D (une couche de cellules cubiques) dans un champ gravitationnel nul. On compare alors la pression de Laplace prédite par le numérique à la valeur théorique. Le domaine est un carré de coté 5 cm au centre duquel on place à l'instant initial une bulle ronde de rayon 1 cm. Sans champ de gravitation, la seule force est la force de tension de surface théoriquement équilibrée sur une interface ronde. Soumise à cette force, la bulle ne doit donc pas bouger, et sa pression interne doit s'équilibrer à la somme de la pression extérieure et de la pression de Laplace.

On choisit les propriétés physiques (densités et viscosités) de l'eau et de l'air respectivement pour la phase liquide et la phase gaz. Le coefficient de tension de surface utilisé est de $8 \times 10^{-2}\ N \cdot m^{-1}$, la pression de Laplace attendue est donc de $8\ Pa$.

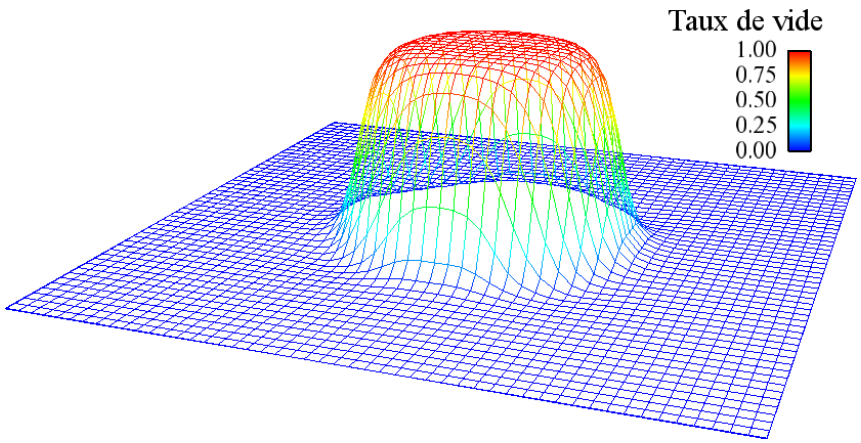


FIGURE 2.12 – *Visualisation extrudée de la pression de Laplace pour une bulle 2D de rayon* 1 *cm sur une grille* 64×64 *(25* cm^2*).*

Dans un premier temps, on mène une étude rapide sur l'expression de la courbure à utiliser parmi les deux écritures (2.7). On utilise trois maillages contenant 32×32, 64×64 et 128×128 cellules.

$$\kappa^{(1)} = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla c}{\|\nabla c\|} \right) \quad \text{ou} \quad \kappa^{(2)} = \frac{1}{\|\nabla c\|} \left[\frac{\nabla c \cdot \nabla}{\|\nabla c\|} \|\nabla c\| - \nabla \cdot (\nabla c) \right] \tag{2.7}$$

On observe sur la figure 2.13 une convergence d'ordre 2 pour l'expression $\kappa^{(1)}$ et

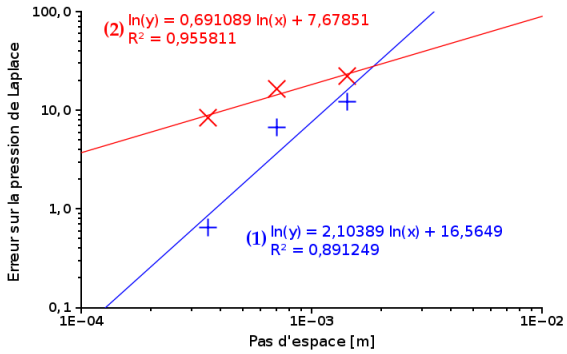


FIGURE 2.13 – *Étude de l'effet de la méthode de calcul de la courbure sur la pression de Laplace simulée, avec les expressions (1) et (2).*

d'ordre 0.7 pour l'expression $\kappa^{(2)}$. On utilisera par la suite l'expression $\kappa^{(1)}$ pour le calcul de la courbure locale.

On utilise pour cette étude 6 maillages, de tailles respectives 16×16, 32×32, 64×64, 128×128, 256×256 et 512×512 cellules. On exprimera le raffinement des maillages en fonction du nombre de pas d'espace (taille moyenne d'une cellule) par diamètre de bulle (*Cf.* table 2.1).

2.2 Reconstruction

Le code de calcul NEPTUNE_CFD est un code permettant d'utiliser des maillages non structurés. Il est donc possible, moyennant des termes de correction pour les projections d'utiliser des maillages non- orthogonaux. Lorsque le maillage utilisé n'est pas orthogonal, c'est-à-dire que la droite IJ liant deux centres de cellules voisines n'est pas orthogonale à la face séparant ces cellules (*Cf.* figure 2.14), ou ne passe pas par le centre de cette dernière, il faut apporter des corrections aux termes de projection entre les valeurs aux centres de cellules et les valeurs aux faces. On construit notamment la projection $I'J'$ de la droite IJ sur la perpendiculaire à la face passant par son centre F. Avec une approximation à l'ordre 1, on reconstruit les variables en I' et en F :

$$\begin{aligned} P_{I'} &= P_I + \mathbf{II'} \cdot (\nabla P)_I \\ P_F &= P_O + \mathbf{OF} \cdot \frac{1}{2}(\nabla P_I + \nabla P_J) \end{aligned} \tag{2.8}$$

Avec ces termes de reconstructions, on peut calculer la courbure locale corrigée pour des maillages non- orthogonaux :

$$\kappa_I = div\,(\mathbf{n}) = \sum_{j \in Vois(i)} \left[\mathbf{n}_{IJ} + \mathbf{OF} \cdot \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{n}_I + \nabla \mathbf{n}_J) \right] . \mathbf{S}_{IJ} \tag{2.9}$$

Dans l'optique de l'utilisation de l'approche à interfaces localisées pour des configurations industrielles, il est important d'évaluer la précision du calcul des grandeurs d'interface pour des maillages complexes, donc entre autres, non réguliers. Pour

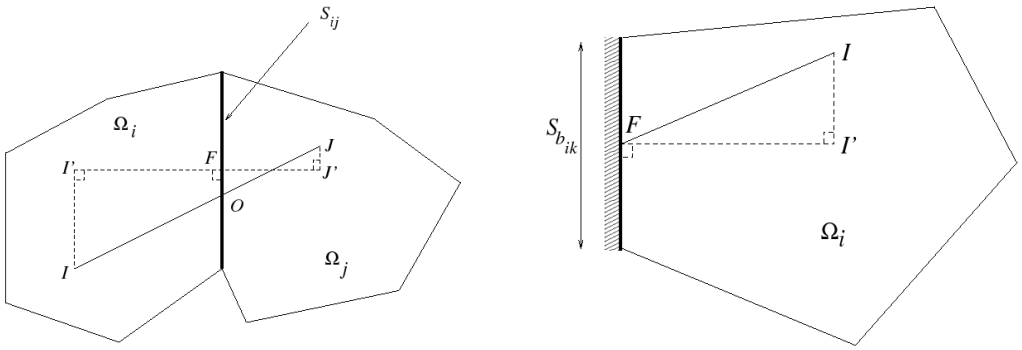


FIGURE 2.14 – *Introduction des entités géométriques pour les faces internes (à gauche) et les faces de bord (à droite).*

l'étude de bulle statiques, on teste des maillages vibrés et des maillages triangulaires. Ces différents types de maillages sont représentés en figure 2.15. Les maillages vibrés sont obtenus par l'ajout d'un déplacement d'amplitude aléatoire mais borné aux coordonnées de chaque point interne du maillage cubique. Un découpage des cubes en deux prismes à bases triangles rectangles nous donne un premier type de maillage triangulaire. Une seconde famille de maillages triangulaires est obtenue à l'aide de la triangulation de Delaunay, qui se rapproche d'un maillage composé de prismes à bases équilatérales.

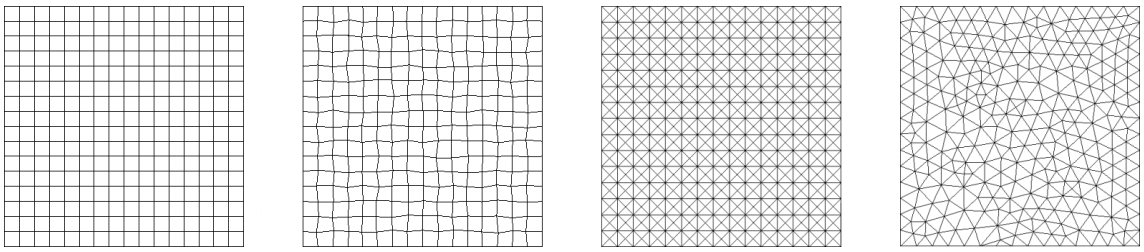


FIGURE 2.15 – *De gauche à droite : Maillages cubique, cubique vibré avec une amplitude de 10 %, triangulaire à partir d'un découpage de la maille carrée et triangulation de Delaunay.*

En plus des 6 maillages à grille carrée, on étudiera 12 maillages à grilles vibrées (6 avec un déplacement maximum de 5% et 6 à 10%), 5 maillages composés de triangles rectangles, et 4 maillages obtenus par triangulation de Delaunay.

2.3 Courants parasites

L'observation de courants parasites avec l'utilisation de la méthode *CSF* de Brackbill *et al.* est un problème bien connu [59, 86, 103]. Il est donc intéressant de quantifier les courants parasites inhérents à l'utilisation de la méthode *CSF* avec l'approche de localisation eulérienne choisie. On quantifie ici ces courants parasites en calculant la moyenne sur le domaine de la vitesse locale, évaluée à partir des vitesses des deux phases liquide et gazeuse ($\mathbf{U} = \alpha_{cl}\mathbf{U}_{cl} + \alpha_{cg}\mathbf{U}_{cg}$), ainsi que le maximum de cette vitesse sur le domaine.

Du fait de leur intensité relativement faible, ces courants ne sont pas un problème pour des cas de suivi d'interface avec une inertie importante. Ce qui sera le cas pour des écoulements contrôlés par la poussée d'Archimède ou par un débit liquide par exemple, et donc pour les écoulements étudiés dans ces travaux.

2.4 Résultats

On compare pour les différentes familles de maillage citées précédemment l'erreur relative sur la pression de Laplace et sur la circularité des bulles, ainsi que les moyennes et maxima des courants parasites. La circularité ξ de la bulle est définie par le rapport entre le périmètre de la bulle ronde initiale et le périmètre de la bulle simulée.

$$\xi = \frac{P_{\text{cercle}}}{P_b} = \frac{\pi d}{P_b} \tag{2.10}$$

Maillage	$d_{\text{bulle}}/\Delta x$	ΔP	ξ	$\overline{\|\mathbf{U}\|}$	$max(\|\mathbf{U}\|)$
	–	$[Pa]$	–	$[m \cdot s^{-1}]$	$[m \cdot s^{-1}]$
16×16	6.4	4.989	1.069	0.00526	0.057
32×32	12.8	7.5711	1.021	0.00275	0.036
64×64	25.6	7.897	1.005	0.0038	0.060
128×128	51.2	7.9193	1.0007	0.0022	0.066
256×256	102.4	7.9914	0.99965	0.0011	0.057
512×512	204.8	7.9959	0.9995	0.0004	0.041

TABLE 2.1 – *Pour la famille de maillages cubiques, nombre de cellules par diamètre de bulle, pressions de Laplace, circularité, moyenne et maximum d'intensité des courants parasites.*

On représente en figure 2.16 ces quatre grandeurs en fonction du paramètre adimensionné pour le raffinement des maillages cubiques, le pas d'espace par diamètre de bulle. Trois diamètres de bulle sont présentés : 0.5, 1 et 2 cm. Les tracés en échelle logarithmique permettent d'observer, lorsque c'est le cas, l'ordre de convergence obtenu.

Pour les maillages carrés, on constate une convergence à l'ordre 2 pour la pression de Laplace et la circularité, et à l'ordre 1 pour la moyenne des courants parasites. Le maximum de la norme des courants parasites ne présente pas de convergence.

Pour les autres familles de maillages (*Cf.* figure 2.17), on n'observe pas de convergence. Dans cette figure, les résultats présentés pour la famille de maillage carré diffèrent de la figure 2.16 du fait de l'ajout des termes correctifs, bien qu'en théorie, ceux-ci doivent être nuls dans ce cas. Les figure 2.18, 2.19 et 2.20 permettent de visualiser les courants parasites sur les maillages obtenus par triangularisation de

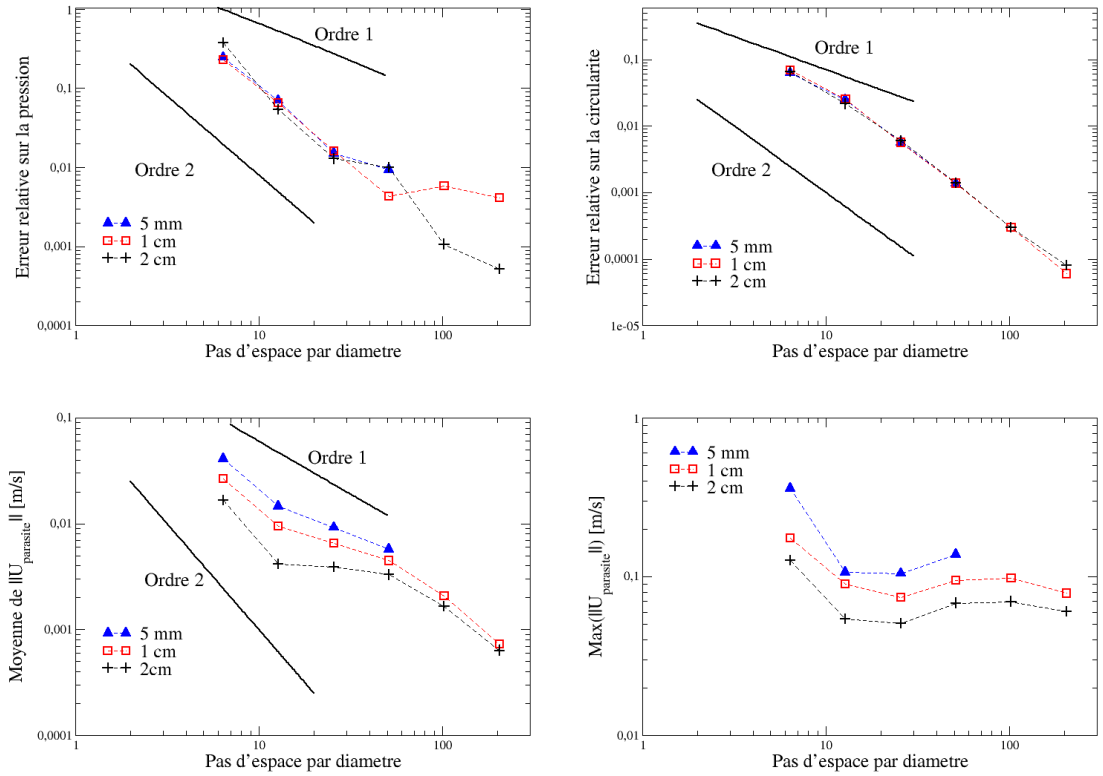


FIGURE 2.16 – *De haut en bas et de gauche à droite : erreur relative sur le calcul de la pression de Laplace, sur la circularité, l'intensité moyenne des courants parasites, et le maximum de la norme des vitesses parasites en fonction du raffinement du maillage, exprimé en nombre de cellules par diamètre de bulle. On présente ces résultats pour trois diamètres de bulles :* 0.5 *(triangles bleus),* 1 *(carré rouge) et* 2 *cm (croix noire).*

Delaunay et vibration des maillages carrés. On observe d'une part, que la symmétrie des courants, classique sur maillages carrés, est complètement déstabilisée, ce qui était attendu a priori du fait de la perte de la symmétrie des maillages. D'autre part, l'intensité de ces courants parasites atteint des valeurs beaucoup plus grandes.

Afin de conserver une certaine forme de convergence, il semble donc qu'il vaille mieux rester en dessous d'environ 50 mailles par diamètres de bulles avec cette méthode sur maillage quelconque. La perte de convergence sur les maillages carrés avec l'ajout des termes de corrections des non- orthogonalités est en lien avec les résultats de Brodère *et al.* [16]. Il faut également garder à l'esprit que ce cas test de la bulle immobile dans un champ de gravité nul, bien que très utile pour la vérification élémentaire de notre implémentation de localisation d'interface, est très loin des cas beaucoup plus fortement inertiels auxquels aspire notre approche finale.

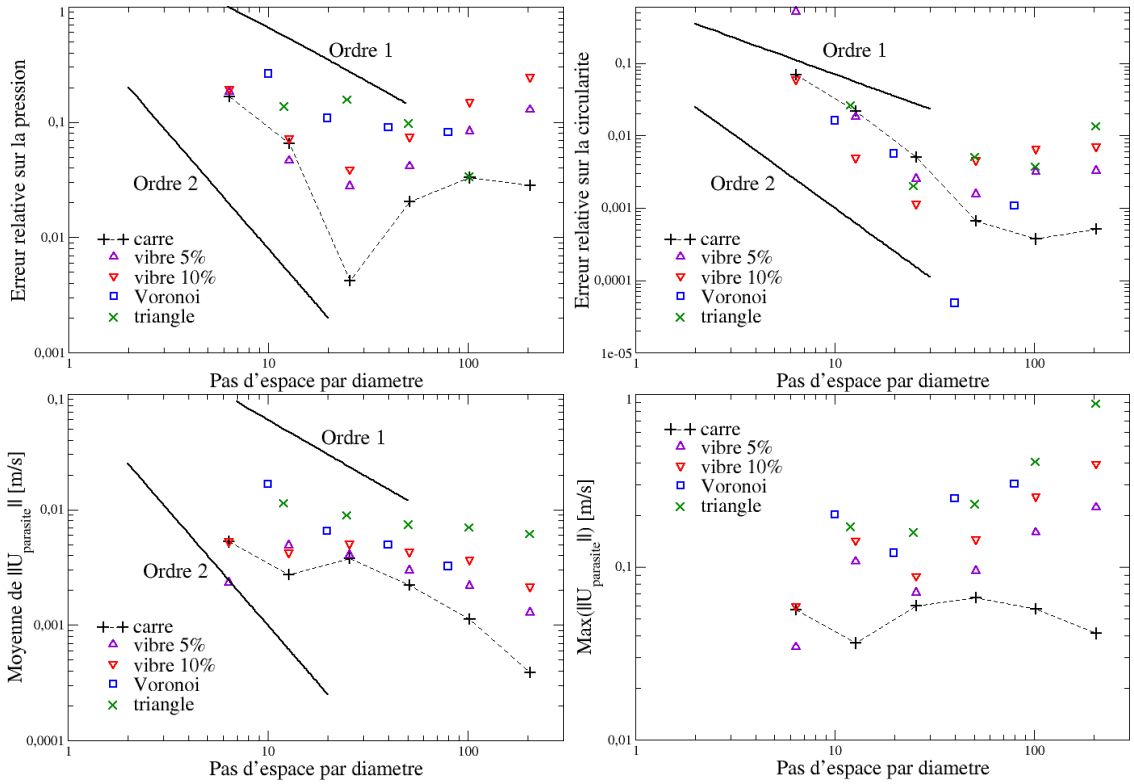


FIGURE 2.17 – *De haut en bas et de gauche à droite : erreur relative sur le calcul de la pression de Laplace, sur la circularité, l'intensité moyenne des courants parasites, et le maximum de la norme des vitesses parasites en fonction du raffinement du maillage, exprimé en nombre de cellules par diamètre de bulle. Les différentes familles de maillage sont présentés pour une bulle de diamètre 2 cm.*

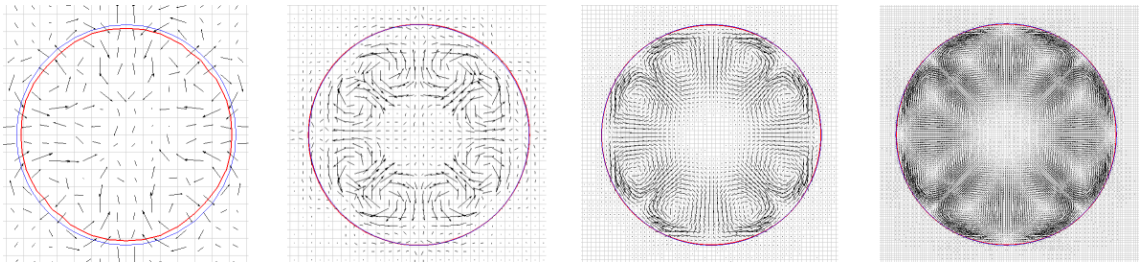


FIGURE 2.18 – *Visualisation des courants parasites pour des maillages cubiques (1024, 4096, 16384 et 65536 cellules).*

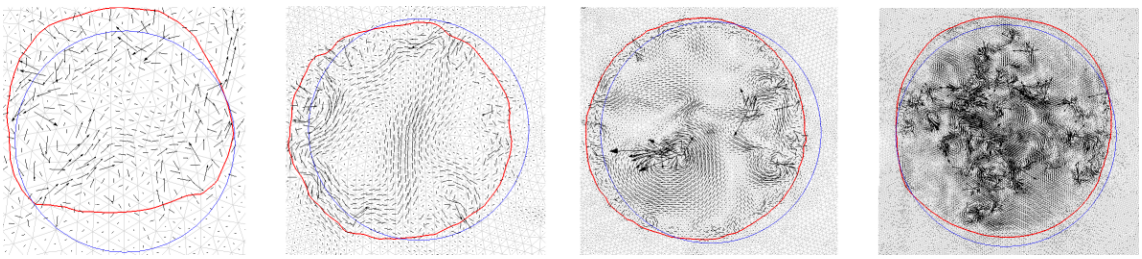


FIGURE 2.19 – *Visualisation des courants parasites pour des maillages triangulaires de Delaunay (2456, 9986, 39734 et 159154 cellules).*

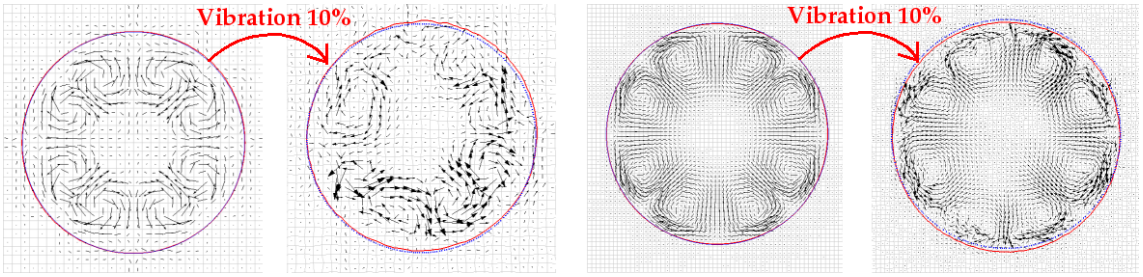


FIGURE 2.20 – *Visualisation des courants parasites pour des maillages cubiques et cubiques vibrés à 10%.*

3 Oscillations de bulles

L'étude précédente concernait le cas de bulles statiques, où seule la seule force de tension de surface s'exerçait sur une bulle à l'équilibre (rond en 2D, sphère en 3D). On ajoute alors un déséquilibre initial sous la forme d'une perturbation de la forme de la bulle à $t = 0\ s$. Cette perturbation induit des oscillations résultant de l'équilibre des forces de tension de surface, amorties par les forces de frottement visqueux.

3.1 Théorie

Dans le référentiel de la bulle, l'équation qui régit sa forme et sa pression interne est l'équation de Rayleigh-Plesset [42, 99] :

$$\rho\left(R\ddot{R} + \frac{3}{2}\dot{R}^2\right) = P_b - P_\infty - \frac{\sigma}{R} - 2\mu\frac{\dot{R}}{R} \tag{2.11}$$

On s'intéresse ici à des petites perturbations dites de mode n, qui peuvent être écrites dans le cas bidimensionnel :

$$R = R_0 + An\cos(n\phi) \tag{2.12}$$

Avec n l'ordre des perturbations (nombre de pics dans le repère polaire), soit ici 2 pour une perturbation elliptique et 4 pour une perturbation carrée, et ϕ une abscisse curviligne de l'interface. Dans le cas de fluides incompressibles, pour des petites variations ($A < R_0$), la courbure $\kappa = 1/R$ peut être approchée par :

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{R_0} + \frac{1}{R_0^2}\left[An\cos(n\phi) + \partial_\phi^2(An\cos(n\phi))\right] \tag{2.13}$$

L'équation (2.11) devient alors une équation d'oscillations amorties dont la solution est de la forme :

$$R(t) = R_0 + A\exp(-\beta t)\sin(\omega_0 t + \varphi) \tag{2.14}$$

Où R_0 et φ sont donnés par les conditions initiales, et :

$$\omega_0^2 = \frac{(n^3 - n)\sigma}{(\rho_1 + \rho_2)R_0^3} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{2n(2n+1)\mu}{4\rho R_0^2} \tag{2.15}$$

3.2 Modélisation numérique

On simule l'oscillation bidimensionnelle d'une bulle de diamètre 2 cm dans un domaine de dimension 5×5 cm. On utilise différents maillages, de tailles respectives 45×45, 64×64, 91×91, 128×128 et 181×181 cellules. Le pas de temps est fixé pour chaque maillage, afin de conserver un nombre de Courant inférieur à 0.5, ce qui en pratique donne des valeurs respectives de 0.5, 0.1, 0.1, 0.05 et 0.01 ms pour les différents maillages.

3.3 Résultats

On simule des bulles oscillants pour les modes de perturbations $n = 2$ et $n = 4$, soit respectivement une excitation elliptique et carrée. Les simulations sont menées dans un domaine bidimensionnel de taille 5×5 cm^2. La phase gaz a les propriétés de l'air ($\rho_g = 1.29\ kg \cdot m^{-3}$ et $\mu_g = 10^{-5}\ kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$), la phase liquide a pour masse volumique $\rho_l = 1000\ kg \cdot m^{-3}$ et pour viscosité $\mu_l = 10^{-4}\ kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$, la tension de surface est fixée à $80 \times 10^{-3}\ N \cdot m^{-2}$.
On attend donc des oscillations avec une pulsation ω_0 pour le mode 2 :

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{(2^3 - 2) \times 80 \times 10^{-3}}{(1000 + 1.29) \times 0.01^3}} = 21.895\ s^{-1} \tag{2.16}$$

et pour le mode 4 :

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{(4^3 - 4) \times 80 \times 10^{-3}}{(1000 + 1.29) \times 0.01^3}} = 69.24\ s^{-1} \tag{2.17}$$

La pulsation des oscillations amorties observées en figures 2.22 et 2.23 sont extraites par transformée de Fourier. Elles sont comparées aux valeurs théoriques ω_0 (2.15), et reportées en table 2.2 pour une déformation de mode 2 et en table 2.3 pour une déformation de mode 4.

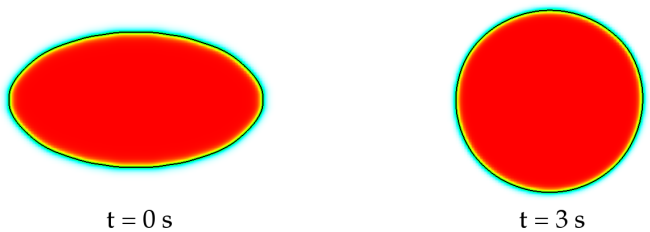


FIGURE 2.21 – *Fraction volumique du gaz à l'état initial perturbé (ellipse) et après amortissement des oscillations au bout de 3 s.*

Maillage	Pulsation ω_0 $[s^{-1}]$	Err. rel. sur ω_0 [%]
45×45	19.75	9.8
64×64	21.54	1.6
91×91	21.54	1.6
128×128	21.53	1.0
181×181	21.21	3.1

TABLE 2.2 – *Pulsations calculées et erreurs relatives par rapport au résultat analytique sur l'oscillation d'une bulle 2D déformée par une perturbation de mode 2.*

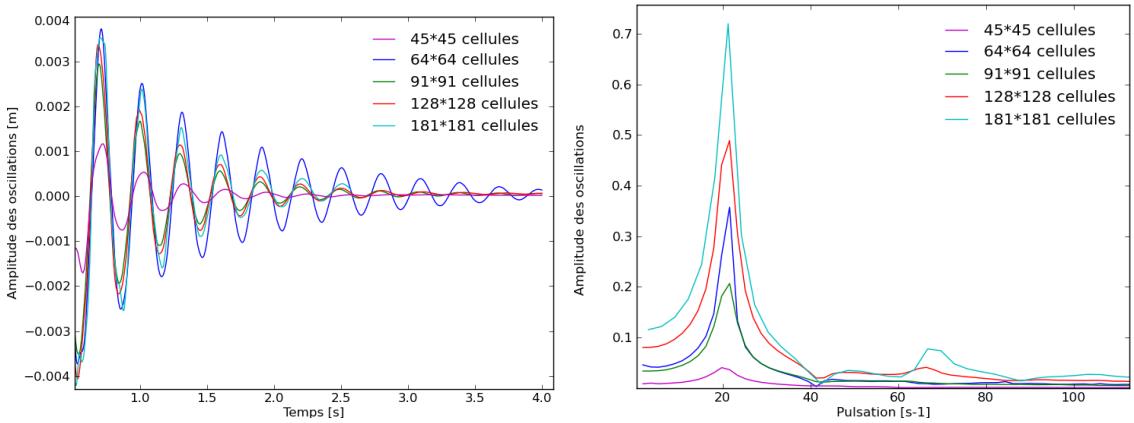


FIGURE 2.22 – *Amplitudes des oscillations de l'axe de la bulle pour le cas d'une perturbation initiale de mode 2 (à gauche), et spectre des pulsations obtenu par transformée de Fourier (FFT) des oscillations amorties (à droite).*

Le résultat sur le maillage 45×45 n'est pas présenté pour la bulle initialement carrée car ce maillage, beaucoup trop grossier, ne permet pas de capter correctement les angles du carré et donc les oscillations.

Maillage	Pulsation ω_0 $[s^{-1}]$	Err. rel. sur ω_0 [%]
64×64	53.86	22.2
91×91	62.83	9.2
128×128	66.33	4.1
181×181	66.42	4.0

TABLE 2.3 – *Pulsations calculées et erreurs relatives par rapport au résultat analytique sur l'oscillation d'une bulle 2D déformée par une perturbation de mode 4.*

On mesure une erreur relative inférieure à 10 % sur la valeur de la pulsation et inférieure à 5 % sur la pression finale comparée à la valeur prédite par l'expression de Laplace (2.5). On remarque dans les table 2.2 et 2.3 une absence de convergence en maillage pour la pulsation ω_0.

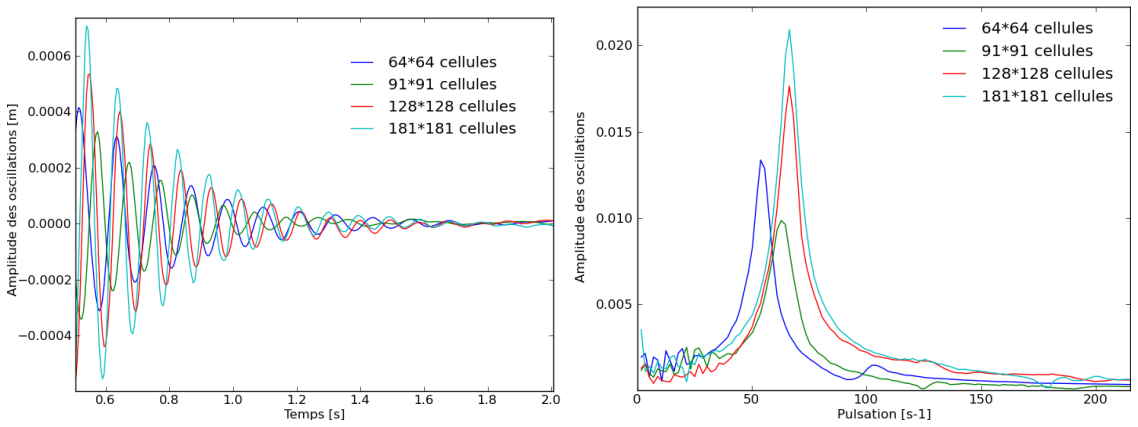


FIGURE 2.23 – *Amplitudes des oscillations de l'axe de la bulle pour le cas d'une perturbation initiale de mode 4 (à gauche), et spectre des pulsations obtenu par transformée de Fourier (FFT) des oscillations amorties (à droite).*

Pour démonstration de faisabilité, l'oscillation d'une bulle dans un domaine 3D est simulée, avec une perturbation initiale ellipsoïdale (mode 2). Le maillage est constitué de $50 \times 50 \times 50$ cellules cubiques. La résolution de l'équation (2.11) en 3D pour une perturbation d'ordre 2 amène à une solution d'oscillations amorties dont la pulsation est de la forme :

$$\omega_0^2 = \frac{(n+2)(n^3-n)\sigma}{((n+1)\rho_1 + n\rho_2)R_0^3} \tag{2.18}$$

Soit, avec les mêmes propriétés physique que pour le cas 2D présenté précédemment :

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{4 \times (2^3-2) \times 80 \times 10^{-3}}{(3 \times 1000 + 2 \times 1.29) \times 0.01^3}} = 25.29 \ s^{-1} \tag{2.19}$$

Ce qui prévoit une période d'oscillation de 124 ms. La période visuellement présentée en figure 2.24 de 150 ms est donc un résultat tout à fait acceptable.

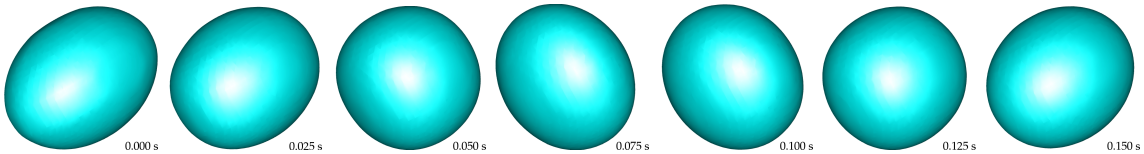


FIGURE 2.24 – *Oscillation d'une bulle sphérique ayant subit une déformation d'ordre 2 (ellipsoïdale). L'intervalle de temps entre deux images est de 25 ms. La surface représentée est l'isosurface $\alpha_{cg} = 0.5$.*

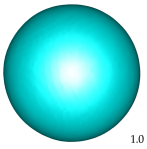


FIGURE 2.25 – *Bulle sphérique obtenue après amortissement des oscillations par les forces visqueuses (ici au bout de 1 s de temps physique).*

On vérifie à l'aide de la figure 2.25 que la bulle tend à reprendre son aspect sphérique après amortissement des oscillations.

4 Conclusion

Dans ce chapitre, la méthode de localisation d'interface dédiée à la simulation des larges bulles déformées (ITM) a été vérifiée sur des cas analytiques. La convergence de l'étape de compression artificielle de l'interface a été testée dans un premier temps, montrant un comportement correct, en particulier dans le cas tri-dimensionnel qui est à terme celui qui nous intéresse le plus.

Ensuite, le modèle est testé sur des cas de bulles isolées dans un champ de gravité nulle. La simulation d'une bulle statique donne de bonnes prédictions des valeurs de pressions de Laplace, et les cas avec perturbation de la forme initiale de la bulle montrent de bons accords entre les fréquences d'oscillations théoriques et numériques. Le retour à l'équilibre de ces bulles perturbées est satisfaisant.

Chapitre III

Modélisation d'interfaces localisées - Montée de bulles

La validation du modèle sur des cas analytiques, présentée au chapitre précédent étant satisfaisante, le présent chapitre propose de comparer l'approche à interface localisée à des résultats expérimentaux. Dans un premier temps, des simulations de montées de bulles dans des fluides de diverses viscosités seront exposées. Ces premiers cas très classiques pour la validation de la modélisation d'interfaces nous permettront de comparer nos résultats à d'autres méthodes numériques.

Compte tenu de l'importance de la coalescence dans les transitions entre les différents régimes d'écoulements, la modélisation de la coalescence locale est ensuite étudiée. On abordera la modélisation de panaches de bulles turbulents avec des modèles deux-phases, deux-champs.

Enfin, bien qu'il n'y ait pas de comparaison expérimentale possible faute de données, des simulations dans les conditions fluides de l'écoulement dans le générateur de vapeur sont réalisées, afin d'estimer la faisabilité numérique.

1 Benchmark de Hysing

Le benchmark de Hysing *et al.* [54, 96] consiste en deux études de montées de bulles. La première propose un rapport des viscosités de 10, un rapport des masses volumiques de 10 également et un coefficient de tension de surface de 24.5 $N \cdot m^{-2}$, tandis que la seconde des rapports respectifs de 100 et 1000 ainsi qu'un coefficient de tension de surface de 1.96 $N \cdot m^{-2}$. La gravité est fixée à 0.98 $m \cdot s^{-2}$ (soit le dixième de la gravité à la surface du globe terrestre). Ces propriétés sont récapitulées en table 3.1, où les masses volumiques ρ sont exprimées en $kg \cdot m^{-3}$ et les viscosités μ en $Pa \cdot s$.

La géométrie ainsi que les conditions initiales, présentées en figure 3.1, sont identiques pour les deux cas. Le domaine de calcul est bidimensionnel. Ses dimensions sont 1 m de large et 2 m de haut. La bulle est initialement ronde, de diamètre 0.5 m, centrée sur la position $(x = 0.5; y = 0.5)$. Les deux cas ont donc le même nombre de

Test Case	ρ_1	ρ_2	μ_1	μ_2	g	σ	Re	Eo	ρ_1/ρ_2	μ_1/μ_2
1	1000	100	10	1	0.98	24.5	35	10	10	10
2	1000	1	10	0.1	0.98	1.96	35	125	1000	100

TABLE 3.1 – *Propriétés physiques et nombres adimensionnels définissant les cas du benchmark (source [54]).*

Reynolds (35) mais des nombres d'Eötvos différents (respectivement 10 et 125), les formes de bulles attendues sont donc assez différentes.

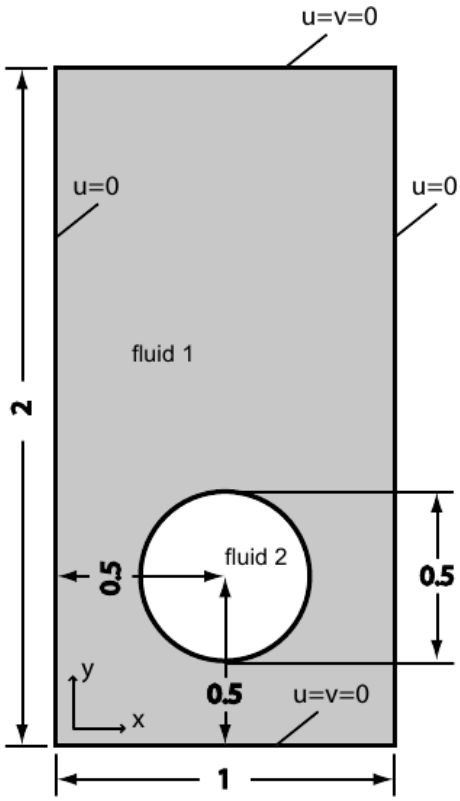


FIGURE 3.1 – *Configuration initiale et conditions limites pour les cas tests du benchmark (source [54].*

Quatre maillages sont utilisés pour le benchmark, composés de 40×80, 80×160, 160×320 et 320×640 cellules, soit des nombres de cellules par diamètre de bulle valant respectivement 20, 40, 80 et 160. Les cellules sont cubiques. Les conditions aux limites sont des conditions de glissement pour les parois verticales et non glissantes pour les parois définissant le bas et le haut du domaine. Les deux plans parallèles à (Oxy) sont des symétries pour respecter la géométrie 2D avec une couche unique de cellule dans la direction z pour tous les maillages.

Il y a trois participants dans le rapport du benchmark. Les premiers utilisent le code TP2D (pour **T**ransport **P**henomena in **2D**), qui est un code basé sur une discrétisation par éléments finis. La résolution de la pression et du champ de vitesse sont délocalisées avec une méthode de projection discrète. L'interface est suivie par

une méthode level-set associée à une étape de correction de masse pour assurer la conservation. Les seconds utilisent le code FreeLIFE (pour **F**ree surface **Li**brary of **F**inite **E**lement). Le code est basé sur un solveur pour écoulements incompressibles dédié aux problèmes à surfaces libres. L'interface est également suivie par une méthode level-set associée à une correction de masse. Enfin, le dernier code utilisé est MooNMD (pour **M**athematics and **o**bject **o**riented **N**umerics in **M**ag**D**eburg). C'est un code basé sur une description par éléments finis avec une approche ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian).

L'ascension des bulles est suivie sur un temps physique de 3 s. D'après les études expérimentales de Clift *et al.* [28] (*Cf.* figure 3.2), une bulle ayant les paramètres physiques du premier cas devrait être dans le régime ellipsoïdal (*ellipsoidal regime*). En supposant que ces conclusions sont valables pour une bulle 2D, on attend une bulle restant compacte durant son ascension, la tension de surface jouant un rôle important dans la forme terminale de la bulle.

Le second cas test est, toujours selon les résultats de Clift *et al.* [28], entre les régimes ellipsoïdal, *skirted* et *dimpled ellipsoidal-cap*. Un fractionnement de la bulle est donc possible dans ce cas.

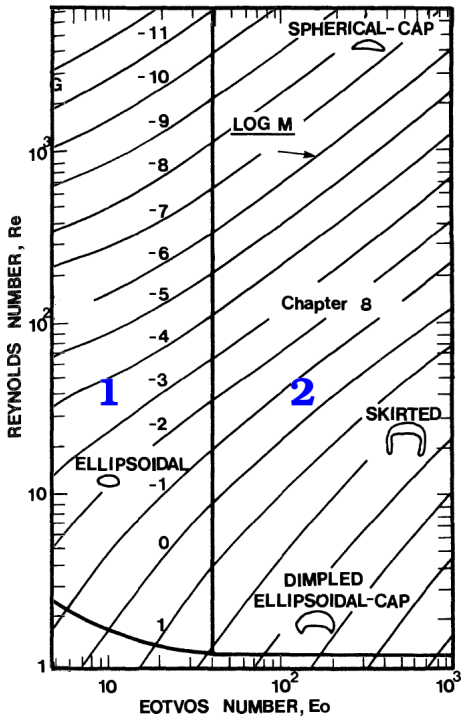


FIGURE 3.2 – *Extrait de la cartographie des régimes de formes de bulles de Clift et al. (source [28]). Les deux cas test du benchmark sont positionnés (1 et 2 en bleu).*

Afin d'obtenir une comparaison quantitative des résultats des différents codes, trois quantités sont mesurées sur la bulle en ascension : la circularité de la bulle, la position du centre de masse de la bulle et la vitesse du centre de masse de la bulle. La circularité de la bulle ξ est définie par le rapport entre le périmètre de la bulle ronde initiale et le périmètre de la bulle simulée. La position du centre de masse de

la bulle au cours de l'ascension de la bulle est évalué par moyenne de la position des cellules contenant la phase gaz. Avec le formalisme du modèle à deux fluides, cette moyenne est pondérée par la fraction volumique de la phase gazeuse :

$$\mathbf{x}_c = (x_c, y_c, z_c) = \frac{\int \alpha_b \mathbf{x} d\Omega}{\int \alpha_b d\Omega} \tag{3.1}$$

La vitesse d'ascension de la bulle est évaluée de façon similaire par moyenne de la vitesse de la phase gaz. Une variante revient à utiliser la vitesse d'ascension du centre de masse de la bulle $\mathbf{U}(\mathbf{x}_c)$.

$$\mathbf{U}_c = \frac{\int \alpha_b \mathbf{U}_b d\Omega}{\int \alpha_b d\Omega} \tag{3.2}$$

1.1 Cas test numéro 1

Le premier cas du benchmark n'est pas très discriminant pour les codes de calculs comme le montre la superposition des résultats en figure 3.3.

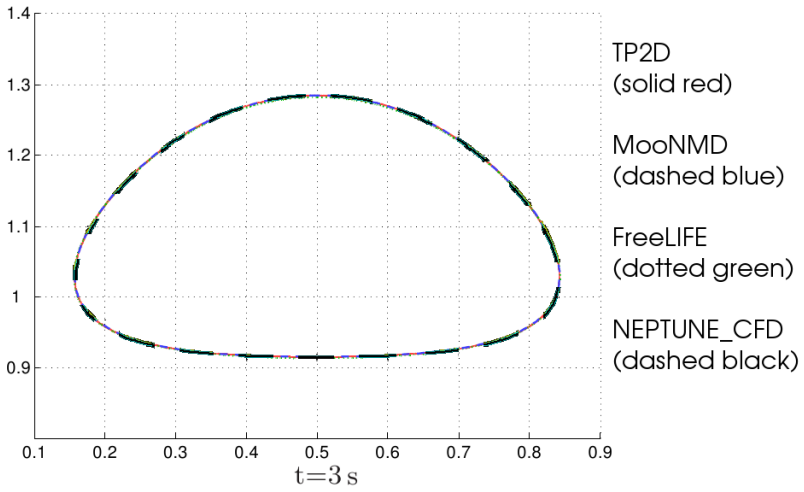


FIGURE 3.3 – *Superposition des interfaces ($\alpha = 0.5$) obtenues avec les trois codes du benchmark et NEPTUNE_CFD.*

Pour ce premier cas, on teste la différence entre une modélisation avec les lois de fermetures présentées au paragraphe I.3, c'est-à-dire la tension de surface et une condition de non-glissement à l'interface, et le modèle complet qui comprend en plus l'étape de compression artificielle de l'interface. Chacune de ces méthodes est utilisée sur les trois maillages comportant respectivement 20, 40 et 80 cellules par diamètre de la bulle ronde initiale.

1.1.1 Observations

L'étape de comparaison visuelle sur la forme de la bulle au bout de 3 s d'ascension ne permet pas d'observer de différences entre les trois codes du benchmark et notre simulation avec NEPTUNE_CFD (seul le modèle complet est représenté

sur la figure 3.3). La comparaison quantitative permet de confirmer cette coïncidence comme le montre l'ascension du centre de masse en figure 3.4. On note que les simulations sur les maillages comportant 40 et 80 cellules par diamètres de bulles (respectivement tirets et traits pleins sur les figures 3.4, 3.5 et 3.6) donnent des résultats très proches avec le modèle complet.

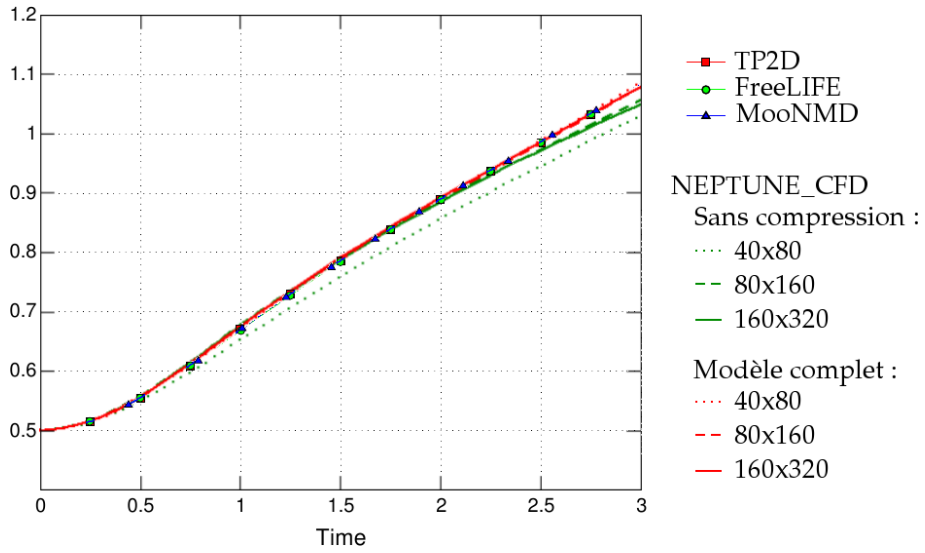


FIGURE 3.4 – *Superposition des positions du centre de masse de la bulle obtenues avec les trois codes du benchmark et NEPTUNE_CFD (modèle complet) pour le cas test numéro 1.*

Sur la figure 3.4, on peut observer une déviation de la position du centre de masse simulé avec un modèle sans compression (courbes vertes) à partir de 2 s d'ascension pour les maillages les plus fins, et de 0.5 s pour le maillage grossier. Cela est sans doute dû à la diffusion progressive de l'interface dans ce cas. Le modèle complet (courbes rouges) simule la position du centre de la bulle avec un très bon accord avec les trois autres codes du benchmark pour tous les maillages utilisés. Sur la figure 3.5, on observe un écart inférieur à 5 % entre le modèle complet et les codes du benchmark sur la prédiction de la vitesse d'ascension de la bulle. Étant donné la correspondance observée à la fois sur l'interface et la position du centre de masse au cours de la simulation, cet écart résulte surtout de la différence entre l'approche mono- et bi-fluide. En effet, même si l'on impose l'égalité des vitesses à l'interface, le fait d'intégrer la vitesse du gaz sur toute la bulle fait intervenir toutes les cellules contenant de la phase gaz, y compris les deux couches de cellules à l'extérieur de l'interface (celle-ci ayant une épaisseur d'environ 5 cellules), qui sont soumises à une condition plus faible sur l'égalité des vitesses liquide et gazeuse.

1.1.2 Conclusions

Ce premier cas test permet de valider la cohérence des prédictions numériques de notre méthode de suivi d'interface implémentée dans NEPTUNE_CFD avec trois codes utilisant des méthodes *level-set* ou d'*interface tracking*.

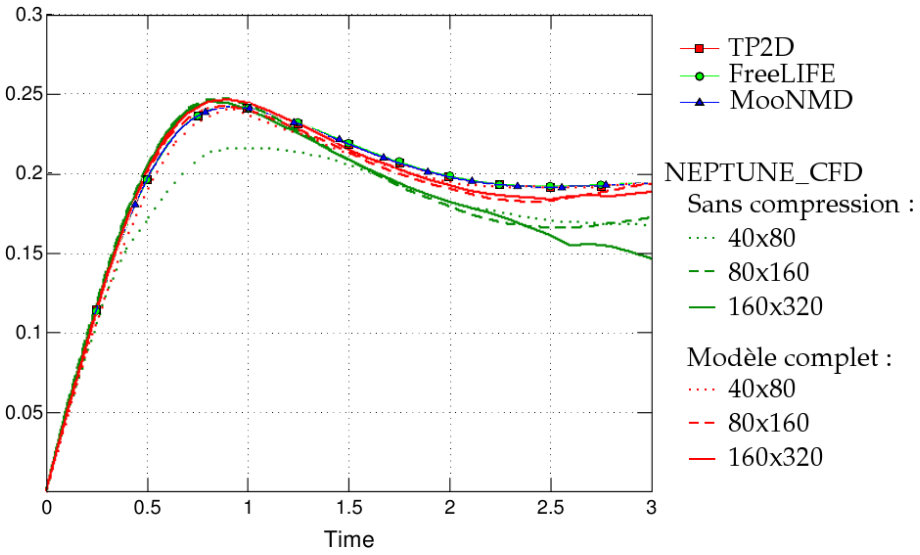


FIGURE 3.5 – *Superposition des vitesses globales de la bulles obtenues avec les trois codes du benchmark et NEPTUNE_CFD pour le cas test numéro 1.*

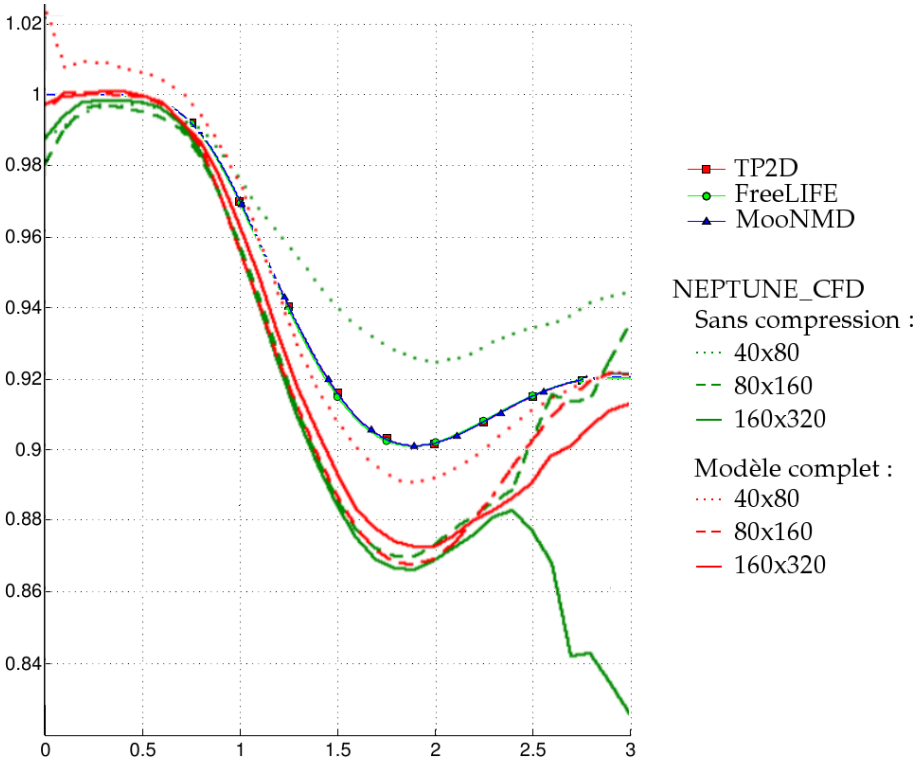


FIGURE 3.6 – *Superposition des circularités obtenues avec les trois codes du benchmark et NEPTUNE_CFD pour le cas test numéro 1.*

1.2 Cas test numéro 2

Pour le cas numéro 2, on teste cette fois-ci différentes méthodes de compression. Pour comparaison, on conserve un cas sans compression. Seule une étape de compression est réalisée à chaque pas de temps physique dans une seconde simulation,

enfin, l'étape de compression est menée jusqu'à convergence dans une troisième simulation. On ne présente ici que les résultats obtenus avec le maillage à 80 cellules par diamètre de bulle qui est le maillage le plus fin utilisé par toutes les méthodes du benchmark.

1.2.1 Observations

La figure 3.7 permet d'observer que l'on obtient après trois secondes d'ascension une bulle assez similaire avec les différentes méthodes. En particulier, la forme de la partie amont de la bulle est quasiment superposable quelque soit le degré de compression de l'interface. On observe par contre un écart plus important sur la partie aval de la bulle où la diffusion de l'interface est importante. Dans la méthode complète, l'étape de compression est itérée en moyenne 5 fois pour atteindre son seuil de convergence. La réduction de la diffusion de la bulle en aval de sa trajectoire montre l'importance de l'utilisation d'une méthode de compression artificielle de l'interface.

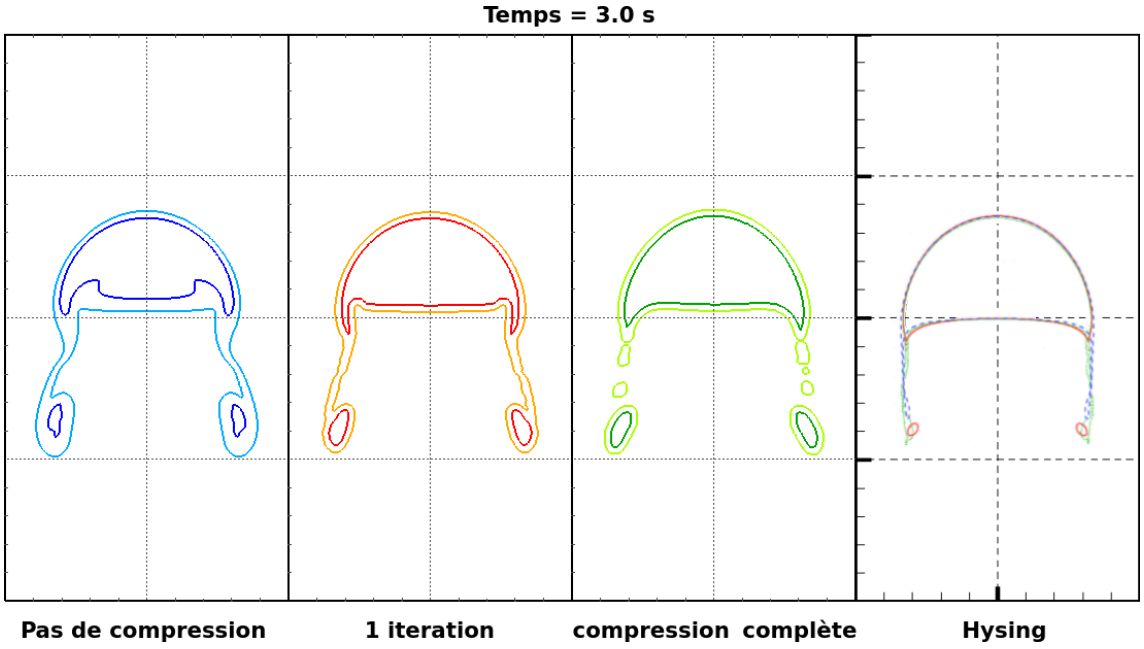
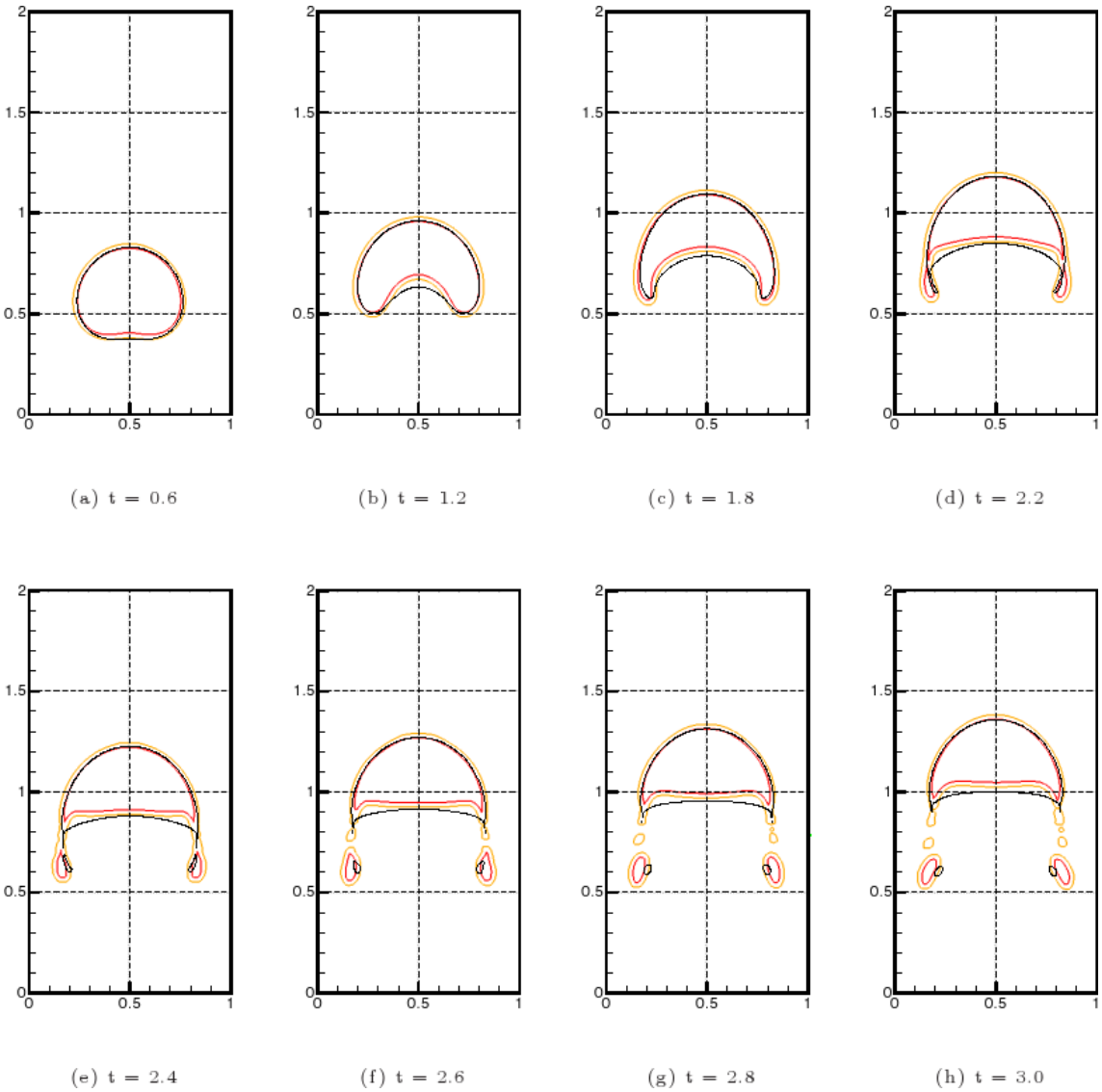


FIGURE 3.7 – *Comparaison des interfaces ($\alpha = 0.5$) obtenues avec les trois simulations sous NEPTUNE_CFD : sans compression, avec une seule itération de compression et avec la méthode complète, et avec les trois codes du benchmark.*

La figure 3.8 montre l'évolution au cours du temps (intervalle de temps entre deux images de 0.6 s) de l'interface de la bulle, avec le code TP2D et avec la méthode de larges interface complète dans NEPTUNE_CFD. On constate sur cette figure que si les deux codes prédisent un fractionnement de la bulle au même moment (aux alentours de 2), les parties détachées n'ont pas le même volume.

En procédant de la même façon que pour le cas numéro 1, on compare maintenant quantitativement les résultats des simulations numériques. Sur la figure 3.9, on



(a) t = 0.6 (b) t = 1.2 (c) t = 1.8 (d) t = 2.2

(e) t = 2.4 (f) t = 2.6 (g) t = 2.8 (h) t = 3.0

FIGURE 3.8 – *Évolution de l'interface de la bulle au cours de son ascension. Les courbes noires représentent l'interface simulée avec le code TP2D tandis que les courbes jaunes et rouges représentent respectivement les isosurfaces* $\alpha_b = 0.1$ *et* $\alpha_b = 0.9$. *La simulation dure* 3 *s physiques, on présente ici différents temps de simulation représentatifs de l'évolution de la bulle.*

constate que l'on retrouve la même ascension jusqu'à la fragmentation de la bulle, intervenant vers 2.0 s. Un écart plus important peut être mesuré sur la figure 3.10, même avant fragmentation de la bulle. Comme sur la figure 3.8, on observe qu'au cours de la simulation la position de l'amont de la bulle, et donc sa vitesse, sont identiques. Il en résulte que les écarts mesurés sur la vitesse globale de la bulle sont dus, soit à la méthode d'évaluation de cette vitesse en diphasique ou en monophasique, soit à la partie diffusée de l'interface qui est plus large dans l'approche bi-fluide.

Comme on pouvait l'observer en figure 3.8, le périmètre de la bulle simulée avec NEPTUNE_CFD est plus grand que celui prévu par TP2D, il en résulte donc une circularité plus faible tout au long de l'ascension de la bulle (*Cf.* figure 3.11).

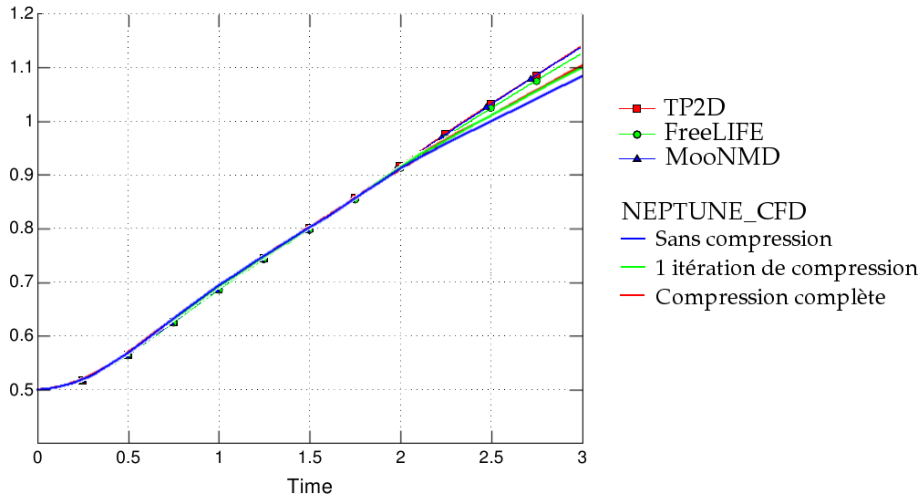


FIGURE 3.9 – *Superposition des positions du centre de masse de la bulle au cours du temps obtenues avec les trois codes du benchmark et NEPTUNE_CFD pour le cas test numéro 2.*

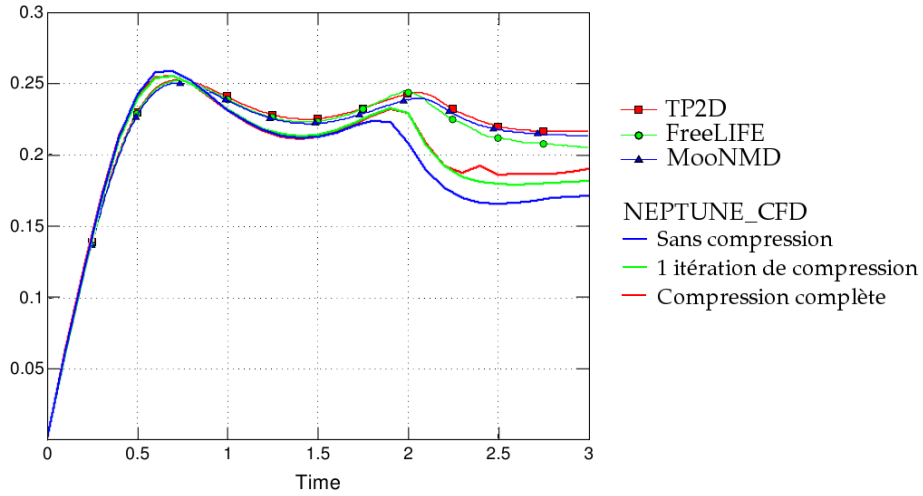


FIGURE 3.10 – *Superposition des vitesses globales de la bulle obtenues avec les trois codes du benchmark et NEPTUNE_CFD pour le cas test numéro 2.*

1.2.2 Conclusions

Les résultats de ce deuxième cas test sont assez concluants concernant la méthode de localisation d'interfaces mise en place. La prise en compte de la tension de surface permet d'obtenir une calotte supérieure coïncidant avec les prévisions des autres codes. La comparaison aux codes du benchmark est satisfaisante du point de vue de la forme générale de la bulle et de sa vitesse. On note une différence au niveau du fractionnement des bulles.

En introduction de leurs travaux, Hysing *et al.* [54] fournissent une comparaison de la bulle du cas numéro 2 au bout de trois secondes d'ascension qui en plus d'inclure les trois codes du benchmark, propose des résultats obtenus avec trois codes commerciaux : ANSYS CFX®, COMSOL Multiphysics® et FLUENT. Aucune information n'est donnée sur les paramètres et les modèles utilisés pour les

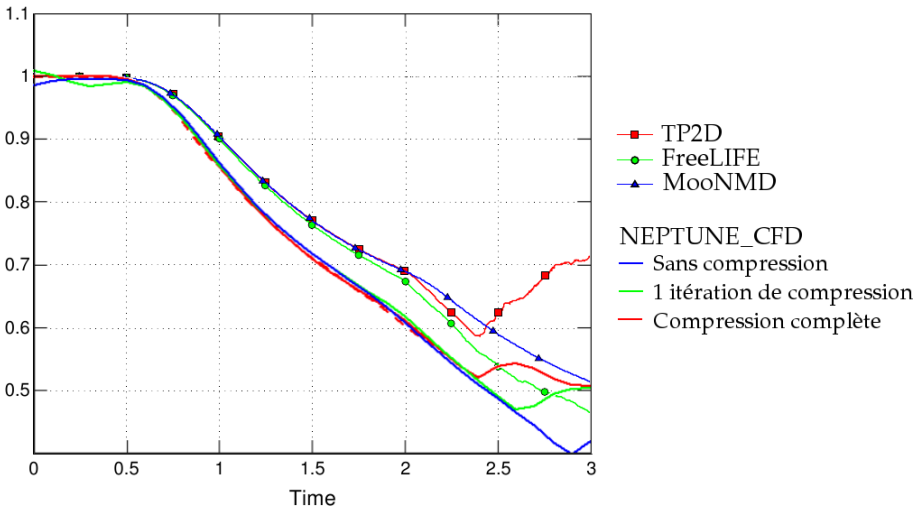


FIGURE 3.11 – *Superposition des circularités obtenues avec les trois codes du benchmark et NEPTUNE_CFD pour le cas test numéro 2.*

simulations avec les codes commerciaux. La figure 3.12 montre que la dynamique de la bulle simulée avec NEPTUNE_CFD est en bon accord avec les autres codes.

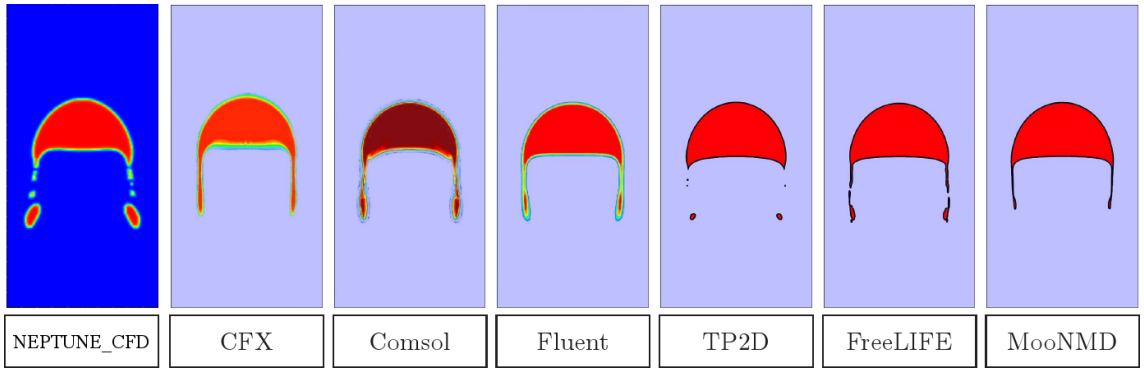


FIGURE 3.12 – *Simulation numérique d'une bulle ascendante 2D pour six codes différents (source Hysing [54]) comparée aux résultats obtenus sous NEPTUNE_CFD avec étape de compression artificielle.*

2 Expériences de Raymond & Rosant

2.1 Présentation des conditions expérimentales

L'expérience consiste en des lâchers isolés de bulles dont le diamètre est variable. Quatre fluides (mélanges eau-glycol) sont étudiés, leurs propriétés étant données par la table 3.2. Des mesures de la forme des bulles ainsi que leur vitesse limite d'ascension sont fournies.

Le montage expérimental est basé sur une cuve rectangulaire de section $30 \times 20\ cm^2$ et de hauteur $50\ cm$.

Série	Viscosité $[Pa \cdot s]$	Densité $[kg/m^3]$	Tension de surface $[N/m]$
S1	0.687	1250	0.063
S3	0.242	1230	0.063
S5	0.0733	1205	0.064
S6	0.0422	1190	0.064

TABLE 3.2 – *Propriétés des fluides utilisés pour les cas modélisés des expériences de Raymond et Rosant [104].*

2.2 Modélisation numérique

Afin d'optimiser le coût CPU des simulations, on modélise les montées de bulles avec l'hypothèse d'une symétrie axiale, ce qui permet d'utiliser une géométrie axisymétrique. Les dimensions de la colonne, en particulier son diamètre interne, étant très grandes devant le diamètre de bulle, on peut considérer la montée de la bulle comme indépendante de toute interaction avec la paroi. On utilisera donc un domaine de calcul de diamètre suffisant pour s'affranchir d'éventuels effets de paroi. Dans l'hypothèse d'une symétrie axiale, seule une tranche du cylindre total est modélisée, l'angle du domaine est choisi de façon à ce que l'épaisseur des cellules reste petite devant le pas d'espace du maillage. La grille est carrée dans le plan de l'axe de symétrie (*Cf.* figure 3.13).

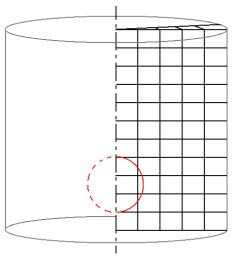


FIGURE 3.13 – *Grille axisymétrique utilisée pour la modélisation des expériences de Bhaga et Weber [13] ainsi que celles de Raymond et Rosant [104].*

Les travaux expérimentaux de Raymond et Rosant [104] fournissent des mesures de vitesse limite d'ascension des bulles, ainsi qu'un rapport de forme pour la bulle une fois cette vitesse atteinte. Expérimentalement, le rapport de forme est calculé à l'aide de la mesure de la hauteur de la bulle h et de sa largeur w. Dans les simulations numériques, un domaine d'une hauteur de 12 fois le diamètre de bulle permet d'atteindre une vitesse d'ascension limite pour les bulles. La hauteur de la bulle est évaluée en intégrant la fraction de taux de vide sur l'axe d'ascension (Oz) :

$$h = \int_{(Oz)} \alpha dz \tag{3.3}$$

On intègre ensuite le taux de vide dans le plan du maillage, ce qui permet d'accéder directement au rapport souhaité sous l'hypothèse que la bulle est une ellipsoïde.

Calcul de la surface de la section de la bulle dans le plan (Ozr) :

$$\frac{\pi}{4} hw = 2 \iint_{(Ozr)} \alpha ds \tag{3.4}$$

D'où l'expression du rapport de forme de la bulle :

$$\frac{h}{w} = \frac{\pi}{8} \frac{\left(\int_{(Oz)} \alpha dz \right)^2}{\iint_{(Ozr)} \alpha ds} \tag{3.5}$$

On met en place un test de sensibilité au raffinement du maillage et un autre à la largeur du domaine de calcul. Ces tests de sensibilité sont réalisés avec un point expérimental moyen, pour une viscosité du liquide de 0.0733 $Pa \cdot s$ (Cas S5) et une bulle ayant un diamètre initial de 8 mm.

Six maillages sont utilisés (M2, M3, M4, M5, M6 et M7), avec un paramètre de pas d'espace $h = \Delta x / d_b$ prenant respectivement les valeurs 1/15, 1/20, 1/25, 1/30, 1/35 et 1/40. La forme finale de la bulle est plus sensible que la vitesse limite au raffinement du maillage. La figure 3.14 permet d'observer cette différence de sensibilité : mis à part le résultat sur le maillage M2, les fronts de bulles (à gauche sur la figure) ont tous progressé à une vitesse similaire malgré les différences de forme. La forme prédite de la bulle est la même à partir du maillage M5, soit pour un paramètre de discrétisation spatiale de 1/30.

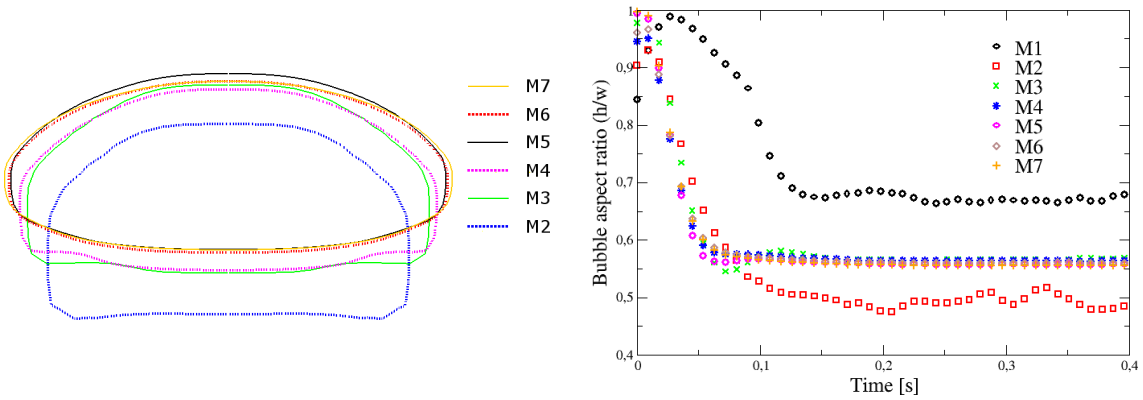


FIGURE 3.14 – *Études de la forme de la bulle en fonction du raffinement du maillage, de 15 à 40 cellules par diamètre de bulle (à droite).*

Cinq tailles de domaines sont testées, de 2 à 6 fois le diamètre de bulle pour le rayon du domaine de calcul. Cette fois, c'est la vitesse limite qui est le paramètre le plus sensible à la dimension du domaine. On observe cela sur la figure 3.15 par le fait que les bulles ont toutes une forme similaire quelque soit la largeur du domaine de calcul. La vitesse limite est indépendante de la taille du domaine pour un rayon de domaine supérieur ou égal à 4 fois le diamètre initial de la bulle.

Ces deux résultats confirment ceux annoncés par Hua *et al.* [52]. Pour toutes les simulations de montées de bulles présentées, on utilisera un domaine de rayon 4 fois le diamètre de la bulle initiale, et de hauteur 12 diamètres de bulles. La finesse du maillage est fixée par le paramètre $h = 1/30$.

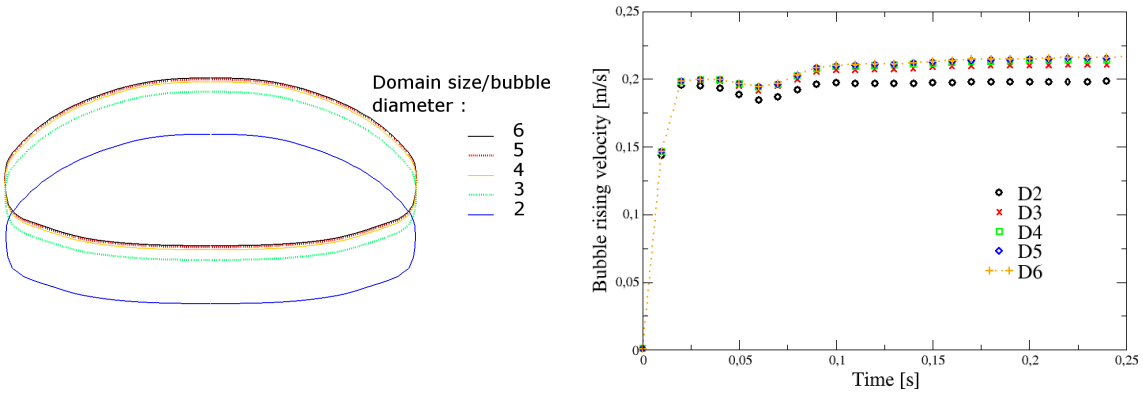


FIGURE 3.15 – *Études de la forme de la bulle en fonction de la taille du domaine physique, rayon du domaine de 2 à 6 fois le diamètre de bulle (à gauche).*

Le temps est constant et est fixé de sorte d'assurer que la condition de Courant-Friedrichs-Lewy soit respectée (nombre de Courant inférieur à 1). Pour chaque liquide, on modélise dix montées de bulles de diamètres initiaux variants de 3 à 12 mm, en incrémentant le diamètre d'un millimètre entre chaque simulation.

2.3 Résultats

On ne garde que les simulations pour lesquelles on obtient une bulle de forme stabilisée qui ne se dissocie pas de l'axe vertical afin de conserver le cadre de simulations axisymétrique. Ce qui explique pourquoi on ne retrouve pas les grands diamètres pour les liquides les moins visqueux. On obtient alors un total de 33 simulations représentées dans les courbes suivantes. Les figures 3.16 et 3.17 montrent la comparaison entre les résultats expérimentaux et les simulations respectivement pour la vitesse limite et le rapport de forme des bulles.

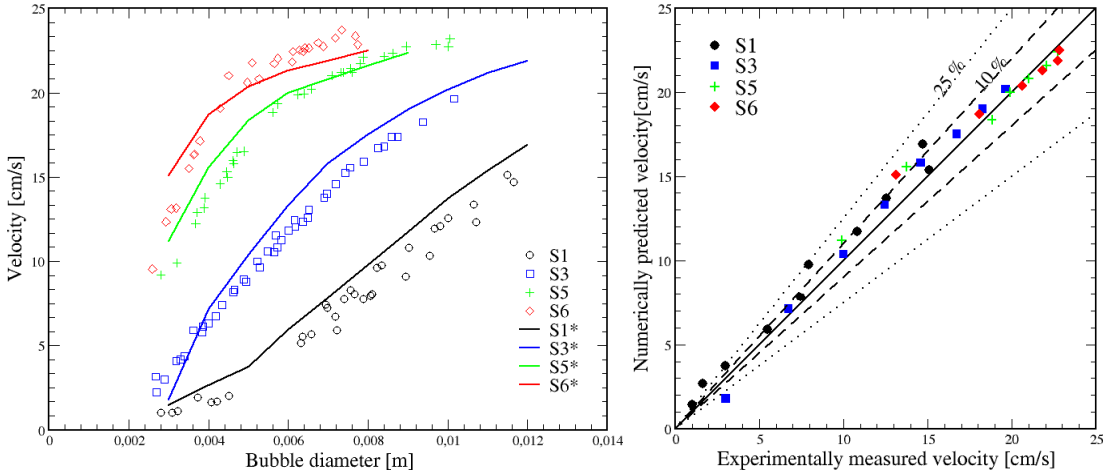


FIGURE 3.16 – *Comparaison entre les mesures expérimentales de vitesses limites (symboles évidés) et les simulations numériques (lignes continues) pour les quatre expériences S1, S3, S5 et S6 de Raymond et Rosant.*

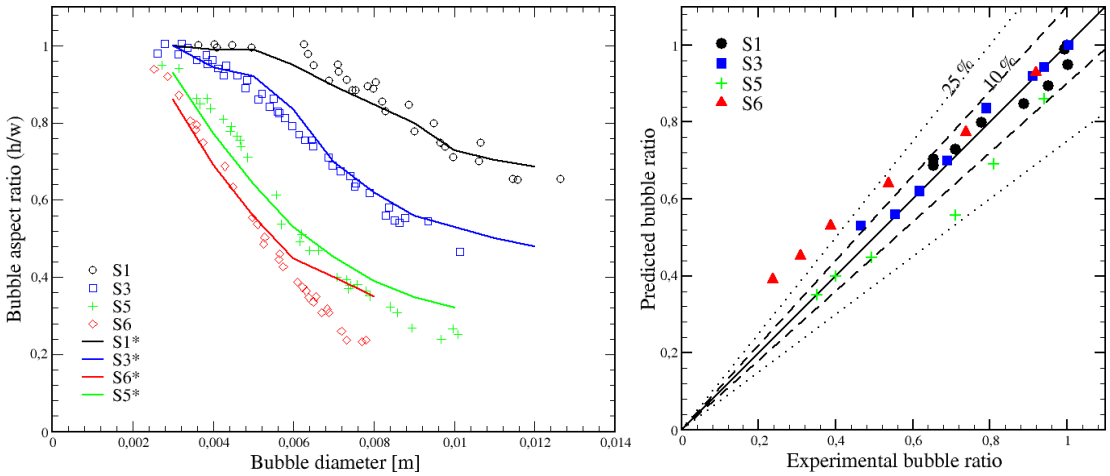


FIGURE 3.17 – *Comparaison entre les mesures expérimentales de forme de bulles (symboles évidés) et les simulations numériques (lignes continues) pour les quatre expériences S1, S3, S5 et S6 de Raymond àet Rosant.*

Une première observation est la concordance entre les diamètres des bulles mesurés et simulés pour les quatre expériences S1, S3, S5 et S6. Après vérification auprès de l'un des deux auteurs, une limitation expérimentale était que les bulles devaient présenter une montée le long de l'axe (Oz) du montage et ne pas présenter d'oscillations, ni se fragmenter. Ainsi, les diamètres supérieurs à 8 mm pour l'expérience S6 qui se séparent de l'axe et donc perdent la symétrie axiale dans les simulations n'ont pas étés mesurés expérimentalement.

La vitesse prédite des bulles est en bon accord avec les résultats expérimentaux, l'écart observé sur la figure 3.16 étant inférieur à 10% pour la plupart des cas, les autres présentant un écart inférieur à 25%. Les points expérimentaux présentent eux-même des écarts pouvant aller jusqu'à 20% pour les cas de montée à faible vitesse. Pour ce qui est de la prédiction de la forme des bulles, on constate sur la figure 3.17 des écarts inférieurs à 10% pour les expériences S1 et S3 et inférieurs à 23% pour l'expérience S5. Seuls les cas avec des diamètres supérieurs à 6 mm de l'expérience S6 présentent un écart supérieur à 25%.

3 Expériences de Bhaga & Weber

Les expériences de Raymond et Rosant ont permis de comparer de manière quantitative le modèle de suivi d'interface pour les bulles déformables. Cependant, si ces résultats permettent de mesurer l'efficacité du modèle, ils ne permettent pas de réaliser une comparaison visuelle de la forme réelle des bulles, au-delà du rapport de forme sous l'hypothèse d'un profil ellipsoïdal de celles-ci. C'est justement ce que l'on vise en simulant les expériences de Bhaga et Weber [13] avec lesquelles sont fournies des photographies de bulles en ascension dans un liquide visqueux.

3.1 Présentation des conditions expérimentales

Les expériences de Bhaga et Weber [13] présentent des cas de montée de bulles dans une colonne contenant un liquide visqueux. La colonne mesure 183 cm de hauteur et a un diamètre interne de 29.2 cm. Chaque expérience consiste en l'observation de la forme finale de bulles pour une valeur de viscosité de la phase liquide (eau sucrée, voir table 3.4). Cette variation de viscosité du fluide est réalisée de façon à faire varier les nombres de Morton et de Reynolds en conservant un nombre d'Eötvos constant égal à 116. La densité du fluide varie entre 1314 et 1390 $kg \cdot m^{-3}$, et le coefficient de tension de surface entre 0.0769 et 0.0800 $N \cdot m^{-1}$. On dispose de photographies de l'état stabilisé de chaque bulle (*Cf.* figures 3.19 et 3.20).

Expérience	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
Mo	848	266	41.1	5.51	1.31	0.103	4.63×10^{-3}	8.60×10^{-4}
Re	2.47	3.57	7.16	13.3	20.4	42.2	94.0	151

TABLE 3.3 – *Nombres adimensionnels pour l'expérience de Bhaga et Weber (source [13]).*

Le volume injecté pour chaque bulle est de 9.3 cm^3, soit un diamètre initial de 26.09 mm avec l'hypothèse d'une bulle initialement sphérique. La viscosité est la seule propriété physique qui change significativement avec la concentration de sucre. On approxime donc la masse volumique et le coefficient de tension de surface à leur valeurs moyennes, soit respectivement $\rho_l = 1350\ kg \cdot m^{-3}$ et $\sigma = 0.0785\ N \cdot m^{-1}$. Ce qui permet de calculer la valeur de la viscosité de chaque cas expérimental à l'aide du nombre de Morton, ainsi que de déduire du nombre de Reynolds la vitesse d'ascension limite de chaque bulle. Ces valeurs sont présentées dans la table 3.4.

Expérience	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
Viscosité $[Pa \cdot s]$	2.70	2.02	1.27	0.77	0.54	0.28	0.13	0.09
Vitesse limite $[cm/s]$	19.0	20.5	25.8	29.0	31.1	34.1	34.9	36.8

TABLE 3.4 – *Viscosité du liquide et estimation de la vitesse limite expérimentale des bulles pour les expériences de Bhaga & Weber.*

3.2 Modélisation numérique

Les simulations sont effectuées avec un pas de temps constant. Ce dernier est fixé en tenant compte de la vitesse limite expérimentale (*Cf.* table 3.4) et du pas du maillage, qui permettent de s'assurer que l'on conserve tout au long du calcul un nombre de courant inférieur à 1 (condition CFL). Le maillage est construit de la même façon (*Cf.* figure 3.13) que pour l'expérience de Raymond & Rosant, en prenant pour référence le diamètre des bulles qui est ici de 26 mm.

3.3 Résultats

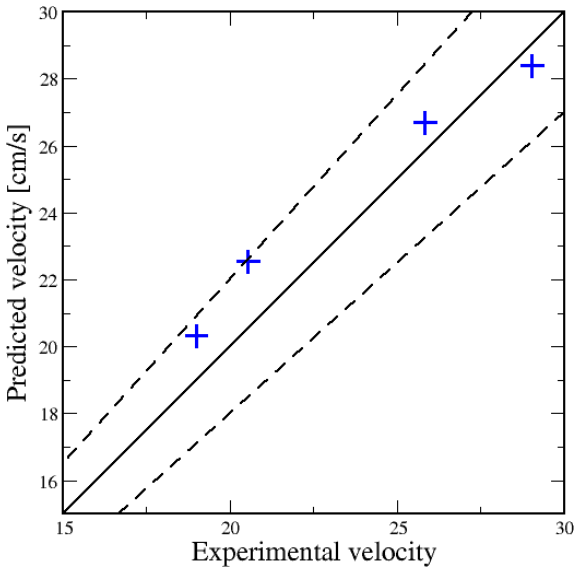


FIGURE 3.18 – *Comparaison entre la vitesse terminale déduite du nombre de Reynolds expérimental et la vitesse calculée par la simulation numérique.*

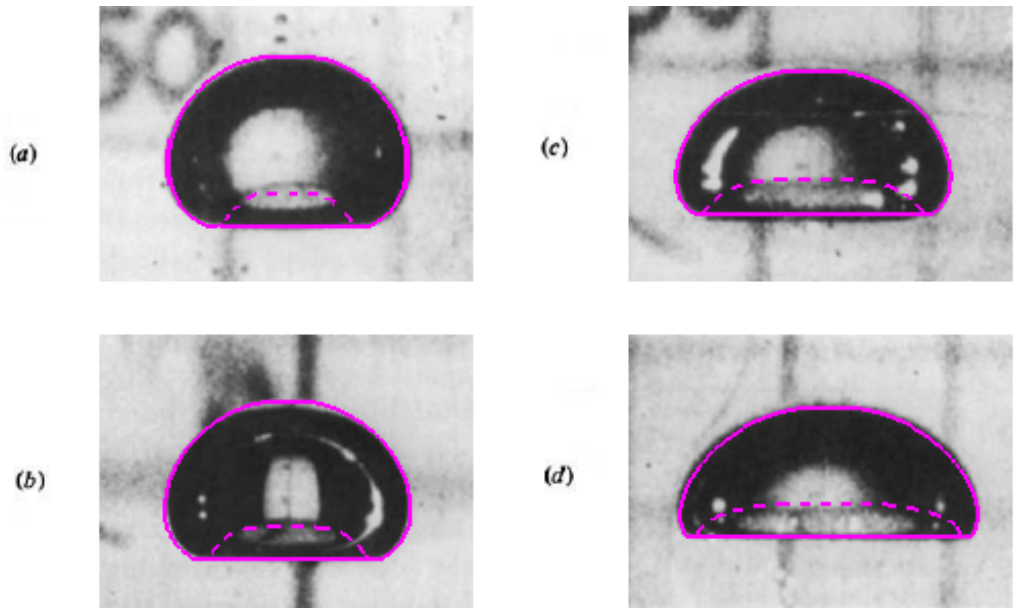


FIGURE 3.19 – *Superposition des résultats de simulation et des photographies issues d'observations expérimentales.*

On retrouve bien les profils (*Cf.* figure 3.19) et vitesses expérimentaux (*Cf.* figure 3.18) pour les quatre premiers cas ((*a*) à (*d*)). Il est à noter que les profils obtenus numériquement sont dimensionnés avec l'échelle du quadrillage des photos expérimentales (carreaux de 1 cm^2 en arrière-plan) et non par rapport à la bulle de l'image.

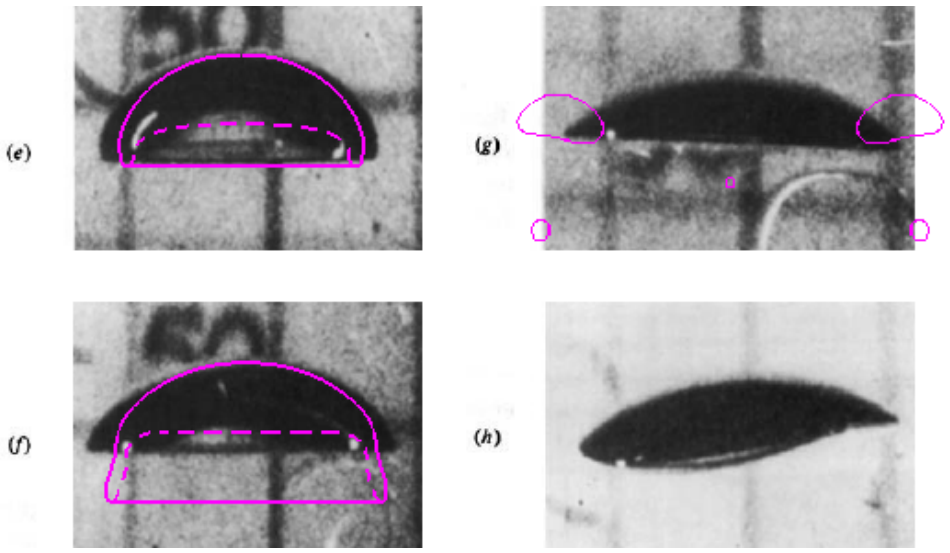


FIGURE 3.20 – *Superposition des résultats de simulation et des photographies issues d'observations expérimentales.*

Pour ce qui est des cas suivants, on observe sur la figure 3.20 que la forme des bulles des cas (e) et (f) sont moins bien prédits par la simulation. Les cas (g) et (h) (ce dernier n'est pas représenté car cela n'avait plus aucun sens) présentent une fragmentation de la bulle que l'on ne retrouve pas expérimentalement. Une première idée est de réaliser une simulation en 3D pour voir si l'on obtient la même chose. Autrement dit, on teste la pertinence de l'utilisation d'un maillage axisymétrique.

On obtient un tore, ce qui conforte l'utilisation du maillage axisymétrique pour les cas (a) à (f). Une des pistes les plus probable pour expliquer cette forte différence de comportement est le fait que l'on modélise ces expériences avec l'hypothèse d'écoulements laminaires, ce qui ne doit plus être le cas des expériences les moins visqueuses. Le fait que les images expérimentales (f), (g) et (h) ne présentent plus une symétrie axiale (le cas (h) étant clairement un cas d'ascension avec une trajectoire flottante, ou *wobbling bubble*), nous laisse penser que cette hypothèse est sans doute justifiée.

Une deuxième idée peut être d'initialiser non plus une bulle ronde, mais de forme ellipsoïdale. Hua & Lou [52] montrent que pour un nombre de Reynolds de 14, cela n'a que peu d'influence sur la forme finale de la bulle, par contre pour $Re = 206$, une bulle ronde se scinde en deux alors que pour $h/w = 0.85$ la bulle reste compacte.

4 Coalescence

La modélisation des expériences de lâchers de bulles dans des fluides visqueux a montré des résultats satisfaisants. On s'intéresse dans cette partie au comportement de deux bulles dans une phase de coalescence. La coalescence locale de deux bulles est un phénomène étudié expérimentalement [19, 25, 87]. La modélisation de cette coalescence, qui est bien entendu très importante dans notre optique de

simulation d'écoulements complexes à fort taux de vide, est un sujet sensible pour les méthodes de capture d'interfaces [25, 48, 90, 131]. Contrairement aux approches avec maillage de l'interface (maillage mobile ou marqueurs), l'approche Eulérienne avec une fonction couleur ne présente pas de problème de recombinaison d'interface puisqu'on ne s'intéresse pas au nombre d'interfaces, et que l'on ne différencie pas une bulle d'une autre. En revanche, il est primordial de s'assurer que l'étape de compression artificielle ne vient pas perturber de façon significative le temps caractéristique de coalescence. Les résultats de simulation numérique seront comparés à des observations expérimentales pour des cas de coalescence locale.

4.1 Test de séparation d'interfaces

On simule ici en 1D la reconnaissance par la méthode de compression d'interfaces diffusées puis re- compactées. On étudie la capacité de la méthode de compression artificielle en fonction de la distance entre les bulles initiales. Les interfaces sont initialement diffusées sur une distance caractéristique égale au rayon des bulles, soit 0.5 cm. Le maillage utilisé est une ligne de $50 \times 1 \times 1$ cellules de volume 1 mm^3 chacune.

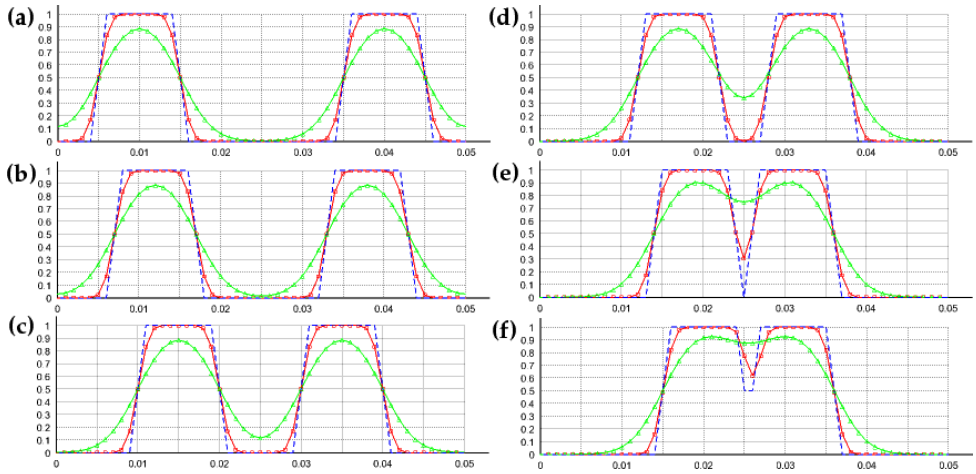


FIGURE 3.21 – *Bulles initiales (bleu), diffusées (vert) et après l'étape de compression artificielle (rouge). Les distances initiales entre les centres des bulles sont respectivement de 6, 5, 4, 3, 2.5 et 2.2 fois le rayon des bulles initiales.*

On observe sur la figure 3.21 que l'on retrouve après compression, deux interfaces pour une distance entre les deux bulles jusqu'à 2.5 fois le rayon initial. Ce test simple permet de s'assurer que l'on ne rencontre pas de problème particulier lié à la compression de deux interfaces proches. On s'intéresse par la suite à la modélisation de la coalescence locale en se basant sur des observations expérimentales.

4.2 Expérience de Chen *et al.*

L'expérience de Chen *et al.* [25], présente des images expérimentales de la coalescence de deux bulles représentée en figure 3.22. Celles-ci sont injectées successivement dans un liquide au repos. Le montage expérimental est décris dans les travaux

de Manasseh *et al.* [76, 77]. Les propriétés du mélange eau-glycérine constituant la phase liquide sont les suivantes :

$$\rho_l = 1220\ kg \cdot m^{-3},\ \mu_l = 0.11\ kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1} \text{ et } \sigma = 0.066\ N \cdot m^{-1} \tag{3.6}$$

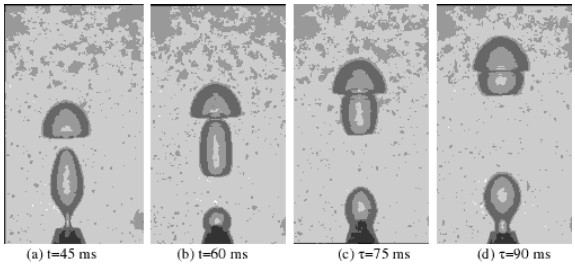


FIGURE 3.22 – *Photographies de l'expérience de coalescence locale de Chen et al. . Les deux bulles sont injectées successivement par un injecteur de diamètre 6 mm.*

L'expérience ayant une géométrie cylindrique, on modélise la coalescence dans un domaine axisymétrique. On utilise ici trois maillages comportant respectivement 100×300, 120×360 et 140×420 cellules, soit respectivement 25, 30 et 35 cellules par diamètre de bulle.

Dans un premier temps, on initialise les deux bulles comme étant déjà dans le domaine à $t = 0\ s$ avec une forme sphérique de diamètre 10 mm. Les figures 3.23 et 3.24 représentent respectivement les simulations avec NEPTUNE_CFD et avec la méthode VOF de Chen *et al.* [25].

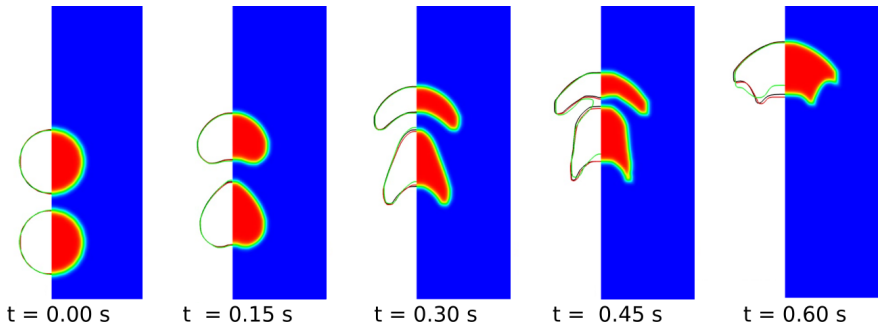


FIGURE 3.23 – *Simulation numérique de l'expérience de Chen et al. avec NEPTUNE_CFD. Sur la partie droite de chaque image, on a représenté les interfaces obtenues avec les trois maillages* 100×300 *(vert),* 120×360 *(rouge) et* 140×420 *(noir). La partie de droite montre le taux de vide pour la phase gaz pour le maillage* 120×360.

On observe sur la figure 3.23 que les résultats avec les maillages 120×360 et 140×420 sont suffisamment proches pour considérer que le maillage 120×360 fournit une solution indépendante du raffinement. Cela conforte les résultats trouvés pour des montées de bulles seules, étudiées au paragraphe 2. Comme il était précisé par les travaux de Chen *et al.* [25] et Hasan et Zakaria [48], l'écart entre l'initialisation de la simulation numérique et l'injection des bulles dans le montage expérimental ne

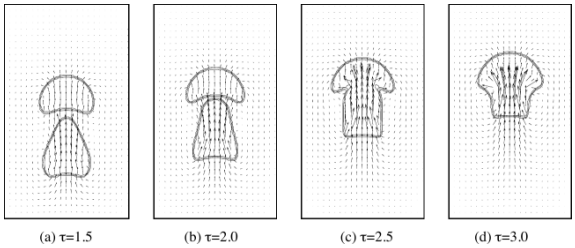


FIGURE 3.24 – *Simulation numérique pour la coalescence locale de Chen et al. [25] ($Re = 12, Eo = 5, Mo = 4.1 \times 10^{-3}, \rho_l/\rho_g = 1000, \mu_l/\mu_g = 100$), le temps adimensionnel τ est défini tel que : $\tau = t/t_{ref}$ sans que t_{ref} ne soit donné.*

laissait pas espérer une comparaison de la forme des bulles lors de la coalescence. On peut néanmoins observer que l'on prédit par la simulation un temps caractéristique de coalescence proche de celui observé expérimentalement (environ 30 ms à partir du moment où la seconde bulle est happée par la bulle de tête).

Pour tenter de se rapprocher des conditions expérimentales et de la forme des bulles lors du processus de coalescence, on initialise le calcul à partir d'un état où les deux bulles sont toujours au repos mais possèdent la même forme que sur la première photographie expérimentale ($t = 45$ ms sur la figure 3.22). On suit alors leur évolution superposée aux observations expérimentales à $t = 60,\ 75$ et 90 ms.

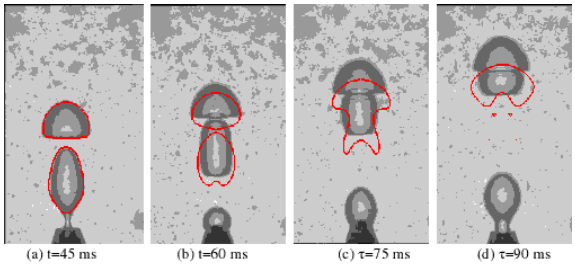


FIGURE 3.25 – *Le contour $\alpha = 0.5$ de la bulle en rouge est superposé aux photographies expérimentales. On peut observer l'écart de vitesses entre les mesures expérimentales et les prédictions de la simulation numérique, essentiellement dues à l'écart initial.*

Les écarts tant sur la forme que pour la vitesse, sont toujours en grande partie dus aux différences entre les conditions initiales. En effet, si l'on a repris les formes initiales des deux bulles, la vitesse initiale est, elle, nulle dans tout le domaine pour la modélisation. On notera en particulier le retard progressif des bulles simulées par rapport aux bulles expérimentales.

4.2.1 Injection de gaz

Une idée est alors de modéliser l'injection des bulles dans le domaine, afin d'avoir des vitesses plus réalistes par rapport à l'expérience. Si l'injection de bulles de gaz par un injecteur à vitesse ou débit connu est réalisable [120], modéliser une entrée contrôlée par une différence de pression telle que l'injection de gaz de Manasseh *et al.* [76] est beaucoup plus complexe. On connaît le diamètre de la sortie de l'injecteur

($d_{\text{injection}} = 6\ mm$). Dans un premier temps, on modélise un jet à vitesse constante. La vitesse d'entrée du jet au niveau de l'injecteur est évaluée à partir des conditions de l'expérience de Chen *et al.* .

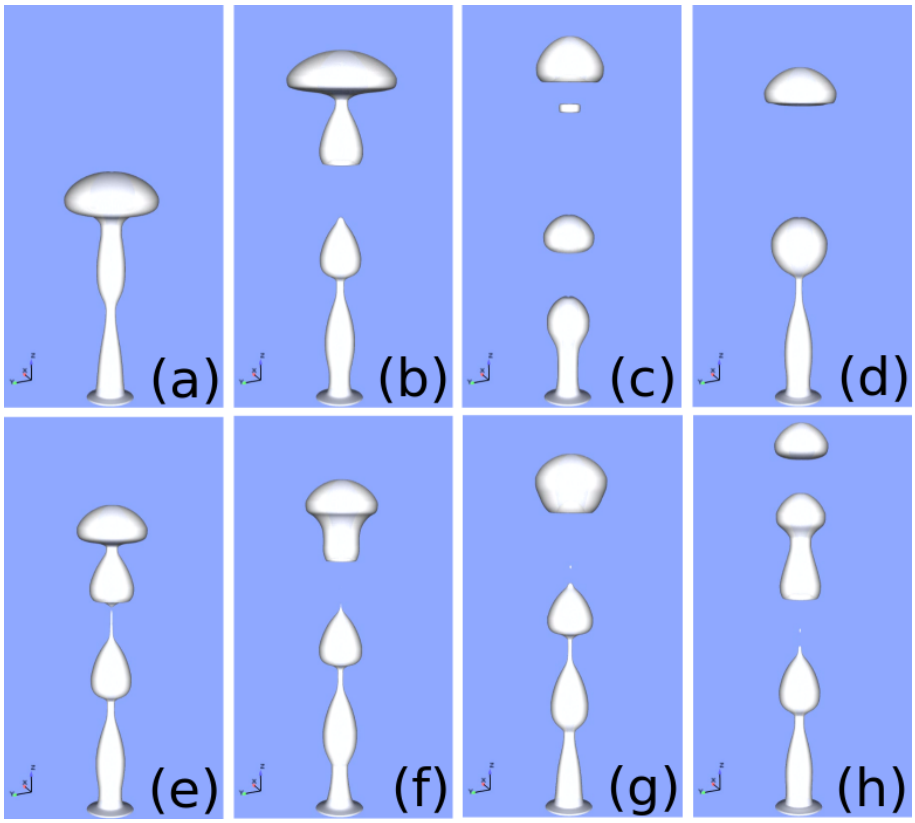


FIGURE 3.26 – *Jet de gaz avec une vitesse d'entrée de* $0.1\ m \cdot s^{-1}$. *L'isosurface* $\alpha_{cg} = 0.5$ *est représentée en blanc. Les images (a), (b), (c), (d), (e), (f), (g) et (h) représentent respectivement le jet au temps* $t =$ $0.05,\ 0.3,\ 0.55,\ 0.8,\ 1.05,\ 1.065,\ 1.08$ *et* $2\ s$. *Certaines bulles se détachant du jet coalescent ensuite entre elles, comme on peut l'observer sur les images (e), (f) et (g).*

On constate que le jet de gaz simulé se fractionne en bulles qui peuvent alors coalescer. On ne contrôle pas la taille des bulles se détachant ni la fréquence de fragmentation du jet. Les coalescences observées comme, par exemple, sur les images (e), (f) et (g) de la figure 3.26, ont toujours lieu avec un temps caractéristique du même ordre de grandeur que le temps caractéristique de coalescence observé expérimentalement.

Dans un second temps, on souhaite injecter des bulles successivement. Cela est réalisé à l'aide d'une entrée de gaz avec un taux de vide constant égal à 1 et une vitesse d'injection en forme de créneau. La valeur de la vitesse est fixée à $U_{\text{injection}} = 0.1\ m \cdot s^{-1}$ sur une durée de $0.05\ s$, ce qui permet d'injecter dans le domaine une bulle ayant un volume d'environ $0.7\ cm^3$. Le résultat d'une telle injection est présenté sur la figure 3.27.

Comme on peut l'observer, le détachement de la bulle à la fin de l'injection n'est pas correctement modélisé. On observe une traînée de gaz diffus qui semble être

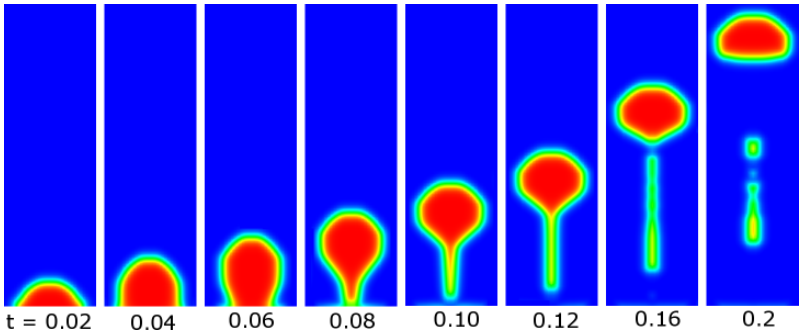


FIGURE 3.27 – *Injection d'une bulle en 2D-axisymétrique par une vitesse d'entrée du gaz de la forme d'une fonction créneau.*

accroché à l'injecteur. Une courte phase d'injection d'eau consécutive à l'injection de la bulle est ajoutée. Cette entrée d'eau est réalisée avec la même vitesse que l'injection de gaz.

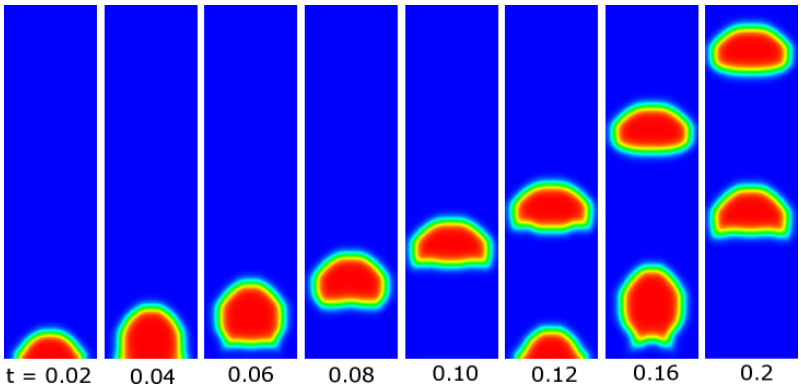


FIGURE 3.28 – *Injection de bulles en 2D-axisymétrique avec une vitesse d'entrée du gaz de la forme d'une fonction créneau suivie d'une courte injection de liquide.*

Cette fois-ci, on est bien capable de réaliser l'injection d'une bulle dans le domaine de calcul avec localisation de l'interface de la bulle. Les résultats expérimentaux disponibles consistent ici en quatre photographies de la coalescence de deux bulles. Si les propriétés du fluide et la taille de l'injecteur sont connus, il nous manque la valeur de la pression imposée en sortie de l'injecteur et la fréquence d'injection des bulles. Ce qui ne permet pas d'évaluer précisément la vitesse d'injection et le volume des bulles. Notre condition aux limites reste donc très incertaine pour la reproduction des conditions expérimentales.

4.3 Expérience de Brereton et Korotney (1991)

Un autre résultat expérimental de coalescence locale entre deux bulles est proposé par Brereton et Korotney [19]. Cette expérience a déjà fait l'objet de simulation à l'aide de méthodes VOF [90, 131] ou de marqueurs [112] pour la simulation de l'interface.

4.3.1 Présentation des conditions expérimentales

Cette expérience a été menée dans deux mélanges liquides de propriétés différentes, les nombres adimensionnels caractérisant ces dernières sont fournies :

$$(a)\begin{cases} Eo = 16 \\ Mo = 30 \\ Re = 1 \end{cases} \quad \text{et} \quad (b)\begin{cases} Eo = 16 \\ Mo = 2 \times 10^{-4} \\ Re = 43 \end{cases} \tag{3.7}$$

Deux bulles sont lâchées successivement dans le liquide, la deuxième bulle étant soit dans l'axe d'ascension de la première, soit décalée par rapport à cet axe. Selon les observations expérimentales, la distance initiale entre les deux bulles n'influence pas le phénomène de coalescence qui a lieu tant que la seconde bulle "voit" le sillage de la bulle amont. Effectivement, tant que la seconde bulle est initialement lâchée dans le sillage de la première, la distance les séparant ne fait que modifier la durée entre l'initialisation et la coalescence des deux bulles, sans changer la durée du phénomène de coalescence.

4.3.2 Modélisation numérique

Connaissant le diamètre des bulles injectées, on utilise pour le calcul les propriétés physiques suivantes, communes aux deux mélanges :

$$\begin{cases} \sigma = 0.069 \ N \cdot m^{-1} \\ g = 9.81 \ m \cdot s^{-2} \\ d_b = 0.01 \ m \\ \rho_l = 1125.4 \ kg \cdot m^{-3} \end{cases} \tag{3.8}$$

Étant donné que seuls les nombres d'Eötvos sont identiques, on fait l'hypothèse que les propriétés des deux liquides ne diffèrent que par la valeur de la viscosité :

$$\begin{cases} \text{cas } (a) \quad \mu_l = 0.795 \ kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1} \\ \text{cas } (b) \quad \mu_l = 0.0524 \ kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1} \end{cases} \tag{3.9}$$

Suivant les conditions initiales utilisées par van Sint Annaland *et al.* [131], la distance entre les deux centres de bulle est fixée à $\Delta z_{\text{centres}} = 15 \ mm$, les bulles ayant un diamètre de 10 mm. Ce qui permet d'observer la coalescence des bulles sur une hauteur raisonnable pour éviter d'avoir un domaine de calcul de trop grande dimension. Pour les cas de coalescence oblique, le désaxement initial est de 0.008 m.

Les dimensions du domaine de calcul sont $0.04 \times 0.04 \times 0.08 \ cm^3$. Les maillages utilisés contiennent respectivement $80 \times 80 \times 160$ et $160 \times 160 \times 320$ cellules pour les cas (a) et (b), soit des pas de discrétisations de $\Delta x = 5 \times 10^{-4} \ m$ et $2.5 \times 10^{-4} \ m$.

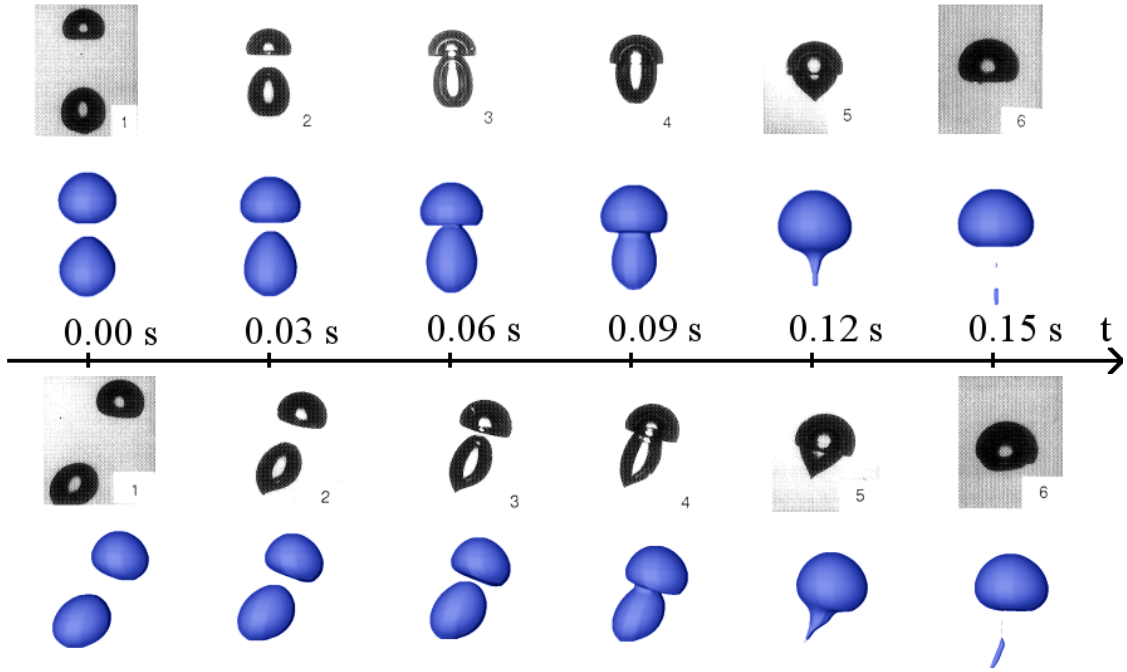


FIGURE 3.29 – *Comparaison entre les observations expérimentales de Brereton et Korotney et la simulation numérique avec Neptune_ CFD pour des bulles en ascension coaxiales (en haut) et oblique (en bas) : $Eo = 16$ $Mo = 30$ $Re = 1$. L'intervalle de temps entre deux images est de 30 ms.*

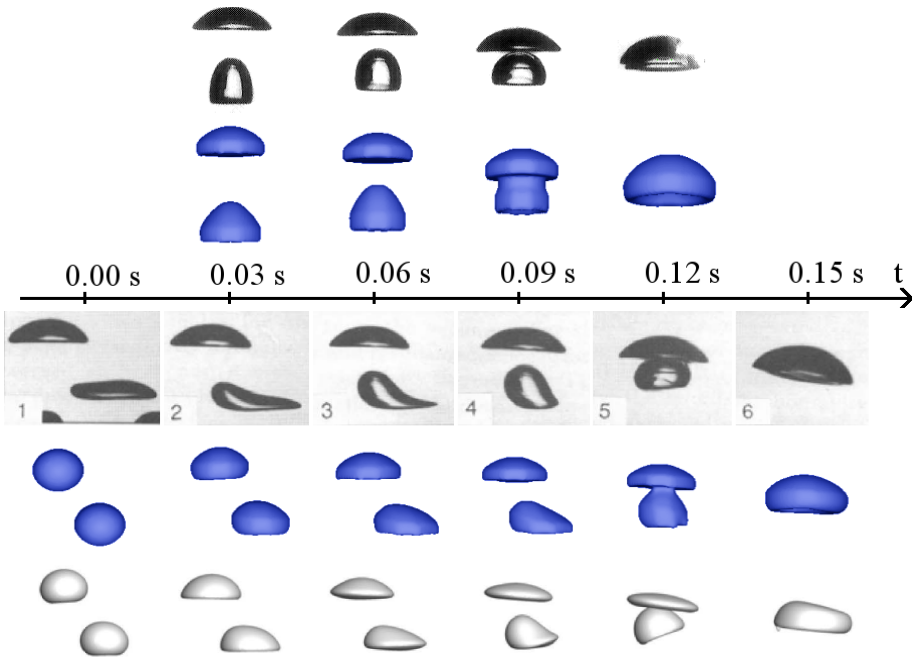


FIGURE 3.30 – *Comparaison entre les observations expérimentales de Brereton et Korotney et la simulation numérique avec Neptune_ CFD pour des bulles en ascension coaxiales (en haut) et oblique (en bas) : $Eo = 16$ $Mo = 2\times10^{-4}$ $Re = 43$. L'intervalle de temps entre deux images est de 30 ms. La simulation numérique de Niceno et al. [90] pour le cas oblique est représentée en blanc.*

4.3.3 Résultats

Les résultats de la coalescence sont présentés en figures 3.29 et 3.30 respectivement pour les cas (a) et (b). Le fait d'avoir utilisé un maillage plus raffiné pour simuler le cas le plus visqueux s'explique par la présence dans ce cas d'une pointe sur la bulle au moment de la coalescence. Cette pointe, que l'on peut observer sur les photographies expérimentales à $t = 0.12\ s$ est très difficile à capter numériquement. On observe un bon accord visuel entre simulations et résultats expérimentaux. Le temps caractéristique du phénomène, entre autre, est bien reproduit par la simulation numérique. Avec un intervalle de temps entre chaque image de 30 ms, on peut évaluer le temps de coalescence à $75 \pm 15\ ms$ pour le cas (a) et $45 \pm 15\ ms$ pour le cas (b). Malgré la complexité du phénomène de coalescence et le fait que l'on ne modélise ni ne simule le drainage du film liquide entre les deux bulles, les formes tant de la bulle de tête que de la bulle de queue sont satisfaisantes. La comparaison avec les résultats de simulation présentée par Niceno *et al.* [90] (*Cf.* figure 3.30) est également satisfaisante.

Une comparaison plus quantitative de la forme des bulles est proposée en figure 3.31. Le rapport de forme est calculé à l'aide de la mesure de la hauteur de la bulle h et de sa largeur w. Comme on ne peut plus faire ici l'hypothèse d'une forme ellipsoïdale pour les bulles, on utilise deux techniques pour évaluer les dimensions des bulles. La première est obtenue en ajustant autour de chaque bulle un pavé, la seconde, une ellipsoïde.

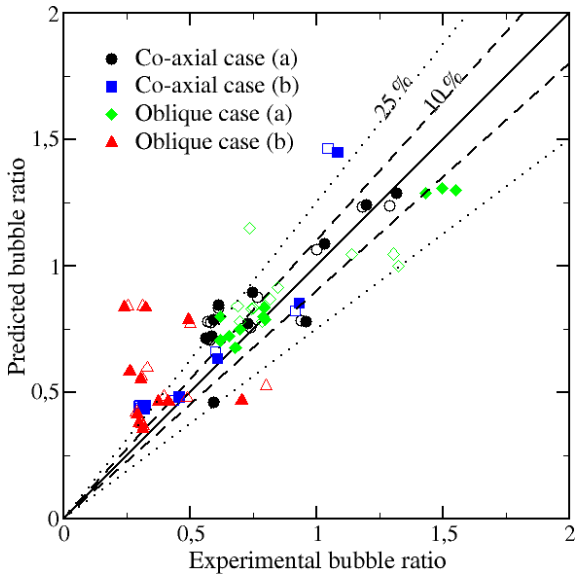


FIGURE 3.31 – *Comparaison entre les rapports de forme des bulles mesurés sur les photographies expérimentales et issus des simulations numériques pour les quatre cas (axiaux et obliques). Les symboles pleins correspondent aux mesures par des ellipsoïdes et les symboles vides aux mesures par des pavés.*

Á l'exception du cas de la coalescence oblique dans le liquide le moins visqueux (cas (b)) représenté par les triangles rouges sur la figure 3.31, l'erreur sur la forme des bulles est globalement inférieure à 25%. Les différences sont principalement dues à

la différence entre l'initialisation des simulations numériques et l'injection des bulles. En effet, sur les photographies expérimentales annotées de $t = 0\ s$, les bulles sont déjà en ascension contrairement aux simulations initialisées avec des bulles sphériques au repos.

4.4 Conclusion

Ces différentes comparaisons avec les résultats expérimentaux de Chen *et al.* et Brereton & Korotney sont satisfaisantes. Le modèle dédié aux larges bulles permet la simulation de phénomènes de coalescence locale, comparables qualitativement aux observations expérimentales, malgré des différences importantes sur les conditions initiales. La comparaison quantitative sur l'expérience de Brereton & Korotney montre elle aussi des résultats en bon accord avec l'expérience, avec un écart sur la forme des bulles inférieur à 25% lorsque les conditions initiales ne sont pas trop éloignées.

Notre modèle est donc capable de traiter des problèmes de montées de bulles isolées ou non, et de suivre deux interfaces qui coalescent.

5 Colonne de bulles - Deen *et al.*

Les paragraphes précédents ont permis de montrer les capacités du modèle dédié aux larges bulles à simuler l'ascension d'une bulle isolée ou la coalescence de deux bulles. Toutes ces simulations ont été réalisées pour des nombres de Reynolds suffisamment petits pour ne pas avoir à modéliser la turbulence. Comme il a déjà été mentionné en introduction, l'approche mise en place dans nos travaux inclut une modélisation de la turbulence pour les échelles inférieures à l'échelle de coupure du modèle, autrement dit, la taille limite entre simulation des interfaces et modélisation de bulles dispersées. Sans pour autant mettre en place une modélisation fine de la turbulence, nous proposons dans ce paragraphe de tester une implémentation simple d'un modèle LES par rapport à une modélisation URANS de la turbulence. L'idée est dans un premier temps d'identifier les points sensibles relatifs à l'utilisation d'un modèle LES dans une simulation comprenant à la fois des interfaces et des structures diphasiques sous-maille (le champ dispersé).

L'expérience de Deen *et al.* [33] est une colonne de bulles oscillantes dans une cuve à base carrée. Cette expérience a été modélisée numériquement avec une approche RANS et LES par Deen *et al.* [34, 35] et Niceno *et al.* [38, 88, 89]. Elle devrait nous permettre de discuter de l'effet d'une modélisation LES dans une simulation où toutes les structures diphasiques sont traitées en sous-maille.

5.1 Description de l'expérience

Le montage expérimental consiste en une colonne de bulles dans une cuve à section carrée ($15 \times 15\ cm^2$), contenant à l'instant initial une hauteur d'eau de $45\ cm$ (noté L sur la figure 3.32). Les bulles sont injectées par une entrée au fond de

la cuve, composée de 49 trous de 1 mm de diamètre chacun, répartis sur une plaque de section carrée également (de coté 6.25 mm), centrée par rapport à la cuve. Cette géométrie de l'injecteur permet l'introduction de bulles d'un diamètre moyen de 4 mm. La vitesse superficielle du gaz est de 5.0 $mm \cdot s^{-1}$.

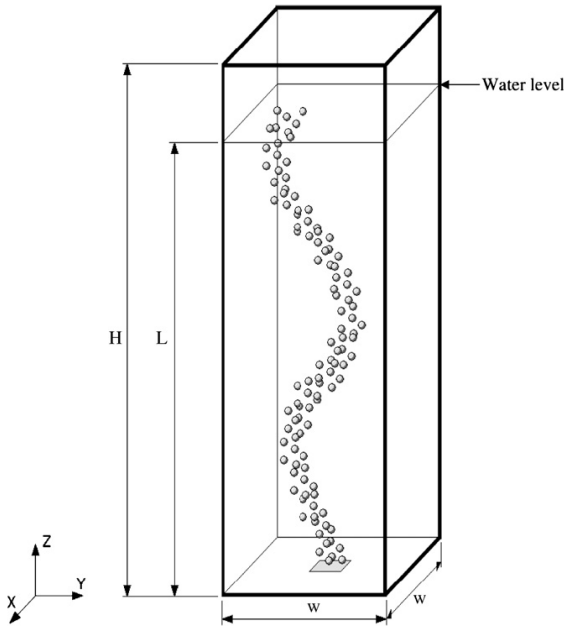


FIGURE *3.32 – Schéma de principe de l'expérience de Deen et al. (source [33]).*

5.2 Modélisation numérique

La phase gazeuse est ici modélisée à l'aide d'une approche dispersée. La simulation de cette expérience permet de vérifier l'implémentation de la viscosité turbulente du modèle LES de Smagorinsky (3.10) dans NEPTUNE_CFD :

$$\mu^T = \sqrt{2}(C_S\overline{\Delta})^2\rho\|S_{ij}| \tag{3.10}$$

Étant donné que l'on modélise les bulles, le filtrage spatial du modèle de turbulence de Smagorinsky ne peut être inférieur au diamètre des bulles. Il y a donc une compétition entre le besoin de raffinement du modèle LES et le modèle de dissipation turbulente induite par les bulles qui risquerait de drainer de l'énergie aux champs résolus si $d_{dg} > \Delta_{\text{filtre SM}}$. Les travaux de thèse de Milelli [78] préconisent de conserver une marge entre le diamètre des bulles et le filtre spatial du modèle de Smagorinsky : $1.2 < \Delta_{\text{filtre SM}}/d_{dg} < 1.8$. Cette implémentation de la viscosité turbulente de Smagorinsky est ici comparée aux résultats d'une modélisation URANS ($k-\epsilon$ ou $R_{ij}-\epsilon$). Le modèle $R_{ij}-\epsilon$ de Speziale, Sarkar & Gatski (SSG) [115] est utilisé pour la comparaison.

Deux maillages sont utilisés : un maillage "grossier" ($15\times15\times50$, $\Delta x = 1\ cm$) et un maillage "fin" ($30\times30\times100$, $\Delta x = 5\ mm$). Les deux maillages respectent donc le critère de Milelli. Le pas de temps est pour ces deux maillages respectivement de

0.01 s et 0.005 s, ce qui pour une vitesse maximale d'environ 0.5 $m \cdot s^{-1}$ donne un nombre de Courant de 0.5.

Le champ de bulles dispersées est modélisé à l'aide des lois de fermeture suivantes pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement. La force de traînée est modélisée à l'aide de l'expression (1.30) fournie par Ishii & Zuber [58]. La masse ajoutée de Zuber [139] (1.37) est utilisée dans l'hypothèse de bulles sphériques, soit avec un coefficient de masse ajoutée $C_A = 0.5$. La force de lift est prise en compte selon l'expression (1.32) de Tomiyama [124] avec un coefficient de lift simplifié $C_L = 0.5$.

Pour ce qui est des conditions aux limites, les parois latérales sont définies comme des murs, avec une condition de non-glissement pour la phase gaz et de glissement pour le liquide. La condition de sortie est une condition de Dirichlet sur la pression. Pour les conditions limites en entrée de la colonne de bulles, les vitesses d'entrée sont fixées. L'entrée est modélisée par une zone de dimension 3×3 cm, soit respectivement 9 et 36 faces de bords pour les deux maillages. La vitesse d'entrée est calculée à partir de la vitesse superficielle du gaz mesurée expérimentalement (3.11).

$$\mathbf{U}_{dg,\text{ entrée}} = \frac{\mathbf{U}_{dg,\text{ superficielle}} \times \mathscr{A}_{\text{colonne}}}{\alpha_{\text{ entrée}} \mathscr{A}_{\text{entrée}}} \tag{3.11}$$

Ce qui pour les dimensions de l'entrée modélisée avec une fraction volumique unitaire, fournit une vitesse du gaz de 5.0 $mm \cdot s^{-1}$.

Les simulations sont menées sur un temps physique de 400 s, le calcul des vitesses moyennes est démarré après les cent premières secondes de simulation.

5.3 Résultats

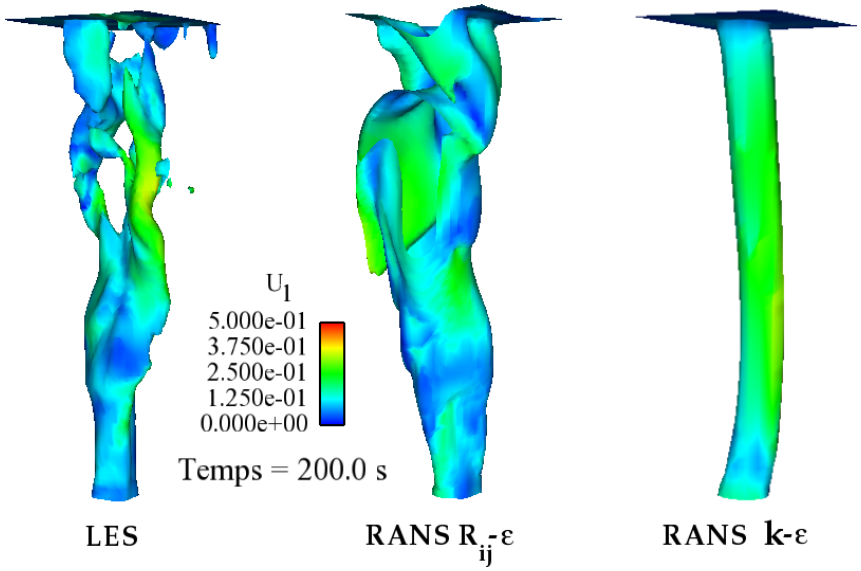


FIGURE 3.33 – *Représentation du contour du panache de bulles instantané, à $t = 150$ s, avec une modélisation LES (à gauche), URANS $R_{ij} - \epsilon$ (au centre), et URANS $k - \epsilon$ (à droite) de la turbulence de la phase liquide. Le contour représente l'isosurface $\alpha_{dg} = 0.05$ et est colorisé par la vitesse du liquide.*

La figure 3.33 présente un aperçu de la différence entre les trois colonnes de bulles simulées avec une modélisation LES, $R_{ij} - \epsilon$ et $k - \epsilon$ pour la turbulence. Au moins du point de vue des isosurfaces de α_{dg}, le panache instantané obtenu avec une modélisation URANS $R_{ij} - \epsilon$ est plus large qu'avec une modélisation LES, indiquant une plus grande dispersion latérale des bulles. La modélisation URANS $k - \epsilon$ qui ne présente plus que les larges fluctuations (*Cf.* figure 3.34) ne sera pas comparée par la suite. On conserve les vitesses instantanées $\mathbf{U}_{cl}, \mathbf{U}_{dg}$ et les vitesses moyennes $\overline{\mathbf{U}}_{cl}, \overline{\mathbf{U}}_{dg}$ des deux phases. Ce qui nous permet de calculer les fluctuations de la vitesse liquide $\mathbf{U}'_{cl} = \mathbf{U}_{cl} - \overline{\mathbf{U}}_{cl}$, ainsi que l'énergie cinétique turbulente (3.12) de la phase liquide.

$$TKE_{cl} = \frac{1}{2}\|\overline{\mathbf{U}'}_{cl}\|^2 \tag{3.12}$$

La figure 3.34 montre les fluctuations instantanées de la composante axiale de la vitesse du liquide expérimentales (à gauche, source [35]) et issues de simulations avec une modélisation URANS et LES de la turbulence. La comparaison avec la courbe expérimentale montre que les amplitudes des fluctuations semblent correctes, avec des oscillations comprise dans l'intervalle [-0.1,0.6] $m \cdot s^{-1}$ pour les mesures expérimentales et [-0.1,0.6] $m \cdot s^{-1}$ pour les résultats de simulations.

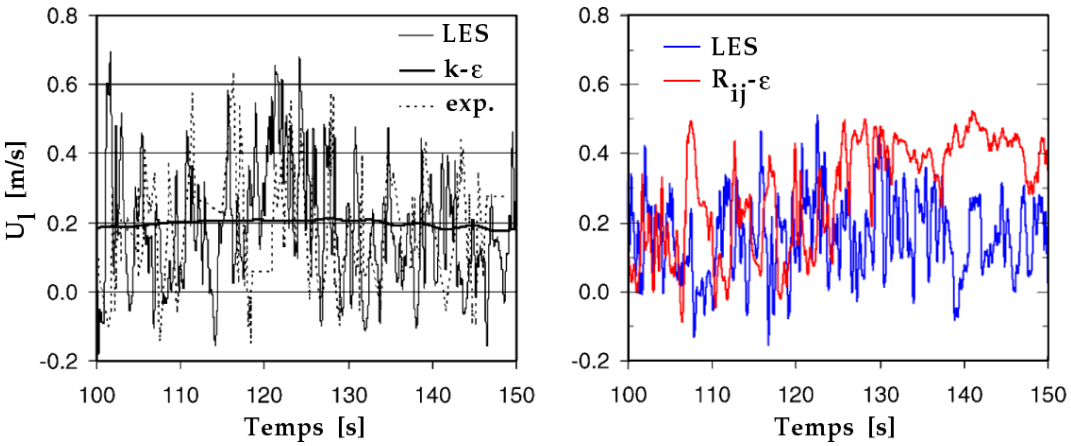


FIGURE 3.34 – *Vitesses instantanées au centre de la section à une hauteur de 25 cm entre 100 et 150 s. La figure de gauche, extraite de l'article de Deen et al. [35], présente les mesures expérimentales et les résultats de simulation avec une modélisation RANS $k-\epsilon$ et LES de la turbulence. La figure de droite présente nos résultats de simulation avec une modélisation RANS $R_{ij} - \epsilon$ et LES de la turbulence.*

Une étude par transformée de Fourier des amplitudes instantanées pour les résultats de la simulation montrent une différence entre les spectres obtenus en $R_{ij} - \epsilon$ et en LES. La figure 3.35 mets en évidence l'amplitude plus importante des pulsations supérieures à 5 $rad.s^{-1}$, pour la simulation avec une modélisation LES de la turbulence. Ce qui correspond aux périodes de fluctuations inférieures à la seconde. Cette différence d' amplitude reste néanmoins trop petite pour conclure à un défaut de modélisation.

On compare les vitesses moyennes des phases gaz et liquides (figure 3.36), les fluctuations sur les composantes latérales et axiales de la vitesse liquide (figure 3.37),

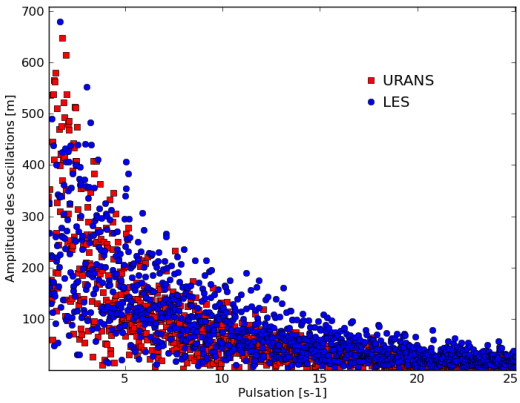


FIGURE 3.35 – *Transformées de Fourier des signaux obtenus pour une modélisation RANS $R_{ij} - \epsilon$ (en rouge) et LES de la turbulence (en bleu).*

ainsi que l'énergie cinétique turbulente dans le liquide (figure 3.38), à une hauteur de 25 *cm* au dessus de l'injection des bulles. Les travaux expérimentaux de Deen *et al.* [35] présentent des mesures de vitesses obtenues à l'aide de plusieurs techniques : Vélocimétrie Doppler à Laser (LDA) et Vélocimétrie par Images de Particules couplée à de la Fluorescence Induite par Laser (PIV/LIF). Leur publication ne mentionne pas les erreurs respectives de ces deux méthodes, nous prenons donc l'écart moyen entre les deux séries de mesures comme intervalle d'erreur, reporté sur la courbe à l'aide des barres d'erreurs. Pour les fluctuations et l'énergie cinétique turbulente, les incertitudes expérimentales ne sont pas fournies et ne seront donc pas renseignées dans les figures 3.37 et 3.38.

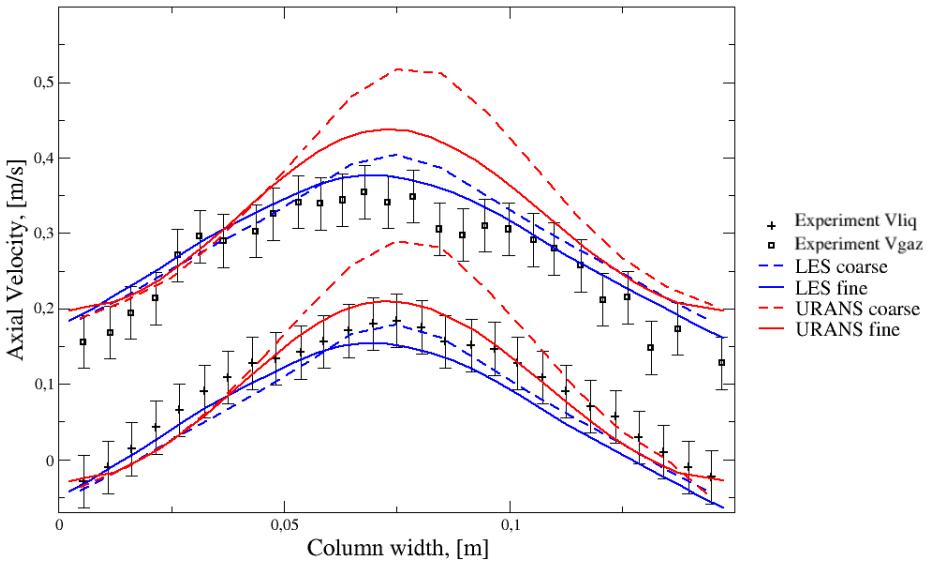


FIGURE 3.36 – *Comparaison des vitesses moyennes gaz et liquides calculées pour les différentes modélisations de la turbulence avec les mesures expérimentales de Deen et al. [33].*

Les vitesses moyennes des phases liquide et gaz, présentées en figure 3.36, montrent une sur-évaluation de la vitesse moyenne au centre de la colonne pour le cas de modélisation RANS $R_{ij} - \epsilon$ de la turbulence par rapport à la modélisation LES.

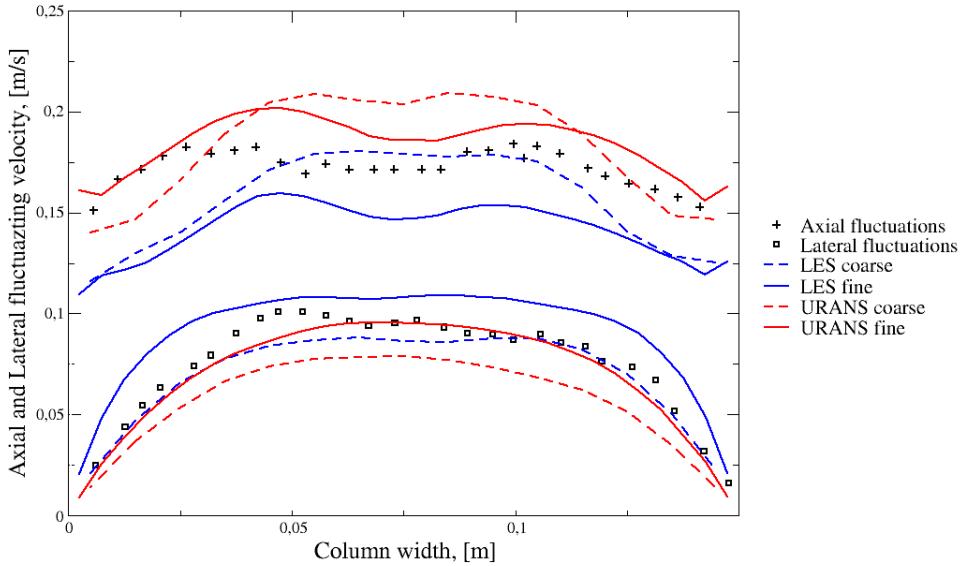


FIGURE 3.37 – *Comparaison entre les fluctuations des vitesses calculées pour les différents modèles de turbulence et les mesures expérimentales de Deen et al. [33].*

Les fluctuations des vitesses latérales et axiales (*Cf.* figure 3.37) du liquide, ainsi que l'énergie cinétique turbulente dans le liquide (*Cf.* figure 3.38) présentent des profils de forme similaire aux mesures expérimentales. On observe que les fluctuations axiales sont plus importantes avec la modélisation RANS $R_{ij} - \epsilon$ de la turbulence, tandis que les fluctuations latérales sont plus importantes avec la modélisation LES.

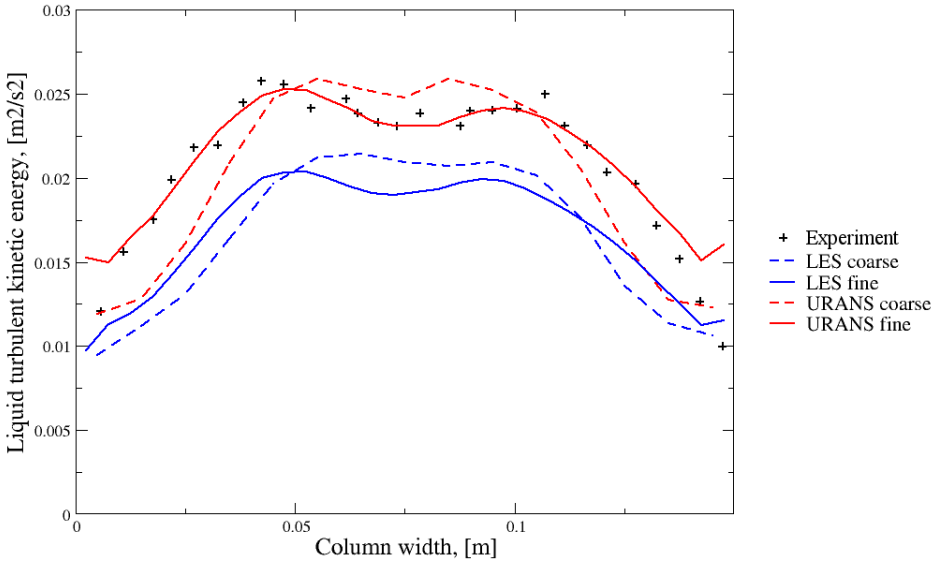


FIGURE 3.38 – *Comparaison entre l'énergie turbulente calculée pour les différents modèles de turbulence et les mesures expérimentales de Deen et al. [33].*

L'énergie cinétique turbulente calculée avec une modélisation RANS $R_{ij} - \epsilon$ est plus importante et plus proche des résultats expérimentaux qu'avec une modélisation LES. Ce dernier résultats peut être dû au fait que seul le modèle le plus simple ait été

utilisé pour la modélisation LES. Malgré des écarts avec les résultats expérimentaux, les deux modèles de turbulence permettent d'obtenir sur le maillage fin les bons profils pour la vitesse moyenne, les fluctuations et l'énergie cinétique turbulente.

5.4 Conclusion

La simulation de l'expérience de panache de bulle turbulent de Deen *et al.* [35] a permis une première comparaison entre une modélisation RANS $R_{ij} - \epsilon$ et une modélisation LES (modèle de Smagorinsky constant [113]). Les résultats présentés ci-dessus montrent qu'il n'est pas évident d'avoir une amélioration de la modélisation de la turbulence en passant d'une modélisation RANS à une modélisation LES. La modélisation LES pour des écoulements diphasiques est en effet dépendante de la taille des structures interfaciales, que celles-ci soient modélisées ou simulées.

Ce seul cas ne nous permet pas de conclure sur le choix d'une modélisation de la turbulence pour notre approche hybride. Il illustre en revanche la complexité de ce choix à venir, qui dépend des autres modèles physiques comme par exemple de la taille de coupure entre modélisation et simulation pour les interfaces diphasiques par exemple.

6 Vers le cas industriel - Conditions GV

Il n'existe pas à notre connaissance de données expérimentales concernant les mesures locales de diamètres ou de vitesses de bulles en écoulements eau-vapeur dans les conditions de fonctionnement des générateurs de vapeur. On vérifie dans cette section que le modèle de localisation d'interface utilisé permet de simuler des écoulements dans ces conditions de pression et température. Toujours sous l'hypothèse d'adiabaticité, on modélise des écoulements à bulles déformables où les phases liquide et gazeuse ont respectivement les propriétés physiques de l'eau liquide et de la vapeur sous une pression de 70 *bar* et une température de 560 K.

Afin de mieux appréhender les problèmes que l'on pourra être amené à rencontrer, un essai d'interaction d'une bulle avec un obstacle est conduit.

Enfin, en prévision des longs tubes et de modélisations avec des vitesses fluides initialement non nulles (conditions GV), un essai de condition périodique est mené.

6.1 Montée d'une bulle isolée

Les conditions moyennes en générateur de vapeur sont décrites en table 3.5.

On en déduit une indication sur la gamme de nombres de Reynolds, Morton et d'Eötvos que l'on va rencontrer dans des écoulements GV :

Pression (bar)	73	
Température (K)	560	
Tension de surface $(N \cdot m^{-1})$	17×10^{-3}	
	phase liquide	phase gazeuse
Densité $(kg \cdot m^{-3})$	734	38
Viscosité $(\mu Pa \cdot s)$	90	19

TABLE *3.5 – Conditions physiques en générateur de vapeur.*

$$Re_b = \frac{\rho_l d_b U_{rel}}{\mu_l} = \frac{734 \times [0.001 - 0.01][0.1 - 1]}{9 \times 10^{-5}} = [815 - 81500]$$

$$Mo = \frac{g\mu_l^4}{\rho_l \sigma^3} = \frac{9.81 \times (9 \times 10^{-5})^4}{734 \times (17 \times 10^{-3})^3} = 2.2 \cdot 10^{-5} \tag{3.13}$$

$$Eo = \frac{g d_b^2 \rho_l}{\sigma} = \frac{9.81 \times ([0.001 - 0.01])^2 \times 696}{17 \times 10^{-3}} = [0.402 - 40.2]$$

Un premier test est réalisé avec des bulles de diamètre 1 cm. Les résultats obtenus avec et sans compression sont présentés en figure 3.39. On obtient des vitesses relatives de l'ordre de 0.5 $m \cdot s^{-1}$, soit un couple $(Re, Eo) = (4 \cdot 10^4, 40)$. La classification de Clift *et al.* (figure 6), prévoit alors une bulle de type *spherical cap*.

On observe sur la figure ci-dessus l'effet d'une vitesse de la bulle plus importante, du fait de la valeur de la viscosité moins élevée de la phase liquide. L'importance relative de l'étape de compression artificielle est ici beaucoup plus grande que pour des bulles évoluant dans des liquides plus visqueux, comme le montre la grande différence entre les bulles avec ou sans étape de compression. Les vitesses plus importantes des bulles et la faible viscosité de la phase liquide provoquent une diffusion très importante de la bulle si l'étape de compression n'est pas utilisée.

6.2 Interaction d'une bulle avec un obstacle

Toujours dans l'optique d'une modélisation d'écoulements en générateurs de vapeurs, la capacité du modèle à simuler une interaction entre un obstacle et une bulle est testée. Dans l'environnement du circuit secondaire en générateur de vapeur, on rencontrera des obstacles de petite dimension lors du passage des grilles de maintient ainsi que le faisceau de tube qui constitue un réseau d'obstacles de l'ordre du centimètre.

Des tests de faisabilité numérique sont menés pour une bulle de diamètre 1 cm rencontrant deux obstacles de dimensions différents : 10×1 mm et 10×5 mm

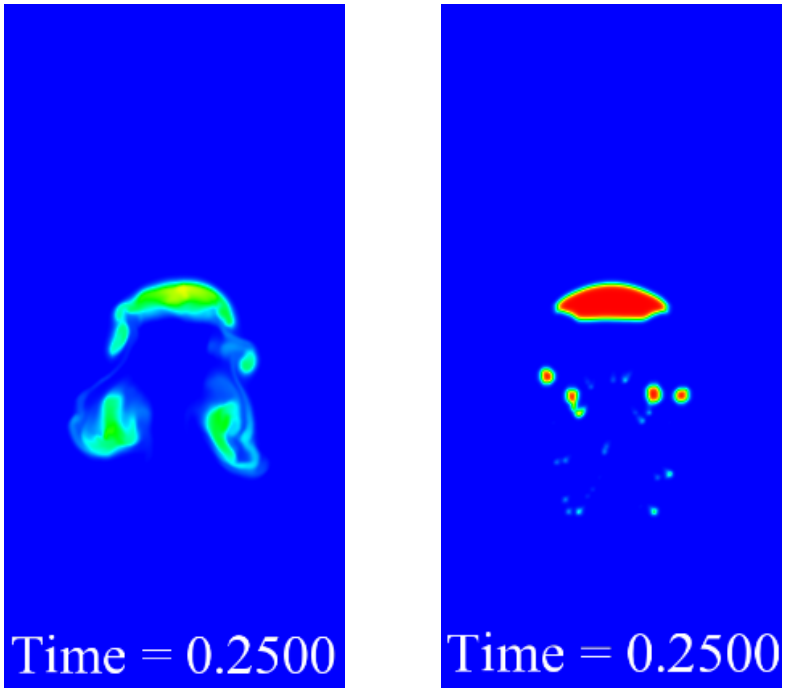


FIGURE 3.39 – *Montée de bulle (diamètre 1 cm) sans compression artificielle de l'interface (à gauche) et avec le modèle complet (à droite) à $t = 0.25$ s.*

de large (*Cf.* figure 3.40). La grille utilisée pour le maillage est cubique, avec un pas de discrétisation spatiale de 0.5 mm. On constate que la bulle est affectée par l'obstacle de 5 mm représenté par 10 cellules de large, entraînant une fragmentation de la bulle, tandis que l'obstacle de 2 cellules de largeur (moins épais que l'interface) ne fait que traverser la bulle.

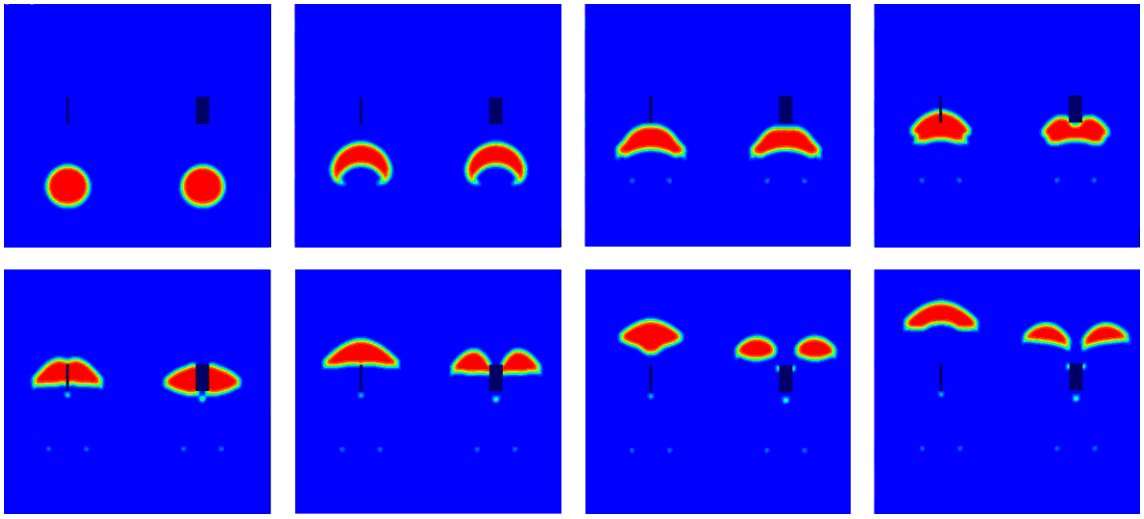


FIGURE 3.40 – *Interaction d'une bulle avec un obstacle de largeur 1 mm (à gauche) et de largeur 5 mm (à droite). L'intervalle de temps entre deux images est de 0.05 s.*

Première conclusion : pour le modèle de large bulle, non seulement, il faudra

mailler le domaine en fonction de la taille des bulles que l'on souhaite simuler et non plus modéliser, mais aussi de celle des obstacles avec lesquels ces bulles sont susceptibles d'interagir (grilles de maintient dans le GV).

De plus, on n'a pas modélisé ici la couche limite sur l'obstacle. Une réflexion sur la mouillabilité et la prise en compte de la ligne triple pourra être importante dans l'optique d'un cas en générateurs de vapeur. Sur la figure 3.40, il semble que les conditions de paroi sans glissement utilisées aient un effet implicite de modélisation non mouillant.

6.3 Conditions aux limites périodiques

Le pré-processeur de NEPTUNE_CFD permet de préparer des maillages avec des parois périodiques. La principale difficulté d'utilisation de tels maillages est la perte des conditions d'entrée et de sortie, c'est-à-dire des conditions de Dirichlet sur la pression notamment.

Il faut ajouter un terme source $\mathbf{S}_k$ dans l'équation de quantité de mouvement. Pour la continuité de la pression, nécessaire au bon calcul des gradients dans les cellules de la paroi périodique, l'idée est de compenser le gradient de pression hydrostatique. On ramène l'équation de quantité de mouvement à :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k \mathbf{U}_k) = \alpha_k \nabla \mathbb{T}_k - \alpha_k \nabla P + \alpha_k \rho_k \mathbf{g} + \sum_{p \neq k} \mathbf{M}_{p \to k} + \alpha_k \mathbf{S}_k \tag{3.14}$$

avec

$$\mathbf{S}_k = \frac{\iiint_\Omega \sum (\alpha_p \rho_p)\, \mathbf{g} d\Omega}{\iiint_\Omega d\Omega} \tag{3.15}$$

L'équilibre hydrostatique est donc compensé sur le domaine ce qui permet de s'affranchir de la discontinuité de pression sur l'axe vertical.

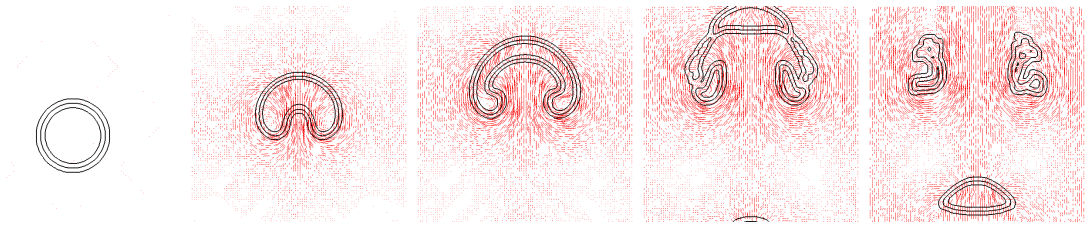


FIGURE 3.41 – *Montée de bulle (diamètre 15 mm) dans une boîte périodique de dimension 5 cm^2. Les lignes de niveau de taux de vide $\alpha = 0.1,\ 0.5$ et 0.9 sont représentées en noir. Les vecteurs vitesses sont représentés en rouge.*

Le recours à une boîte périodique permet de s'affranchir de maillage très importants pour modéliser des écoulements sur de longues distances. Cet outil est donc potentiellement très utile pour la mise en œuvre de tests rapides.

6.4 Conclusion

Ces tests de faisabilité sont de bon augure pour notre démarche vers une modélisation à deux échelles avec des petites bulles modélisées comme une phase dispersée,

et les plus grosses simulées pour suivre avec précision leurs déformations et interactions avec les divers obstacles de la géométrie, à l'exemple des grilles de maintient du faisceau de tube dans le générateur de vapeur.

7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une comparaison entre les simulations numériques utilisant notre modèle de suivi de l'interface des bulles déformées et des expériences. Nous avons observé un bon accord pour les deux cas du benchmark de Hysing *et al.* [54], et ce malgré la différence importante entre notre approche eulérienne diphasique et l'approche mono-fluide avec une localisation de l'interface à l'aide d'une fonction *level-set* ou une méthode avec marqueurs d'interfaces utilisées par Hysing *et al.* . Les expériences de montées de bulles dans un liquide au repos telle que celle de Bhaga & Weber [13] ou de Raymond & Rosant [104] ont permis de valider notre approche de localisation de l'interface, avec des écarts sur les vitesses et les formes des bulles inférieurs à 25%.

La simulation du phénomène de coalescence locale donne de très bons résultats, notamment par rapport à l'expérience de Brereton & Korotney [19]. Ce résultat important valide l'utilisation de notre méthode pour des cas présentant une fraction volumique élevée, où les phénomènes de coalescence peuvent être nombreux.

L'expérience de Deen *et al.* [35] permet de tester les différences entre l'approche URANS et une approche LES pour la modélisation de la turbulence. Ces résultats seuls ne permettent pas de trancher pour le choix de la méthode, mais notre approche complète à trois champs se prête fortement à l'utilisation de la LES, étant donné l'existence au sein du modèle d'une taille de coupure pour la résolution des interfaces des structures diphasiques, en dessous de laquelle les bulles sont modélisées à l'aide d'une approche dispersée.

Enfin, des essais ont été présentés dans les conditions physiques (densités, viscosités et tension de surface) des écoulements en générateur de vapeur. Faute de données expérimentales locales pour ces conditions, des tests de faisabilité ont été exposés.

Remarque : Il est intéressant de noter à ce stade que pour des calculs inertiels de montée de bulles, la répartition en temps CPU est la suivante : environ 90% du temps CPU est passé dans l'étape de résolution de l'incrément physique (résolution des équations de Navier-Stokes), et 10% du temps CPU est consacré à l'étape de compression artificielle, en moyenne par pas de temps. Cette répartition est valable quelque soit le nombre de dimensions du domaine de calcul, pour un seuil de compression artificielle de 10^{-3}, ce qui en pratique correspond à moins de 10 sous-itérations de compression par pas de temps.

L'ensemble de ces résultats nous permet de passer désormais à l'étape suivante dans l'élaboration de notre approche 2-phases, 3-champs. Le chapitre suivant traite donc directement du couplage entre l'approche exposée et validée jusqu'ici, et de l'approche dispersée du modèle classique à deux fluides.

Chapitre IV

Simulations à l'aide du modèle hybride multichamp

Au chapitre précédent, il a été question, suite à la vérification du modèle mis en place pour la localisation de l'interface des larges bulles sur des cas analytiques, de valider cette approche à l'aide de résultats expérimentaux. On s'est également rapproché des conditions physiques réelles de notre objectif final, c'est-à-dire de l'écoulement en générateur de vapeur. Faute de résultats expérimentaux dans ces conditions, la faisabilité numérique du suivi d'interface a été éprouvée.

Dans le présent chapitre, notre démarche consiste à coupler ce modèle de suivi d'interface avec le modèle de phase dispersée. Dans un premier temps, on s'intéresse à la réalisation numérique d'un calcul multichamps, sans termes de transfert. Puis on introduira progressivement le transfert de champ à l'interface et les termes de création, respectivement du champ gaz continu et du champ gaz dispersé. On s'attellera enfin à un début de validation de l'approche hybride complète sur des cas expérimentaux.

1 Cas de démonstration

Ce tout premier cas permet de vérifier que numériquement parlant, la cohabitation des deux approches, dispersée et localisée, est effective. Pour chaque champ on résout une équation de bilan de masse et une équation de quantité de mouvement. On simule l'ascension d'une large bulle (diamètre 1 cm) dans un mélange d'eau et de petites bulles dispersées (diamètre 1 mm). L'ensemble possède initialement une vitesse d'ascension de 2.5 $m \cdot s^{-1}$. Le domaine de calcul est un plan de dimension 5×10 cm, maillé par une grille de 100×200 cellules.

Une première constatation est qu'il n'est pas trivial d'avoir la présence de trois champs coexistants dans les cellules proches de l'interface où l'on applique l'étape de compression artificielle. Il apparaît donc nécessaire d'avoir un modèle de coalescence/rebond pour les bulles dispersées entrant dans les cellules contenant l'interface. Dans un premier temps, seule la coalescence est implémentée, mais un modèle com-

plet permettant le rebond pourra être ajouté. Le modèle de coalescence à l'interface consiste à transférer toute fraction volumique de gaz dispersé qui entrerait dans les larges bulles (région où $\alpha_{cg} \geq 0.5$) vers le champ continu gaz.

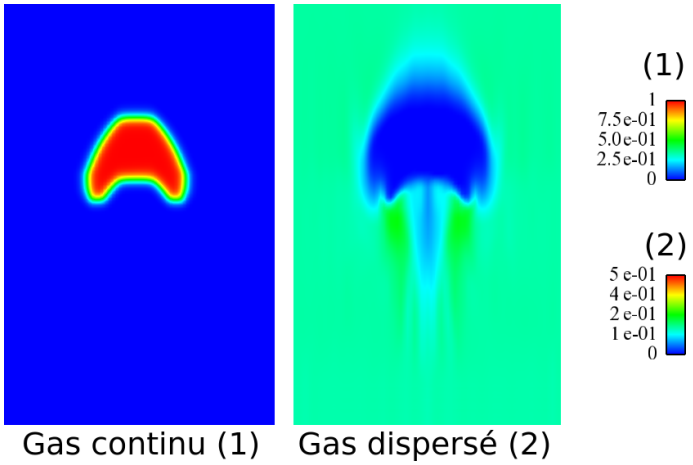


FIGURE 4.1 – *Observation de la fraction volumique pour le gaz continu (à gauche) et du gaz dispersé (à droite) après* 0.5 *s d'ascension.*

La figure 4.1 montre les fractions volumiques respectives du gaz continu (à gauche) et du gaz dispersé (à droite) après 0.5 *s* d'ascension.

Afin d'avoir un point de comparaison pour ce premier test de faisabilité, on simule l'écoulement d'un mélange diphasique autour d'un cylindre solide dont la position est fixe. Le même maillage est utilisé. Le mélange diphasique a les même propriétés que la phase dispersée précédente : diamètre des bulles dispersées de 1 *mm* et vitesse d'ascension du mélange provenant de la vitesse relative de la simulation précédente entre la large bulle et le mélange diphasique. Malgré les différences entre les deux simulations provenant essentiellement du fait que la large bulle se déforme au cours de son ascension, ce qui n'est évidemment pas le cas du cylindre, on peut observer deux effets communs :

- ▷ Une recirculation du champ dispersé en aval de l'obstacle (large bulle ou cylindre) ;
- ▷ Une absence de bulles en amont de l'obstacle.

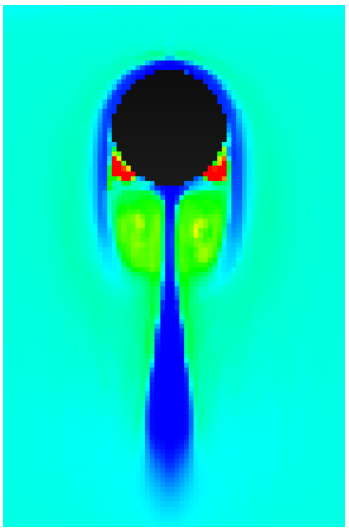


FIGURE 4.2 – *Écoulement d'un mélange diphasique eau-bulles dispersées* ($\alpha_{dg} = 0.2$) *autour d'un cylindre.*

L'absence de bulles dispersées en amont de l'obstacle étant observé avec le cylindre solide, on ne peut donc pas imputer le modèle de coalescence à l'interface. Les bulles se concentrent dans les zones dépressionnaires et inversement leur taux de présence est plus faible dans les zones de surpression, par exemple, en amont de l'obstacle. Ce premier test est donc tout à fait encourageant sur l'utilisation du modèle hybride à trois champs, du moins du point de vue de la faisabilité numérique.

2 De l'approche dispersée vers le continu

Comme nous l'avons énoncé au paragraphe précédent, nous allons maintenant nous intéresser à la mise en place des différents termes d'échanges pour l'implémentation d'un modèle à trois champs. L'approche hybride multiphasique proposée est d'abord testée pour un jet de bulles dispersées impactant une surface libre (*Cf.* figure 4.3). Le gaz dispersé est injecté à la base du domaine, le gaz continu peut sortir du domaine, afin de conserver une pression constante en haut du domaine. On conserve l'hypothèse précédente : la coalescence est la seule interaction existant lorsque ces deux champs entrent en collision. On testera cette coalescence seule dans un premier temps, avant d'ajouter le terme de création de larges bulles déformables.

On reprend ici le design du cas test de Hänsch *et al.* [46]. Le domaine de calcul est un pavé de dimensions $0.2 \times 0.5 \times 0.05\ m$. Initialement, la surface libre est située à une hauteur de $0.3\ m$. On injecte un débit de gaz dispersé de forme parabolique de $5 \times 10^{-4}\ m^3 \cdot s^{-1}$.

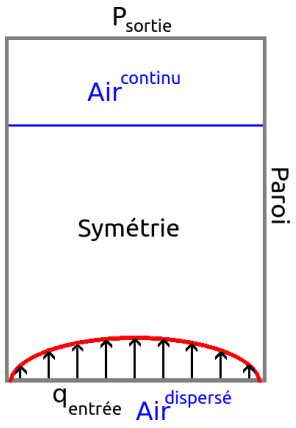


FIGURE 4.3 – *Schéma de principe et conditions aux limites du cas test proposé par Hänsch et al. pour un panache de bulles.*

2.1 Interaction d'un panache avec une interface

Ce premier cas permet d'éprouver les capacités du modèle de coalescence entre des bulles dispersées entrant en contact avec une surface libre. La figure 4.4 présente le taux de vide du champ dispersé auquel on superpose la position de l'interface entre le champ liquide et le champ gaz continu. Sur la courbe présentant les volumes respectifs de chaque champ gaz, on distingue deux régimes. Le premier, lorsque $t \in [0, 1]\ s$, est la phase d'ascension de la première injection de gaz. Le volume injecté de gaz dispersé (en rouge) croit linéairement avec le temps tandis qu'à l'inverse, la condition de Dirichlet sur la pression en haut de domaine "chasse" autant de gaz continu qu'il ne rentre de gaz dispersé. Après que l'injection de gaz dispersé ait atteint l'interface entre les deux champs continus, on atteint un second régime, avec une convergence dans le temps du volume de chaque champ dans le domaine de calcul. Ceci montre donc que le modèle de coalescence entre les deux champs gaz à l'interface permet d'obtenir un équilibre entre la masse dispersée injectée et le transfert du champ dispersée vers le champ continu à l'interface.

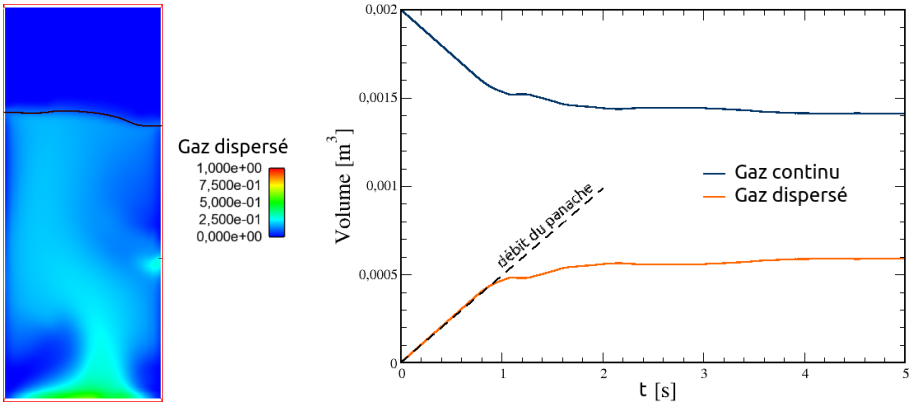


FIGURE 4.4 – *Superposition de la fraction volumique de gaz dispersé et de la position de la surface libre (à gauche) et évolution temporelle des volumes occupés par les champs continu et dispersé gaz (à droite). Le panache atteint l'interface à environ $t = 1$ s, lorsque la courbe du volume du gaz dispersé se sépare de celle du débit d'entrée du panache, marquant le début de la coalescence entre les deux champ gaz.*

2.2 Activation de la création de bulles localisées

On active alors le terme de transfert correspondant à la création de larges bulles (4.1) lorsque la fraction volumique du champ gaz dispersé dépasse la valeur critique $\alpha_{\text{crit}} = 0.3$ et que son gradient est supérieur à $\|\nabla\alpha_{\text{crit}}\| = 0.1/\Delta x$.

$$\Gamma_{\text{création } cg} = \alpha_{dg}\alpha_{cg}\frac{\rho_g}{\Delta t}C_{dg\to cg}H(\alpha_{dg} - \alpha_{\text{crit}})H(\nabla\alpha_{dg} - \nabla\alpha_{\text{crit}}) \tag{4.1}$$

où H est la fonction Heaviside, et $C_{dg\to cg}$ une constante. On rappelle que ces termes de transfert, définis au chapitre I, sont utilisés dans l'équation de bilan de masse mais aussi de quantité de mouvement de chacun des champs concernés, avec la relation :

$$\Gamma_{\text{création } cg} = -\Gamma_{\text{disparition } dg} \tag{4.2}$$

La figure 4.5 présente la fraction volumique de gaz dispersé et l'interface (iso-surface $\alpha_{cg} = 0.5$) du champ de gaz continu. Avec le critère de déclenchement du transfert du champ gaz dispersé vers le champ gaz continu exprimé en (4.1), les larges bulles sont initiées en bas du domaine, où le panache est le plus concentré en bulles, comme on pouvait le prévoir en figure 4.4. Celles-ci grossissent ensuite lors de leur ascension, du fait du terme de coalescence entre les deux champs gaz.

Il faut bien garder en tête qu'à ce stade, cette simulation ne prouve rien d'autre que la capacité du code et de la méthode implémentée à traiter des problèmes avec une double approche pour la phase gaz. Les petites bulles sont modélisées par une approche dispersée, et les structures de tailles plus importantes, jugées déformables sont traitées avec une approche d'interface localisée. On montre ici la réalisation d'un transfert entre les deux approches lorsque celles-ci coexistent localement, et la faisabilité de la création lors de la simulation, de structures résolues à partir du champ dispersé.

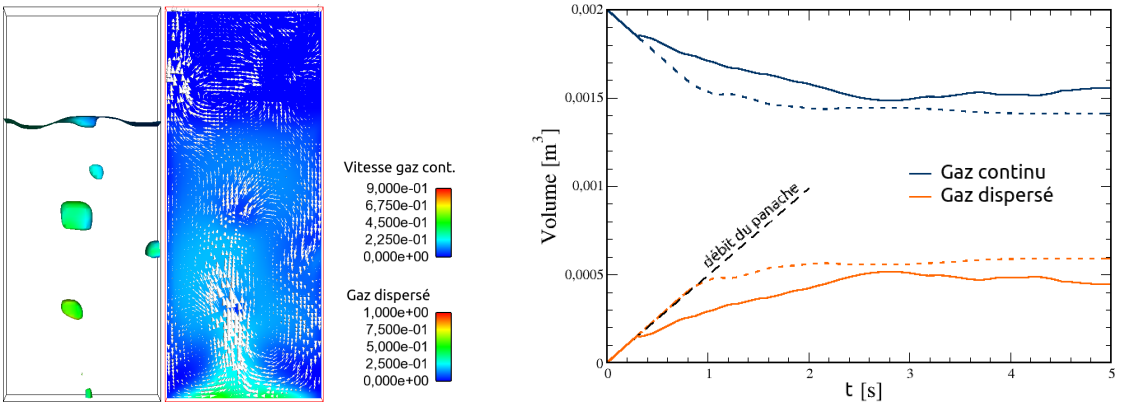


FIGURE 4.5 – *Sur la figure de gauche, on juxtapose l'isosurface $\alpha_{cg} = 0.5$, indiquant la position de la surface libre et des larges bulles, et la fraction volumique de gaz dispersé à laquelle on a superposé le champs de vitesse moyen de la phase gaz $((\alpha_{dg}\mathbf{U}_{dg} + \alpha_{cg}\mathbf{U}_{cg})/(\alpha_{dg} + \alpha_{cg}))$. Les courbes en pointillés et en traits pleins représentent respectivement les volumes des deux champs gaz calculés sans et avec terme de création de large bulle.*

3 De l'approche continue vers le dispersé

De manière analogue au paragraphe précédent, on étudie la faisabilité du terme de création du champ dispersé à partir du champ gaz continu, lorsque celui-ci est détecté comme sous-résolu.

3.1 Glissement interfacial

Dans un premier temps, l'idée est de modifier localement le terme de traînée, pour adapter le modèle aux régions où l'interface est sous résolue mais toujours localisée. On amorce donc la transition vers le modèle dispersé sans pour autant effectuer de transfert. Dans ces régions sous-résolues, l'objectif est d'ajouter un glissement interfacial de la même manière que pour une loi de glissement en paroi. La détection de la sous-résolution de l'interface est réalisée à l'aide du critère sur la valeur de la courbure et du gradient local de fraction volumique présenté au chapitre I.3.4, (4.3).

$$C^{Int}_{\text{résolution}} = \kappa \nabla \alpha_{cg} d\Omega \tag{4.3}$$

Le cas choisi pour cette étude est le cas numéro deux du benchmark de Hysing *et al.* [54] (*Cf.* chapitre III.1). La simulation de cette bulle en ascension dans un liquide au repos donnait des résultats dépendant fortement du raffinement du maillage. On se propose ici de tester si l'ajout d'un glissement interfacial aux endroits les moins résolus permettrait de rapprocher les résultats obtenus avec un maillage "moyen" et un maillage "fin", comportant respectivement 80×160 et 160×320 cellules. On détecte une interface comme sous-résolue pour une valeur du critère de résolution supérieur à $\Delta x/30$, seuil inférieur au seuil de transition de champs défini au chapitre I, qui permettra d'avoir une transition dans les zones de glissement. Ce qui pour les maillages utilisés donne des critères respectifs de 4×10^{-4} et 2×10^{-4} m. La figure 4.6 présente la bulle au bout de 3 s d'ascension. Le modèle de glissement

est implémenté et les vitesses de glissement sont calculées mais pas utilisées. Les isosurfaces $\alpha_{cg} = 0.1$, 0.5 et 0.9 sont tracées en noir. La norme de la vitesse du gaz est illustrée sur l'image de gauche, tandis que sur l'image de droite est représenté le critère de résolution (4.3). Le champ de vitesse de glissement calculé est schématisé par les vecteurs rouges.

On visualise que les zones détectées comme non résolues, où est calculée une vitesse de glissement, sont bien les zones de potentiels fractionnements. Les vitesses de glissement calculées sont faibles par rapport à la vitesse du gaz (2.5 ordres de grandeur). On applique alors ces vitesses de glissement pour les deux maillages.

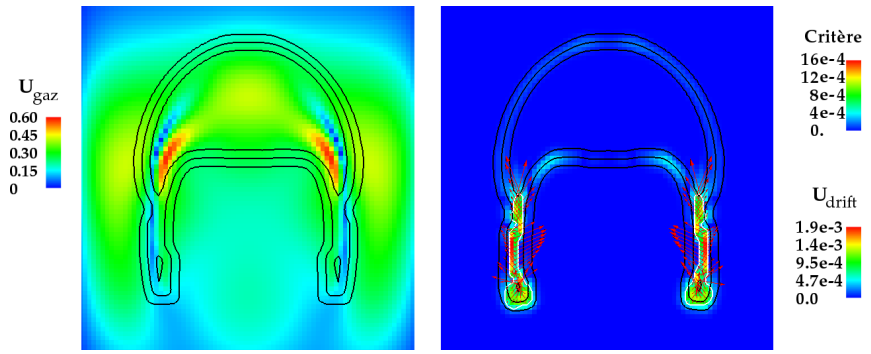


FIGURE 4.6 – *Représentation du principe de la détection d'interfaces mal résolues. L'image de gauche présente la vitesse du gaz, tandis que l'image de droite montre le critère de détection qui repère bien la "jupe" mal résolue de la bulle, ainsi que les vitesses de glissement pour les zones détectées.*

Les interfaces des bulles obtenues sont représentées en figure 4.7 par les isosurfaces $\alpha_{cg} = 0.1$, 0.5 et 0.9, tracées en noir. On constate que l'ajout d'un glissement interfacial réduit fortement les détachements des bulles pour les deux maillages.

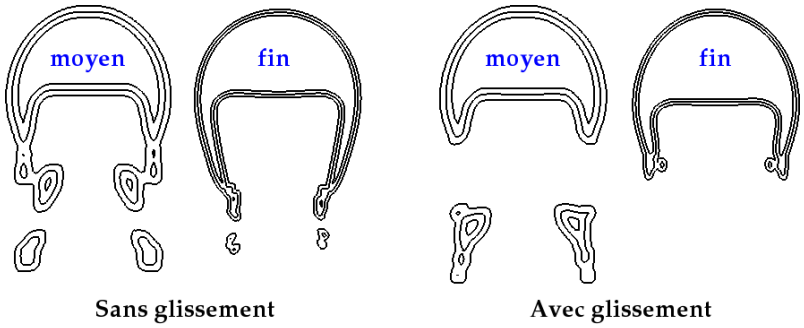


FIGURE 4.7 – *Isosurfaces $\alpha = 0.1$, 0.5 et 0.9 pour les maillages moyen et fin. A gauche sont présentés les résultats avec le modèle d'interface localisé présenté au chapitres précédents, à droite les résultats avec l'ajout d'un glissement pour les interfaces mal résolues.*

La détection des interfaces non résolues est donc concluante. De plus, il apparaît que l'ajout d'un glissement pour les interfaces non résolues peut être une solution pour éviter les *îlots* de gaz immobiles observés lors des simulations 2-phases, 2-champs avec fractionnement, comme par exemple le cas de l'interaction d'une bulle avec un obstacle (*Cf.* figure 4.8). Ces îlots, ayant une taille généralement inférieure à

4 cellules restent immobiles dans le domaine de calcul après leur création du fait des valeurs aberrantes de la courbure locale, et donc de la force de tension de surface qui se retrouve supérieure, de plusieurs ordres de grandeur, à toutes les autres forces, y compris de la force d'Archimède. Nous aborderons ce point en annexe A.

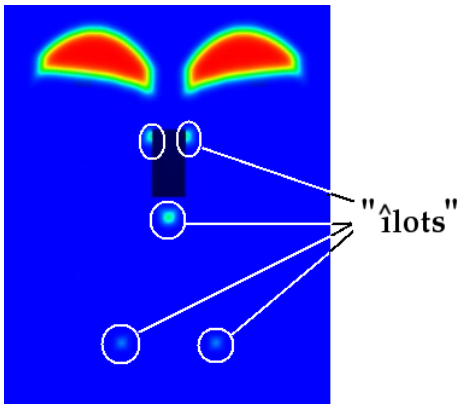


FIGURE 4.8 – *Observation d'îlots sous-résolus (cerclés en blanc) lors du fractionnement de la bulle.*

3.2 Jet impactant

On choisit là encore un cas test proposé par Hänsch *et al.* [46]. Il consiste en l'étude de l'entraînement d'air lors de l'impact d'un jet d'eau sur une surface libre. Le domaine est bidimensionnel, de dimensions $0.3 \times 0.5\ m$. Le jet entre au centre du bord supérieur du domaine, comme indiqué sur le schéma de principe du cas test en figure 4.9. La hauteur d'eau initiale est de $0.4\ m$. La vitesse d'entrée du jet est de $1.7\ m \cdot s^{-1}$, pour une largeur du jet de $16\ mm$. Le même débit est fixé comme condition limite de sortie en bas du domaine, afin d'assurer la conservation du volume de la phase liquide dans le domaine lui-même.

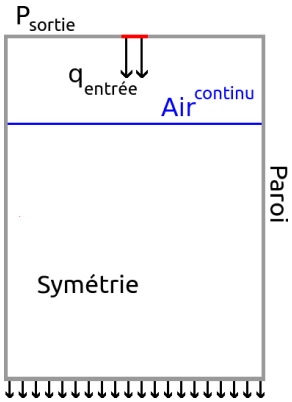


FIGURE 4.9 – *Schéma de principe et conditions aux limites du cas test proposé par Hänsch et al. pour un jet plongeant.*

3.2.1 Détection des zones sous résolues

Sur la figure 4.10, on observe les valeurs du seuil de détection (4.3) de la sous-résolution d'une interface localisée. Le calcul présenté n'utilise que l'approche à

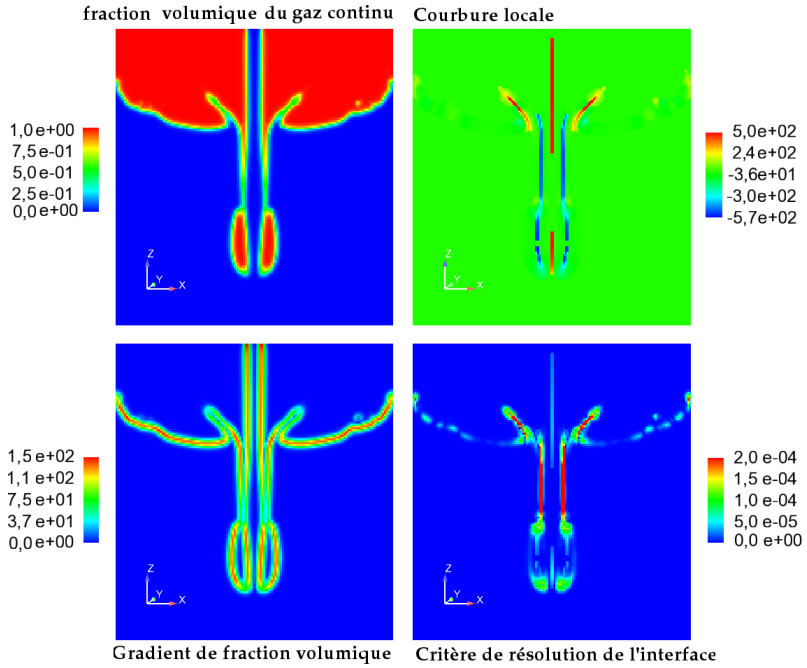


FIGURE 4.10 – *De gauche à droite et de haut en bas ; fraction volumique du champ gaz, courbe locale, norme du gradient de la fraction volumique et critère de résolution de l'interface.*

interface localisée pour la phase gazeuse. Pour le moment, le transfert vers une approche dispersée est calculé et observé, mais pas effectif.

Avec un pas du maillage de 2×10^{-3} m, le seuil de résolution selon notre critère $\Delta x/20$ défini au paragraphe I.4 est de 10^{-4} m. On constate sur la figure 4.10 que l'on détecte bien avec ce critère le film de gaz entre les bulles entraînées et la surface libre.

3.2.2 Résultats

Le transfert du champ gaz continu vers le champ gaz dispersé est alors appliqué. La figure figure 4.11 montre l'état de la simulation aux temps physiques $t = 0.2$ et 1.0 s. La phase gaz continu (en gris) est représentée par son interface ($\alpha_{cg} = 0.5$) (en blanc). La fraction volumique de la phase gaz dispersée est dépeinte par une échelle de couleur.

On reproduit l'entraînement d'une grosse bulle de forme allongée à l'impact du jet sur la surface libre. Pour avoir un point de comparaison, on reproduit la simulation avec une approche 2-phases, 2-champs avec une approche d'interface localisé pour toute la phase gaz. La comparaison au bout de 0.5 s de temps physique est présentée en figure 4.12. On constate que l'air n'est pas entraîné à la même profondeur dans l'eau. Le fait que l'interface localisée soit supposée résolue dans l'approche 2-phases, 2-champs utilisée, et donc sans glissement interfacial, impose au gaz une vitesse identique à celle du liquide. Dans l'approche hybride 2-phases, 3-champs, en revanche, les parties non résolues de l'interface vont être transférées au modèle de champ dispersé, qui possède ses propres lois de fermeture. Ce champs

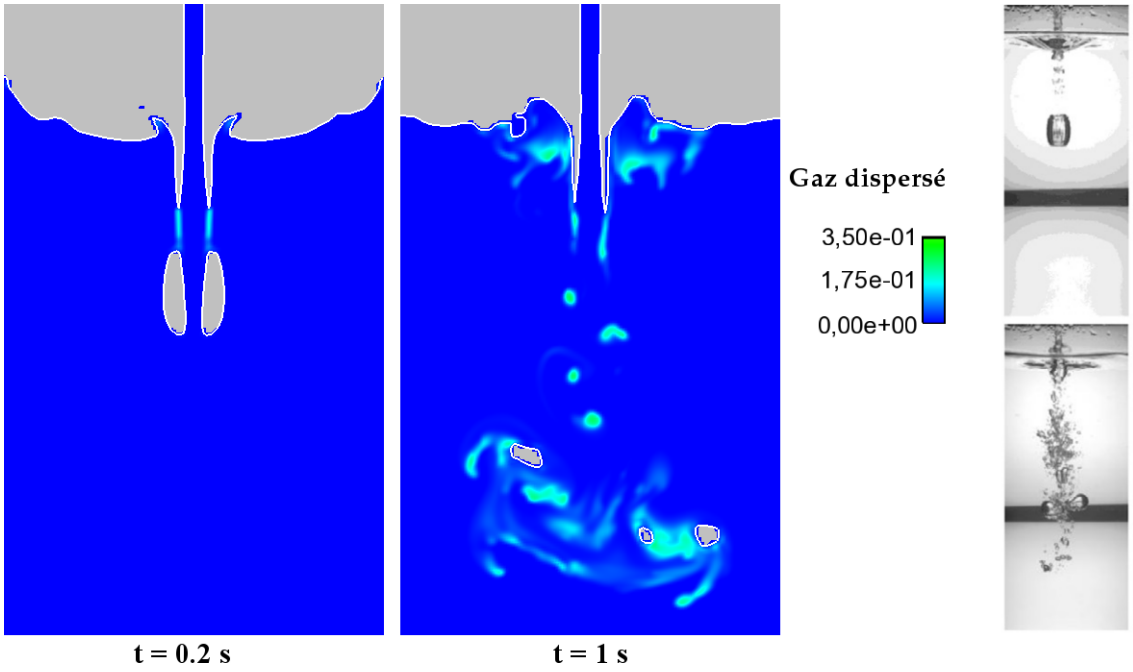


FIGURE 4.11 – *Simulation avec une approche hybride 2-phases, 3-champs de l'entrainement d'air par un jet plongeant dans une surface libre. Le gaz continu est en gris, le champ gaz dispersé est colorisé par sa fraction volumique. Source des photographies expérimentales : Zhu et al. [138].*

créé au cours de l'entraînement de gaz par le jet va alors ralentir ce dernier, du fait de la force de traînée et de la force de masse ajoutée qui vont absorber une partie de l'énergie cinétique du liquide.

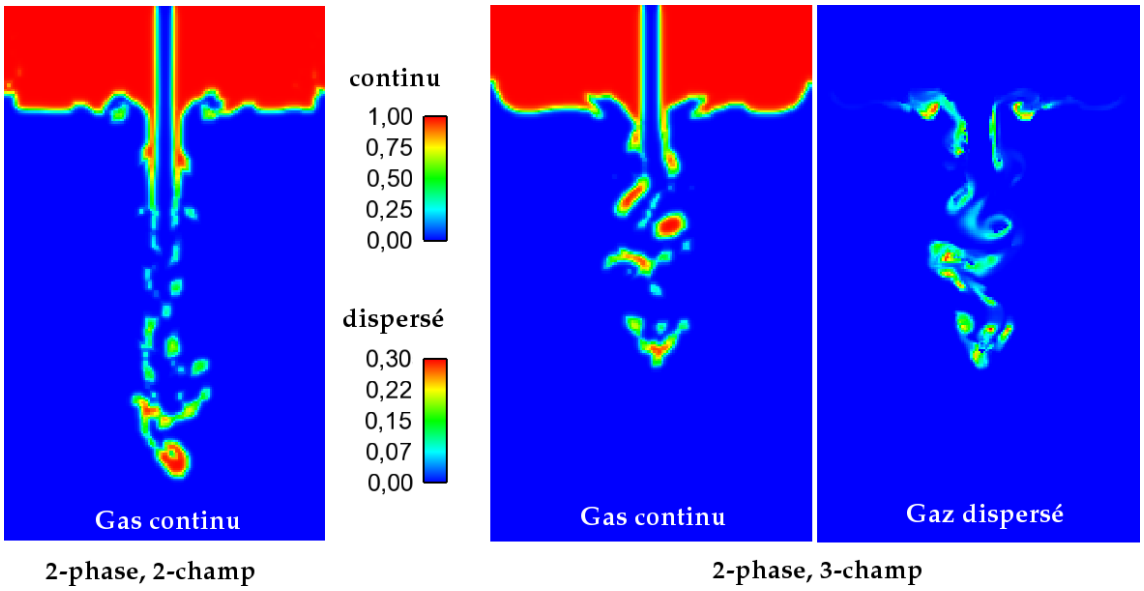


FIGURE 4.12 – *Comparaison de la modélisation avec deux et trois champs pour le cas du jet plongeant à $t = 0.5$ s.*

3.3 Conclusion

Dans cette partie, on vient de mettre en place une modélisation hybride 2-phases, 3-champs avec des termes de transferts effectifs entre les deux champs gaz. Le fait de modéliser un écoulement diphasique présentant une large gamme de taille d'interfaces, tels qu'un jet plongeant ou un panache de bulles interagissant avec une surface libre, a montré des différences par rapport à une modélisation classique à 2-phases, 2-champs.

Il faut maintenant tester cette nouvelle approche par rapport à des résultats expérimentaux, afin d'éprouver le paramétrage des termes de transferts entre champs gaz.

4 Comparaisons expérimentales

Afin de pouvoir discuter au mieux des avantages et des inconvénients de cette nouvelle approche, nous avons recherché des résultats expérimentaux présentant une large gamme de taille d'interface. Deux expériences sont apparues comme suffisamment bien décrites et renseignées tant au niveau du montage expérimental que des mesures réalisées : le panache de bulles turbulent de Castillejos [22], et le jet plongeant de Cummings & Chanson [31, 32]. Le problème majeur de ces expériences est qu'elles sont très compliquées à modéliser.

4.1 Jet de bulles - Castillejos

4.1.1 Description du montage expérimental

Le montage expérimental [22] schématisé en figure 4.14, est une colonne de bulles dans une cuve cylindrique de diamètre 0.5 m et de hauteur 0.5 m. Un injecteur de diamètre $d_{in} = 6.35\ mm$, centré en bas de colonne, permet l'entrée d'un débit volumique constant dans la cuve.

Les profils moyens de taux de vide et de vitesse de la phase gaz sont mesurés à neuf hauteurs différentes : 20, 40, 65, 100, 140, 190, 240, 290 et 350 mm de l'injecteur. Les bulles ont un diamètre qui peut aller jusqu'à 6 cm à l'injection et fragmentent pour atteindre moins de 5 mm à la surface de la cuve. Le jet se disperse pour atteindre en moyenne un diamètre de 0.16 m à la surface de la cuve. On peut constater sur les instantanés expérimentaux présentés en figure 4.14 la complexité des structures diphasiques de ce montage expérimental.

4.1.2 Modélisation numérique

On utilise deux maillages issus du découpage du contour de la cuve cylindrique dans un cube de $100 \times 100 \times 100$ et $200 \times 200 \times 200$. Ce qui nous donne un maillage "grossier" ($790,000$ cellules, $\Delta x = 0.5\ cm$) et un maillage "fin" ($6,325,600$ cellules, $\Delta x = 0.25\ cm$). On teste séparément sur cette expérience le modèle de localisation d'interface et le modèle de phase dispersée. Cela permet d'avoir un aperçu des limites

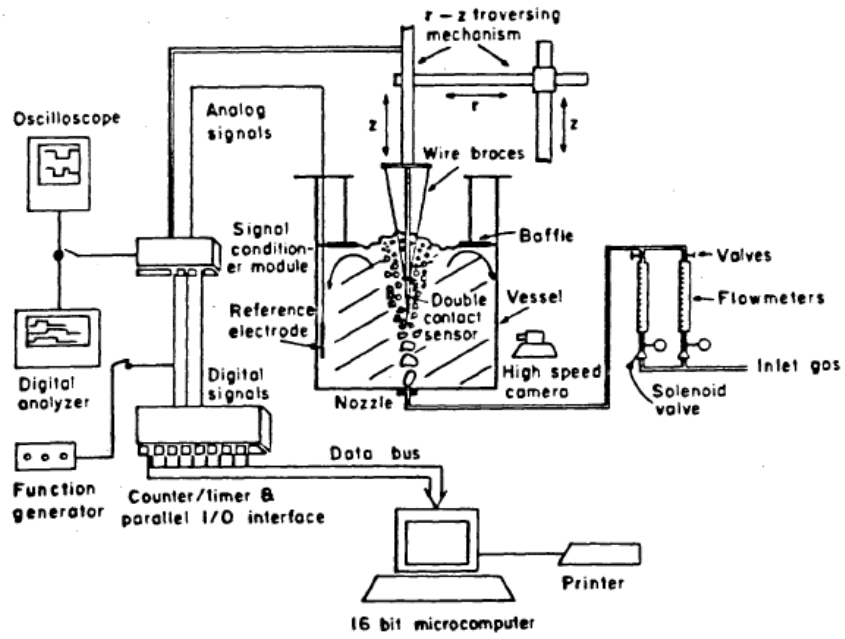


FIGURE 4.13 – *Schéma de principe de l'expérience de Castillejos (source [22]).*

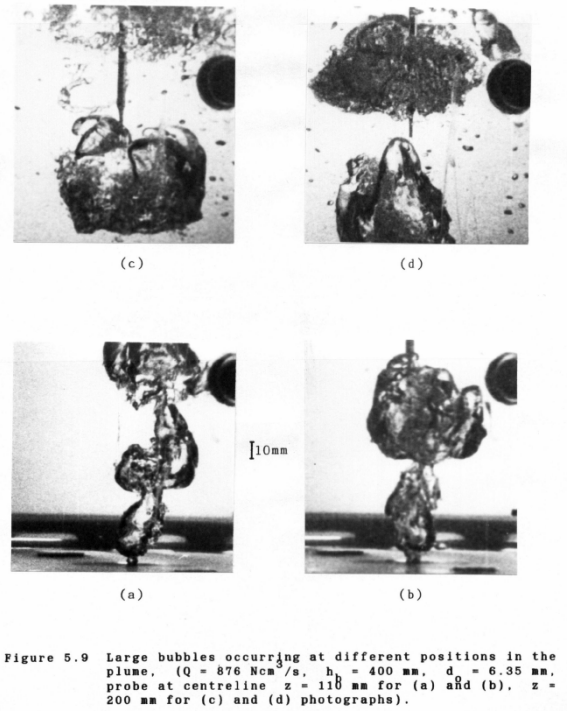


Figure 5.9 Large bubbles occurring at different positions in the plume, (Q = 876 Ncm³/s, h_0 = 400 mm, d_o = 6.35 mm, probe at centreline z = 110 mm for (a) and (b), z = 200 mm for (c) and (d) photographs).

FIGURE 4.14 – *Photographies de l'expérience de Castillejos (source [22]).*

de chaque modèle dans le cas d'un panache de bulles composé d'une large gamme de diamètres, avec d'importantes variations du taux de présence du gaz.

La turbulence est modélisée par l'approche LES de Smagorinsky présentée au chapitre précédent pour le cas du panache de Deen *et al.* [35]. Le pas de temps des

simulation est de 10^{-4} et 5×10^{-5} s respectivement sur le maillage grossier et fin. Les profils moyens de vitesse et de taux de vide sont calculés sur un temps physique de 10 s, après 1 s de calcul pour laisser le panache se mettre en place.

4.1.3 Résultats

La figure 4.15 présente les isosurfaces $\alpha = 0.5$ obtenues avec le maillage fin et la modélisation 2- phases, 2-champs avec localisation de l'interface (2 phases continues). On observe une importante fragmentation du panache de gaz après du premier tiers de la hauteur d'ascension. Le défaut de fragmentation dans la portion basse de la cuve par rapport aux images expérimentales (*Cf.* figure 4.14) est sans doute dû au manque de résolution spatiale au niveau de l'injection, dont le diamètre est modélisé par 2 cellules. On peut observer près de la surface libre des structures interfaciales très petites, de l'ordre de quelques mailles. Ces structures sont ici sous-résolues, on sait donc (*Cf.* chapitre III) que celles-ci sont mal modélisées.

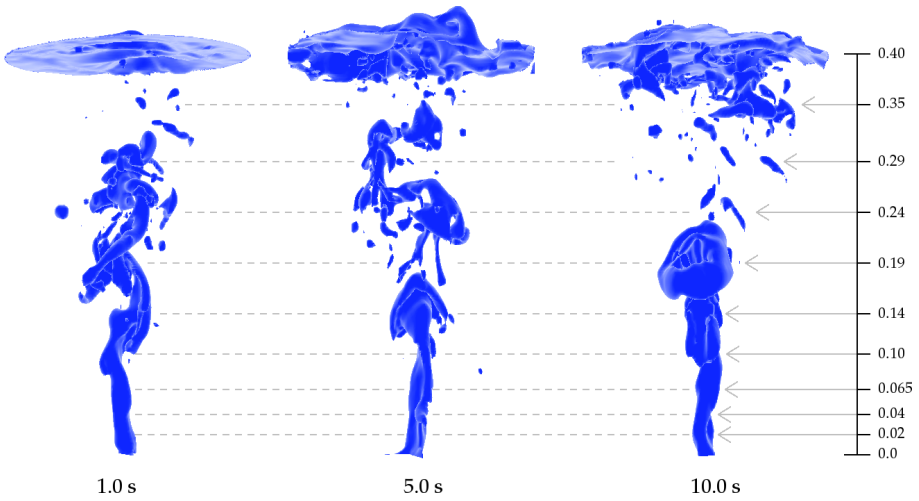


FIGURE 4.15 – *Isosurface $\alpha_{cg} = 0.5$ représentant la position du panache à $t = 1.0$, 5.0 et 10.0 s physiques pour le maillage fin avec une approche d'interface localisée entre le liquide et le gaz continu. Seul le cylindre central de rayon 0.08 m est représenté.*

Raffiner plus nécessiterait trop de ressources informatiques, le maillage fin contenant déjà plusieurs millions de cellules. Des maillages adaptés, plus raffinés au centre du domaine tels que ceux présentés en figure 4.16 ont étés testé sans succès, le calcul divergeant après quelques dixièmes de seconde physiques.

Les courbes présentées en figure 4.17 permettent de comparer les résultats de l'approche dispersée (en rouge) et de l'approche à interface localisée (en vert) pour le maillage grossier. Si les profils de taux de vide sont assez similaire près de l'injecteur (côtes 0.02 0.04 et 0.065 m), le panache modélisé par une approche dispersée ne se fractionne presque pas, ce qui donne un pic de taux de vide atteignant toujours des valeurs de 0.6 lors de l'impact avec la surface libre en haut de cuve ; le panache n'est pas assez dispersé. De même, les vitesses prédites par cette approche dispersée sont trop importantes et pas assez dispersées dans la direction radiale de la cuve.

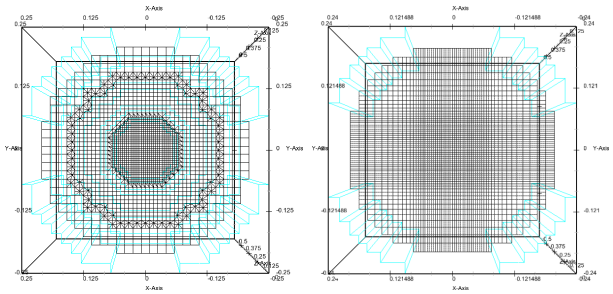


FIGURE 4.16 – *Maillages adaptés à la large géométrie de l'expérience, avec recollement à gauche et adaptation géométrique à droite.*

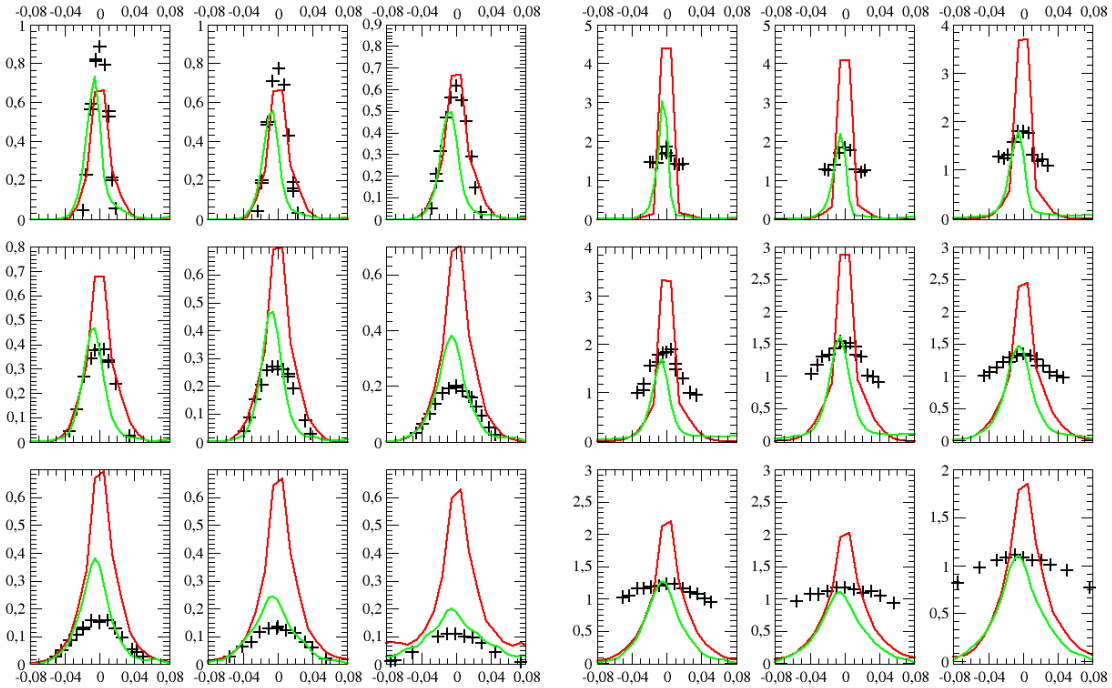


FIGURE 4.17 – *Comparaison des profils de taux de vide (à gauche) et de vitesses (à droite) moyens expérimentaux (croix) et simulation sur maillage* $100 \times 100 \times 100$*, de haut en bas et de gauche à droite, les hauteurs des profils sont respectivement de 0.02, 0.04, 0.065, 0.1, 0.14, 0.19, 0.24, 0.29 et* 0.35 m.

Les courbes présentées en figure 4.18 compare les résultats de simulation avec l'approche à interface localisée entre le maillage grossier en vert, et le maillage fin en bleu. Mise à part au niveau de l'injecteur où les profils de vitesse pour le maillage sont plus éloignés des résultats expérimentaux, les résultats obtenus sur le maillage fin sont plus prédictifs du comportement du panache réel. On observe que proche du panache (côtes 0.24, 0.29 et 0.35 m), les profils de vitesse et de taux de vide moyen pour le maillage fin ne sont pas tout à fait convergés. Le temps de simulation de 11 s physique avec un démarrage du calcul des moyennes au bout de 1 s n'est apparemment pas suffisant. Ce calcul sur le maillage fin prenant déjà une semaine sur un calculateur de 768 cœurs, nous n'avons pas eu le temps d'effectuer un second calcul pour obtenir des moyennes convergées en temps.

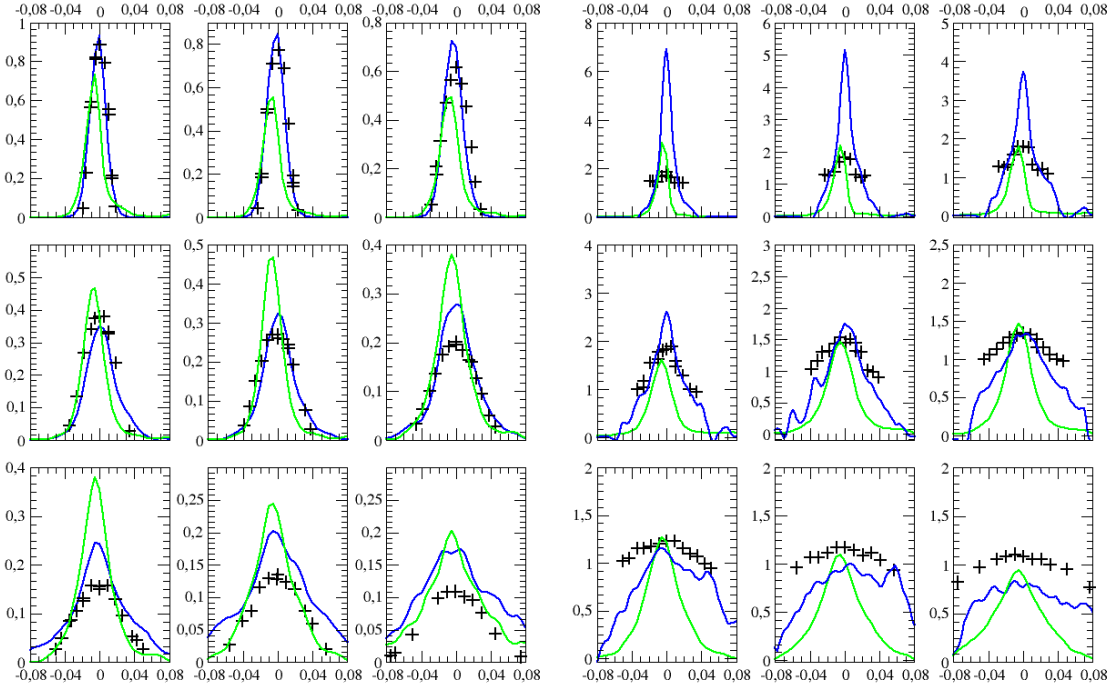


FIGURE 4.18 – *Comparaison des profils de taux de vide (à gauche) et de vitesses (à droite) moyens expérimentaux (croix) et simulation entre le maillage grossier (en vert) et le maillage fin (en bleu), de haut en bas et de gauche à droite, les hauteurs des profils sont respectivement de 0.02, 0.04, 0.065, 0.1, 0.14, 0.19, 0.24, 0.29 et* 0.35 *m.*

Parallèlement à cette dernière étude qui nécessite encore d'obtenir des résultats mieux convergés en temps, nous avons commencé à tester notre approche 2-phases, 3-champs sur ce cas expérimental. Ce type d'expérience est typiquement le genre de cas que nous souhaiterions pouvoir modéliser avec cette approche, étant donné la très large gamme de diamètre et la complexité de l'écoulement (*Cf.* figure 4.14). Il apparaît en effet beaucoup trop coûteux en temps CPU de résoudre toutes les échelles d'interfaces présentes, comme on peut s'en apercevoir avec le temps de calcul du cas précédent alors que nous ne simulons l'injecteur qu'avec 2×2 cellules.

La figure 4.19 présente les premiers résultats avec l'approche 2-phases, 3-champs au bout de 1 et 2 s de temps physique sur le maillage fin. Les isosurfaces $\alpha_{cg} = 0.5$ et $\alpha_{dg} = 0.2$ sont respectivement représentées en bleu et rouge.

Ces premiers résultats qualitatifs montrent un élargissement du panache lors de la transition du champ gaz continu au champ gaz dispersé. On n'observe plus sur la figure 4.19 d'interfaces sous-résolue (fragments bleus) ; elles ont bien toutes été au fur et à mesure de leur apparition transférées vers la phase dispersée.

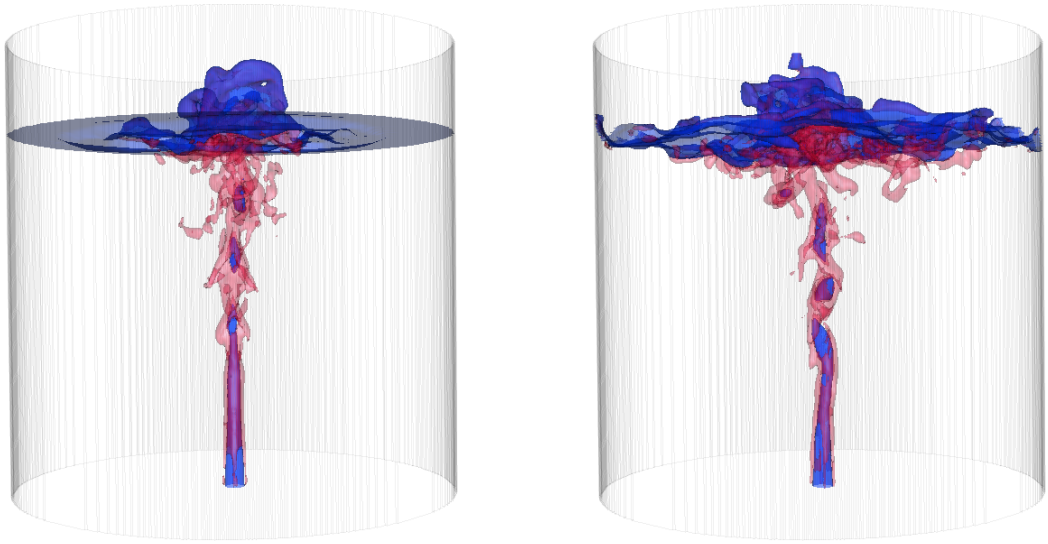


FIGURE 4.19 – *Isosurfaces $\alpha_{cg} = 0.5$ (en bleu) et $\alpha_{dg} = 0.2$ (en rouge) à $t = 1$ et 2 s pour une modélisation avec l'approche 2-phases, 3-champs complète sur le maillage fin.*

4.1.4 Conclusion

La modélisation de cette expérience a déjà été réalisée par Pigny & Coste [97, 98] avec une approche 2-phases, 2-champs. L'approche proposée alors présentait des lois de fermetures dépendantes de paramètres locaux tels que l'évaluation du taux de vide local afin de détecter la formation de poches et ainsi ajouter la prise en compte de la tension de surface par exemple. Dans notre approche, nous avons proposé d'utiliser des modélisations distinctes pour les poches et les bulles sphériques. Les résultats présentés montrent les limites de simulations avec une approche 2-phases, 2-champs ; l'approche dispersée n'est pas adaptée à la simulation de bulles dont le diamètre est vingt fois plus grand que la taille de maille (diamètre 6 cm pour un pas spatial de 0.25 mm), et une approche où toutes les interfaces sont simulées nécessite dans ce cas un maillage beaucoup plus raffiné.

C'est justement dans ce cas que notre approche hybride 2-phases, 3-champs présente tout son intérêt. En fonction des structures de l'écoulement diphasique que l'on souhaite résoudre, on recherche une taille de coupure pour les tailles caractéristiques des interfaces que l'on souhaite simuler et celles que l'on souhaite modéliser par une approche dispersée supposant leur forme sphérique ou ovoïde. On pallie donc le manque de raffinement spatial par une modélisation physique pour les bulles les plus petites. Un premier cas utilisant l'approche 2-phases, 3-champs montre des résultats visuels encourageants. Il faudrait pousser plus loin cette étude en modifiant les paramètres des transferts de masse entre les deux champs gaz qui pour le moment ont étés implémentés de manière très simple afin d'obtenir une première modélisation hybride fonctionnelle. Pour cela, des idées ont déjà été évoquées dans la description des modèles au chapitre I, et sont récapitulées dans le chapitre suivant, comme par exemple l'utilisation d'une approche polydispersée pour le champs gaz dispersé qui devrait permettre l'échange d'information sur le diamètre local lors du

transfert.

Un deuxième cas expérimental est testé avec notre approche hybride ; une expérience d'entraînement d'air par un jet pénétrant une surface libre. Ce cas, de dimensions plus raisonnables, et très bien renseigné du point de vue des mesures, pourrait permettre cette amélioration future du couplage entre champs gaz de l'approche hybride.

4.2 Jet pénétrant - Cummings & Chanson

4.2.1 Description du montage expérimental

Le montage expérimental de Cummings et Chanson [32] est un jet plongeant dans une cuve, entraînant une partie de l'air avec lui. La particularité de cette expérience de jet est sa géométrie plane, qui devrait permettre une simulation dans un domaine bidimensionnel. La zone d'entraînement des bulles est schématisée sur la figure 4.20.

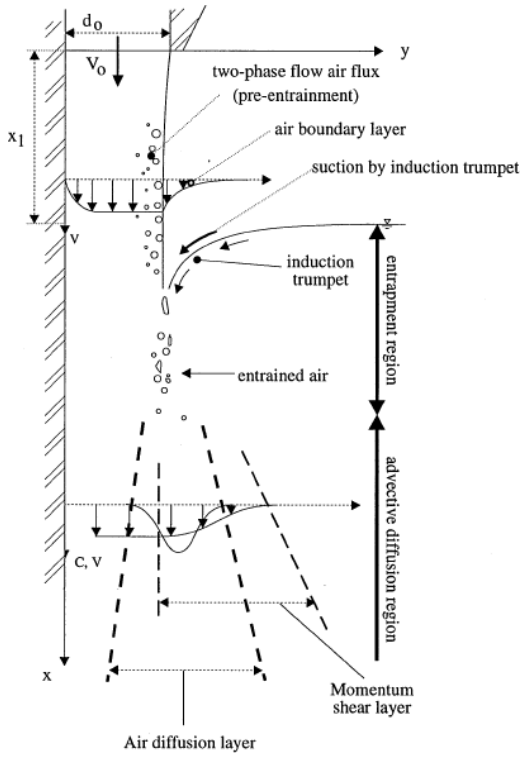


FIGURE 4.20 – *Schéma de principe de l'expérience de Cummings & Chanson (Source [32]).*

La cuve a une largeur de 0.30 m et contient de l'eau sur une profondeur de 1.8 m. Le jet, de section 0.269×0.012 m, est guidé par une plaque sur une longueur de 0.35 m, avec un angle de 89° par rapport à l'horizontale. L'entrée d'eau est située à 0.09 m au-dessus du niveau de la surface libre. Les vitesses d'injection vont de 0.3 à 9.0 $m \cdot s^{-1}$, on choisit le cas $U_{\text{entrée}} = 2.0\ m \cdot s^{-1}$. On dispose de mesures expérimentales de taux de vide moyens réalisés par une acquisition continue sur 10.0 s, et de mesures de vitesses moyennes, effectuées à l'aide d'une sonde pitot

(moyenne de quatre acquisition de 5.0 s) et par mesures de conductivité sur 10.0 s. Nous pourrons donc comparer nos résultats de simulations par rapport aux mesures à différentes côtes sous la surface : 0.01, 0.05, 0.10 et 0.20 m.

4.2.2 Modélisation numérique

Le domaine de calcul a pour dimensions $1.8 \times 1.0 \times 0.001$ m. Deux maillages sont utilisés, un premier maillage "grossier" avec un pas spatial $\Delta x = 0.002$ m, soit $450,000$ cellules, et un second "fin" avec $\Delta x = 0.001$ m soit $1,800,000$ cellules. La largeur du jet est donc simulée par 6 et 12 cellules respectivement. Un premier calcul est lancé sur un temps physique de 9 s, pour établir un régime d'entraînement d'air et permettre dans un second calcul lui aussi sur 9 s physiques, de calculer les moyennes de taux de vide et de vitesse. Cette simulation en deux temps est réalisée avec une approche 2-phases, 2-champs et notre approche hybride 2-phases, 3-champs. La turbulence est modélisée par une approche LES, avec une loi de paroi de type van Driest près des interfaces résolues. Une difficulté rencontrées lors de cette simulation est l'importante agitation de l'interface qui a priori n'existe pas dans le cas expérimental. Une première réponse à ce problème a été de modifier les conditions aux limites de sortie afin d'atténuer cette agitation, en particulier l'existence de vagues créées lors de l'impact entre le jet et la surface qui se réfléchissait à la paroi du domaine. Le principe de cette modification consiste, comme schématisé en figure 4.21, en une correction du débit sortant en fonction de la hauteur d'eau réelle constatée sur la paroi opposée au jet. En atténuant les fluctuations de la hauteur d'eau loin du jet, on corrige le fait de ne pas avoir un domaine de calcul aussi étendu que la cuve expérimentale.

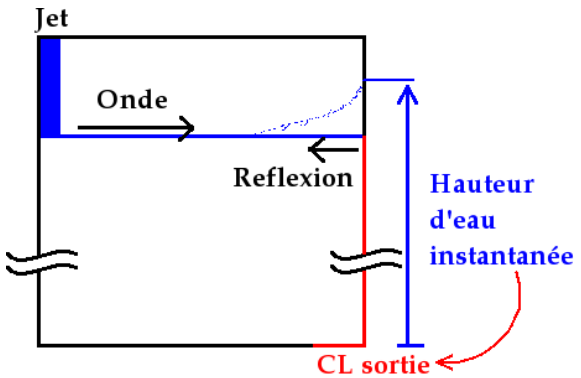


FIGURE 4.21 – *Schéma de principe de la correction du débit sortant pour amortir la propagation des vagues générées par l'impact du jet. La condition aux limites de sortie (condition sur le débit) est indiquée en rouge.*

4.2.3 Résultats

Sur la figure 4.22, on compare le taux de vide instantané du gaz pour une simulation avec l'approche 2-phases, 2-champs et 2-phases, 3-champs. Pour le cas 3-champs, le taux de vide du gaz continu est superposé au taux de vide du gaz dispersé lorsque

$\alpha_{cg} > 0.5$. On observe sur ces deux images que l'interface est encore très agitée malgré les précautions utilisées pour les conditions aux limites. On observe également quelques différences entre les deux approches. Par exemple la diffusion des bulles est plus importante dans le cas 2-phases, 2-champs (à gauche sur la figure).

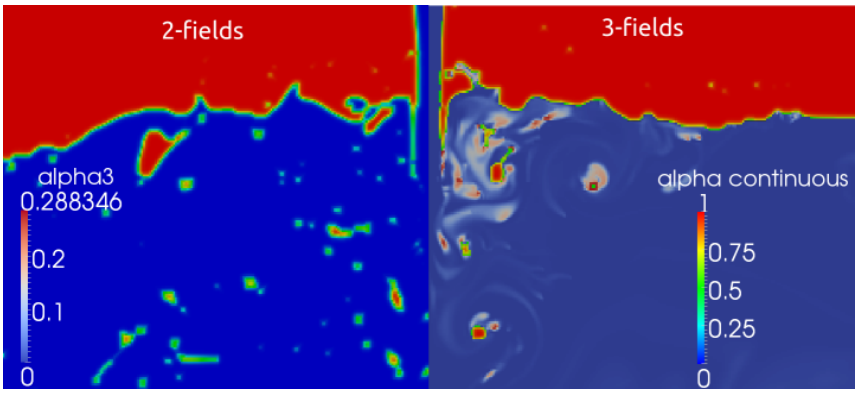


FIGURE 4.22 – *Comparaison des taux de vide instantanés pour les modélisations 2- (à gauche) et 3-champs (à droite) à $t = 18$ s. Les champs dispersé et continu sont superposés dans le cas 3-champs.*

Les figures 4.23 et 4.24 représentent respectivement les comparaisons pour la vitesse moyenne et le taux de vide moyen. Les vitesses moyennes sont en bon accord qualitatif avec les mesures expérimentales. On peut noter que la largeur de jet croît de manière plus importante sur les mesures expérimentales que dans les prédictions de la simulation. Les résultats présentent peu de différences entre la modélisation 2-phases, 2-champs et 2-phases, 3-champs.

Concernant le taux de vide moyen par contre, l'écart entre les résultats de simulation et les mesures expérimentales est assez net. La seule observation concluante est la profondeur de pénétration des bulles entrainées, puisque l'on retrouve la forte diminution du taux de vide moyen entre les profondeurs de 0.10 et 0.20 m. Les fluctuations importantes de l'interface dans la simulation perturbent fortement la moyenne du taux de vide, on aperçoit cet impact par l'existence d'un plateau de taux de vide moyen sur les courbes à 0.01, 0.05 et 0.10 m de profondeur. On peut noter que le taux de vide moyen dispersé (en pointillés bleus) qui n'est pas impacté directement par les fluctuations de l'interface se révèle être assez proche des mesures expérimentales.

4.3 Conclusion

La simulation de l'expérience de Cummings & Chanson montre des résultats intéressants malgré les difficultés numériques rencontrées. La vitesse du jet en particulier est en bon accord avec les mesures expérimentales. L'utilisation d'un modèle de turbulence pour la surface libre devrait permettre d'éviter les fortes fluctuations de l'interface qui ne sont pas observées expérimentalement. Les profils de taux de vide moyen seront alors très certainement plus réalistes.

Cette expérience qui présente des mesures de turbulence locale pourra sans doute permettre d'établir les termes de turbulence à la fois pour la surface libre et pour le

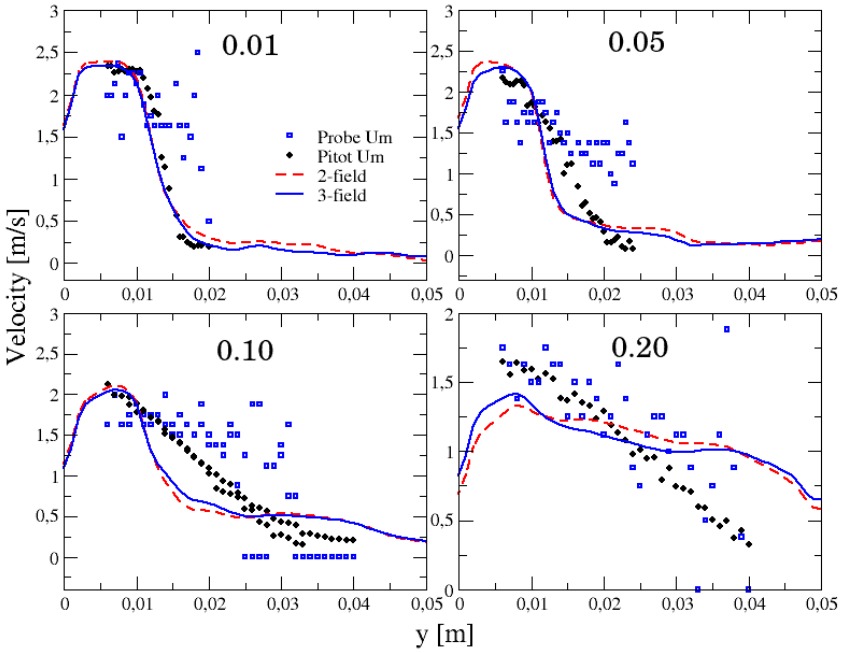


FIGURE 4.23 – *Comparaison entre les résultats de simulation et les mesures expérimentales de vitesses moyennes pour quatre profondeurs sous la surface : 0.01, 0.05, 0.10 et 0.20 m. Les pointillés rouges représentent la modélisation 2-champs, la ligne bleue la modélisation 3-champs.*

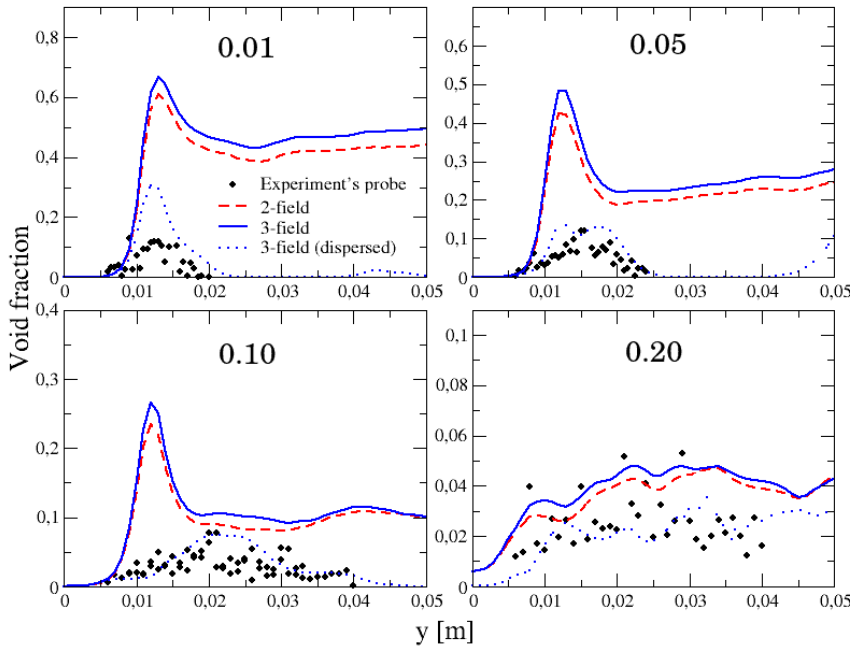


FIGURE 4.24 – *Comparaison entre les résultats de simulation et les mesures expérimentales de taux de vide moyens pour quatre profondeurs sous la surface : 0.01, 0.05, 0.10 et 0.20 m. Les pointillés rouges représentent la modélisation 2-champs, la ligne bleue la modélisation 3-champs, les pointillés bleu représentent la part du champ dispersé dans le mélange.*

mélange diphasique (couplage entre les bulles résolues ou non et la modélisation de la turbulence).

5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mis en œuvre de manière progressive l'approche hybride 2-phases, 3-champs. Un premier test numérique a permis de vérifier la faisabilité informatique du multichamps. Ensuite, au travers de tests simples, nous avons construit chaque terme de transfert de façon isolée dans un souci de vérification unitaire.

Au terme de cette mise en œuvre, nous avons présenté l'approche hybride 2-phases, 3-champs complète, munie des trois termes de transferts de masse identifiés au chapitre :

- ▷ Le terme d'échange de masse entre les champs gaz dispersé et continu coexistants localement
- ▷ Le terme de création de gaz dispersé par fractionnement du champ gaz continu
- ▷ Le terme de création de gaz continu par coalescence de champ gaz dispersé.

Cette approche, effective du point de vue numérique et méthodologique, comporte des critères de transition entre les différents champs de même nature physico-chimique, soit la phase gaz ici. La validation de ces critères, qui déclenchent les transferts de masse et de quantité de mouvement, est à poursuivre.

Deux démonstrations de simulations avec l'approche hybride 2-phases, 3-champs ont été présentées sur des cas expérimentaux de grandes dimensions (de l'ordre du mètre). Le cas de Castillejos [22] est aux limites des possibilités d'une modélisation complètes des interfaces liquide-gaz, et la simulation de toutes ces interfaces nécessiterait trop de ressources informatiques. L'approche hybride 2-phases, 3-champs proposée se place donc comme un compromis avec une simulation des interfaces déformées couplées à une modélisation physique des bulles sphériques ou ovoïdes. L'expérience de Cummings & Chanson [31, 32] présente elle aussi un large spectre de taille pour les structures interfaciales, allant de la surface libre à de très petites bulles sphériques entraînées par un jet plan impactant la surface. Le traitement de la surface libre avec notre approche semble montrer un manque de modélisation des termes de turbulence, sujet que nous avons discuté au paragraphe I.5.2.3. Une fois ce problème surmonté, cette expérience semble prometteuse pour établir un terme de transfert du champ gaz continu vers le champ gaz dispersé. Elle présente en effet une plus grande simplicité d'analyse que l'expérience de Castillejos qui est sans doute sensible à un plus grand nombre de paramètres (impact du raffinement en maillage au niveau de l'injecteur).

Conclusions et perspectives

Les régimes d'écoulements diphasiques apparaissant au cours de l'ébullition complète en tube vertical sont nombreux : de l'écoulement à bulles dispersées pendant la phase d'ébullition nucléée à un écoulement de gouttelettes en suspension dans une phase vapeur en passant par des régimes à poches ou annulaires. La simulation numérique de la transition entre de tels régimes est à l'heure actuelle un des plus importants challenge de l'étude des écoulements multiphasiques. Parmi toute les méthodes disponibles dans la littérature, l'utilisation de méthodes multi-échelle semble être l'une des plus prometteuses dans le cadre d'une utilisation industrielle.

L'approche présentée dans ces travaux propose de découper les deux phases liquide et vapeur en un système à quatre champs : liquide continu, liquide dispersé, vapeur continue et vapeur dispersée. Cette opération permet alors de modéliser de manière différente les champs dispersés et continus, en requérant en contrepartie l'implémentation de termes de couplages supplémentaires entre les champs appartenant à la même phase physico-chimique. Nous présentons ici un modèle 2-phases, 3-champs conservant une phase liquide continue, et une phase gazeuse pouvant être dispersée ou continue, avec une hypothèse d'écoulement adiabatique, qui permet dans un premier temps d'écarter les échanges de masses dus aux changements de phases. Le principe est d'utiliser la modélisation eulérienne à deux fluides pour phase dispersée disponible dans le code NEPTUNE_CFD pour les petites bulles peu déformées (sphériques ou ellipsoïdales) couplée à une méthode de localisation d'interface pour les larges bulles déformées. Les lois de fermetures utilisées pour chaque champ gaz sont donc très différentes. L'utilisation d'une approche dispersée pour les bulles sphériques ou ellipsoïdales, dont les lois de fermeture sont vérifiées et validées dans la littérature permet de limiter le raffinement en maillage. La localisation de l'interface des larges bulles déformées permet à l'inverse de s'affranchir de l'utilisation de corrélations pour des formes de bulles complexes ou de lois de fermetures dépendant du régime de l'écoulement.

Le premier chapitre présente les modèles utilisés. Après la description de la modélisation eulérienne à deux fluides et des lois de fermeture dédiées aux bulles dispersées dans le code NEPTUNE_CFD, nous présentons la méthode de localisation et de traitement de l'interface que nous avons implémentée et mise au point dans le

code. Les termes de couplage développés pour les transferts entre les deux champs gaz sont exprimés et discutés, avant d'évoquer la question de la modélisation de la turbulence avec une telle approche diphasique.

Une première partie de travail consiste à vérifier et valider la méthode de localisation d'interface. La vérification de l'acuité de la méthode est effectuée à l'aide de la simulation de cas dont la solution analytique est connue. Dans un premier temps, on présente ainsi la simulation de bulles statiques soumises à la seule force de tension de surface (mesures de pressions de Laplace), et de retour à l'équilibre de bulles perturbées. Dans un second temps, la simulation de cas expérimentaux de complexité croissante (montée de bulle dans un fluide visqueux, coalescence locale entre deux bulles, panaches de bulles, entraînement d'air par un jet plongeant), permet de construire une validation de la simulation des différents effets importants pour l'étude de régimes complexes telle que l'ébullition en générateur de vapeur. Ces études font l'objet des chapitres II et III.

Dans le chapitre IV, nous abordons la mise en place concrète de l'approche hybride multichamp au travers de cas tests simples permettant de construire chaque terme de transfert de manière isolée dans un souci de vérification unitaire. Au terme de cette mise en œuvre, nous avons présenté l'approche hybride 2-phases, 3-champs complète, munie des trois termes de transferts de masse identifiés au chapitre :

- ▷ Le terme d'échange de masse entre les champs gaz dispersé et continu coexistants localement
- ▷ Le terme de création de gaz dispersé par fractionnement du champ gaz continu
- ▷ Le terme de création de gaz continu par coalescence de champ gaz dispersé.

En fonction des structures de l'écoulement diphasique que l'on souhaite résoudre, on recherche une taille de coupure pour les tailles caractéristiques des interfaces que l'on souhaite simuler et celles que l'on souhaite modéliser par une approche dispersée sous l'hypothèse que leur forme soit sphérique ou ovoïde. On remplace donc un besoin de raffinement spatial par une modélisation physique pour les bulles de forme connues. Les premières perspectives de cette approche hybride 2-phases, 3-champs sont discutées au travers d'essai de simulation des expériences de Castillejos [22] et Cummings & Chanson [32]. Cette approche, effective du point de vue numérique et méthodologique, comporte des critères de transitions entre les différents champs gaz. La validation de ces critères, qui déclenchent les transferts de masse et de quantité de mouvement, doit être poursuivie.

Perspectives

Comme nous l'avons vu au cours de ces travaux, la mise en place de l'approche hybride multichamps 2-phases, 3-champs (qui pourra être étendue à 2-phases, 4-champs) ouvre la voie à de nombreuses études. Les présents résultats proposent une mise en place globale de l'approche, pour aboutir à une modélisation effective du point de vue méthodologique et numérique.

De futures études pourront se donner pour but l'utilisation d'une approche polydispersée pour le champ gaz dispersé, ainsi que le transfert d'information sur le diamètre local entre les champs gaz. Le transfert du champ dispersé vers le champ continu serait alors ciblé sur la classe contenant les plus grands diamètres, avec un critère de transition sans doute basé sur la fraction volumique et le diamètre plutôt que sur le gradient. Le critère ainsi que le transfert mis en place du champ continu vers le dispersé ne conserve pas non plus d'information sur le diamètre des bulles, l'approche simpliste d'un diamètre constant pour la phase dispersée ne le permettant pas. Dans l'idée d'utiliser une approche tenant compte du diamètre local à l'avenir, on peut imaginer transférer en plus de la masse une information sur le diamètre des bulles continues qui passent dans le champ dispersé. Celle-ci pourra être établie à partir de la courbure locale des fragments sous-résolus. Ce qui, avec une loi de coalescence/fractionnement pour la phase dispersé, que ce soit dans une approche polydispersée ou plus simplement une loi de transport de l'aire interfaciale, devrait permettre d'obtenir un diamètre plus réaliste.

Une autre idée qui n'a pas été explorée est d'appliquer un critère de transition non plus en local sur les cellules, mais sur un maillage plus grossier ou un stencil beaucoup plus large. Ces transformations, revenant à prendre une moyenne spatiale locale, devrait permettre de détecter la présence d'une poche avec une plus grande flexibilité que l'usage seul de gradients locaux (gradients qui ne vont chercher des informations que dans les cellules voisines, voire au voisinage étendu).

Comme on l'a vu au paragraphe I.5.2.3, la modélisation de la turbulence pour une approche couplant approche dispersée et localisation d'interface est un problème aujourd'hui non résolu. Il sera donc très utile d'approfondir notre compréhension des méchanismes d'interaction entre les interfaces et la turbulence. Les travaux de Larocque *et al.* [68], Liovic & Lakehal [73], Vincent *et al.* [134], ainsi que de Chesnel *et al.* [27] montrent l'interêt d'une recherche dans ce sens.

L'extension de cette approche à l'étude des surfaces libres est actuellement un travail en cours, dont les premières étapes sont présentées en annexe A. Dans la continuité de l'application de la méthode à un champ plus large de régimes d'écoulements diphasiques, l'objectif est la mise en place de l'approche hybride 2-phases, 4-champs avec l'ajout d'un champ pour les gouttes dispersées.

Enfin, ces travaux ayant comme objectif premier la modélisation des écoulements en générateur de vapeur, une des extensions à apporter à la présente approche est la résolution de l'équation de conservation de l'énergie.

Communications & visibilité

Au cours de cette thèse, différents travaux ont été présentés et confrontés aux avis de la communauté scientifique de la mécanique des fluides numériques et des écoulements multiphasiques. La mise en place du modèle dédié au suivi de l'interface des larges bulles présentée aux chapitre I, ainsi que son application aux montées de bulles dans un liquide visqueux ont fait l'objet d'une communication en conférence internationale :

MULTIFIELD HYBRID APPROACH FOR BUBBLE TO SLUG FLOWS
Denèfle, R., Mimouni, S., Caltagirone, J.-P., and Vincent, S.
In *Proceedings of 9th Advances in Fluid Mechanics 2012 : AFM'12*
(Split, Croatia, june 2012).

Dans le même esprit, l'application du modèle pour les larges bulles à la coalescence locale de deux bulles a fait l'objet d'un article, accepté en 2013 :

HYBRID MULTIFIELD METHOD APPLIED TO BUBBLE RISING AND COALESCENCE
Denèfle, R., Mimouni, S., Caltagirone, J.-P., and Vincent, S.
Int. Jr. of Computational Methods and Experimental Measurements
(accepted in 2013).

La difficulté de la simulation de cas complexes tels que le panache de bulles de Castillejos [22] a fait l'objet d'une communication en conférence européenne :

MULTIFIELD HYBRID APPROACH FOR TWO-PHASE FLOW MODELLING
Denèfle, R., Mimouni, S., Caltagirone, J.-P., and Vincent, S.
In *Proceedings of 9th European Fluid Mechanics Conference : EFMC'9*
(Rome, Italie, sept. 2012).

L'implémentation et le test de l'approche 2-phases, 3-champ couplé, a été exposé en conférence internationale ainsi que lors d'un colloque européen :

A NEW MULTIFIELD APPROACH FOR INTERMITTENT TWO-PHASE FLOW REGIMES MODELING
Denèfle, R., Mimouni, S., Caltagirone, J.-P., and Vincent, S.
In *Proceedings of 8th International Conference on Multiphase Flow : ICMF'8*
(Jeju, Korea, may 2013).

A MULTIFIELD HYBRID APPROACH FOR THE MODELING OF TWO-PHASE FLOW REGIME TRANSITIONS
Denèfle, R., Mimouni, S., Caltagirone, J.-P., and Vincent, S.
In *Proceedings of Euromech Colloquium 555*
(Bordeaux, France, aug. 2013).

De plus, le modèle implémenté pour le suivi des larges bulles déformables est à l'heure actuelle en train d'être pérennisé dans la version de développement du code NEPTUNE_CFD.

Annexe A

Extension à l'étude des surfaces libres

Ces travaux de thèse ont été réalisés dans le cadre du projet NEPTUNE qui intègre le code NEPTUNE_CFD. Le modèle pour les larges bulles, décrit au chapitre I, et validé au chapitre III, a été implémenté dans la version de développement actuelle du code. Une base de cas de vérification et de validation spécifique à ce modèle est actuellement mise en place. On trouvera dans cette base certains des cas dédiés aux larges bulles présentés dans ces travaux.

Une extension du modèle à l'étude des surfaces libre a alors été envisagée. C'est l'objet des simulations présentées dans cette première annexe.

1 Cas de l'écoulement autour d'un bump

Ce premier cas très simple consiste en l'écoulement autour d'un obstacle arrondi, ou *bump*. Dans la base actuelle de validation du code, ce cas est modélisé avec une approche LIM pour la surface libre. L'idée est ici de vérifier que notre modèle est également capable de simuler l'écoulement autour de cette marche.

Le cas consiste en un passage d'une marche arrondie par un écoulement jusqu'à convergence de la simulation vers un état stationnaire. La simulation est initialisée comme schématisée sur l'image de gauche de la figure 1.1, avec un pavé d'eau en amont de la marche et une condition sur le débit d'entrée amont.

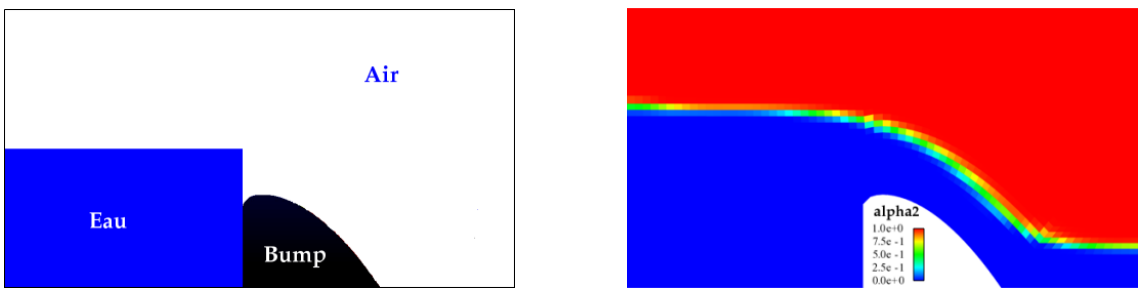


FIGURE 1.1 – *Initialisation (à gauche) et résultat stationnaire (à droite) pour le cas d'un écoulement autour d'une marche arrondie simulé avec l'approche ITM.*

Le maillage est adapté à la géométrie et épouse la forme de la marche, comme on peut l'apercevoir sur la figure 1.1 au dessus de l'obstacle. Cela permet pour la modélisation avec l'approche standard dédiée aux surfaces libres de NEPTUNE_CFD (LIM) de conserver une interface quasiment parallèle aux faces du maillages, utile pour l'approche à trois cellules pour le traitement de l'interface (Cf Chapitre I). On compare la position de l'interface convergée en temps avec les mesures expérimentales disponibles (base de validation NEPTUNE_CFD) en figure 1.2.

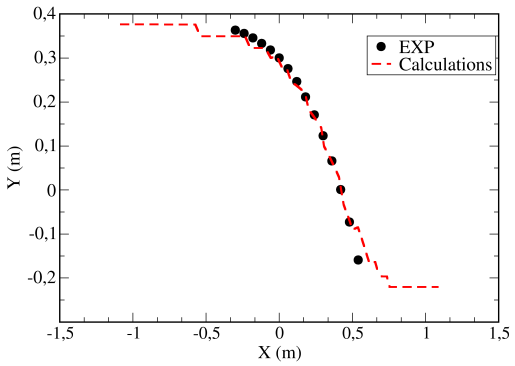


FIGURE 1.2 – *Comparaison pour le cas de l'écoulement autour d'un obstacle arrondi de l'interface simulée par le calcul convergé en temps (tirets rouges) et les mesures expérimentales.*

Ce premier cas simple permet de positionner notre approche de localisation d'interface comme une méthode intéressante pour la modélisation de surfaces libres. De plus amples études sont actuellement en cours pour vérifier que cette extension soit applicable dans le cadre de calculs industriels. Nous allons ici nous contenter de présenter un cas de vérification classique : l'instabilité de Rayleigh- Taylor [23].

2 Instabilité de Rayleigh-Taylor

Cette seconde étude consiste en un cas de validation classique pour les codes de CFD diphasique avec localisation d'interfaces. L'instabilité de Rayleigh-Taylor apparaît lorsque un fluide "lourd" se déplace vers un fluide "léger". En particulier lorsque un fluide "lourd" est placé au dessus d'un fluide "léger", la moindre perturbation de l'interface (impliquant localement $\nabla\mu \wedge \nabla P \neq \mathbf{0}$) initie l'instabilité.

2.1 Théorie

Si la déformation initiale de l'interface entre les deux fluides est de forme sinusoïdale d'amplitude a_0, alors tant que l'on reste dans le cadre de petites amplitudes, la linéarisation des équations de Navier-Stokes permet d'obtenir l'amplitude de déformation de l'interface $a(t)$ suivante :

$$a(t) = a_0 exp(\omega t) \tag{1.1}$$

avec une pulsation ω :

$$\omega^2 = gk\left(\frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_1 + \rho_2}\right) + \frac{k\sigma}{g(\rho_1 + \rho_2)} \tag{1.2}$$

donnée au premier ordre avec un nombre d'onde de k.

2.2 Simulation numérique

On simule un domaine bidimensionel de hauteur 5 m et de largeur $L = 1\ m$. La gravité est fixée à $g = -10\ m \cdot s^{-2}$, les propriétés du fluide "lourd" sont $\rho_1 = 3\ kg/m^3$ et $\mu_1 = 0.03\ Pa.s$, celles du fluide "léger" $\rho_2 = 1\ kg \cdot m^{-3}$, $\mu_2 = 0.01\ Pa \cdot s$. La tension de surface est $\sigma = 0.075\ N \cdot m^{-2}$. L'interface est initialisée par une fonction sinusoïdale (1.3), d'amplitude initiale $a_0 = 1\ mm$ et de longueur d'onde L.

$$a_0\left[cos\left(\frac{2\pi x}{L} - \pi\right) + 1\right] \quad \text{pour} \quad x \in [0, L] \tag{1.3}$$

Le maillage utilisé contient 96×480 cellules. Le pas de temps constant est fixé à $10^{-4}\ s$. Les deux phases sont considérées comme continues, les modèles sont donc des modèles 2-phases, 2-champs. On utilise pour cette simulation trois modèles de lois de fermetures ; le modèle de large interfaces de la version standard de NEPTUNE_CFD (LIM), l'approche exposée pour les larges bulles (ITM), et cette même approche avec la détection d'interfaces mal résolue pour lesquels un glissement est ajouté. En figure 1.3, on compare l'amplitude simulée à la théorie linéarisée pour $t \in [0, 1.5]\ s$.

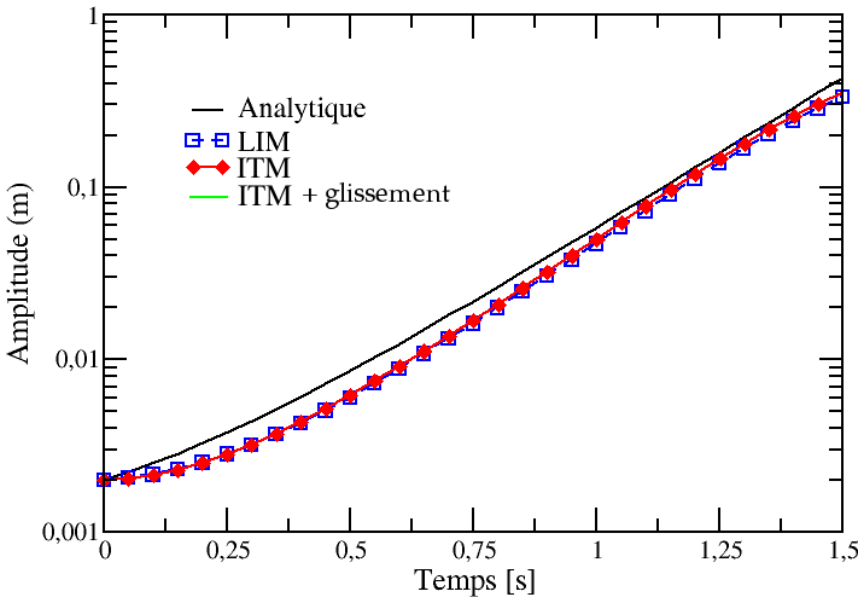


FIGURE 1.3 – *Comparison between different mesh refinements and the theory, variable time step (initial value : 1 ms except for the more refined : 0.1 ms), with surface tension.*

La figure 1.3 montre une faible différence entre la simulation avec le modèle LIM et celle avec le modèle ITM. L'écart entre les modèles ITM avec ou sans glissement

est nul sur cet intervalle de temps. Ce qui indique que pour les petites déformations, on conserve bien une interface résolue. L'écart par rapport aux prévisions du calcul analytique est inférieur à 10 % pour tous les modèles.

On sort maintenant du cadre des petites amplitudes. L'amplitude initiale est accentuée pour arriver à une amplitude initiale égale à un pas spatial, soit 10.4 mm pour raccourcir le temps de la simulation. La figure 1.4 présente les résultats de simulation pour les 3 approches LIM, ITM et ITM avec glissement pour 10 s de temps physique.

Si l'on constate que l'on a toujours une bonne concordance entre l'amplitude maximale sur les deux premières secondes des simulations, on observe l'apport crucial de l'étape de compression artificielle contenue dans l'approche ITM. On observe peu de différences entre la ITM avec ou sans glissement, mis à part une diminution du nombre d'îlots de fraction volumiques ("bulles" de diamètre inférieur à la maille) avec l'ajout du glissement interfacial.

3 Conclusion

Ces résultats donnent un aperçu des travaux en cours pour l'extension de la méthode présentée à l'étude de problèmes à surface libre. Bien que des vérifications et validations supplémentaires soient nécessaires, on peut d'ores et déjà conclure quant à l'intérêt de la méthode.

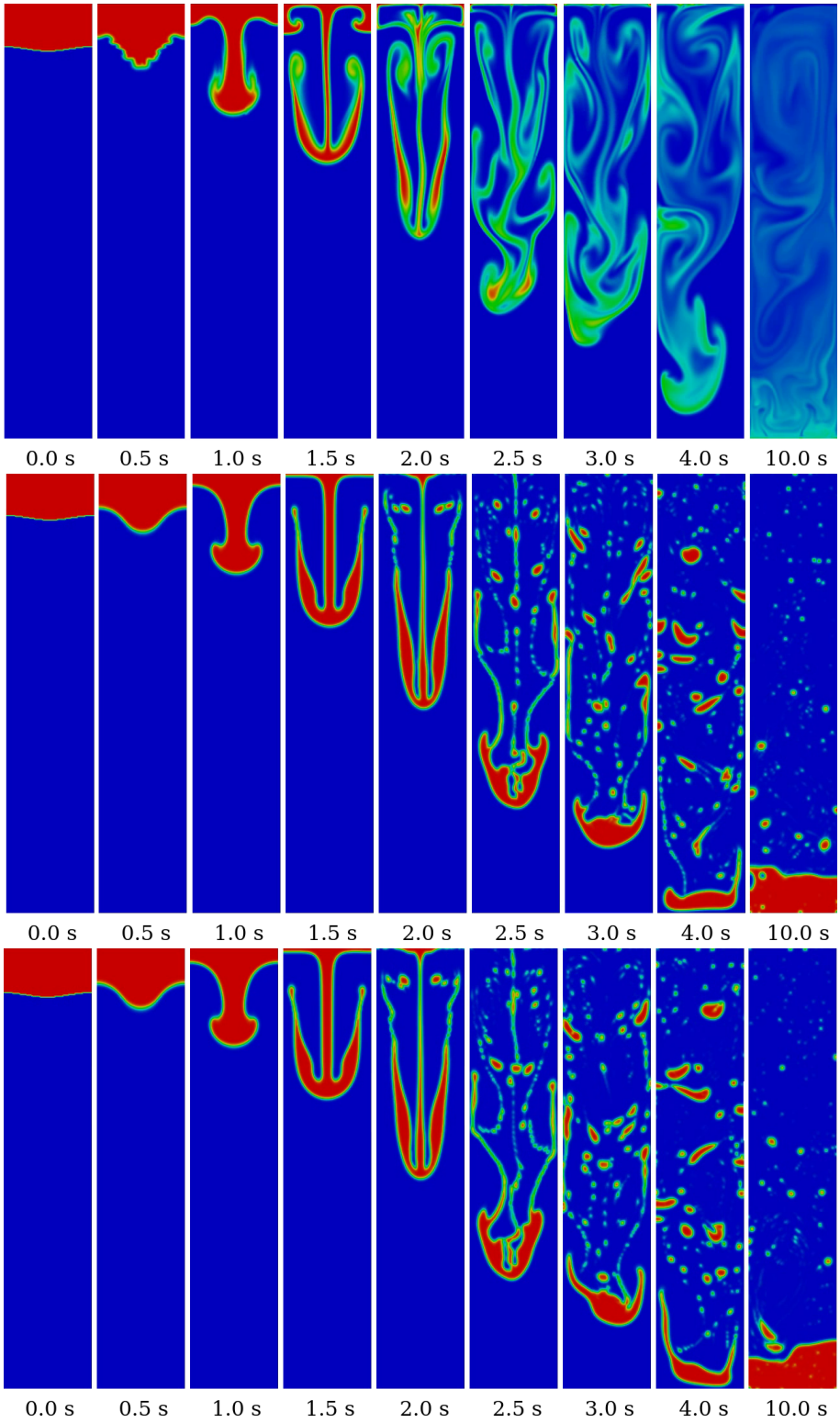


FIGURE *1.4 – De haut en bas, simulation d'une instabilité de Rayleigh-Taylor avec les approches LIM, ITM et ITM avec glissement pour les interfaces mal résolues.*

Annexe B

Thermique

Dans l'optique de la modélisation des régimes d'écoulement diphasiques eau-vapeur en générateur de vapeur, il faut ajouter à notre système d'équations les termes de transferts de masse et de quantité de mouvement dus aux changements de phase, et résoudre une équation supplémentaire par champ ; la conservation de l'enthalpie, que l'on peut écrire pour le modèle à deux fluides décrit par Ishii et Hibiki [56] :

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\alpha_k\rho_k H_k)}{\partial t} + \nabla\cdot(\alpha_k\rho_k H_k\mathbf{U}_k) = \quad & \nabla\cdot(\alpha_k\mathbf{U}_k\cdot(\mathbb{T}_k+\mathbb{T}_k^{SM})) \\ & -\nabla\cdot(\alpha_k\mathbf{q}_k+\alpha_k\mathbf{q}_k^{SM}) \\ & +\alpha_k\frac{\partial P}{\partial t}+\sum_{p\neq k}(\mathbf{M}_{p\to k}\mathbf{U}_k+\Pi_{p\to k})\end{aligned} \tag{2.1}$$

Dans une première partie, on présentera ici succinctement les modèles de transferts thermiques implémentés dans le code NEPTUNE_CFD pour le cas de bulles dispersées et pour les interfaces libres (LIM).

1 Transferts thermiques interfaciaux

Dans l'équation (2.1), le terme de transfert thermique interfacial $\Pi_{p\to k}$ peut se décomposer en un terme d'échange de chaleur et un terme de transfert de masse (2.2).

$$\Pi_{p\to k} = \zeta_{kp}(T_p - T_k) + \Gamma_{p\to k}H^{int}_{p\to k} \tag{2.2}$$

où H^{int} est le saut d'enthalpie à l'interface. On notera $\Pi'_{p\to k} = \zeta_{kp}(T_p - T_k)$ la partie d'échange de chaleur.

1.1 Bulles dispersées

Le modèle dédié au transfert thermique entre une phase continue et des inclusions dispersées, en l'occurrence des bulles est donné par les relations suivantes pour la phase liquide :

$$\Pi'_{cl} = \zeta_{kp}(T_{sat} - T_{cl}) \quad \text{avec} \quad \zeta_{kp} = \frac{A_i Nu}{d_{dg}} \tag{2.3}$$

où Nu est le nombre de Nusselt, et pour la phase vapeur :

$$\Pi'_{dg} = f(\alpha_{dg}) \frac{\rho_{dg} Cp_{dg}}{\tau_{dg}} (T_{sat} - T_{dg}) \tag{2.4}$$

où f est une fonction de pondération qui peut prendre plusieurs expression : 1, α_{cl}, α_{dg} ou $\alpha_{dg} \times \alpha_{cl}$

1.2 Modèle de larges interfaces - LIM

Dans les cellules ne contenant pas l'interface, on utilise les modèles de gouttes et bulles. Pour les larges interfaces, le coefficient d'échange est calculé en fonction de l'aire interfaciale locale contenue dans la cellule interfaciale ($\alpha_{cg} \in [0.3, 0.7]$), ainsi que détaillé par Coste [29].

$$\Pi'_{cl} = \zeta_{kp}(T_{sat} - T_{cl}) \quad \text{avec} \quad \zeta_{kp} = \frac{A_i \rho_{cl} \|\mathbf{U}'\|}{T^+} \tag{2.5}$$

où T^+ est obtenu à l'aide d'une loi de paroi $T^+ = f(y^+)$.

2 Transferts thermiques (conduction)

On cherche ici à étudier numériquement l'évolution thermique d'une boîte contenant à l'instant initial deux compartiments de températures différentes T_1 et T_2.

2.1 Théorie

L'équation régissant l'évolution du système est la suivante :

$$a \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{2.6}$$

Où a est la diffusivité thermique ($[a] \equiv m^2.s^{-1}$). La température, le temps et l'abscisse sont adimensionnés par rapport aux grandeurs du système :

$$T^* = \frac{T - T_f}{T_2 - T_f} \quad , t^* = \frac{\lambda}{\rho C_p L^2}.t \quad \text{et} \quad x^* = \frac{x}{L}$$

Avec ces variables adimensionnées, la température initiale est un échelon unitaire. En séparant les variables t^* et x^* et en cherchant une solution sous la forme de série de Fourier, on obtient la solution analytique suivante :

$$T^*(x^*,t^*) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4}{(2n+1)\pi} sin\left[\frac{(2n+1)\pi x^*}{2}\right] exp\left[-\left(\frac{(2n+1)\pi}{2}\right)^2 t^*\right] \tag{2.7}$$

2.2 Étude numérique

Les deux fluides sont choisi identiques et ont les propriétés de l'eau (2.8), les températures sont fixées respectivement aux valeurs 100 et 200 K.

$$\begin{aligned} \rho &= 1000\ kg.m^{-3} \\ C_p &= 4180\ J.kg^{-1}.K^{-1} \\ \lambda &= 0.6\ W.m^{-1}.K^{-1} \end{aligned} \tag{2.8}$$

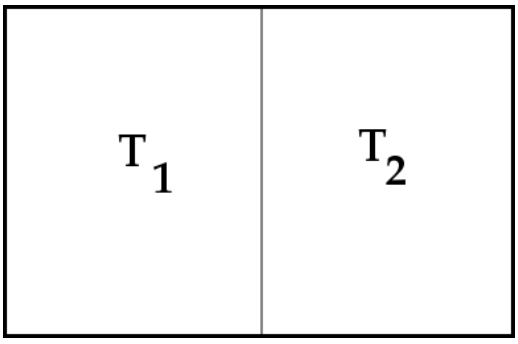


FIGURE 2.1 – *Initialisation du cas pour la conduction thermique à l'interface.*

L'étude est menée suivant deux approches : une première monophasique, la conduction se fera donc au travers des termes volumiques, et une seconde diphasique, dans ce cas la conduction entre les deux zones initiales (*Cf.* figure 2.1) passe par un terme d'échange interfacial. Le calcul monophasique permet de vérifier que le terme de conduction volumique est correct comme le montre la comparaison avec la théorie en figure 2.2.

Pour le cas diphasique, l'interface est modélisée à l'aide d'une cellule où $\alpha_{cg} = 0.5$. On implémente dans un premier temps le coefficient de transfert interfacial λ_{12}, avec $\alpha(1-\alpha)$ comme fonction de localisation à l'interface, et $\|\nabla\alpha\|$ comme aire interfaciale :

$$\zeta_{12} = \alpha(1-\alpha)\|\nabla\alpha\|\lambda \tag{2.9}$$

On ne retrouve pas les prédictions analytiques dans le cas diphasique. Ce qui montre qu'il reste un effort de modélisation à fournir pour l'implémentation des transferts thermiques à l'interface avec une modélisation locale de celle-ci. Des idées sont à explorer dans la littérature [108], et/ou en s'inspirant de l'implémentation des modèles existants à l'heure actuelle dans le code NEPTUNE_CFD.

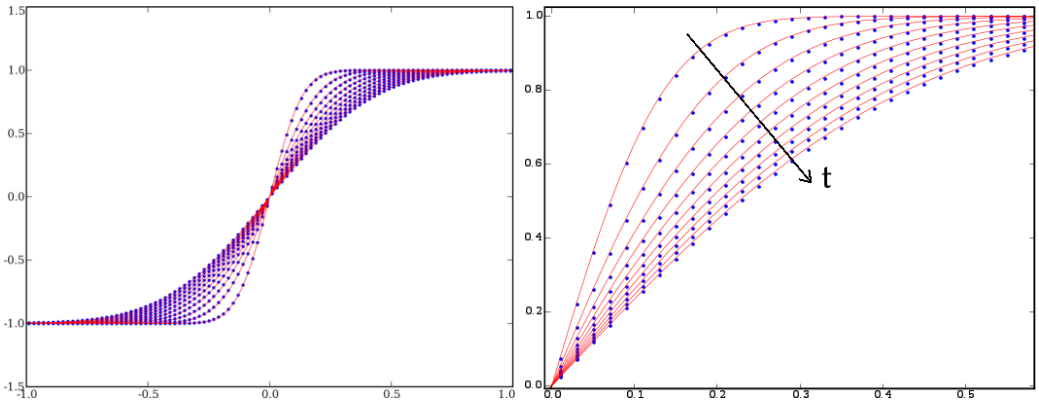


FIGURE 2.2 – T^* *fonction de* x^* *pour* $t = \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10\}$ *s. Les solutions analytiques sont en rouge et les résultats numériques en croix noires.*

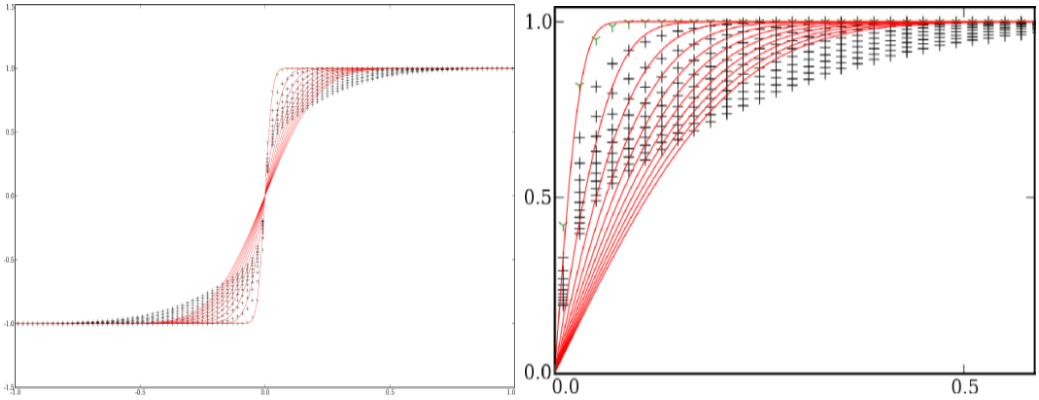


FIGURE 2.3 – T^* *fonction de* x^* *pour* $t = \{0.1, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0\}$ *s. Les solutions analytiques sont en rouge et les résultats numériques en croix noires.*

3 Changement de phase - Ébullition d'une bulle sphérique

On s'intéresse, au contraire du paragraphe précédent à la partie transfert de masse des échanges thermiques. Deux approches existent pour les termes couplés de transferts thermique et massiques entre deux états d'une même phase chimique. La première, peut être la plus naturelle, consiste à avoir un terme de transfert thermique et un terme de transfert de masse conservatifs :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t}\alpha_1\rho_1 H_1 + conv = \zeta_{12}\left(T_2 - T_1\right) + \Gamma_1 H^\sigma \\ \\ \dfrac{\partial}{\partial t}\alpha_2\rho_2 H_2 + conv = -\zeta_{12}\left(T_2 - T_1\right) + \Gamma_2 H^\sigma \end{cases} \tag{2.10}$$

La deuxième approche, qui est celle retenue pour le modèle eau-vapeur du code NETUNE_CFD, consiste à choisir un modèle de transfert spécifique pour chaque phase (retour à la saturation, large interface, LIM, ...) et d'assurer ensuite la conser-

vation avec le terme de changement de phase (transfert de masse).

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t}\alpha_1\rho_1 H_1 + conv = \Pi_1' + \Gamma_1 H_1 \\ \\ \dfrac{\partial}{\partial t}\alpha_2\rho_2 H_2 + conv = \Pi_2' + \Gamma_2 H_2 \end{cases} \tag{2.11}$$

Avec la relation suivante :

$$\Gamma_1 = \frac{\Pi_1' + \Pi_2'}{H_2 - H_1} \tag{2.12}$$

Pour un premier test, on choisit un modèle de simple retour à la saturation pour les deux phases, avec un temps de relaxation de 0.01 s et un pré-facteur en $\alpha(1-\alpha)$ pour la localisation à l'interface :

$$\alpha_1(1-\alpha_1)\frac{\rho_1 Cp_1}{\tau_1}(T_{sat} - T_1) \tag{2.13}$$

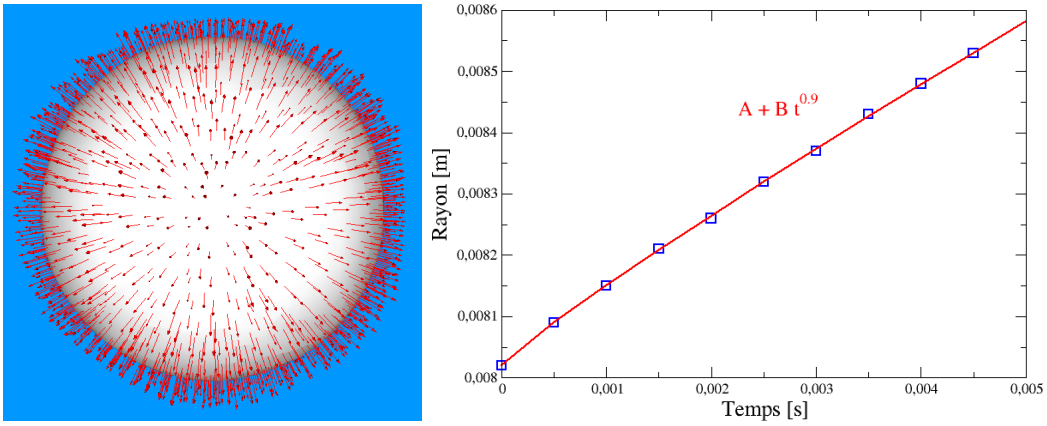


FIGURE 2.4 – *Visualisation des vecteurs vitesses à l'interface (à gauche) et rayon de la bulle en fonction du temps à $P = 10$ bar.*

On observe sur la figure 2.4 que l'on est capable avec un terme de changement de phase très simple de faire croître de manière isotrope une bulle de vapeur saturée entourée d'un liquide surchauffé. La théorie prédit un rayon de la bulle fonction de la racine carrée du temps [42, 71, 100]. Dans notre cas, l'utilisation du module eau-vapeur déjà implémenté dans le code impose l'utilisation de propriétés variables pour les fluides (ρ, Cp, ...), ce qui diffère des hypothèses permettant de prédire une croissance du rayon selon une loi racine carrée (2.14) [42].

$$R(t) \approx 2\frac{\rho_l C_{Pl}}{\rho_v L}\sqrt{\alpha_l t}\Delta T \tag{2.14}$$

En considérant que les propriétés fluides varient peu au cours du calcul, le fait que l'on ne retrouve pas une évolution selon une loi racine carrée est sans doute dû aux modèles très simples utilisés (retour à la saturation). Des travaux complémentaires devraient permettre l'implémentation d'un modèle de changement de phase spécifiques à la modélisation de l'interface, à l'instar de la méthode dédiée aux surfaces libres (LIM) [29].

4 Conclusion

On a montré que la résolution de l'équation de la thermique est fonctionnelle pour notre modèle dédié aux bulles simulées. Il reste maintenant à implémenter des modélisations permettant de prendre en compte les termes de transferts thermiques (de chaleur et de changement de phase) en accord avec la physique de ces phénomènes.

Bibliographie

[1] Adalsteinsson, D., and Sethian, J. A. The fast construction of extension velocities in level set methods. *Journal of Computational Physics 148* (1997), 2–22.

[2] Adoua, R., Legendre, D., and Magnaudet, J. Reversal of the lift force on an oblate bubble in a weakly viscous linear shear flow. *Journal of Fluid Mechanics 628* (2009), 23–41.

[3] Almgren, A. S., Bell, J. B., Colella, P., Howell, L. H., and Welcome, M. L. A conservative adaptive projection method for the variable density incompressible navier–stokes equations. *Journal of Computational Physics 142* (1998), 1–46.

[4] Archambeau, F., Méchitoua, N., and Sakiz, M. *Code_Saturne* : a Finite Volume Code for the Computation of Turbulent Incompressible Flows - Industrial Applications. *International Journal on Finite Volumes 1* (2004).

[5] Avdeev, A. A., and Pekhterev, V. P. Vapour condensation in non-equilibrium bubble flows. *High temperature 24*, 6 (1986), 831–837.

[6] Baker, O. Simultaneous flow of oil and gas. *Oil and Gas Journal 53*, 185 (1954).

[7] Banerjee, S. Multifield models. In *Short courses, Modelling and Computation of Multiphase Flow* (Zurich, Switzerland, 2010).

[8] Bartosiewicz, Y., Laviéville, J., and Seynhaeve, J.-M. A first assessment of the NEPTUNE_CFD code : Instabilities in a stratified flow comparison between the VOF method and a two-field approach. *International Journal of Heat and Fluid Flow 29* (2008), 460–478.

[9] Belt, R., and Simonin, O. Quadrature method of moments for the pdf modelling of droplet coalescence in turbulent two-phase flows. In *ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting* (Vail, Colorado, USA, 2009).

[10] Bertin, J. C., and Percout, J. M. Présentation générale de l'évaporateur des générateurs de vapeur des tranches rep 900, 1300 et 1450 mw. Tech. rep., EDF Branche Énergies, 2000.

[11] Bestion, D. Applicability of two-phase CFD to nuclear reactor thermalhydraulics and elaboration of best practice guidelines. *Nuclear Engineering and Design 253* (2012).

[12] Bestion, D., Coste, P., Niceno, B., Mimouni, S., Lakehal, D., and Bartosiewicz, Y. Two-phase CFD : The various approaches and their applicability to each flow regime. *Multiphase Science and Technology 23* (2011).

[13] Bhaga, D., and Weber, M. E. Bubbles in viscous liquids : shape, wakes and velocities. *Journal of Fluid Mechanics 105* (1981), 61–85.

[14] Biesheuvel, A., and van Wijngaarden, L. Two-phase flow equations for a dilute dispersion of gas bubbles in liquid. *Journal of Fluid Mechanics 148* (1984), 301–318.

[15] Bonometti, T., and Magnaudet, J. An interface-capturing method for incompressible two-phase flows. validation and application to bubble dynamics. *International Journal of Multiphase Flow 33* (2007), 109–133.

[16] Bordère, S., Vincent, S., and Caltagirone, J.-P. Stochastic energetic approach devoted to the modeling of static two-phase problems dominated by surface tension. *Computers & Fluids 39* (2010), 392–402.

[17] Brackbill, J. U., Kothe, D. B., and Zemach, C. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics 100* (1992), 335–354.

[18] Brennen, C. E. *Fundamentals of Multiphase Flows.* Cambridge University Press, 2005.

[19] Brereton, G., and Korotney, D. Coaxial and oblique coalescence of two rising bubbles. In *Proceedings of AMD-Vol0 119 : The ASME Applied Mechanics Conference* (Columbus, Ohio, USA, 1991).

[20] Carrara, M. D., and DesJardin, P. E. A filtered mass density function approach for modeling separated two-phase flows for LES I : Mathematical formulation. *International Journal of Multiphase Flow*.

[21] Carrara, M. D., and DesJardin, P. E. A filtered mass density function approach for modeling separated two-phase flows for LES II : Simulation of a droplet laden temporally developing mixing layer. *International Journal of Multiphase Flow 34* (2008), 748–766.

[22] Castillejos, A. H. *A study of the fluid-dynamic characteristics of turbulent gas-liquid bubble plumes.* PhD thesis, University of British Columbia, 1986.

[23] Chandrasekhar, S. *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability.* Dover Publications, 1961.

[24] Chen, L., Garimella, S., Reizes, J., and Leonardi, E. The development of a bubble rising in a viscuous liquid. *Journal of Fluid Mechanics 387* (1999), 61–97.

[25] Chen, L., Li, Y., and Manasseh, R. The coalescence of bubbles - a numerical study. In *Proceedings of Third International Conference on Multiphase Flow : ICMF'98* (Lyon, France, 1998).

[26] Chen, P., Sanyal, J., and Dubukovic, M. Numerical simulation of bubble columns flows : effect of different breakup and coalescence closures. *Chemical Engineering Science 60* (2005), 1085–1101.

[27] Chesnel, J., Réveillon, J., Ménard, T., Berlemont, A., and Demoulin, F. X. Large eddy simulation of liquid atomization : From the resolved scales to subgrid spray. In *Proceedings of 7th Int. Conf. on Multiphase Flow 2010 : ICMF'7* (Tampa, FL USA, 2010).

[28] Clift, R., Grace, J. R., and Weber, M. E. *Bubbles, drops, and particles.* Academic Press, New York, 1978.

[29] Coste, P. Computational simulation of Multi-D liquid-vapor thermal shock with condensation. In *Proceedings of 5th International Conference on Multiphase FlowICMF'04* (Yokohama, Japan, 2004).

[30] Coste, P., Laviéville, J., Pouvreau, J., Baudry, C., Guingo, M., and Douce, A. Validation of the large interface method of NEPTUNE_CFD 1.0.8 for PTS application. In *CFD4NRS-3* (Washington DC, USA, 2010).

[31] Cummings, P., and Chanson, H. Air entrainment in the developing flow region of plunging jets - part 1 : Theoretical development. *Journal of Fluid Engineering 119* (1997), 597–602.

[32] Cummings, P., and Chanson, H. Air entrainment in the developing flow region of plunging jets - part 2 : Experimental. *Journal of Fluid Engineering 119* (1997), 603–608.

[33] Deen, N. G., Hjertager, B. H., and Solberg, T. Comparison of piv and lda measurement methods applied to the gas-liquid flow in a bubble column. In *Proceedings of 10th Int. Symp. on Appl. of Laser Techniques to Fluid Mech.* (Lisbon, Portugal, 2000).

[34] Deen, N. G., Solberg, T., and Hjertager, B. H. Numerical simulation of the gas-liquid flow in a square cross-sectioned bubble column. In *Proceedings of 14th Int. Congress of Chemical and Process Engineering : CHISA* (Praha, Czech Republic, 2000).

[35] Deen, N. G., Solberg, T., and Hjertager, B. H. Large eddy simulation of the gas-liquid flow in a square cross-section bubble column. *Chemical Engineering Science 56* (2001), 6341–6349.

[36] Delage-Santacreu, S. *Méthode de raffinement de maillage adaptatif hybride pour le suivi de fronts dans des écoulements incompressibles*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, 2006.

[37] Delage-Santacreu, S., Vincent, S., and Caltagirone, J.-P. Tracking fronts in one and two-phase incompressible flows using an adaptative mesh refinement approach. *Journal of Science Comput 41* (2009), 221–237.

[38] Dhotre, M. T., Niceno, B., and Smith, B. L. Large eddy simulation of a bubble column using dynamic sub-grid scale model. *Chemical Engineering Science 136* (2008), 337–348.

[39] Douce, A., Mimouni, S., Guingo, M., Morel, C., Laviéville, J., and Baudry, C. Validation of NEPTUNE_CFD 1.0.8 for adiabatic bubbly flow and boiling flow. In *CFD4NRS-3* (Washington DC, USA, 2010).

[40] Drew, D. A., and Passman, S. L. *Theory of Multicomponent Fluids*. Applied mathematical sciences, Vol. 135. Springer, 1999.

[41] Faghri, A., and Zhang, Y. *Transport phenomena in multiphase systems*. Elsevier, 2006.

[42] Franc, J. P., Avellan, F., Belahadji, B., Billard, J. Y., Briançon-Marjollet, L., Fréchou, D., Fruman, D. H., Karimi, A., Kueny, J. L., and Michel, J. M. *La Cavitation, Mécanismes physiques et aspects industriels*. Presses Universitaires de Grenoble, 1995.

[43] Fulgosi, M., Lakehal, D., Banerjee, S., and Angelis, V. D. Direct numerical simulation of turbulence in a sheared air–water flow with a deformable interface. *JFM 482* (2003), 319–345.

[44] Fuster, D., Agbaglash, G., Josserand, C., Popinet, S., and Zaleski, S. Numerical simulation of droplets, bubbles and waves : state of the art. *Fluid dynamics research 41* (2009).

[45] Gingold, R. A., and Monaghan, J. J. Smoothed particle hydrodynamics : theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 181* (1977), 375–389.

[46] Hänsch, S., Lucas, D., Krepper, E., and Höhne, T. A multi-field two fluid concept for transitions between different scales of interfacial structures. *International Journal of Multiphase Flow 47* (2012), 171–182.

[47] Harten, A. The artificial compression method for computation of shocks and contact discontinuities : III. self adjusting hybrid schemes. *Mathematics of Computation 32* (1978), 363–389.

[48] Hasan, N., and binti Zakaria, Z. Computational approach for a pair of bubble coalescence process. *International journal of Heat and Fluid Flows 32* (2011), 755–761.

[49] Henriques, A. *Prise en compte des grandes interfaces dans un code moyenné Eulérien à deux champs de vitesse*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Genoble, 2006.

[50] Hirt, C. W., and Nichols, B. D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics 39* (1981), 201–225.

[51] Hua, J. Cfd simulation of the effects of small dispersed bubbles on the rising of a single large bubble in 2d vertical channels. In *Proceedings of 8^{th} Int. Conf. on Multiphase Flow 2013 : ICMF'8* (Jeju, Korea, 2013).

[52] Hua, J., and Lou, J. Numerical simulation of bubble rising in viscous liquid. *Journal of Computational Physics 222* (2007), 769–795.

[53] Hyman, J. M. Numerical methods for tracking interfaces. *Physica D 12* (1984), 396–407.

[54] Hysing, S., Turek, S., Kuzmin, D., Parolini, N., Burman, E., Ganesan, S., and Tobiska, L. Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubbles dynamics. *International Journal of Numerical Methods for Fluid Mechanics 60* (2009), 1259–1288.

[55] Ishii, M. *Thermo-fluid dynamic, theory of two-phase.* Eyrolles, 1975.

[56] Ishii, M., and Hibiki, T. *Thermo-fluid Dynamics of Two Phase Flow.* Springer-Verlag, 2006.

[57] Ishii, M., Kim, S., and Kelly, M. J. Development of interfacial area transport equation. *Nuclear Engineering and Technology 37*, 6 (2005), 525–536.

[58] Ishii, M., and Zuber, N. Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particule flows. *American Institute of Chemical Engineers Journal 25* (1979).

[59] Jamet, D., Torres, D., and Brackbill, J. U. On the theory and computation of surface tension : the elimination of parasitic currents through energy conservation in the second gradient method. *Journal of Computational Physics 182* (2002), 262–276.

[60] Jayanti, S., and Valette, M. Prediction of dryout and post-dryout heat transfer at high pressure using a 1D 3-fluid model. *International Journal of Heat and Mass Transfer 47* (2004), 4895–4910.

[61] Kačeniauskas, A. Development of efficient interface sharpening procedure for viscous incompressible flows. *Informatica 19*, 4 (2008), 487–504.

[62] Kendil, F. Z., Krepper, E., Salah, A. B., Lucas, D., and Mataoui, A. Numerical study of a bubble plume generated by bubble entrainment from a impinging jet. *Nuclear Engineering and Design 241* (2011), 4111–4121.

[63] Koebe, M., Bothe, D., and Warnecke, H. J. Direct simulation of air bubbles in water/glycerol mixtures : shapes and velocity fields. In *Proceedings of FEDSM'03 : 4th ASME_ JSME Joint Fluids Engineering Conference* (Honolulu, Hawaii, USA, 2003).

[64] Krepper, E., Končar, B., and Egorov, Y. CFD modelling of subcooled boiling - Concept, validation and application to fuel assembly design. *Nuclear Engineering and Design 237* (2007), 716–731.

[65] Krepper, E., Lucas, D., Frank, T., Prasser, H.-M., and Zwart, P. J. The inhomogeneous MUSIG model for the simulation of polydispersed flows. *Nuclear Engineering and Design 238* (2008), 1690–1702.

[66] Lafaurie, B., Nardone, C., Scardovelli, R., Zaleski, S., and Zanetti, G.

[67] Lahey, R. T., and Drew, D. A. The analysis of two-phase flow and heat transfer using a multidimensional, four field, two-fluid model. *Nuclear Engineering and Design 204* (2001), 29–44.

[68] Larocque, J., Vincent, S., Lacanette, D., Lubin, P., and Caltagirone, J.-P. Parametric study of LES subgrid terms in a turbulent phase separation flow. *International Journal of Heat and Fluid Flow 31* (2010), 536–544.

[69] Laviéville, J., Quérémais, E., Boucker, M., and Mass, L. Neptune_cfd v1.0 user guide. Tech. rep., EDF-CEA, 2005.

[70] Laviéville, J., Quérémais, E., Mimouni, S., Boucker, M., and Méchitoua, N. Neptune_cfd v1.0 theory manual. Tech. rep., EDF-CEA, 2004.

[71] Legendre, D. *Quelques aspects des forces hydrodynamiques et des transferts de chaleur sur une bulle sphérique*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 1996.

[72] Liao, Y., Lucas, D., Krepper, E., and Schmidtke, M. Development of a generalized coalescence and break-up closure for the inhomogeneous MUSIG model. *Nuclear Engineering and Design 241* (2011), 1024–1033.

[73] Liovic, P., and Lakehal, D. Multi-physics treatment in the vicinity of arbitrarily deformable gas–liquid interfaces. *Journal of Computational Physics 222* (2007), 504–535.

[74] Liu, Y., Hibiki, T., Sun, X., Ishii, M., and Kelly, M. J. Drag coefficient in one dimensional two-group two-fluid model. *International Journal of Heat and Fluid Flow 29* (2008), 1402–1410.

[75] Maeda, A., Sou, A., and Tomiyama, A. A hybrid method for simulating flows including fluid particles. In *Proceedings of FEDSM06 : ASME Joint US - European Fluid Engineering Summer Meeting* (July 2006).

[76] Manasseh, R. Acoustic sizing of bubbles at moderate to high bubbling rates. *Exptl. Fluid. & Thermal Sic. J Edition for 4^{th} Word Conference on Experimental. Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics* (1997).

[77] Manasseh, R., Yoshida, S., and Rudman, M. Bubble formation processes and bubble acoustic signals. In *Proceedings of Third International Conference on Multiphase Flow : ICMF'98* (Lyon, France, 1998).

[78] Milelli, M. *A numerical analysis of confined turbulent bubble plumes*. PhD thesis, Swiss Federal Institute of Technology Zurich, 2002.

[79] Mimouni, S., Archambeau, F., Boucker, M., Laviéville, J., and Morel, C. A second order turbulence model based on a Reynolds stress approach for two-phase boiling flow - part I : Adiabatic cases. *Science and Technology of Nuclear Installations 2009*, Article ID 792395 (2008).

[80] Mimouni, S., Archambeau, F., Boucker, M., Laviéville, J., and Morel, C. A second order turbulence model based on a reynolds stress approach for two-phase boiling flow and application to fuel assembly analysis. *Nuclear Engineering and Design 240* (2010), 2225–2232.

[81] Mimouni, S., Archambeau, F., Boucker, M., Laviéville, J., and Morel, C. A second order turbulence model based on a Reynolds stress approach

for two-phase boiling flow. part 1 : Application to the asu-annular channel case. *Nuclear Engineering and Design 240* (2010), 2233–2243.

[82] Mo, S., Ashrafian, A., and Johansen, S. T. Simulation of flow regime transitions in vertical pipe flow. In *Proceedings of 8th Int. Conf. on Multiphase Flow 2013 : ICMF'8* (Jeju, Korea, 2013).

[83] Morel, C. Modeling approaches for strongly non-homogeneous two-phase flows. *Nuclear Engineering and Design 237* (2007), 1107–1127.

[84] Morel, C., Ruyer, P., Seiler, N., and Laviéville, J. Comparison of several models for multi-size bubbly flows on an adibatic experiment. *International Journal of Multiphase Flow 36* (2010), 25–39.

[85] Murzyn, F., and Chanson, H. Free surface fluctuations in hydraulic jumps : experimental observations. *Experimental Thermal and Fluid Science 33* (2009), 1055–1064.

[86] Nadooshan, A. A., and Shirami, E. Generalization of SGIP surface tension force model in three-dimensional flows and compare to other models in interfacial flows. *World academy of science, Engineering and technology 39* (2008), 66–71.

[87] Narayanan, S., Goossens, L. H. J., and Kossen, N. W. F. Coalescence of two bubbles rising in line at low Reynolds numbers. *Chemical Engineering Science 29* (1974), 2071–2082.

[88] Niceno, B., Boucker, M., and Smith, B. L. Euler-Euler large eddy simulation of a square cross-sectional bubble column using the neptune CFD code. *Science and Technology of Nuclear Installations* (2009), 1–8.

[89] Niceno, B., Dhotre, M. T., and Deen, N. G. One-equation sub-grid scale (SGS) modelling for Euler-Euler large eddy simulation (EELES) of dispersed flow. *Chemical Engineering Science 63* (2008), 3923–3931.

[90] Niceno, B., Sato, Y., Badillo, A., and Andreani, M. Multi-scale modeling and analysis of convective boiling : towards the prediction of chf in rod bundles. *Nuclear Engineering and Design 63* (2010), 620–635.

[91] Olsson, E., and Kreiss, G. A conservative level set method for two phase flow. *Journal of Computational Physics 210* (2005), 225–246.

[92] Olsson, E., Kreiss, G., and Zahedi, S. A conservative level set method for two phase flow II. *Journal of Computational Physics 225* (2007), 785–807.

[93] Osher, S., and Sethian, J. A. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics 79* (1988), 12–49.

[94] Ouchene, R., Erriguible1, A., Vincent, S., and Subra-Paternault, P. Simulation of liquid solvent atomization in compressed CO_2. *submitted to Mechanics Research Communications*.

[95] Patankar, S., and Spalding, D. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer 15*, 10 (1972), 1787–1806.

[96] Pianet, G., Vincent, S., Leboi, J., Caltagirone, J.-P., and Anderhuber, M. Simulating compressible gas bubbles with a smooth volume tracking 1-fluid method. *International Journal of Multiphase Flow 36* (2010), 273–283.

[97] Pigny, S. Intermediate scales between simulation and modeling of two-phase flows. *Nuclear Engineering and Design 241* (2011), 874–887.

[98] Pigny, S., and Coste, P. Simulation modeling of two-phase bubbly flows. In *The 11th International Topical Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics (NURETH-11)* (Avignon, France, October 2005).

[99] Plesset, M. S. On the stability of fluid flows with spherical symmetry. *Journal of Applied Physics 25*, 1 (1954), 96–98.

[100] Plesset, M. S., and Zwick, S. A. The growth of vapor bubbles in superheated liquids. *Journal of Applied Physics 25*, 4 (April 1954), 493–500.

[101] Podowski, M. Z. On the consistency of mechanic multidimensionnal modeling of gas/liquid two phase flow. *Nuclear Engineering and Design 239* (2009), 933–940.

[102] Popinet, S. Gerris : a tree-based adaptive solver for the incompressible euler equations in complex geometries. *JCP 190* (2003), 572–600.

[103] Popinet, S., and Zaleski, S. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluid 30* (1999), 775–793.

[104] Raymond, F., and Rosant, J.-M. A numerical and experimental study of the terminal velocity and shape of bubbles in viscous liquids. *Chemical Engineering Science 55* (2000), 943–955.

[105] Renaud-Assemat, I. *Développement d'une méthode lagrangienne de simulation d'écoulements turbulents à phases séparées.* PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2011.

[106] Sagaut, P. *Large Eddy Simulation for Incompressible flows.* Springer-Verlag, 2004.

[107] Sato, Y., and Niceno, B. A conservative local interface sharpening scheme for the constrained interpolation profile method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids 70* (2012), 441–467.

[108] Sato, Y., and Niceno, B. A sharp-interface phase change model for a mass-conservative interface tracking method. *JCP 249* (2013), 127–161.

[109] Scardovelli, R., and Zaleski, S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Review of Fluid Mechanics 31* (1999), 567–603.

[110] Scardovelli, R., and Zaleski, S. Analytical relations connecting linear interfaces and volume fractions in rectangular grids. *Journal of Computational Physics 164* (2000), 228–237.

[111] Shin, S. Computation of the curvature field in numerical simulation of multiphase flow. *Journal of Computational Physics 222* (2007), 872–878.

[112] Singh, R., and Shyy, W. Three-dimensional adaptive grid computation with conservative, marker-based tracking for interfacial fluid dynamics. In *44^{th} Aerospace Science Meeting* (Reno MV, USA, 2006).

[113] Smagorinsky, J. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review 91* (1963), 99–165.

[114] Sokolichin, A., and Eigenberger, G. Applicability of the standard k-ϵ turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns : Part I. Detailed numerical simulations. *Chemical Engineering Science 54* (1999), 2273–2284.

[115] Speziale, C. G., Sarkar, S., and Gatski, T. B. Modelling the pressure-strain correlation of turbulence : an invariant dynamical system approach. *Journal of Fluid Mechanics 227* (1991), 245–272.

[116] Sun, X., Kim, S., Ishii, M., and Beus, S. G. Modeling of bubble coalescence and disintegration in confined upward two phase flow. *Nuclear Engineering and Design 230* (2004), 3–26.

[117] Sussman, M. A parallelized, adaptive algorithm for multiphase flows in general geometries. *Computers and Structures 83* (2005), 435–444.

[118] Sussman, M., and Puckett, E. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D ands axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics 162* (2000), 301–337.

[119] Sussman, M., Smereka, P., and Osher, S. A level set approach for computing solutions in incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics 114* (1994), 146–159.

[120] Sussman, M., Smith, K., Hussaini, M. Y., Ohta, M., and Shi-Wei, R. A sharp interface method for imcompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics 221* (2007), 469–505.

[121] Taitel, Y., Bornea, D., and Dukler, A. E. Modelling flow pattern transition for steady upward gas-liquid flow in vertical tubes. *American Institute of Chemicals Engineers 26* (1980), 345–354.

[122] Tentner, A., Lo, S., Splawski, A., Ioilev, A., Samigulin, M., Ustinenko, V., and Melnikova, S. Computational fluid dynamics modeling of two-phase flow topologies in a boiling water reactor fuel assembly. In *Proceeding of the 16^{th} International Conference on Nuclear Engineering* (Orlando, USA, 2008).

[123] Theofanous, T. G., and Hanratty, T. J. Appendix 1 : Report on study group on flow regimes in multifluid flow. *International Journal of Multiphase Flow 29* (2003), 1061–1068.

[124] Tomiyama, A., Tamai, H., Zun, I., and Hosokawa, S. Transverse migration of single bubbles in simple shear flows. *Chemical Engineering Science 57* (2002), 1849–1858.

[125] Tran, M. L. *Modélisation Instationnaire de la Distribution Spatial des Phases dans les écoulements Diphasiques en Régime a Bulles.* PhD thesis, Université Lyon 1, 1997.

[126] Tryggvason, G., Scardovelli, R., and Zaleski, S. *Direct Numerical Simulation of Gas-Liquid multiphase flows.* Cambridge University Press, 2011.

[127] Tsuchiya, K., Ohsaki, K., and Taguchi, K. Large and small bubble interaction patterns in a bubble column. *International Journal of Multiphase Flow 22* (1996), 121–132.

[128] Unverdi, S. O., and Tryggvason, G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics 100* (1992), 25–37.

[129] Ustinenko, V., Samigulin, M., Ioilev, A., Lo, S., Tentner, A., Lychagin, A., Girin, V., and Vanyukov, Y. Validation of cfd-bwr, a new two-phase computational fluid dynamics model for boiling water reactor analysis. *Nuclear Engineering and Design 238* (2008), 660–670.

[130] van Driest, E. R. On turbulent flow near a wall. *Journal of Aeronautic Sciences 23* (1956).

[131] van Sint Annaland, M., Deen, N. G., and Kuipers, J. A. M. Numerical simulation of gas bubbles behaviour using a three-dimensional volume of fluid method. *Chemical Engineering Science 60* (2005), 2999–3011.

[132] Vincent, S., Balmigère, G., Caltagirone, J.-P., and Meillot, E. Eulerian-Lagrangian multiscale methods for solving scalar equations - Application to incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics 229* (2010), 73–106.

[133] Vincent, S., Caltagirone, J.-P., Lubin, P., and Randrianarivelo, T. N. An adaptative augmented lagrangian method for three-dimensional multimaterial flows. *Computers and Fluids 33* (2004), 1273–1289.

[134] Vincent, S., Larocque, J., Lacanette, D., Toutant, A., Lubin, P., and Sagaut, P. Numerical simulation of phase separation and a priori two-phase LES filtering. *Computers & Fluids 37* (2008), 898–906.

[135] Štrubelj, L. *Numerical simulations of stratified two-phase flows with two-fluid model and interface sharpening.* PhD thesis, University of Ljublana, 2009.

[136] Weisman, J., and Kang, S. Y. Flow pattern transitions in vertical and upwardly inclined lines. *International Journal of Multiphase Flow 7* (1981), 271–291.

[137] Whitaker, S. *The Method of Volume Averaging.* Theory and Applications of Transport in Porous Media, Vol. 13. Springer, 1999.

[138] Zhu, Y., Oguz, H., and Prosperetti, A. On the mechanism of air entrainment by liquid jets at a free surface. *Journal of Fluid Mechanics 404* (2000), 151–177.

[139] Zuber, N. On the dispersed two-phases flow in the laminar flow regime. *Chemical Engineering Science 19* (1964).

[140] Zuber, N., and Findlay, J. A. Average volumetric concentration in two-phase flow systems. *Journal of Heat Transfer 87* (1965).

[141] Zuzio, D., and Estivalezes, J.-L. An efficient block parallel AMR method for two-phase interfacial flow simulations.