



HAL
open science

Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphases pour la microfluidique

Guillaume Prigent

► **To cite this version:**

Guillaume Prigent. Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphases pour la microfluidique. Autre [cond-mat.other]. Université Paris Sud - Paris XI, 2013. Français. NNT : 2013PA112009 . tel-01059794

HAL Id: tel-01059794

<https://theses.hal.science/tel-01059794>

Submitted on 2 Sep 2014

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 de DOCTORAT

préparée au LIMSI

ÉCOLE DOCTORALE : MIPEGE

présentée par

Guillaume PRIGENT

pour obtenir

le grade de DOCTEUR de l'Université Paris-Sud

Discipline : PHYSIQUE

MODÉLISATION ET SIMULATION NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENTS DIPHASIQUES POUR LA MICROFLUIDIQUE

Soutenue le 24 janvier 2013 devant la Commission d'Examen

Composition du jury :

Directeur de thèse :	Patrick Le Quéré	Directeur de recherche (CNRS - LIMSI)
Co-directrice de thèse :	Marie-Christine Duluc	Maître de conférences (CNAM - LIMSI)
Présidente du jury :	Caroline Nore	Professeur des universités (LIMSI CNRS - Paris-Sud)
Rapporteurs :	Guy Lauriat	Professeur des universités (UPEMLV - MSME)
	Stéphane Vincent	Maître de conférences (ENSCP - TREFLE)
Examineur :	Stéphane Dellacherie	Chercheur (CEA Saclay - LMEC)

à ma famille

Remerciements

Je tiens à remercier en premier lieu mes directeurs de thèse, Patrick Le Quéré et Marie-Christine Duluc d'avoir accepté d'encadrer et de suivre ma thèse. Je les remercie pour leur disponibilité, pour leur implication, ainsi que pour les nombreuses discussions fructueuses que l'on a pu échanger lors des réunions de travail. Ce fut gratifiant et un réel plaisir de travailler avec eux.

Je tiens particulièrement à remercier Patrick Le Quéré pour tout l'apport scientifique qu'il a su me transmettre, pour la gestion de la thèse, ainsi que pour les discussions et les échanges de points de vue que j'ai beaucoup apprécié.

Je souhaite également associer à mes remerciements Marie-Christine Duluc pour les nombreuses discussions scientifiques que l'on a pu avoir et pour son implication dans le suivi de la thèse.

Je remercie Caroline Nore, Guy Lauriat, Stéphane Dellacherie et Stéphane Vincent d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Je remercie le jury pour l'intérêt qu'il a porté à mes travaux de thèse, ainsi que pour les remarques et les questions pertinentes qui ont été formulées lors de la soutenance et dans les rapports.

Je souhaite également remercier le personnel du LIMSI. Je pense particulièrement au service informatique, aux bibliothécaires, aux secrétariats de la direction et du groupe mécanique, qui ont tous contribué à ce que la thèse puisse être menée dans de bonnes conditions. J'ai également une pensée spéciale pour les nombreux collègues avec qui j'ai eu le plaisir de partager le bureau. Leur bonne humeur et les nombreuses discussions partagées sur des sujets divers et variés resteront un excellent souvenir.

Je suis également reconnaissant envers l'état français et l'université Paris-Sud pour l'allocation de thèse dont j'ai bénéficié durant ces 3 années de thèse.

J'ai également eu l'opportunité d'enseigner à l'IUT d'Orsay durant les 3 années de doctorat. Ce fut une expérience riche et enrichissante durant laquelle j'ai eu l'occasion de collaborer avec des collègues que j'apprécie beaucoup.

J'ai évidemment une pensée très particulière pour ma famille, pour tout mes proches et pour la plus belle découverte de ma thèse. Je tiens à les remercier pour leur soutien indéfectible et j'aimerais ajouter qu'ils comptent beaucoup pour moi. Je leur dédie cette thèse.

Table des matières

1	Introduction	9
1.1	Contexte	10
1.2	Objectifs de la thèse	13
1.3	Plan de la thèse	14
2	Modélisation physique	15
2.1	Rappel des équations diphasiques	16
2.1.1	Forme intégrale des équations diphasiques	16
2.1.2	Équations phasiques	18
2.1.3	Équations de saut	19
2.2	Approximation faible Mach	21
2.2.1	Introduction	21
2.2.2	Adimensionnement	22
2.2.3	Développement asymptotique	23
2.2.4	Système d'équations faible Mach	23
3	Traitement de l'interface	28
3.1	Principales méthodes de traitement d'interface	29
3.1.1	Méthodes eulériennes	30
3.1.2	Méthodes lagrangiennes	38
3.1.3	Méthode de frontière immergée	41
3.1.4	Méthode de front-tracking	42
3.2	Choix de modélisation et de la méthode de traitement d'interface	49
3.2.1	Évaluation de la pression thermodynamique et de la divergence de la vitesse dans le gaz	51
3.2.2	Fonction indicatrice de phase élargie H^{ext}	52
4	Étapes préliminaires de vérification du code diphasique	54
4.1	Modèle à un fluide incompressible-faible Mach sans front-tracking	55
4.2	Modèle à un fluide incompressible-faible Mach avec front-tracking (confi- guration isotherme)	58

5	Développement du code diphasique incompressible-faible Mach avec équation de l'énergie	60
5.1	Modèle incompressible-faible Mach avec front-tracking sans déplacement de l'interface	61
5.1.1	Cas tests de vérification de l'implémentation de l'équation de l'énergie	61
5.1.2	Fonction indicatrice de phase échelon H_{ech}	75
5.2	Modèle incompressible-faible Mach avec front-tracking et déplacement de l'interface	87
5.2.1	Dilatation isobare d'une bulle	87
5.2.2	Fonction indicatrice de phase échelon H_{ech} avec seuil adaptatif	91
5.2.3	Advection isochore d'une bulle	101
5.2.4	Advection isobare avec dilatation d'une bulle	109
5.3	Tableau récapitulatif des configurations traitées	114
6	Conclusion générale et perspectives	116
	Bibliographie	119
A	Annexes	126
A.1	Méthodes numériques	127
A.2	Discretisation en espace des équations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement	129
A.3	Conditions aux limites	132
A.4	Continuité des contraintes	133

Liste des tableaux

5.1	Tableau comparatif : résultats obtenus avec le front-tracking standard H^{ft} et résultats obtenus avec H_{ech} ($\alpha_{liq} = \alpha_{gaz}$)	83
5.2	Résultats numériques comparés à la théorie pour l'état stationnaire	85
5.3	Tableau comparatif : résultats obtenus avec la méthode de front-tracking standard H^{ft} et résultats obtenus avec H_{ech} ($k_{liq} = k_{gaz}$)	86
5.4	Tableau comparatifs : résultats obtenus avec H_{ech} et un seuil fixe de $s = 0,5$ et résultats obtenus avec H_{ech} et un seuil adaptatif	99
5.5	Tableau récapitulatif des cas tests simulés	115

Table des figures

3.1	Méthode VOF (Hirt and Nichols), SLIC, PLIC (Youngs) [59]	33
3.2	Méthode ghost fluid [64]	36
3.3	Exemple de maillage distordu [22]	38
3.4	Exemple de maillage orthogonal (Magnaudet et al, cité dans [60])	38
3.5	Redéfinition des cellules coupées par l'interface [74]	39
3.6	Interface lagrangienne et lissage de l'interface sur le maillage fixe eulérien	43
3.7	Structure du front [67]	43
3.8	Représentation de la fonction δ [48]	45
4.1	Évolution de la pression thermodynamique dans la bulle au cours du temps	56
4.2	Évolution de la masse de gaz au cours du temps	56
4.3	Champ de température et de vitesse à $t = 1,5$ ms, maillage 256×256	57
4.4	Fonction indicatrice de phase dans le cas test sur les courants parasites [61]	59
4.5	Courants parasites engendrés en utilisant un modèle à un fluide incompressible/faible Mach [61]	59
5.1	Évolution de la pression thermodynamique dans la bulle au cours du temps avec la version du code utilisant le front-tracking	62
5.2	Évolution de la surface de la bulle au cours du temps avec la version du code utilisant le front-tracking	62
5.3	Évolution de la masse de la bulle au cours du temps avec la version du code utilisant le front-tracking	62
5.4	Évolution de la pression thermodynamique dans la bulle en utilisant le front-tracking	65
5.5	Erreur sur la conservation de la masse en utilisant le front-tracking	65
5.6	Surface de la bulle en utilisant le front-tracking	66
5.7	Vitesse de déplacement du centre de masse (selon $O\vec{x}$) de la bulle en utilisant le front-tracking	66
5.8	Vitesse de déplacement du centre de masse (selon $O\vec{y}$) de la bulle en utilisant le front-tracking	66
5.9	Évolution de la pression thermodynamique dans la bulle en utilisant le front-tracking	70
5.10	Erreur sur la conservation de la masse en utilisant le front-tracking	70

5.11	Surface de la bulle en utilisant le front-tracking	70
5.12	Flux en $x = 4L/10$	71
5.13	Flux en $x = 6L/10$	71
5.14	Flux en $x = L/4$ (liquide) avec et sans prise en compte de $\vec{u} \cdot \nabla T$, maillage 64×64	71
5.15	Flux en $x = 3L/4$ (liquide) avec et sans prise en compte de $\vec{u} \cdot \nabla T$, maillage 64×64	71
5.16	Flux en $x = 4L/10$ (liquide-gaz) avec et sans prise en compte de $\vec{u} \cdot \nabla T$, maillage 64×64	72
5.17	Flux en $x = 6L/4$ (liquide-gaz) avec et sans prise en compte de $\vec{u} \cdot \nabla T$, maillage 64×64	72
5.18	Vitesse du centre de masse de la bulle selon $O\vec{x}$ obtenue en utilisant le front-tracking	72
5.19	Vitesse du centre de masse de la bulle selon $O\vec{y}$ obtenue en utilisant le front-tracking	72
5.20	77
5.21	Évolution de la pression thermodynamique dans le gaz au cours du temps	81
5.22	Conservation de la masse du gaz au cours du temps	81
5.23	Comparaison du flux de chaleur obtenu par calcul en utilisant H_{ech} avec le flux de chaleur théorique pour la section de la cavité située en $x = L/4$	81
5.24	Comparaison du flux de chaleur obtenu par calcul en utilisant H_{ech} avec le flux de chaleur théorique pour la section de la cavité située en $x = 3L/4$	81
5.25	Comparaison du flux de chaleur obtenu par calcul en utilisant H_{ech} avec le flux de chaleur théorique pour la section de la cavité située en $x = 4L/10$	82
5.26	Comparaison du flux de chaleur obtenu par calcul en utilisant H_{ech} avec le flux de chaleur théorique pour la section de la cavité située en $x = 6L/10$	82
5.27	Vitesse du centre de masse de la bulle selon $O\vec{x}$ obtenue en utilisant H_{ech}	82
5.28	Vitesse du centre de masse de la bulle selon $O\vec{y}$ obtenue en utilisant H_{ech}	82
5.29	Évolution de la pression thermodynamique dans la bulle en utilisant une fonction indicatrice de phase échelon	84
5.30	Erreur sur la conservation de la masse en utilisant une fonction indicatrice de phase échelon	84
5.31	Vitesse du centre de masse le bulle selon $O\vec{x}$ pour les calculs utilisant H_{ech}	84
5.32	Champ de température à $t = 4.10^{-4}s$ lorsque H_{ech} est utilisé	85
5.33	Champ de vitesse à $t = 4.10^{-4}s$ lorsque H_{ech} est utilisé	85
5.34	Erreur sur la conservation de la masse lorsque un seuil fixe $s = 0.5$ est utilisé	90
5.35	Évolution de la surface de la bulle au cours du temps lorsque un seuil fixe $s = 0.5$ est utilisé	90
5.36	Erreur sur la conservation de la masse en fonction des valeurs du seuil pour plusieurs maillages (sur un pas de temps)	92

5.37	Seuil obtenu à l'issue de la procédure de recherche de seuil (zoom), cas <i>Cavité ouverte chauffée</i>	94
5.38	Nombre d'itérations réalisées dans la procédure de recherche de seuil (zoom), cas <i>Cavité ouverte chauffée</i>	94
5.39	Seuil obtenu à l'issue de la procédure de recherche de seuil durant l'intégralité de la simulation, maillage 64×64	94
5.40	Erreur sur la conservation de la masse avec valeur de seuil adaptative pour plusieurs maillages : 32×32 ; 64×64 et 128×128	95
5.41	Évolution de la surface de la bulle au cours du temps : valeur de seuil adaptative vs front-tracking (maillage 64×64)	95
5.42	Champ de température à $t = 6.10^{-4} s$	96
5.43	Champ de vitesse à $t = 6.10^{-4} s$	96
5.44	Champ de température à $t = 1,7.10^{-3} s$	96
5.45	Champ de vitesse à $t = 1,7.10^{-3} s$	96
5.46	Profil de température à mi-hauteur de la cavité	97
5.47	Profil de température à $y = 0,65H = 65 \mu m$	97
5.48	Dérivée temporelle du volume de la bulle (surface en 2D)	97
5.49	Fonction indicatrice de phase échelon ajustée (maillage 50×50)	100
5.50	Courants parasites engendrés en utilisant un modèle monofluide incompressible-faible Mach et la fonction indicatrice de phase échelon ajustée (maillage 50×50)	100
5.51	Variation de la pression thermodynamique dans la bulle au cours du temps	102
5.52	Comportement de l'erreur sur la conservation de la masse au cours du temps	102
5.53	Comportement de l'erreur sur la conservation du volume (surface en 2D) au cours du temps	103
5.54	Champs instantanés de température et de vitesse à $t = 0,5 ms$ pour un maillage 96×192	104
5.55	Conditions de chauffage et évolution de la pression au cours du temps	105
5.56	Évolution de la pression thermodynamique au cours du temps	107
5.57	Champ de température à $t = 0,362 ms$	107
5.58	Champ de vitesse à $t = 0,362 ms$	107
5.59	Erreur sur la conservation de la masse avec un seuil fixe pour une bulle advectée dans un microcanal chauffé	108
5.60	Erreur sur la conservation de la masse avec un seuil adaptatif pour une bulle advectée dans un microcanal chauffé	108
5.61	Valeur du seuil s utilisée pour le calcul de H_{ech} en fonction du temps	109
5.62	Nombre d'itérations réalisées dans la procédure de recherche de seuil	109
5.63	Valeur du seuil s utilisée pour le calcul de H_{ech} en fonction du temps	111
5.64	Nombre d'itérations réalisées dans la procédure de recherche de seuil	111
5.65	Fonction indicatrice de phase à $10^{-3} s$	111

5.66	Champ de température à 10^{-3} s.	111
5.67	Volume (surface en 2D) de la bulle en fonction du temps.	112
5.68	Masse de la bulle en fonction du temps.	112
A.1	Maillage décalé	130

Liste des symboles

Lettres latines

A_i	Surface de discontinuité.
c_p	Capacité calorifique à pression constante.
\vec{F}	Force de tension superficielle.
H_{ft}	Fonction de Heaviside lisse.
H_{ech}	Fonction de Heaviside échelon.
H^{ext}	Fonction de Heaviside élargie.
k	Conductivité thermique.
L	Longueur de la cavité.
m	Masse.
\bar{P}	Pression thermodynamique.
q	Flux de chaleur.
q'	Flux de chaleur linéique.
q''	Densité de flux de chaleur.
R	Rayon.
r	Constante des gaz parfaits.
s	Constante seuil.

S	Surface.
t	Temps.
T	Température.
\vec{u}	Vitesse.
V	Volume.
V_m	Volume matériel.

Lettres grecques

α	Diffusivité thermique.
γ	Coefficient isentropique.
δ_h	Fonction de Dirac discrète.
κ	Courbure.
μ	Viscosité dynamique.
π	Pression dynamique.
ρ	Masse volumique.
σ	Tension superficielle.
$\bar{\bar{\tau}}$	Tenseur de viscosité.

Indices

0	Relatif aux conditions initiales.
b	Relatif à la bulle.
f	Relatif à l'état final.
gaz	Relatif au gaz.
i	Relatif à l'interface.
liq	Relatif au liquide.
th	Relatif à la théorie.

Chapitre 1

Introduction

1.1 Contexte

Pour satisfaire à la fois des contraintes de poids et d'espace, les recherches et développements de haute technologie s'intéressent fortement aux systèmes miniaturisés, ceci dans un contexte où l'emploi de fortes densités de puissance est une nécessité pour certaines applications. Il est alors indispensable de développer des stratégies et des technologies innovantes, afin de permettre l'extraction de densités de flux de chaleur importantes.

En effet, les systèmes miniaturisés à haute densité de puissance peuvent, durant leur fonctionnement, générer des densités de flux thermiques considérables qui doivent impérativement être évacuées. Cela pour éviter la surchauffe des composants des systèmes, qui peut entraîner une chute de performance, voire la destruction des systèmes.

Ces densités de flux chaleur substantielles, produites pendant le fonctionnement des systèmes, peuvent atteindre différents ordres de grandeurs. En outre, elles varient de quelques $W.cm^{-2}$, avec par exemple $2 W.cm^{-2}$ pour les piles à combustibles [80], jusqu'à des densités de flux ultra hautes de l'ordre de $2,5 kW.cm^{-2}$ pour les lasers à haute puissance, ou les cibles dans les accélérateurs de particules par exemple, en passant par des densités de flux de l'ordre de $100 W.cm^{-2}$ pour la micro-électronique [37].

Pour de tels systèmes, l'évacuation de la chaleur constitue un facteur limitant de développement et d'application. C'est pourquoi, la gestion thermique des microsystèmes à haute densité de flux fait l'objet de nombreux travaux de recherche. Ces travaux ont abouti au développement de nouvelles technologies et stratégies concernant l'extraction de densités de flux importantes. Parmi les solutions proposées, on peut notamment citer l'utilisation de jets avec une densité de flux atteinte de $40 kW.cm^{-2}$ [32], de pulvérisations qui permettent d'obtenir une densité de flux de $1,2 kW.cm^{-2}$ [45] ainsi que l'emploi de microéchangeurs de chaleur compacts composés de microcanaux. Les performances atteintes sont sans commune mesure avec les résultats obtenus en utilisant les technologies traditionnelles de convection monophasique.

Parmi ces solutions, les microéchangeurs de chaleur compacts composés de microcanaux ont l'avantage de fournir un rapport surface/volume important qui augmente le transfert de chaleur et de masse pour un encombrement réduit. L'extraction d'une densité de flux de chaleur de $27,6 kW.cm^{-2}$ a été obtenue par Mudawar et Bowers [37] en 1999, à l'aide d'un écoulement avec ébullition au sein de microcanaux verticaux ($D < 1 mm$) utilisant comme fluide de travail de l'eau injectée avec un débit massique important ($> 40\,000 kg.m^{-2}.s^{-1}$). Le refroidissement par changement de phase au sein d'échangeurs compacts constitués de microcanaux apparaît donc comme une solution très prometteuse.

Cette technologie fait toujours l'objet de nombreuses recherches portant sur l'augmentation des flux de chaleur pouvant être évacués. Ces recherches prennent plusieurs formes, expérimentales, numériques et théoriques (voir [25]). Toutefois, de récents états de l'art établies par Kandlikar [25] et Murthy [40], soulignent que la modélisation du transitoire durant l'ébullition reste un challenge important à relever. Au vu des échelles d'espace et de temps mises en jeu, la simulation numérique apparaît comme un outil nécessaire et complémentaire à l'expérience pour mieux comprendre les phénomènes impliqués dans de tels écoulements. En effet, c'est un outil qui permet d'avoir accès à un certain nombre de grandeurs qui peuvent être difficiles à mesurer dans l'expérience (pression, vitesse, température). Bien qu'elle ne puisse se substituer à l'expérience, la simulation numérique peut procurer des éléments permettant d'améliorer le développement de modèles. De plus, la simulation d'écoulements diphasiques liquide vapeur avec changement de phase, est également très importante pour les industriels. Elle permet de lancer des calculs prédictifs et aide à la prise de décision dans les bureaux R&D, notamment pour le dimensionnement des systèmes.

La plupart des modèles utilisés actuellement considèrent des phases incompressibles. Or, lorsqu'il existe un rapport de masse volumique substantiel entre les différentes phases, ou lorsque les gradients de température mis en jeu sont élevés, et de façon générale pour les problèmes où les effets de compressibilité du gaz sont importants, ces modèles ne sont pas adaptés pour décrire correctement la physique.

Des modèles compressibles ont été développés, mais ils requièrent la définition d'une équation d'état pour chaque phase. De plus, la différence de vitesse de propagation du son qui existe entre les différents milieux engendre des contraintes sévères sur le pas de temps, qui peuvent être pénalisantes, et qui peuvent rendre les méthodes de résolution utilisées inefficaces (voir par ailleurs §2.2). C'est la raison pour laquelle cette thèse a été orientée vers la modélisation et la simulation numérique d'écoulements diphasiques avec transfert de chaleur, comprenant un liquide incompressible et un gaz compressible.

Les travaux qui, dans le même esprit, proposent une modélisation simultanée d'une phase liquide incompressible et d'une phase gazeuse compressible sont peu nombreux. On peut toutefois citer les travaux de Caiden et al. [5] qui utilisent une méthode level-set pour le suivi de l'interface et la localisation des zones compressibles et incompressibles, couplée à la méthode ghost fluid pour imposer les conditions aux limites à l'interface. Cependant, dans cette étude, la difficulté du couplage à l'interface est esquivée en ne considérant pas de couplage en énergie (conductivité thermique négligée). Le couplage visqueux n'est pas non plus pris en compte (fluide compressible non visqueux). Hao et Prosperetti [20] combinent le front-tracking et la méthode ghost fluid pour décrire une bulle de gaz compressible au sein d'un liquide incompressible dans un code 3D. Cependant, les tests de validation présentés sont uniquement isothermes, et l'équation

de l'énergie n'est donc pas prise en compte. Le travail de Caltagirone et al [6] propose un modèle à un fluide permettant de décrire les aspects incompressibles ou compressibles d'un écoulement diphasique. Ce modèle est obtenu à partir d'un modèle à un fluide incompressible en introduisant des termes supplémentaires transcrivant les effets de compressibilité des phases. En outre, des termes traduisant l'évolution de la pression sont introduits dans l'équation de quantité de mouvement, et l'équation de l'énergie est reformulée pour faire apparaître un terme de divergence qui réalise le couplage avec la conservation de la masse compressible. Bien que le modèle autorise la prise en compte de rapports importants de masse volumique (10^7) et de viscosité (10^{12}), seuls des cas tests isothermes sont présentés dans [6]. Dellacherie [13] propose l'établissement d'un système diphasique faible Mach (DLMN) pour modéliser les écoulements diphasiques sans changement de phase à bas Mach. Ce système est obtenu sous certaines hypothèses, en filtrant l'acoustique du système d'équations compressibles diphasiques via un développement asymptotique des variables avec le nombre de Mach comme petit paramètre. Ce système d'équations permet de simuler la compression et la dilatation d'une bulle. Cependant, les cas tests de vérification qui ont été menés sont à une dimension d'espace. Dellacherie [14] propose également l'application du DLMN sous l'hypothèse d'un champ de vitesse potentiel pour des configurations à 2 dimensions d'espace. Dans ce travail schéma anti-dissipatif initialement proposé par Després and Lagoutière [15] est utilisé pour contrôler la diffusion de l'interface (fonction de Heaviside) lors de son advection. Il en résulte une zone de mélange correspondant à la diffusion de l'interface sur une cellule. Le DLMN est alors étendu au cas de mélange pour pouvoir correctement traiter la zone de mélange imposé par la diffusion de l'interface. La méthode est utilisée pour traiter la dilatation d'une et de six bulles. On peut également mentionner l'étude de Boger et al [3] qui proposent l'extension de la méthode multi-pressure-variables (MPV) aux écoulements multiphasiques. La méthode MPV permet de simuler toute une gamme d'écoulements à divers nombres de Mach avec le même modèle. Pour illustrer les capacités du code, les équations d'Euler sont résolues dans un cas test 1D. Enfin, un code a été développé au LIMSI, permettant la simulation anisotherme d'écoulements liquide gaz pour des configurations 1D et 2D [9]. Il apparaît ainsi que les modèles proposés jusqu'à présent décrivant un liquide incompressible et un gaz compressible sont, en dehors des travaux de Daru et al [9] et de Dellacherie [14], soit appliqués à des cas 2D ou 3D isothermes ([5], [20], [6]), soit appliqués à des cas anisothermes mais à une dimension d'espace ([13], [3]).

Dans ce contexte, mon travail de thèse se positionne sur la poursuite du développement de code du LIMSI, afin d'obtenir un outil numérique fiable et performant permettant la description et l'analyse physique d'écoulements diphasiques mettant en jeu des transferts de chaleur et l'utilisation des effets de compressibilité du gaz pour un éventail de configurations plus large, l'un des principaux objectifs à terme étant la simulation d'écoulements diphasiques avec changement de phase en microcanaux.

À ce titre, la description compressible du gaz doit permettre l'accès à la pression thermodynamique qui représente une première étape nécessaire pour envisager la simulation du changement de phase. Outre ce premier objectif, la prise en compte des effets de compressibilité du gaz ouvre un champ d'applications telles que la simulation de micropompes pilotées par le transfert de chaleur comme celles développées par Yin et Prosperetti [77], l'amélioration du mélange par le contrôle d'écoulements induits par micropompes à une jonction en Y [76]; ou encore par utilisation d'une micropompe pour agiter et générer un écoulement oscillatoire, afin d'induire une interface ondulée et ainsi augmenter la surface de contact de mélange entre les fluides au sein d'un microcanal [68].

Tous ces dispositifs peuvent trouver des applications concrètes notamment en biotechnologie et en chimie, comme par exemple pour le contrôle de la distribution de nano-médicaments avec concentration médicamenteuse optimale maîtrisée à l'aide d'un chauffage du microcanal [28] ou encore pour le contrôle et la génération de gradients de température dans les microcanaux composant le Laboratoire sur puce (LOC) utilisé pour l'hybridation de l'ADN [16]. On trouve également des applications dans le refroidissement de systèmes électroniques [69] et de piles à combustibles [80], ou encore dans la conception de microactionneurs sans déplacement de pièces mécaniques [77]. De façon générale, les microcanaux, les micropompes, les échangeurs de chaleur, et les dispositifs de mélange, sont des éléments qui constituent les MEMS (microsystèmes électromécaniques) et les laboratoires sur puce (LOC).

1.2 Objectifs de la thèse

Cette thèse a comme objectif le développement d'un outil numérique permettant la simulation et l'analyse physique d'écoulements multiphasiques liquide-gaz au sein de microstructures. Ces écoulements doivent, en outre, pouvoir mettre en jeu des transferts de chaleur, et prendre en compte les effets de compressibilité de la phase gazeuse.

Pour commencer, une première phase nécessaire d'appropriation des précédents travaux menés au laboratoire (notamment [9] [24]), doit être réalisée via la construction et la vérification d'un code diphasique utilisant des éléments développés au laboratoire.

À l'issue de cette phase préliminaire, le cœur de la thèse doit consister à poursuivre et approfondir la procédure de vérification du code, avec le développement et le traitement de cas tests supplémentaires de complexité croissante. Après analyse des résultats de simulation, si nécessaire, des améliorations et/ou modifications du code doivent être apportées afin d'accroître la précision des résultats et la fiabilité de l'outil numérique. Le développement du code doit permettre d'atteindre un stade de développement qui rende possible la simulation de configurations idéalisées requérant la prise en compte

du transfert de chaleur ainsi que des effets de compressibilité du gaz. Ces configurations seront néanmoins proches d'applications réelles (voir §1.1).

1.3 Plan de la thèse

La modélisation d'écoulements diphasiques requiert plusieurs éléments : un modèle ainsi qu'une méthode de traitement d'interface.

Le premier chapitre est dédié à la modélisation. On commencera par rappeler les équations qui gouvernent l'évolution des écoulements diphasiques, ainsi que les relations de saut qui doivent être respectées à l'interface. Puis nous introduirons l'approximation faible Mach qui sera utilisée pour modéliser la phase gazeuse. Cette approximation permettra par la suite la prise en compte des effets de compressibilité du gaz.

Dans le chapitre suivant, on présentera les principales méthodes de traitement d'interface qui sont le plus couramment utilisées, et on mentionnera leurs principaux avantages et inconvénients, afin de motiver le choix de la méthode de traitement d'interface qui sera utilisée par la suite. À la fin de ce chapitre, on indiquera les choix qui ont été retenus pour la modélisation de l'écoulement, ainsi que la méthode qui a été choisie pour le traitement d'interface.

Le chapitres 4 et 5 présentent le code diphasique développé dans le cadre de la thèse. L'ordre de présentation des chapitres et des cas tests traités, correspond à la démarche méthodologique qui a été suivie pour atteindre les objectifs fixés. On présentera tout d'abord, les étapes préliminaires qui ont permis l'appropriation de codes monophasiques et diphasiques existant au LIMSI, ainsi que les diverses méthodes numériques qui sont utilisées. Dans un second temps, de nouveaux cas tests seront définis dans le but de vérifier l'implémentation de l'équation de l'énergie. Ces cas tests, d'une complexité croissante, sont spécialement développés pour vérifier la conservation de l'énergie. Les résultats de ces simulations permettront d'identifier un certain nombre de difficultés liées au lissage de l'interface. Après analyse des résultats, les améliorations apportées au code pour remédier à ces problèmes, seront présentées. Enfin, on cherchera à tester le code dans des cas tests qui tendent à se rapprocher de configurations qui ont un intérêt applicatif (voir §1.1).

Enfin, ce document s'achève avec la conclusion générale dans laquelle on présentera les perspectives de recherche qui s'offrent à l'issue de ce travail de thèse.

Chapitre 2

Modélisation physique

2.1 Rappel des équations diphasiques

Dans ce chapitre les équations régissant l'évolution des écoulements diphasiques sont rappelées. Pour les démonstrations et plus de détails, le lecteur peut se référer à l'article de Delhayé [12]. L'établissement des équations locales diphasiques s'obtient de façon similaire aux équations monophasiques. Les principes de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sont appliqués à un volume matériel $V_m(t) = V_{m_1}(t) \cup V_{m_2}(t)$ comprenant une interface $A_i(t)$ considérée comme une surface de discontinuité des différentes variables. Les volumes $V_{m_1}(t)$ et $V_{m_2}(t)$ sont délimités respectivement par les surfaces $S_1(t)$ et $S_2(t)$.

On rappelle tout d'abord la forme intégrale des équations diphasiques. Les intégrales de volume donneront les équations phasiques valables en tout point de chaque phase, tandis que les intégrales de surface fournissent les relations de saut exprimant l'équilibre à l'interface [12].

2.1.1 Forme intégrale des équations diphasiques

2.1.1.1 Conservation de la masse

$$\begin{aligned}
 & \sum_{k=1,2} \left[\int_{V_{m_k}(t)} \left(\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k) \right) dV \right] \\
 & + \int_{A_i(t)} \left(\frac{d\rho_i}{dt} + \rho_i \nabla_s \cdot \vec{u}_i \right) dS + \sum_{k=1,2} \left[\int_{A_i(t)} (\rho_k (\vec{u}_i - \vec{u}_k) \cdot \vec{n}_k) dS \right] \quad (2.1) \\
 & \qquad \qquad \qquad = \\
 & \qquad \qquad \qquad 0
 \end{aligned}$$

avec ρ_k , \vec{u}_k respectivement la masse volumique et la vitesse des phases $k = 1, 2$, ρ_i et \vec{u}_i respectivement la masse volumique et la vitesse de l'interface, $\nabla_s = \nabla - \vec{n}_i (\vec{n}_i \cdot \nabla)$ représente le gradient s'exerçant sur une surface [1].

2.1.1.2 Conservation de la quantité de mouvement

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1,2} \left[\int_{V_{m_k}(t)} \left(\frac{\partial \rho_k \vec{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k) \right) dV + \int_{A_i(t)} (\rho_k \vec{u}_k (\vec{u}_i - \vec{u}_k) \cdot \vec{n}_k) dS \right] \\
+ \int_{A_i(t)} \left(\frac{d\rho_i \vec{u}_i}{dt} + \rho_i \vec{u}_i \nabla \cdot \vec{u}_i \right) dS \\
= \\
\sum_{k=1,2} \left[\int_{V_{m_k}(t)} \rho_k \vec{F}_k dV + \int_{S_k(t)} \vec{n}_k \cdot \overline{\overline{T}}_k dS \right] \\
+ \int_{A_i(t)} \rho_i \vec{F}_i dS + \oint_{\partial A_i(t)} \sigma \vec{N} dl
\end{aligned} \tag{2.2}$$

avec le scalaire σ représentant la tension superficielle, et \vec{N} le vecteur normal unitaire sortant appliqué en un point appartenant à la courbe ∂A_i délimitant la surface de discontinuité $A_i(t)$. \vec{F} représente les forces extérieures s'appliquant aux volumes $V_1(t)$ et $V_2(t)$ ainsi qu'à la surface $A_i(t)$. Le tenseur des contraintes $\overline{\overline{T}}_k$ s'exerçant sur les surfaces est donné par la relation $\overline{\overline{T}}_k = -p\overline{\overline{I}} + \overline{\overline{\tau}}$ se décomposant classiquement en un terme de pression $p\overline{\overline{I}}$ et le tenseur de viscosité $\overline{\overline{\tau}}$. Dans notre cas on s'intéressera aux fluides newtoniens et on admettra l'hypothèse de Stokes. Par conséquent le tenseur de viscosité a la forme suivante :

$$\overline{\overline{\tau}} = \mu \left[\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^t - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{u}) \overline{\overline{I}} \right] \tag{2.3}$$

avec $\nabla \cdot \vec{u} = 0$ dans le liquide.

2.1.1.3 Conservation de l'énergie totale $e = \rho e_{int} + \frac{1}{2} \rho \vec{u}^2$

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1,2} \left[\int_{V_{m_k}(t)} \left(\frac{\partial e_k}{\partial t} + \nabla \cdot (e_k \vec{u}_k) \right) dV + \int_{A_i(t)} (e_k (\vec{u}_i - \vec{u}_k) \cdot \vec{n}_k) dS \right] \\
+ \int_{A_i(t)} \left(\frac{de_i}{dt} + e_i \nabla_s \cdot \vec{u}_i \right) dS \\
= \\
\sum_{k=1,2} \left[\int_{V_{m_k}(t)} \underbrace{\rho_k \vec{F}_k \cdot \vec{u}_k}_I dV + \int_{S_k(t)} \underbrace{\left(\overline{\overline{T}}_k \cdot \vec{n}_k \right) \cdot \vec{u}_k - \vec{q}_k \cdot \vec{n}_k}_{III} dS \right] \\
+ \int_{A_i(t)} \underbrace{\left(\rho_i \vec{F}_i \cdot \vec{u}_p \right)}_{II} dS + \oint_{\partial A_i} \left(\sigma \vec{u}_p \cdot \vec{N} - \vec{q}_i \cdot \vec{N} \right) dl
\end{aligned} \tag{2.4}$$

avec \vec{u}_p définie par

$$\vec{u}_p = (\vec{u}_i \cdot \vec{n}_k) \vec{n}_k + \vec{u}_t \quad (2.5)$$

la composante normale $\vec{u}_i \cdot \vec{n}_k$ est la vitesse de déplacement de l'interface et la composante tangentielle de \vec{u}_p notée \vec{u}_t est égale aux composantes tangentielles des vitesses du fluide (dans [12] les composantes de vitesse tangentielles sont supposées continues $\vec{u}_1^t = \vec{u}_2^t$). Les termes I et II traduisent la puissance des forces extérieures exercée respectivement sur $V_{m_k}(t)$ et $A_i(t)$, tandis que le terme III représente la puissance exercée par les forces de surface sur $S_k(t)$. Les termes $\oint_{\partial A_i} \vec{q}_i \cdot \vec{N} dl$ ainsi que $\int_{S_k(t)} \vec{q}_k \cdot \vec{n}_k dS$ traduisent l'apport de chaleur par conduction thermique.

À partir de ces relations intégrales sont déduites les équations locales phasiques valables dans chaque phase ainsi que les relations de saut régissant les équilibres à l'interface.

2.1.2 Équations phasiques

Les intégrales de volumes donnent les équations locales phasiques. Les équations phasiques, valables en tout point des phases sont les équations de Navier-Stokes classiques :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} + \rho \vec{F} + \int_{A_i(t)} \sigma \kappa \vec{n} \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) ds \\ \frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (e \vec{u}) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \nabla \cdot (\vec{u} \cdot \bar{\bar{T}}) + \rho \vec{F} \cdot \vec{u} \end{cases} \quad (2.6)$$

avec κ égale à deux fois la courbure moyenne, et δ la fonction de Dirac non nulle lorsque $\vec{x} = \vec{x}_i$.

L'équation de conservation de l'énergie pour des écoulements compressibles peut s'écrire sous d'autres formes. Nous utiliserons l'équation de conservation de l'énergie sous forme enthalpique faisant intervenir la température

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c_p T \vec{u}) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \beta T \frac{DP}{Dt} + \nabla \vec{u} : \bar{\bar{\tau}} \quad (2.7)$$

avec c_p la chaleur massique à pression constante, k la conductivité thermique et le coefficient thermoélastique de dilatation isobare $\beta = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_p$ caractérisant la variation relative de la masse volumique sous l'action de la température à pression constante. Par la suite nous considérerons des gaz parfaits ($\beta = 1/T$). L'équation (2.7) se réduit alors à

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c_p T \vec{u}) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \frac{DP}{Dt} + \nabla \vec{u} : \bar{\bar{\tau}} \quad (2.8)$$

2.1.3 Équations de saut

Les relations de saut primaires sont obtenues à partir des principes de conservation et sont fournies par les termes apparaissant dans les intégrales de surface. Dans notre travail, nous considérerons une interface d'épaisseur nulle, la masse volumique de l'interface ρ_i est alors négligée. Dans ce cas, les relations de saut à l'interface se réduisent à :

2.1.3.1 Relation de saut sur la masse

$$\rho_1 (\vec{u}_1 - \vec{u}_i) \cdot \vec{n}_1 + \rho_2 (\vec{u}_2 - \vec{u}_i) \cdot \vec{n}_2 = 0 \quad (2.9)$$

Si on ne considère pas de changement de phase (pas de flux de masse à travers l'interface) alors

$$\rho_1 (\vec{u}_1 - \vec{u}_i) \cdot \vec{n}_1 = \rho_2 (\vec{u}_2 - \vec{u}_i) \cdot \vec{n}_2 = 0 \quad (2.10)$$

on en déduit la continuité de la composante normale de la vitesse à travers l'interface.

$$\vec{u}_1^n = \vec{u}_2^n = \vec{u}_i^n \quad (2.11)$$

2.1.3.2 Relation de saut sur la quantité de mouvement ;

Sans changement de phase on a $\dot{m}_k = 0$ et $\vec{n}_1 = -\vec{n}_2 = \vec{n}_i$, alors la relation de saut sur la quantité de mouvement se réduit à

$$-\bar{\bar{T}}_1 \cdot \vec{n} + \bar{\bar{T}}_2 \cdot \vec{n} = -\nabla_S \sigma + (\nabla_S \cdot \vec{n}) \sigma \vec{n} \quad (2.12)$$

en multipliant l'éq (2.12) par la normale à l'interface \vec{n}_i , on obtient

$$\underbrace{(p_1 - p_2)}_{\text{pression hydrostatique}} + \vec{n} \cdot (\bar{\bar{\tau}}_2 - \bar{\bar{\tau}}_1) \cdot \vec{n} = \underbrace{(\nabla_S \cdot \vec{n})}_{\text{courbure } \kappa} \sigma \quad (2.13)$$

qui se réduit à la relation de Laplace lorsque le fluide est au repos

$$\underbrace{(p_1 - p_2)}_{\text{pression hydrostatique}} = \underbrace{(\nabla_S \cdot \vec{n})}_{\text{courbure } \kappa} \sigma \quad (2.14)$$

En multipliant l'éq (2.12) par le vecteur tangent à l'interface \vec{t}_i , la relation (2.12) devient

$$\vec{t} \cdot (\bar{\bar{\tau}}_2 - \bar{\bar{\tau}}_1) \cdot \vec{n} = -\vec{t} \cdot \nabla_S \sigma \quad (2.15)$$

où l'on note que le membre de gauche ne contient pas de pression seulement des gradients de vitesse. On peut interpréter la relation (2.15) de la sorte : un gradient non nul (effet Marangoni) de tension superficielle pouvant résulter d'un gradient en température ou de composition chimique à l'interface induit nécessairement un mouvement. Dans nos études nous ne considérerons pas d'effet Marangoni thermique ou lié à la concentration.

2.1.3.3 Relation de saut sur l'énergie totale.

Après quelques modifications, la relation de saut sur l'énergie totale peut s'écrire sous la forme

$$\sum_{k=1,2} \left[\dot{m}_k \left(u_k + \frac{P_k}{\rho_k} + \frac{\vec{u}_k^2}{2} - \vec{u}_k \cdot \vec{u}_p \right) + \vec{q}_k \cdot \vec{n}_k - (\bar{\vec{r}}_k \cdot \vec{n}_k) \cdot (\vec{u}_k - \vec{u}_p) \right] = \rho_i \frac{d}{dt} (u_i) + \dot{m}_i \left(u_i - \frac{\vec{u}_p^2}{2} \right) + \nabla_S \cdot \vec{q}_i \quad (2.16)$$

Si l'on ne prend pas en compte le changement de phase (2.10), que l'on considère qu'il n'y a pas de flux de chaleur entrant à travers ∂A_i , que les vitesses normales à l'interface sont continues (2.11), et que la masse volumique de l'interface est négligeable, alors la relation de saut (2.16) projetée sur la normale à l'interface donne la continuité du flux de chaleur à travers l'interface

$$\sum_{k=1,2} [\vec{q}_k \cdot \vec{n}_k] = 0 \quad (2.17)$$

Les relations de saut sont importantes car elles fournissent les conditions aux limites à l'interface que le modèle choisi doit respecter.

2.2 Approximation faible Mach

On souhaite obtenir un modèle qui permette la prise en compte des effets de compressibilité du gaz mais sans avoir à simuler les phénomènes acoustiques. En effet, l'acoustique ne fait pas l'objet de nos études, et sa prise en compte est dans ce cas pénalisante en terme de performance de calcul (voir ci-dessous).

Les équations dites faible Mach que l'on utilisera, sont issues d'un développement asymptotique réalisé sur uniquement une échelle de temps et sur une échelle d'espace. Ces équations prennent en compte les effets de compressibilité avec des variations importantes de température et de masse volumique $\frac{-1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = \nabla \cdot \vec{u} \neq 0$ tandis que les phénomènes acoustiques sont filtrés des équations (voir plus loin 2.2.4.1 p26). Le filtrage de l'acoustique simplifie le système d'équations, et permet comme l'indiquent Paolucci [46] et Munz [39], d'effacer la limitation sur les pas de temps pour les méthodes explicites. Le filtrage donne également la possibilité d'améliorer les performances des méthodes implicites qui utilisent des procédures de relaxations itératives, la relaxation des grandes longueurs d'onde étant connue pour être un processus lent. En effet, si l'on considère les phénomènes acoustiques alors la contrainte CFL (Courant-Friedrich-Lewy) devient

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \max |c + \vec{u}| \leq 1 \quad (2.18)$$

ce qui est extrêmement pénalisant lorsque le nombre de Mach tend vers zéro pour les schémas temporels explicites, car l'onde acoustique ne doit pas franchir plus d'une cellule sur un pas de temps. Si les ondes acoustiques sont filtrées alors la contrainte CFL devient

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \max |\vec{u}| \leq 1 \quad (2.19)$$

et le pas de temps est alors limité à la vitesse maximum de l'écoulement et ce quel que soit le nombre de Mach, même lorsque celui-ci tend vers zéro.

2.2.1 Introduction

L'approximation faible Mach consiste à effectuer un développement asymptotique des équations compressibles en utilisant le nombre de Mach, caractérisant la compressibilité du fluide (avec le coefficient de dilatation isobare $\beta = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T}$), comme petit paramètre.

L'analyse asymptotique a, entre autres, été employée comme un outil permettant d'étudier des phénomènes physiques liés à la compressibilité du fluide opérant sur des échelles d'espaces et/ou temps différentes. En outre, Majda [34] utilise l'analyse asymptotique pour en dériver un système d'équations décrivant la combustion bas Mach mettant en jeu deux échelles d'espaces et une échelle de temps. Également, l'analyse asymptotique permet à Munz [39] d'étendre l'utilisation de schémas numériques résolvant des écoulements

incompressibles à des écoulements faiblement compressibles, alors que Klein [26] étend la validité de méthodes numériques valables pour des écoulements compressibles aux écoulements à faible nombre de Mach. Les développements réalisés par Klein [26] lui permettent ainsi de balayer des régimes d'écoulements à bas et importants nombres de Mach. Il applique ses méthodes aux problèmes de déflagration-détonation en combustion dans [26] et à la thermoacoustiques dans [27]. Meister [35], propose dans son travail la justification mathématique de l'analyse asymptotique réalisée par Klein [26]. On peut également citer le travail de Müller [38], qui tire de son analyse asymptotique des éléments permettant à la fois une meilleure compréhension mathématique des équations qui décrivent la physique et les mécanismes physiques mis en jeu lorsque le nombre de Mach tend vers zéro. Enfin, dans le domaine du diphasique, le développement d'un modèle diphasique faible Mach par Dellacherie [13][14] a rendu possible la simulation de la dilatation d'une et de six bulles.

2.2.2 Adimensionnement

Les équations sont adimensionnées pour faire apparaître les nombres adimensionnels qui quantifient l'importance des phénomènes physiques mis en jeu. Dans notre cas, on souhaite introduire le nombre de Mach, paramètre qui (avec β) caractérise la compressibilité.

2.2.2.1 Choix des grandeurs de référence

On choisit ρ_{ref} , T_{ref} , k_{ref} , μ_{ref} , $c_{p_{ref}}$ et la longueur du domaine physique L_{ref} comme grandeurs de référence pour adimensionner les équations. Il faut prêter une attention particulière au choix de la vitesse de référence, car la vitesse de l'écoulement et la vitesse du son diffèrent de plusieurs ordres de grandeurs lorsque $Ma \rightarrow 0$. Par conséquent, la vitesse du fluide et la vitesse du son ne peuvent pas posséder la même vitesse de référence Munz [39]. Nous choisirons comme dans Klein [26] l'utilisation d'une vitesse de référence u_{ref} indépendante de la vitesse du son $c = (P_{ref}/\rho_{ref})^{1/2}$, ce qui garantit que la vitesse adimensionnée reste bien définie à l'ordre 1 lorsque $Ma \rightarrow 0$. S'intéressant uniquement à l'écoulement et non à l'acoustique, on choisit comme temps de référence le temps caractéristique du développement temporel de l'écoulement $t_{ref} = L_{ref}/u_{ref}$. En utilisant les grandeurs de référence définies ci-dessus, le système d'équations adimensionnées décrivant un écoulement compressible d'un gaz parfait est le suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.20a)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = \frac{1}{Ma^2} \nabla P + \frac{1}{Re} \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} + \frac{1}{Fr} \rho \vec{g} \quad (2.20b)$$

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c_p T \vec{u}) = \frac{1}{Re \cdot Pr} \nabla \cdot (\nabla T) + \frac{DP}{Dt} + \frac{Ma^2}{Re} \nabla \vec{u} : \bar{\bar{\tau}} \quad (2.20c)$$

$$P = \rho r T \quad (2.20d)$$

où Re , Pr et Fr sont respectivement les nombres de Reynolds, de Prandtl et de Froude. Afin d'éviter la dépendance en γ , il est habituel de travailler avec un nombre de Mach global $M = \sqrt{\gamma} Ma$, avec Ma nombre Mach classique et $\gamma = c_p/c_v$.

2.2.3 Développement asymptotique

L'obtention des équations faiblement compressibles (à faible nombre de Mach), ainsi que l'observation du comportement des solutions de ces équations, nécessitent l'application d'un développement asymptotique de toutes les variables en utilisant le nombre de Mach comme petit paramètre.

Pour définir un développement asymptotique il faut choisir une série convergente, et les échelles de temps et d'espace appropriées données par les équations et le domaine que l'on veut étudier Meister [35].

2.2.3.1 Choix des échelles de temps et d'espace

Afin d'étudier les différentes composantes et implications de la pression, nous allons effectuer un développement asymptotique sur une seule échelle de temps mais sur deux échelles d'espace. En effet, à faible nombre de Mach si l'on définit une échelle de temps unique, la vitesse de l'écoulement et la vitesse du son diffèrent de plusieurs ordres de grandeur. Deux échelles spatiales apparaissent alors naturellement, caractérisées par \vec{x} pour les phénomènes convectifs et par $\vec{\xi} = M\vec{x}$ qui est associé à l'acoustique. Le développement asymptotique pour les variables f selon une échelle de temps et de multiples échelles spatiales comme dans [35],[39],[26],[18],[27] a la forme suivante :

$$f(x, \xi, t) = f(x, \xi, t)^{(0)} + M f(x, \xi, t)^{(1)} + M^2 f(x, \xi, t)^{(2)} + \dots \quad (2.21)$$

2.2.4 Système d'équations faible Mach

En introduisant le développement asymptotique (2.21) dans les équations compressibles (2.20a - 2.20d) et en tenant compte de la relation $\nabla = \nabla_{\vec{x}} + M \nabla_{\vec{\xi}}$ avec respectivement $\nabla_{\vec{x}}$ et $\nabla_{\vec{\xi}}$ les gradients en \vec{x} et $\vec{\xi}$, et par identification des termes multipliés par

les mêmes puissances de Mach on obtient :

A l'ordre 0

$$\frac{\partial \rho^{(0)}}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot (\rho^{(0)} \vec{u}^{(0)}) = 0 \quad (2.22a)$$

$$\nabla_{\vec{x}} P^{(0)} = 0 \quad (2.22b)$$

$$\frac{\partial \rho^{(0)} c_p^{(0)} T^{(0)}}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot (\rho^{(0)} c_p^{(0)} T^{(0)} \vec{u}^{(0)}) = \frac{1}{Re Pr} \nabla_{\vec{x}} \cdot \vec{q}^{(0)} + \frac{DP^{(0)}}{Dt} \quad (2.22c)$$

$$P^{(0)} = \rho^{(0)} r T^{(0)} \quad (2.22d)$$

A l'ordre 1

$$\frac{\partial \rho^{(1)}}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot (\rho^{(1)} \vec{u}^{(1)}) = -\nabla_{\vec{\xi}} \cdot (\rho^{(0)} \vec{u}^{(0)}) \quad (2.23a)$$

$$\nabla_{\vec{x}} P^{(1)} + \nabla_{\vec{\xi}} P^{(0)} = 0 \quad (2.23b)$$

$$\frac{\partial \rho^{(1)} c_p^{(1)} T^{(1)}}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot (\rho^{(1)} c_p^{(1)} T^{(1)} \vec{u}^{(1)}) + \nabla_{\vec{\xi}} \cdot (\rho^{(0)} c_p^{(0)} T^{(0)} \vec{u}^{(0)}) = \quad (2.23c)$$

$$\frac{\nabla_{\vec{x}} \cdot \vec{q}^{(1)}}{Re Pr} + \frac{\nabla_{\vec{\xi}} \cdot \vec{q}^{(0)}}{Re Pr} + \frac{DP^{(1)}}{Dt} \quad (2.23d)$$

$$P^{(1)} = \rho^{(1)} r T^{(1)}$$

Et à l'ordre 2

$$\frac{\partial \rho^{(2)}}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot (\rho^{(2)} \vec{u}^{(2)}) = -\nabla_{\vec{\xi}} \cdot (\rho^{(1)} \vec{u}^{(1)}) \quad (2.24a)$$

$$\frac{\partial \rho^{(0)} \vec{u}^{(0)}}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot (\rho^{(0)} \vec{u}^{(0)} \otimes \vec{u}^{(0)}) = -\nabla_{\vec{x}} P^{(2)} - \nabla_{\vec{\xi}} P^{(1)} + \frac{1}{Re} \nabla_{\vec{x}} \cdot \vec{\bar{\tau}}^{(0)} + \frac{1}{Fr} \rho^{(0)} \vec{F}^{(0)} \quad (2.24b)$$

$$\frac{\partial \rho^{(2)} c_p^{(2)} T^{(2)}}{\partial t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot (\rho^{(2)} c_p^{(2)} T^{(2)} \vec{u}^{(2)}) + \nabla_{\vec{\xi}} \cdot (\rho^{(1)} c_p^{(1)} T^{(1)} \vec{u}^{(1)}) = \quad (2.24c)$$

$$\frac{\nabla_{\vec{x}} \cdot \vec{q}^{(2)}}{Re Pr} + \frac{\nabla_{\vec{\xi}} \cdot \vec{q}^{(1)}}{Re Pr} + \frac{DP^{(2)}}{Dt} + \nabla \vec{u} : \vec{\bar{\tau}} \quad (2.24d)$$

$$P^{(2)} = \rho^{(2)} r T^{(2)}$$

2.2.4.1 Les différentes composantes de pression

De la relation (2.22b), on conclut

$$P^{(0)} = P^{(0)}(\xi, t) \quad (2.25)$$

De plus, Meister[35] et Klein[26] montrent que :

$$P^{(0)} = P^{(0)}(t) \quad (2.26a)$$

$$P^{(1)} = P^{(1)}(\xi, t) \quad (2.26b)$$

L'ordre dominant de la pression $P^{(0)}$. Sachant que la pression est décomposée en

$$P = P^{(0)} + MP^{(1)} + M^2P^{(2)} + O(M^3) \quad (2.27)$$

Lorsque $M \rightarrow 0$ seulement $P^{(0)}$ survit et satisfait l'équation d'état (2.22d). C'est pour cela qu'elle est qualifiée de pression thermodynamique. Elle apparaît également dans l'équation de l'énergie à l'ordre zéro (2.22c). De plus, si l'on considère les équations d'Euler, à partir de l'équation de l'énergie à l'ordre zéro (2.22c) et en prenant en compte (2.26a), la relation suivante peut être facilement démontrée

$$\frac{\partial \ln \rho^{(0)}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla_{\vec{x}} \ln \rho^{(0)} = \frac{1}{\gamma} \frac{d \ln P^{(0)}}{dt} \quad (2.28)$$

qui est l'équation décrivant une compression quasi adiabatique où $P^{(0)}(t)$ a le rôle de la pression thermodynamique.

Évaluation de $dP^{(0)}/dt$. À partir de l'équation de l'énergie (2.22c) et de l'équation d'état (2.22d) à l'ordre zéro redimensionnées, on peut obtenir la relation suivante qui donne l'évolution de la pression thermodynamique $P^{(0)}(t)$ au cours du temps :

$$\frac{dP^{(0)}(t)}{dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) (\gamma - 1) - \gamma P^{(0)} \nabla \cdot \vec{u} \quad (2.29)$$

Le membre de gauche ne dépend que du temps, tandis que le membre de droite comporte des grandeurs fonctions à la fois du temps et de l'espace. En intégrant (2.29) en espace, on obtient la relation permettant de calculer l'évolution de la pression thermodynamique

$$\frac{dP^{(0)}(t)}{dt} = \frac{\int_{V(t)} [\nabla \cdot (k \nabla T) (\gamma - 1) - \gamma P^{(0)} \nabla \cdot \vec{u}] dV}{\int_{V(t)} dV} \quad (2.30)$$

On en conclut qu'une moyenne sur l'échelle \vec{x} donne la relation d'évolution de $P^{(0)}(t)$ dans le temps et que l'évolution de $P^{(0)}(t)$ est due à la compression ou à la dilatation des frontières ∂V du domaine faiblement compressible et/ou due au flux net de chaleur échangé à travers ∂V .

L'évaluation du terme $dP^{(0)}/dt$ peut être délicate comme indiqué par Le Quéré [57], car elle résulte d'une double intégration, spatiale et temporelle. Par conséquent ce terme inclut les erreurs de troncature de l'équation de l'énergie, mais également le manque de

précision de l'intégration temporelle. Il peut en résulter une dérive de $P^{(0)}(t)$ dans le temps même à l'état stationnaire. Une manière différente de calculer $P^{(0)}$ est proposée dans [57] pour remédier à ces problèmes, cependant cette méthode ne s'adapte pas aux domaines ouverts.

Le terme de pression à l'ordre 1, $P^{(1)}$, varie selon (2.26b) sur les grandes échelles $\vec{\xi} = M\vec{x}$. La pression $P^{(1)}$ influe sur l'évolution de la quantité de mouvement, car son gradient apparaît dans l'équation de quantité de mouvement d'ordre 2. Pour étudier le terme de pression d'ordre 1 $P^{(1)}$, Geratz [18], Klein [26], Meister [35] sous certaines hypothèses (variations de $\rho^{(0)}$ seulement sur l'échelle acoustique, et équations d'Euler) et dans un cadre plus général Munz [39], séparent les petites des grandes échelles en effectuant une moyenne sur les grandes échelles de l'équation de quantité de mouvement d'ordre 2, et de l'équation de l'énergie d'ordre 1. Munz [39] donne ainsi l'équation régissant l'évolution des ondes acoustiques à grande longueur d'onde impliquant $P^{(1)}$

$$\frac{\overline{\partial \rho \vec{u}}^{(0)}}{\partial t} + \nabla_{\xi} P^{(1)} = 0 \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial P^{(1)}}{\partial t} + \gamma P^{(0)} \nabla_{\xi} \cdot \overline{\vec{u}}^{(0)} = 0 \quad (2.32)$$

Pour que cette pression ait une influence sur l'écoulement il faut prendre en considération deux échelles d'espace, et dans ce cas la pression d'ordre 1 décrit les phénomènes acoustiques dans l'équation de quantité de mouvement, et ne peut pas être incluse dans le terme de pression d'ordre 0.

L'acoustique aux grandes longueurs d'ondes interagit avec l'advection sur la même échelle de temps mais sur des échelles spatiales différentes. L'étude des hautes fréquences évoluant sur des échelles de temps caractéristiques bien plus courtes ($\tau = t/M$) que celle de l'advection (t) nécessite un développement asymptotique mettant en jeux des échelles de temps multiples. Muller [38] s'intéresse aux écoulements lents, affectés par les effets acoustiques dans un gaz confiné. Il considère des temps importants et introduit l'échelle de temps rapide acoustique $\tau = t/M$. Il en déduit, entre autres, que $P^{(1)}$ peut également dans ce cas être considérée comme une pression acoustique. Zank [79] réalise un développement asymptotique multi échelles en temps et en espace. Il en conclut que le temps caractéristique de propagation des ondes acoustiques à grandes longueurs d'onde et des phénomènes convectifs est comparable.

Quand est-ce que l'acoustique disparaît des équations ? L'acoustique disparaît des équations dans deux cas. Si dans l'analyse asymptotique on ne considère qu'une échelle de temps et qu'une échelle de longueur, alors les termes ∇_{ξ} disparaissent et on aura, au 1^{er} ordre de l'équation de quantité de mouvement $P^{(1)} = P^{(1)}(t)$. L'acoustique n'est alors plus décrite. On retrouve cette configuration lorsque l'on considère un

système dont la dimension géométrique est comparable à la longueur caractéristique.

L'acoustique disparaît également des équations dans le cas où l'on a $Ma \rightarrow 0$, alors la grande échelle de longueur ξ de l'expansion multi-échelles devient nulle car pour tout x fini on a $\xi = Max \rightarrow 0$ quand $Ma \rightarrow 0$. Par ailleurs les variables d'ordre 0 et 1 sont dans ce cas gouvernées par les mêmes équations, il n'est donc plus nécessaire de les séparer.

Enfin on peut citer Paolucci qui dans [46] justifie le filtrage des ondes acoustiques par : *'la vitesse de propagation des ondes acoustiques est très rapide devant la vitesse de l'écoulement, dans des domaines petits devant la taille $\vec{\xi} = M\vec{x}$ ces ondes ont le temps de se propager dans le domaine plusieurs fois, causant la diminution de leur amplitude sur des temps courts. Leur amplitude ainsi que leur énergie peut être considérée comme petite.'*

Le terme de pression à l'ordre 2 $P^{(2)}$ n'apparaît que dans l'équation de quantité de mouvement à l'ordre 0. Lorsque $Ma \rightarrow 0$ et que l'on retrouve les équations incompressibles ce terme survit. On en déduit que cette pression d'ordre 2, joue le même rôle que la pression dans la formulation incompressible. On parle de partie incompressible de la pression. Cette pression, qui agit comme une force locale, sert à imposer la contrainte sur la divergence de la vitesse Klein [26].

Système d'équations bas Mach pour le gaz

Pour plus de clareté les exposants indiquant l'ordre 0 ne sont plus notés. Le système d'équations bas Mach dimensionné qui sera résolu dans le gaz est le suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.33a)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = \nabla P^{(2)} + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} + \rho \vec{g} \quad (2.33b)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla T = \frac{1}{\rho c_p} \left[\nabla \cdot (\nabla T) + \frac{DP^{(0)}}{Dt} \right] \quad (2.33c)$$

$$P^{(0)} = \rho r T \quad (2.33d)$$

Chapitre 3

Traitement de l'interface

Les principales méthodes de traitement d'interface avec leurs caractéristiques vont être présentées dans ce chapitre. Cette présentation bien que non exhaustive permettra d'éclairer le choix de la méthode de traitement d'interface qui a été utilisée dans cette thèse. Par ailleurs le modèle à un fluide que l'on utilisera par la suite sera introduit dans le paragraphe 3.1.1.1 lors de la présentation des méthodes eulériennes.

Pour une présentation plus complète des méthodes de traitement d'interface, on renvoie le lecteur à la monographie de Prosperetti et Tryggvason [53].

3.1 Principales méthodes de traitement d'interface

On distingue deux principales classes de méthodes de traitement d'interface : les méthodes lagrangiennes et les méthodes eulériennes (volume tracking). Le choix d'une méthode efficace et robuste pour prendre en compte l'interface dépend du problème physique que l'on veut étudier, car chaque méthode possède ses forces et faiblesses. La différence entre ces deux classes de méthodes réside dans la représentation de l'interface : explicite ou implicite. Dans les méthodes lagrangiennes l'interface est traquée explicitement. En effet, dans ces méthodes, le maillage s'adapte au cours du temps de façon à se confondre avec l'interface. Tandis que les méthodes eulériennes utilisent un maillage fixe, avec une interface qui n'est pas suivie explicitement mais reconstruite à partir d'une fonction indicatrice de phase ou fonction de couleur (voir §3.1.1.1).

Les méthodes lagrangiennes maintiennent l'interface comme une discontinuité, et traquent explicitement son évolution. Aucune modélisation est nécessaire pour définir l'interface ou ses effets sur l'écoulement. De plus les conditions aux limites peuvent être appliquées exactement à l'interface. Cependant, ces méthodes nécessitent un remaillage à chaque pas de temps. Il faut noter que dans le cas de fortes distorsions de l'interface le maillage peut être fortement altéré et non uniformément distribué, ce qui peut dégrader la précision des méthodes de résolution. Le principal inconvénient de ces méthodes réside dans leur difficulté à prendre en compte les changements topologiques et notamment les ruptures ou coalescence.

Les méthodes eulériennes que l'on appelle également *fixed grid methods*, *front capturing methods* ou encore *volume tracking methods*, nécessitent une modélisation ou des équations supplémentaires pour obtenir des informations sur la localisation des phases et des discontinuités. En effet à la différence des méthodes lagrangiennes, l'interface n'est pas traquée explicitement dans les méthodes eulériennes. Pour repérer les différentes phases et imposer les phénomènes interfaciaux, une fonction indicatrice de phase ou fonction de couleur est introduite. Cette fonction indicatrice de phase est définie sur l'ensemble du domaine de calcul et permet de localiser les différentes phases. À chaque

pas de temps, l'interface peut être localisée et reconstruite à partir de cette fonction indicatrice de phase.

La fonction indicatrice de phase permet de faire apparaître les conditions aux limites dans les équations régissant l'évolution de l'écoulement, mais ces conditions aux limites sont altérées. En effet dans ces méthodes l'interface est diffuse et d'épaisseur non nulle (cf 3.1.4.1). Par conséquent les informations sur l'interface sont lissées, amenant un étalement et la dispersion des informations.

Les méthodes eulériennes présentent l'avantage de ne pas avoir besoin de procédures de remaillage. De plus, ces méthodes prennent en compte automatiquement les changements de topologie que se soit la coalescence ou la fragmentation. Cependant à cause du lissage de l'interface, les phénomènes physiques liés à l'interface ne sont pas décrits précisément, l'interface n'étant pas explicitement représentée.

3.1.1 Méthodes eulériennes

3.1.1.1 Formulation à un fluide

Dans les méthodes eulériennes il n'y a qu'un unique système d'équations, valable pour tout le domaine de calcul. Il décrit l'évolution de l'ensemble des phases, les phénomènes interfaciaux, ainsi que les conditions aux limites à l'interface. Ceci est réalisé en introduisant une fonction indicatrice de phase que l'on notera H , et qui a pour valeur 1 dans le gaz et 0 dans le liquide. Cette fonction permet de localiser les phases et de d'imposer les conditions aux limites à l'interface, et dans son voisinage (du fait du lissage de H). On peut noter que cette fonction H n'a pas de signification physique à l'exception du cas de la méthode volume of fluid (VOF), où H représente également la fraction volumique des différentes phases.

Cet unique système est résolu sur une grille fixe. On appelle cette approche la formulation à un fluide ou formulation monofluide. Dans le cadre de la formulation à un fluide, pour un écoulement entièrement compressible, le système d'équations est le suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (3.1a)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} + \int_{A_i(t)} \sigma \kappa \vec{n} \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) ds \quad (3.1b)$$

$$\rho c_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \nabla T \right] = \nabla \cdot (k \nabla T) + \beta T \frac{dP}{dt} + \nabla \vec{u} : \bar{\bar{\tau}} \quad (3.1c)$$

$$P = P(\rho, T) \quad (3.1d)$$

avec les propriétés physiques également définies pour l'ensemble du domaine de calcul. Elles sont exprimées en fonction de H , afin de prendre en compte la discontinuité à

travers l'interface :

$$X = X_{gaz}H + (1 - H) X_{liq} \quad (3.2)$$

Il existe plusieurs méthodes eulériennes. Elles se différencient par la manière dont la fonction indicatrice de phase H est advectée puis reconstruite, ainsi que par la façon dont les phénomènes interfaciaux sont imposés. Nous allons présenter dans les grandes lignes les méthodes les plus utilisées avec leurs principaux avantages et inconvénients.

3.1.1.2 Méthode Volume Of Fluid (VOF)

Dans ces méthodes, la fonction de Heaviside H est remplacée par une fonction de couleur C qui varie entre 0 et 1. Cette fonction est une approximation de la fonction échelon de Heaviside au niveau discret et représente la fraction volumique qu'occupe chaque phase dans une cellule. Les cellules ayant une valeur de C strictement comprise entre 0 et 1 sont situées sur l'interface. L'advection de la fonction de couleur C nécessite la connaissance de la position et de l'orientation de l'interface. Puis l'advection se fait en utilisant la relation suivante :

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

Nous allons présenter brièvement la méthode VOF originale avec les étapes de reconstruction de l'interface et d'advection de la fonction de couleur C . Puis nous présenterons quelques méthodes alternatives permettant de reconstruire l'interface.

Méthode SOLA-VOF développée par Hirt et al [21] reconstruit l'interface à l'aide d'une série de segments discontinus alignés sur le maillage. L'algorithme comporte deux étapes, la reconstruction de l'interface et l'advection de C .

Dans un premier temps C est mise à jour en résolvant explicitement l'équation sous forme conservative (3.3). Une attention particulière est portée sur l'évaluation des flux de C à travers les surfaces des cellules. Afin de préserver le caractère discontinu de l'interface et assurer la conservation de volume, les auteurs utilisent une méthode 'donneur-accepteur' décrite dans [66] permettant de mettre C à jours en fonction des flux de C .

Cette méthode de donneur-accepteur attribue les rôles de donneur (cellule qui perd le flux) et d'accepteur (cellule qui reçoit le flux) à partir de l'orientation de l'interface et du signe de la vitesse normale à l'interface. Le flux à travers l'interface est alors estimé. L'algorithme comporte également une procédure qui corrige le flux estimé afin d'éviter que l'advection de $C_{advecté}$ ne soit pas supérieure à ce que la cellule donneuse contient $C_{donné}$.

La procédure d'advection est répétée sur toutes les cellules du domaine pour mettre à jour les valeurs de C . Dans une seconde étape, il faut déterminer l'orientation du segment représentant l'interface à l'intérieur des cellules. L'orientation peut être horizontale ou verticale (en 2D). Le choix de l'orientation se fait en cherchant avec lequel des axes la normale à l'interface est le plus alignée. Lorsque la normale à l'interface et la valeur de C sont connues, on peut ajuster la position du segment pour obtenir la bonne valeur de C . Cette méthode présente l'inconvénient de pouvoir engendrer rapidement une fragmentation des phases, en particulier dans des cas où la vitesse présente des zones de recirculation. Il existe également d'autres méthodes de précision variable pour reconstruire l'interface que l'on va présenter succinctement.

Autres méthodes de reconstruction d'interface

Méthode « Simple line interface calculation ou SLIC »[41], est la plus élémentaire. Cette méthode utilise une procédure qui s'applique successivement sur chaque direction du problème. L'algorithme reconstruit l'interface avec un segment parallèle ou perpendiculaire à la direction balayée par la procédure, en considérant les valeurs de C dans la cellule où sera reconstruite l'interface, ainsi que dans ses cellules voisines. Par contre comme l'algorithme utilise uniquement des lignes parallèles aux axes des coordonnées, les interfaces générées par cette méthode sont généralement discontinues et des « morceaux » d'interface peuvent se détacher. Enfin on notera que la méthode ne considère que les voisins dans une direction à la fois, par conséquent l'interface reconstruite dans la cellule peut avoir une représentation différente pour chaque direction balayée par l'algorithme.

Méthode « Piecewise linear interface construction PLIC » est une méthode qui améliore la reconstruction de l'interface. Youngs [78], DeBar [11] ont été parmi les premiers à représenter l'interface dans les cellules par des segments de droite ayant une orientation quelconque. Chaque segment d'interface est défini par sa normale et par son intersection avec les contours du volume de contrôle. La position du segment est ajustée de façon à satisfaire la contrainte sur la conservation du volume. L'orientation du segment revient à trouver la normale à l'interface qui est donnée par la relation

$$\vec{n} = \nabla C \quad (3.4)$$

Youngs [78] par exemple calcule la normale à l'interface grâce aux relations suivantes :

$$n_{i,j}^x = \frac{1}{\Delta x} [C_{i+1,j+1} + 2C_{i+1,j} + C_{i+1,j-1} - C_{i-1,j+1} - 2C_{i-1,j} - C_{i-1,j-1}] \quad (3.5a)$$

$$n_{i,j}^y = \frac{1}{\Delta x} [C_{i+1,j+1} + 2C_{i,j+1} + C_{i-1,j+1} - C_{i+1,j-1} - 2C_{i,j-1} - C_{i-1,j-1}] \quad (3.5b)$$

Bien que l'interface soit décrite avec plus de précision, l'interface reste discontinue car les segments ne sont pas reliés. Ashgriz et al. [2] représentent l'interface par un jeu de segments construits cette fois sur les faces des volumes de contrôle et non à l'intérieur du volume de contrôle comme dans [78] et [11]. Ils obtiennent ainsi une interface constituée d'une ligne quasi continue composée de segments de droite. Les différentes méthodes de reconstruction d'interface sont illustrées sur la figure 3.1.

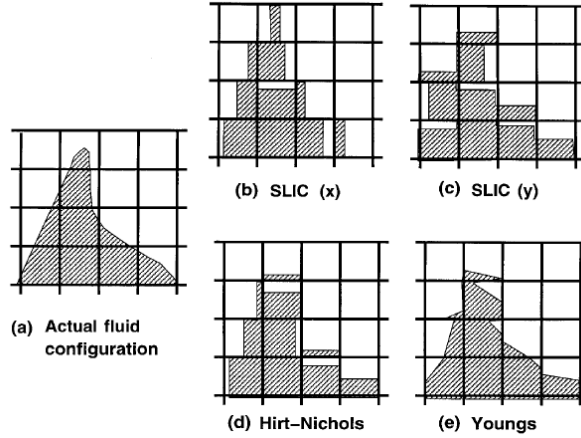


FIGURE 3.1 – Méthode VOF (Hirt and Nichols), SLIC, PLIC (Youngs) [59]

On peut également citer d'autres méthodes de reconstruction d'interface plus récentes :

Méthode « center of mass algorithm »[55]. Dans cette méthode une masse fictive est attribuée aux différents fluides (1 ou 0). L'approximation de l'interface dans un bloc de 3×3 cellules se fait en cherchant le centre de masse du bloc, puis le vecteur normal à l'interface est défini comme le vecteur unitaire appliqué au centre de masse et pointant vers le centre du volume de contrôle.

Méthode « central difference algorithm » dans un bloc de cellules 3×3 , la normale à l'interface est calculée par la relation

$$\vec{n} = \frac{1}{2} \sum_{k=-1}^1 C_{i+1,j+k} - C_{i-1,j+k} \quad (3.6)$$

Méthode « Efficient Least Squares volume-of-fluid interface reconstruction algorithm (ELVIRA) » proposée par Puckett [54]. Dans un bloc 3×3 centré sur la cellule i, j , l'interface est représentée par une droite traversant le bloc avec pour contrainte que la fraction volumique de la cellule centrale i, j soit égale à la vraie valeur de C . La pente de la droite est calculée de façon à minimiser l'erreur entre la vraie valeur de C et la valeur de C donnée par l'approximation linéaire [60]. Pilliod et Puckett

montrent dans [23] que la méthode ELVIRA est une méthode de reconstruction d'interface d'ordre deux qui est capable de reconstruire exactement une interface constituée de segments.

Conclusions et remarques Des comparaisons entre les différentes techniques de reconstruction d'interface ont été effectuées dans [59] et [55]. Il en ressort que les méthodes PLIC produisent des erreurs sur l'advection de C plus faibles d'un ordre de grandeur par rapport à la méthode VOF proposée par Hirt [21]. Enfin Pilliod et Puckett [23], dans leur étude comparent leur méthode de reconstruction d'interface ELVIRA avec les variantes de la méthode VOF parmi les plus utilisées comme SLIC [41], PLIC de Youngs [78], les méthodes « central difference algorithm » et « center of mass algorithm ». Ils montrent que les méthodes SLIC, PLIC, VOF, « central difference algorithm » et « center of mass algorithm » sont d'ordre un, tandis que la méthode ELVIRA est d'ordre 2. Il faut bien noter que l'amélioration de la qualité de la reconstruction de l'interface, influe sur l'évaluation des flux [21] ainsi que sur la qualité de l'évaluation de la courbure de l'interface.

Pour conclure, les méthodes VOF de par leur construction assurent la conservation du volume et de la masse dans le cas incompressible lorsque l'équation (3.3) peut se mettre sous forme conservative. En écoulement compressible cette équation (3.3) n'est pas sous forme conservative. Pour remédier à ce problème Puckett et al dans [55] proposent d'ajouter au jeu d'équations original une loi de conservation de la masse séparée pour chaque phase. Un autre avantage est la prise en compte automatique des changements de topologie. Les points faibles proviennent de la description de l'interface qui influe sur la qualité de l'advection de C , sur l'évaluation des flux à l'interface, ainsi que sur l'évaluation des forces de tension superficielle qui font intervenir la courbure de l'interface.

3.1.1.3 Méthode Level-set

La méthode Level-set a été introduite par Osher et Sethian [44]. Cette méthode utilise une fonction $\psi(\vec{x}, t)$ appelée fonction distance donnant la distance d'un point \vec{x} à l'interface représentée par l'isovaleur $\psi(\vec{x}, t) = 0$. La fonction ψ est positive à l'intérieur du domaine $\Omega(t)$ délimité par l'interface et est négative à l'extérieur de ce domaine. Cette fonction, étant une fonction distance, doit satisfaire la contrainte $|\nabla\psi| = 1$. Une vue d'ensemble de la méthode ainsi que la présentation de quelques améliorations sont données par Osher et Fedkiw dans [43]. L'essentiel de la méthode est résumé ci-dessous

Advection de ψ La fonction ψ est advectée à l'aide de la relation

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \vec{u}\nabla\psi = 0 \tag{3.7}$$

l'interface est advectée à la vitesse normale à l'interface $\vec{u}^n = \vec{u} \cdot \frac{\nabla\psi}{|\nabla\psi|}$. On peut réécrire l'équation (3.7) ce qui donne

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \vec{u}^n |\nabla\psi| = 0 \quad (3.8)$$

Lorsque la fonction ψ a été advectée, on peut définir une fonction indicatrice de phase à partir de ψ

$$H(\psi) = 1 \text{ si } \psi > 0 \quad (3.9a)$$

$$H(\psi) = 0 \text{ si } \psi < 0 \quad (3.9b)$$

Après l'advection de $\psi(\vec{x}, t)$ par l'équation (3.8), la fonction $\psi(\vec{x}, t)$ peut devenir irrégulière : trop plate ou trop raide à proximité de l'interface et on peut avoir $|\nabla d(\vec{x}, t)| \neq 1$. Il est important de conserver $\psi(\vec{x}, t)$ comme une fonction distance car elle permet de garder une interface avec une épaisseur fixe, et lorsque $|\nabla d(\vec{x}, t)| \neq 1$ il peut subvenir des pertes de masse à chaque pas de temps (Sussman et al [63]). La procédure de réinitialisation remplace $\psi(\vec{x}, t)$ par une nouvelle fonction ϕ qui a le même niveau zéro que $\psi(\vec{x}, t)$ et qui est une distance signée à l'interface i.e. $|\nabla d(\vec{x}, t)| = 1$. Ceci est réalisé en résolvant le système suivant jusqu'à l'état stationnaire

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} = sgn(\psi) [1 - |\nabla\phi|] \quad (3.10a)$$

$$\phi(\vec{x}, 0) = \psi(\vec{x}, t) \quad (3.10b)$$

où $sgn(\psi)$ est une fonction signe telle que

$$sgn(\psi) = \begin{cases} -1 & \text{si } \psi < 0 \\ 0 & \text{si } \psi = 0 \\ +1 & \text{si } \psi > 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

Pour étendre une quantité définie sur l'interface $p(\vec{x}, t)$ (telle qu'une force interfaciale par exemple) au voisinage de $\Gamma(t)$ dans la direction normale à l'interface, on résout jusqu'à l'état stationnaire

$$\frac{\partial q}{\partial\tau} + sgn(\psi) \left[\frac{\nabla\psi}{|\nabla\psi|} \cdot \nabla q \right] = 0 \quad (3.12a)$$

$$q(\vec{x}, 0) = p(\vec{x}, t) \quad (3.12b)$$

La fonction signe et la fonction indicatrice de phase peuvent être lissées pour éviter les variations trop violentes de propriétés physiques et éviter des instabilités à l'interface. Le lissage s'effectue à l'aide des relations suivantes

$$\begin{aligned}
H(\psi) &= 0 & \psi < -\epsilon \\
H(\psi) &= 1 & \psi > \epsilon \\
H(\psi) &= \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\psi}{\epsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\psi}{\epsilon}\right) \right] & \text{sinon}
\end{aligned} \tag{3.13}$$

avec ϵ l'épaisseur de l'interface désirée.

Les méthodes Level-set sont parfois couplées avec des méthodes Ghost fluid, qui consiste à rendre certaines variables, qui subissent des variations importantes, multi-valuées, de manière à éviter les oscillations numériques dans les opérateurs de dérivation discrète à travers l'interface (voir par exemple [17]). La méthode ghost fluid permet d'obtenir des solutions discontinues à l'interface contrairement aux méthodes où l'interface est lissée (VOF, Level-set, Front-tracking). Pour produire une solution discontinue il faut respecter les conditions de saut à l'interface. La méthode ghost fluid n'impose pas les conditions de saut à l'interface explicitement, mais crée un fluide artificiel qui impose implicitement les bonnes conditions aux limites (de saut) à l'interface.

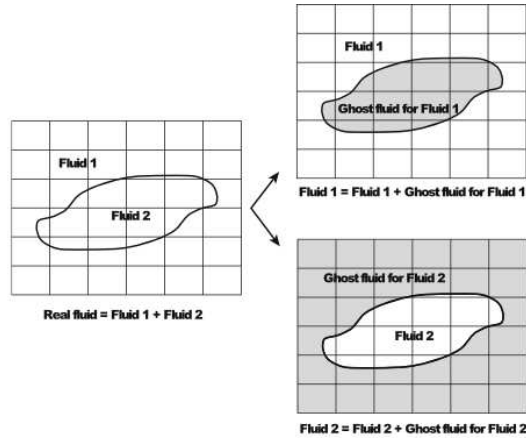


FIG. 2. Schematic of ghost-fluid method.

FIGURE 3.2 – Méthode ghost fluid [64]

3.1.1.4 Calcul de la tension superficielle

La tension de surface qui apparaît dans l'équation de conservation de quantité de mouvement est modélisée par la relation

$$\vec{F}(\vec{x}) = \sigma \kappa \delta \vec{N} \tag{3.14}$$

La plupart du temps, l'implémentation de la force interfaciale dans les méthodes VOF utilise la méthode CSF (Continuum Surface Tension) proposée dans [4] qui atténue les contraintes topologiques sans perdre en précision et en robustesse. Cette méthode remplace le phénomène surfacique par un phénomène volumique dont l'intégrale reproduit

le phénomène physique souhaité. Dans les méthodes VOF avec la formulation CSF [4], la tension superficielle est donnée par

$$\vec{F}(\vec{x}) = \sigma \kappa \frac{|\nabla C|}{[C]} \frac{\nabla C}{|\nabla C|} \quad (3.15)$$

où la fonction de Dirac δ est approximée par $|\nabla C|/[C]$, avec $[C]$ le saut de la fonction de couleur qui vaut 1 lorsque $C = H$. La normale unitaire à l'interface \vec{N} est donnée par

$$\vec{N} = \frac{\nabla C}{|\nabla C|} \quad (3.16)$$

et la courbure moyenne κ est obtenue à partir de

$$\kappa = -\nabla \cdot \vec{N} \quad (3.17)$$

soit finalement

$$\vec{F}(\vec{x}) = \sigma \kappa \nabla H \quad (3.18)$$

Avec la méthode level-set, la tension de surface est donnée par [4], [8] :

$$\vec{F}(\vec{x}) = \sigma \kappa(\psi) \delta(\psi) \nabla \psi \quad (3.19)$$

où la courbure moyenne $\kappa(\psi)$ est obtenue à partir de

$$\kappa(\psi) = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \psi}{|\nabla \psi|} \right) \quad (3.20)$$

et $\delta(\psi)$ la fonction de Dirac δ lissée de la façon proposée par Peskin [48]

$$\delta(\psi) = \frac{1}{2} (1 + \cos(\pi\psi/\alpha)) / \alpha \text{ si } |\psi| < \alpha \quad (3.21a)$$

$$\delta(\psi) = 0 \text{ sinon} \quad (3.21b)$$

L'implémentation de la tension superficielle dans les méthodes de front-tracking est différente et sera présentée en détail plus loin (§3.1.4.4).

3.1.1.5 Conclusions et remarques

Comme les méthodes VOF, les méthodes Level-set permettent de prendre en compte les changements de topologie automatiquement. Cependant, la méthode ne garantit pas la conservation du volume (et de la masse) lorsque l'interface subit des déformations importantes [58]. Enfin, de façon générale, la conservation du volume (et de la masse) n'est pas garantie par la méthode, car les erreurs numériques commises lors de la procédure de réinitialisation engendrent un déplacement artificiel de l'interface [42].

3.1.2 Méthodes lagrangiennes

3.1.2.1 Méthode body-fitted

Dans ces méthodes, un maillage curviligne est utilisé pour épouser la forme de l'interface à chaque pas de temps via des procédures de remaillage. Ces méthodes permettent de décrire précisément l'interface sans faire intervenir un traitement spécial (pas de modélisation, ni de lissage). Dans ce type de méthodes, les équations peuvent être traitées de manière similaire dans tout le domaine de calcul, et les conditions aux limites sur l'interface peuvent être imposées exactement à l'interface. Par conséquent le niveau de précision des méthodes numériques peut alors être maintenu dans les différentes phases, et également le long de l'interface. Ces méthodes sont utilisées lorsque l'interface se déforme très légèrement et que le nombre d'inclusions est limité. Dans ces conditions les solutions calculées sont de grande précision. Cependant les méthodes body-fitted montrent de grandes difficultés à simuler un nombre d'inclusions important, la gestion du maillage devenant très compliquée dans ce cas. Elles ne sont pas non plus indiquées lorsqu'il s'agit de traiter des déformations d'interfaces importantes et les changements de topologie, car la simulation de cette physique engendre de très fortes déformations du maillage qui peut devenir distordu. Un exemple d'application de cette méthode est donné par Yang et Prosperetti [73] dans la simulation de l'ascension d'une bulle sujette à des déformations. On peut également citer le travail de Magnaudet [33] qui utilise un maillage curviligne pour étudier les forces s'appliquant sur une sphère au sein d'écoulements instationnaires et pour différents nombres de Reynolds.

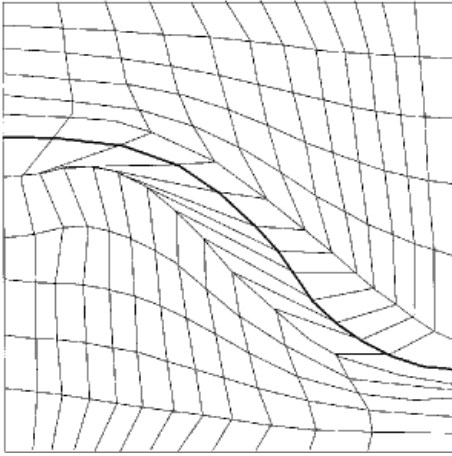


FIGURE 3.3 – Exemple de maillage distordu [22]

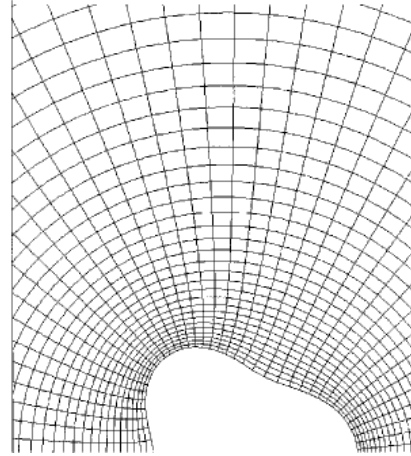


FIGURE 3.4 – Exemple de maillage orthogonal (Magnaudet et al, cité dans [60])

3.1.2.2 Méthode Sharp interface

Dans ce type de méthode également appelées « cartesian cut cell method », le maillage n'est pas curviligne et l'écoulement est calculé sur un maillage fixe eulérien tandis que l'interface est décrite explicitement avec un maillage lagrangien qui se déplace librement à travers le maillage fixe. Dans les méthodes Sharp interface, l'interface entre les différentes phases est traitée comme une frontière intégrée dans un maillage régulier cartésien. Les cellules coupées par l'interface sont identifiées ainsi que les intersections de l'interface avec les faces des cellules. Les cellules adjacentes à l'interface sont remodelées en retirant ou agglomérant des morceaux de cellules coupées par l'interface formant ainsi des cellules trapézoïdales le long de l'interface. L'évaluation des flux à travers ces cellules trapézoïdales est construite de façon à préserver l'ordre des méthodes numériques utilisées pour résoudre les équations du mouvement.

Ce type de méthode permet d'imposer la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sans avoir recours à une modélisation additionnelle donnant la forme et l'advection de l'interface. Ainsi l'ordre des méthodes de résolution employées est conservé, et la conservation de la masse dans les différentes phases est assurée tout en pouvant simuler des interfaces qui se déforment fortement. Cependant les changements de topologie ne sont pas pris en compte aussi aisément qu'avec les méthodes VOF et Level-set. Quelques exemples d'implémentation de cette méthode sont donnés dans [70] et [74] dans le cas de simulations solide-fluide, dans le cas de simulations diphasiques [75], et pour la simulation d'écoulements visqueux incompressibles [74].

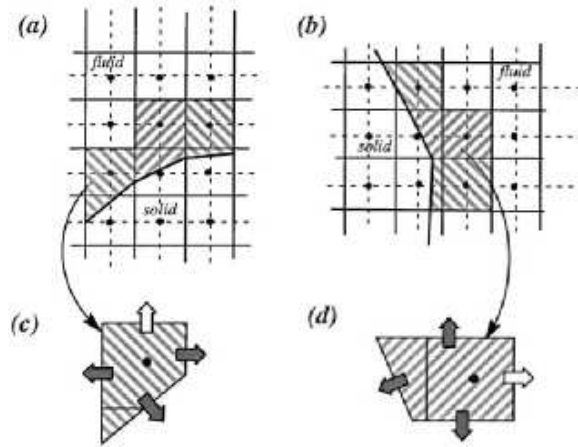


FIGURE 3.5 – Redéfinition des cellules coupées par l'interface [74]

Conclusions

Pour résumer, les méthodes VOF assurent naturellement la conservation du volume et de la masse en écoulements incompressibles et, moyennant quelques améliorations, en écoulements compressibles. Cependant la description de l'interface n'est pas précise, ce qui entraîne des difficultés pour évaluer la courbure de l'interface et imposer les conditions aux limites. La méthode level-set permet, comme les méthodes VOF, de prendre en compte automatiquement les changements topologiques. Elle décrit l'interface implicitement à l'aide d'une fonction distance signée qui donne une définition de l'interface plus précise que dans les méthodes VOF standard. Mais la fonction distance signée doit être réinitialisée fréquemment altérant la conservation de la masse. Enfin les méthodes lagrangiennes sont très précises avec une interface sans épaisseur et des conditions aux limites qui sont imposées exactement à l'interface. Cependant les changements de topologie et les interfaces fortement déformées ne sont pas facilement accessibles par ce type de méthodes car la procédure de remaillage qui permet de préserver le maillage adéquat peut devenir très compliquée dans ce cas. Le nombre d'inclusions pouvant être simulées est également limité.

Si la description de l'interface est secondaire ou si l'impact de l'interface sur le reste des phénomènes n'est pas significatif, alors les méthodes eulériennes sont intéressantes. Si la discontinuité à travers l'interface doit être simulée fidèlement, et si le comportement de l'interface est l'objet de l'étude, alors les méthodes lagrangiennes sont plus intéressantes.

D'autres méthodes de traitement d'interface existent et de nouvelles méthodes se développent parmi lesquelles on peut citer la méthode phase field et la méthode constrained interpolation profil (CIP) pour les méthodes eulériennes, la méthode Lagrangian-eulerian method et la méthode Deformed-cell method pour les méthodes lagrangiennes.

Toutefois il est difficile d'en donner une vue d'ensemble. Pour une introduction à de nombreuses méthodes diphasiques le lecteur peut se référer à l'ouvrage récent de Prosperetti et Tryggvason [53]. Pour finir, la tendance est actuellement à l'hybridation des méthodes afin de tirer avantage des points forts de chaque méthode. Par exemple, Ménard et al [36] développent un code 2D et 3D dans lequel l'interface est traquée à l'aide d'une méthode level set couplée à la méthode ghost fluid pour imposer avec précision les conditions aux limites à l'interface. La méthode level set est également couplée à la méthode VOF pour assurer la conservation de la masse. On peut également citer pour exemple le travail de Terashima et Tryggvason [64] qui proposent une méthode mixte front-tracking/ghost-fluid dans laquelle l'interface est capturée explicitement et les conditions aux limites à l'interface sont imposées de façon précise via la méthode ghost-fluid.

3.1.3 Méthode de frontière immergée

La méthode de frontière immergée ou *Immersed Boundary method (IB method)* a été proposée et développée dans un premier temps par Peskin [48], puis améliorée dans [50] et [52]. Tout comme la méthode de front-tracking que l'on présentera juste après, la méthode met en jeu deux types de variables : lagrangiennes et eulériennes reliées par une fonction de Dirac δ . Concrètement, les équations de Navier-Stokes sont discrétisées sur un maillage eulérien régulier et la frontière immergée est décrite de façon lagrangienne. La frontière immergée peut exercer des forces localisées sur l'écoulement et se déplace à la vitesse du fluide. L'interaction entre la frontière immergée et le fluide est modélisée par une approximation lisse de la fonction de Dirac au niveau discret. Un exemple d'approximation sera donné dans la description de la méthode front-tracking.

L'influence de l'interface sur le fluide adjacent est imposée par l'intermédiaire de termes sources dans les équations de Navier-Stokes. Ces termes peuvent être calculés de plusieurs façons, ce qui donne différentes variantes de la méthode de frontière immergée. Pour une introduction de ces variantes, le lecteur peut se référer à [53].

Peskin, en conclusion de [49], met en avant certaines limites de la méthode de frontière immergée originale et propose plusieurs axes de développement. En outre il relève que la IB method peut atteindre une précision d'ordre 2 lorsqu'il s'agit de solutions lisses. Mais la méthode ne serait que d'ordre 1 lorsque des interfaces fines (sharp) sont mises en jeu. Car en effet elles impliquent des solutions non lisses, alors que la IB method étale l'interface sur une épaisseur de l'ordre d'une maille. Peskin met également en avant une autre faiblesse de la méthode relative à la conservation du volume. Bien que le champ de vitesse sur le maillage eulérien soit à divergence nulle au niveau discret, il n'y a pas de garantie que le champ de vitesse interpolé sur le maillage lagrangien qui se déplace le reste. Dans le cas d'écoulements incompressibles, ce problème est résolu dans [52] où Peskin et Printz construisent un opérateur divergence discret pour que le champ de vitesse interpolé respecte mieux la contrainte de divergence nulle. Cela assure une meilleure conservation de volume car l'advection de la frontière immergée se fait à partir des vitesses interpolées du maillage vers l'interface.

On pourra noter qu'il existe un lien entre la méthode de frontière immergée, les méthodes eulériennes, et la méthode de front-tracking, car dans la plupart des cas la fonction de distribution utilisée pour lisser l'interface provient des fonctions introduites par Peskin dans la méthode de frontière immergée.

Des modifications de la méthode de frontière immergée ont été apportées par Leveque [31] : la discrétisation des équations est modifiée à proximité de l'interface afin de garder la précision d'ordre 2 sur la grille fixe même lorsque l'interface n'est pas alignée avec la grille. Dans [30] Lee et Leveque incorporent la force interfaciale dans l'équation

de Poisson sur la pression dans la procédure de projection afin d'améliorer l'évaluation du saut de pression ainsi que la conservation du volume par rapport aux méthodes de frontière immergée standard. Ces méthodes développées par Leveque et al s'appellent les méthodes d'interfaces immergées.

3.1.4 Méthode de front-tracking

La méthode introduite par Unverdi et Tryggvason [71] et par Tryggvason et al [67] est une méthode hybride qui empreinte des éléments aux méthodes eulériennes, lagrangiennes, et aux méthodes de frontières immergées. En effet les équations de Navier-Stokes sont résolues sur un maillage fixe eulérien avec une modification de ces équations à proximité de l'interface. De ce point de vue cette méthode s'apparente aux méthodes eulériennes car on utilise le modèle monofluide pour modéliser l'écoulement (cf §3.1.1.1). Cependant, elle s'apparente également aux méthodes lagrangiennes car l'interface est traquée explicitement avec un maillage lagrangien spécifique composé de segments contigus (en 2D). Les forces interfaciales sont calculées exactement à l'interface et sont transférées au maillage fixe par interpolation comme dans la méthode de frontière immergée de Peskin. On peut voir le front-tracking comme une méthode eulérienne-lagrangienne ou de *surface tracking*.

La différence avec la méthode de frontière immergée est que l'interface marque la discontinuité des propriétés physiques. À chaque pas de temps, le champ des propriétés physiques est reconstruit à partir des informations transportées par l'interface permettant ainsi d'imposer les conditions de saut. En pratique, la définition des propriétés physiques fait intervenir une fonction indicatrice de phase H calculée à partir de la position de l'interface et définie sur le maillage fixe eulérien. Cette fonction vaut $H = 0$ ou $H = 1$ selon les régions du domaine occupées par les différentes phases, et son gradient est non nul uniquement à l'interface.

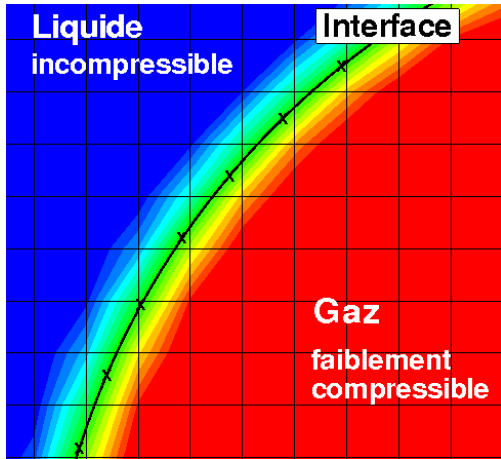


FIGURE 3.6 – Interface lagrangienne et lissage de l’interface sur le maillage fixe eulérien

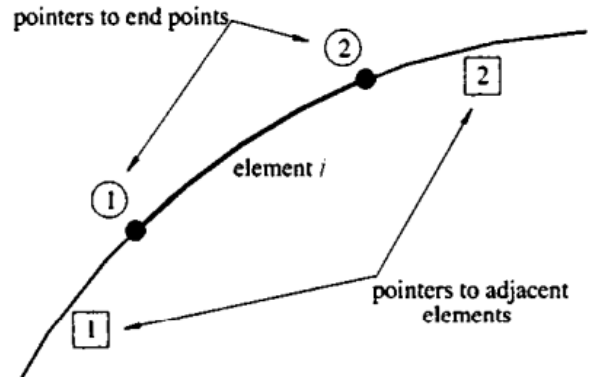


FIGURE 3.7 – Structure du front [67]

3.1.4.1 Lissage de l’interface

Dans la méthode proposée par Unverdi et Tryggvason [71] et par Tryggvason et al [67], l’interface n’est pas discontinue mais possède une épaisseur fixe de l’ordre du pas d’espace. En d’autres termes la fonction H n’est pas une fonction de Heaviside mais H en est une approximation lissée au niveau discret sur quelques cellules localisées à proximité de l’interface. L’épaisseur artificielle de l’interface est une fonction du pas de maillage seulement et ne change pas au cours du temps. Par conséquent il n’y a pas de diffusion numérique de l’interface.

Les auteurs dans [71] et [67] justifient cet étalement de l’interface, en considérant la fonction δ comme la limite d’une fonction lisse dont le paramètre définissant le lissage de l’interface tend vers zéro. L’approximation de δ qui est faite en pratique correspond au choix d’un paramètre de lissage petit mais fini au lieu de zéro.

Unverdi et Tryggvason [71] notent que le lissage de l’interface permet une localisation plus précise de l’interface sur la grille fixe. Car si H varie de 0 à 1, la seule information disponible est l’interface est quelque part entre les points du maillage avec des valeurs de H différentes. Lorsque l’interface est lissée, on peut localiser exactement l’interface. Les auteurs ajoutent que le lissage améliore la stabilité des algorithmes et la régularité des solutions. Enfin l’étalement de l’interface permet d’éviter les phénomènes d’oscillation et de diffusion numérique liés au traitement des discontinuités.

Bien que l’interface soit décrite explicitement par un maillage 1D pour les codes 2D (ou 2D pour les codes 3D), il existe dans ce type de méthodes comme dans les méthodes

eulériennes une zone non physique autour de l'interface qui correspond à l'étalement de celle-ci.

3.1.4.2 Approximation de δ

L'interface est définie par une fonction de Dirac δ , le transfert de la fonction de Dirac vers le maillage fixe revient à construire une approximation discrète de δ sur le maillage fixe. Cette approximation se fait sur un nombre de cellules contrôlé permettant d'éviter la diffusion numérique. Pour construire l'approximation discrète de δ , les méthodes front-tracking s'inspirent de la méthode de frontières immergées développée par Peskin[48] où l'interface discontinue est représentée par une distribution qui permet d'imposer les forces interfaciales sur l'écoulement avoisinant. La représentation de l'approximation de la fonction de Dirac au niveau discret est représentée sur la Fig. 3.8, avec $h = \Delta x$.

L'approximation de δ doit permettre d'assurer que la quantité surfacique $\Phi_f(s)$ définie à l'interface et transférée sur le maillage eulérien soit conservée [67]. D'après l'article de Peskin[52] la distribution la quantité interfaciale $\Phi_f(s)$ sur le maillage fixe se fait par la relation

$$\Phi(\vec{x}) = \sum_l \Phi_f(l) \delta_h(\vec{x} - \vec{x}_f) \Delta s \quad (3.22)$$

avec la quantité interpolée sur le maillage fixe $\Phi(\vec{x})$ et la somme se faisant sur les l éléments constituant l'interface. La fonction δ est représentée par la fonction distribution $\delta_h(\vec{x})$ qui détermine quelle fraction de la quantité interfaciale reçoit chaque point du maillage. La fonction distribution $\delta_h(\vec{x})$ est définie comme le produit de fonctions 1D :

$$\delta_h(\vec{x}) = \delta_h(x - x_f) \times \delta_h(y - y_f) \times \delta_h(z - z_f) \quad (3.23)$$

ces fonctions sont identiques à celles proposées par Peskin dans [50]

$$\begin{aligned} \delta_h(r) &= \frac{1}{8} \left[3 - 2|r| + \sqrt{(1 + 4|r| - 4r^2)} \right] & |r| \leq 1 \\ \delta_h(r) &= \frac{1}{2} \delta_h(2 - |r|) & 1 \leq |r| \leq 2 \\ \delta_h(r) &= 0 & 2 \leq |r| \end{aligned} \quad (3.24)$$

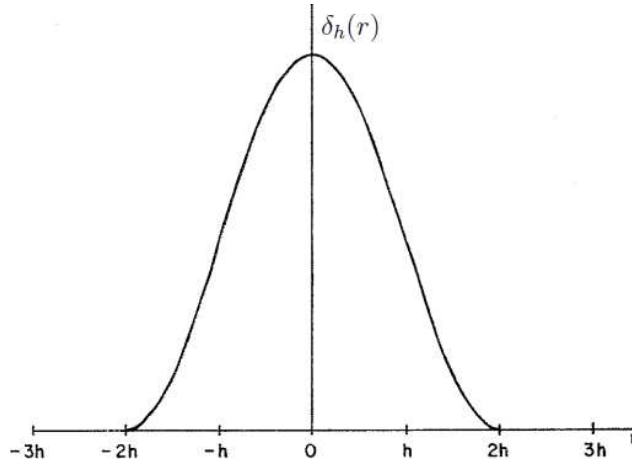


FIGURE 3.8 – Représentation de la fonction δ [48]

3.1.4.3 Calcul de la fonction indicatrice de phase H

Contrairement aux méthodes eulériennes classiques VOF et Level-set notamment, la fonction indicatrice de phase n'est pas advectée, mais calculée à partir des informations transportées par l'interface. Dans les méthodes front-tracking, le saut de la fonction indicatrice de phase est porté par l'interface et est distribué aux points de la grille situés dans l'entourage de l'interface.

Pour trouver le champ de H , on considère la divergence du gradient de H , ce gradient étant non nul seulement à l'interface, et l'on résout

$$\nabla^2 H = \nabla \cdot \int_{A_i(t)} \delta \vec{n} ds \quad (3.25)$$

La fonction de Dirac $\delta(\vec{x})$ est approximée au niveau discret sur plusieurs cellules par (3.22), l'expression (3.25) devient alors

$$\nabla^2 H = \nabla \cdot \sum_l \delta_h(\vec{x} - \vec{x}^{(l)}) \vec{n}^{(l)} \Delta s^{(l)} \quad (3.26)$$

la somme portant sur les l éléments composant l'interface.

3.1.4.4 Calcul de la force interfaciale

La tension superficielle intervient dans le bilan de quantité de mouvement qui est résolu sur le maillage fixe eulérien. Pour bénéficier de la description explicite de l'interface, la tension superficielle est calculée à l'interface. La force s'appliquant à un élément de l'interface est donnée par la relation

$$\delta \vec{f} = \int_{\Delta s} \sigma \kappa \vec{n} ds \quad (3.27)$$

en 2D on peut utiliser la relation de Frenet $\kappa \vec{n} = d\vec{t}/ds$ ce qui donne

$$\delta \vec{f} = \sigma (\vec{t}_2 - \vec{t}_1) \quad (3.28)$$

lorsque $\sigma = cste$, la force est calculée en 3D avec

$$\delta \vec{f} = \sigma \oint_{A_i} \vec{t} \times \vec{n} ds \quad (3.29)$$

La force interfaciale est alors distribuée sur le maillage fixe par

$$\vec{F}(\vec{x}) = \sum_l f^{(l)} \delta_h(\vec{x} - \vec{x}^{(l)}) \Delta s \quad (3.30)$$

3.1.4.5 Advection de l'interface

L'interface est advectée de façon lagrangienne à l'aide de la relation suivante

$$\frac{d\vec{x}^{(l)}}{dt} = \vec{u}^{(l)} \quad (3.31)$$

Il est donc nécessaire de connaître la vitesse $\vec{u}^{(l)}$ en tout point définissant l'interface $\vec{x}^{(l)}$. Pour interpoler la vitesse du maillage eulérien vers l'interface, on utilise les mêmes points que ceux sur lesquels la force a été distribuée et la même fonction de distribution. La vitesse en un point de l'interface l est donnée par

$$\vec{u}^{(l)} = \sum_{ijk} \vec{u}_{ijk} \delta_h(\vec{x} - \vec{x}^{(l)}) d\vec{x} \quad (3.32)$$

où la somme se fait sur tous les centres des volumes de contrôle de coordonnées i, j, k à proximité de l'interface.

3.1.4.6 Conclusions

Le point fort de la méthode tient en la description explicite de l'interface qui rend possible la localisation exacte de l'interface et un calcul précis de la courbure locale de l'interface. Le point faible de la méthode réside dans sa complexité de mise en oeuvre (stockage et gestion des marqueurs et éléments notamment) et le traitement non automatique des coalescences et ruptures. En effet il devient rapidement difficile de gérer plusieurs inclusions avec des interactions entre de multiples interfaces. Les ruptures et coalescences doivent être traitées « manuellement », notamment lorsque deux interfaces sont suffisamment proches pour influencer le même point du maillage. Dans ce cas, le gradient de H devient nul et l'interface n'existe plus sur le maillage eulérien. Il faut également donner un mécanisme permettant de traiter les ruptures et de les modéliser. Par contre le front-tracking est la seule méthode capable de maintenir un film de liquide

très mince (plus petit que le pas d'espace) entre des bulles très proches. Tandis qu'avec les méthodes eulériennes, l'interface disparaît automatiquement lorsque la distance entre deux inclusions devient inférieure au pas d'espace.

La gestion des ruptures et des coalescences a été améliorée dans [62] en utilisant une méthode qui tire avantage de la représentation de l'interface par deux moyens distincts en front-tracking : explicite avec le maillage lagrangien et implicite avec l'isovaleur de la fonction indicatrice de phase $H = 0,5$. Plus généralement, les éléments constituant l'interface peuvent être reconstruits sur l'isovaleur d'une fonction caractérisant l'interface, comme la fonction de couleur en VOF, la distance signée en level-set ou la fonction indicatrice de phase en front-tracking. Dans [62], après avoir mis à jour la fonction indicatrice de phase, l'interface constituée de segments est reconstruite sur l'isocontour $H = 0,5$ en utilisant une interpolation linéaire. La procédure de remaillage de l'interface doit être effectuée régulièrement.

Il existe également une autre approche proposée par Torres et Brackbill [65] permettant de gérer les coalescences et les ruptures. Cette méthode appelée « the point-set method » construit la fonction indicatrice de phase à partir de points non connectés. Puis les calculs de la normale à l'interface et de la courbure sont réalisés à partir du champ de la fonction indicatrice de phase de façon similaire aux méthodes level-set. Cependant cette méthode est plus coûteuse que le front-tracking standard et la procédure doit être réalisée à chaque pas de temps.

3.1.4.7 Traitement des courants parasites.

L'évaluation précise de la tension superficielle est primordiale lorsque l'on considère, comme en microfluidique, de petites échelles spatiales, les effets de tension superficielle augmentant lorsque le rayon de courbure diminue. De plus, lorsque l'on considère des écoulements liquide-gaz, les effets de tension superficielle sont prédominants par rapport à l'amortissement visqueux.

Si, du fait d'une mauvaise évaluation de la tension de surface, l'équilibre des forces à l'interface n'est pas respecté, alors des courants parasites apparaissent à l'interface et créent des oscillations pouvant aller jusqu'à la destruction de l'interface.

L'équilibre des forces normales à l'interface est obtenu en respectant la condition de saut sur la quantité de mouvement à l'interface faisant intervenir la tension superficielle et le saut de pression à l'interface. Par conséquent pour satisfaire la condition de saut sur la quantité de mouvement, on peut agir soit sur le calcul du gradient de pression, soit sur l'évaluation de la tension superficielle.

Dans [51] les auteurs réduisent les courants parasites en corrigeant le gradient de pression

de façon à équilibrer la tension superficielle. Une autre approche est donnée dans [61] où une méthode hybride est utilisée pour calculer la tension superficielle en tirant avantage des méthodes de front-tracking et VOF. Afin de bénéficier de la définition explicite de l'interface propre à la méthode de front-tracking, la courbure est calculée à partir des marqueurs constituant l'interface définie par un maillage spécifique lagrangien. La tension superficielle quant à elle est imposée de façon similaire aux méthodes VOF c'est à dire en utilisant ∇H , ce qui donne

$$\vec{F} = \sigma \kappa_{ft} \nabla H \quad (3.33)$$

En utilisant cette formulation, la courbure est évaluée précisément. Les gradients de la fonction caractéristique ∇H et le gradient de pression $\nabla \pi$ sont discrétisés de la même façon, permettant ainsi l'équilibre des forces au niveau discret.

3.2 Choix de modélisation et de la méthode de traitement d'interface

Le choix d'une méthode de traitement d'interface repose sur plusieurs critères relatifs à la physique que l'on souhaite simuler. Ces critères permettent de sélectionner les différentes méthodes de traitement d'interface selon leur caractéristiques (cf §3.1).

Il faut, entre autres, déterminer si la description de l'interface est secondaire ou si l'impact de l'interface sur le reste des phénomènes est significatif. L'objectif de la thèse est de simuler des écoulements diphasiques avec transfert de chaleur dans des structures de l'ordre de quelques microns. De part l'échelle caractéristique du problème il faut une méthode qui permette une évaluation précise de la tension superficielle, et notamment de la courbure qui devient importante lorsque l'échelle caractéristique du problème diminue. En effet, une erreur sur la tension superficielle produirait des courants parasites à l'interface pouvant détruire celle-ci.

Le choix d'une méthode eulérienne ne serait pas le plus opportun car ces méthodes ne permettent pas une description précise de l'interface et par conséquent une évaluation précise de la tension superficielle. En effet, une évaluation insuffisamment précise de cette force interfaciale donne naissance à des courants parasites au niveau de l'interface. En outre, le front-tracking standard génère des courants parasites à l'interface de l'ordre de $10^{-4} m.s^{-1}$ soit deux ordres de grandeurs de moins que les méthodes VOF standard [29].

On peut également regarder si un grand nombre d'inclusions doit être simulé et si le comportement de l'interface et les changements topologiques font l'objet de l'étude. Ce n'est pas l'objectif principal de cette thèse où seulement quelques inclusions gazeuses seront simulées avec peu ou pas de ruptures et de coalescences. Cependant pour des travaux futurs, il serait utile de se garder la possibilité de simuler des changements topologiques.

Dans cette optique il est préférable d'écarter les méthodes lagrangiennes dont la complexité de mise en œuvre croît lorsque le nombre d'inclusions augmente et lorsque des phénomènes de rupture-coalescence ou de grandes déformations de l'interface sont impliqués.

En lien avec les caractéristiques physiques de l'écoulement que l'on souhaite simuler, nous avons été conduits à privilégier la méthode front-tracking avec l'amélioration apportée par [61] pour traiter les courants parasites. Cette méthode permet une description précise de l'interface et peut avec certaines adaptations prendre en compte les changements topologiques automatiquement (voir [62] ou [65]). La méthode front-tracking est plus complexe à implémenter que les méthodes eulériennes, mais la méthode de front-

tracking standard n'aura pas à être développée lors de cette thèse, car les sous-routines sont disponibles au laboratoire.

Le choix du front-tracking implique l'utilisation d'un modèle à un fluide ou mono fluide introduit au paragraphe 3.1.1.1.

Dans la formulation monofluide que nous utiliserons, les phases liquides seront considérées incompressibles. Nous utiliserons l'approximation faible Mach introduite dans le paragraphe 2.2 pour modéliser les phases gazeuses. En effet, on rappelle que les équations faible Mach permettent la prise en compte des effets de compressibilité ainsi que des variations importantes de masse volumique et de température. L'autre avantage de l'approximation faible Mach est le filtrage de l'acoustique dans les équations qui simplifie le système d'équations et permet d'effacer la limitation sur les pas de temps augmentant ainsi l'efficacité du code de calcul. Cependant l'utilisation de l'approximation faible Mach nécessite l'introduction d'une pression supplémentaire par rapport au modèle incompressible, la pression thermodynamique $P^{(0)}$ que nous noterons par la suite $\bar{P} = P^{(0)}$.

Le modèle que l'on utilisera par la suite est le même que dans [9] avec une légère modification du terme de tension superficielle. Le système décrivant l'évolution de l'écoulement diphasique liquide-gaz parfait est le suivant :

$$\nabla \cdot \vec{u} = -\frac{H}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} \quad (3.34a)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau} + \sigma \kappa \nabla H \quad (3.34b)$$

$$\rho c_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \nabla T \right] = \nabla \cdot (k \nabla T) + H \frac{d\bar{P}}{dt} \quad (3.34c)$$

$$\rho = (1 - H) \rho_{liq} + H \frac{\bar{P}}{rT} \quad (3.34d)$$

Les termes traduisant la dilatabilité des phases gazeuses, c'est à dire les variations de volume par $\nabla \cdot \vec{u}$ et les variations de pression thermodynamique par $dP^{(0)}/dt$ sont précédés de la fonction indicatrice de phase H . Cela permet à la formulation monofluide de basculer d'une formulation faible Mach pour décrire les gaz à une formulation incompressible pour décrire les liquides. Les propriétés physiques μ , c_p , k sont définies pour l'ensemble du domaine de calcul en faisant intervenir H , afin de prendre en compte la discontinuité à travers l'interface :

$$X = X_{gaz} H + (1 - H) X_{liq} \quad (3.35)$$

Remarques

Le modèle que l'on utilise doit satisfaire les lois de conservation dans chaque phase mais également les relations de saut. La continuité de la composante normale de la vitesse à l'interface est respectée intrinsèquement car sans changement de phase l'interface est advectée à la vitesse de l'écoulement. De même, lorsque le fluide est au repos l'équation de conservation de quantité de mouvement (3.34b) dégénère en la relation de Laplace qui est correctement satisfaite grâce au traitement spécifique des courants parasites (cf fin du §3.1.4.7). Cependant il faut prêter une attention particulière à la conservation du flux de chaleur ainsi qu'à la continuité des contraintes qui nécessitent un traitement particulier au niveau discret (voir notamment §5.1.2.4 pour la continuité du flux de chaleur conductif et l'annexe A.4 pour la continuité des contraintes).

3.2.1 Évaluation de la pression thermodynamique et de la divergence de la vitesse dans le gaz

La relation locale donnant la divergence de la vitesse dans le gaz est obtenue en combinant l'équation de l'énergie sous forme conservative avec l'équation d'état du gaz et en utilisant le fait que \bar{P} ne dépend que du temps. On obtient ainsi l'expression suivante :

$$\nabla \cdot \vec{u} = \left[\nabla \cdot (k \nabla T) (\gamma - 1) - \frac{d\bar{P}}{dt} \right] \frac{1}{\gamma \bar{P}} \quad (3.36)$$

En intégrant cette équation (3.36) sur le domaine gazeux, on obtient la relation régissant l'évolution de la pression thermodynamique dans le gaz

$$\frac{d\bar{P}}{dt} = \frac{\int_{V(t)} [\nabla \cdot (k \nabla T) (\gamma - 1) - \gamma \bar{P} \nabla \cdot \vec{v}] H dV}{\int_{V(t)} H dV} \quad (3.37)$$

Remarques

On observe qu'une évaluation précise de $d\bar{P}/dt$ dépend du bilan spatial de plusieurs quantités, ou en d'autres termes du respect de

- la conservation du flux de chaleur
- la conservation de la masse
- la conservation du volume de la bulle

In fine, la valeur de la pression est issue d'une intégration en espace mais également d'une intégration en temps de $d\bar{P}/dt$. L'obtention de la valeur exacte de \bar{P} est délicate car une erreur sur la conservation du flux, de la masse, ou du volume dans le gaz, se répercute sur la précision de l'évaluation de la pression thermodynamique. Enfin on remarquera que c'est l'équation de l'énergie sous forme non conservative qui est résolue dans le système à un fluide (3.34c). En effet, résoudre la forme conservative de l'équation de l'énergie se réduirait à calculer l'évolution de la pression thermodynamique, car du

fait de la propriété de $\bar{P} = \bar{P}(t)$ qui est uniquement fonction du temps et de l'équation d'état $\bar{P} = r\rho T$, ces deux équations sont semblables.

3.2.2 Fonction indicatrice de phase élargie H^{ext}

Enfin, au vu des choix de modélisation qui ont été retenus, si l'on considère des inclusions gazeuses au sein d'une cavité fermée remplie de liquide, et si de plus, les phases sont non miscibles et qu'il n'y a pas de transfert de masse, alors on doit satisfaire la relation suivante

$$\int_{V(t)} [\nabla \cdot \vec{u}] H dV = 0 \quad (3.38)$$

avec $V(t)$ le domaine de calcul et H la fonction indicatrice de phase repérant les différentes phases sur le domaine de calcul.

Cette relation (3.38) traduit la relation de compatibilité étant donnée la nature incompressible du liquide

Il a été remarqué par Daru et al [9] que cette relation n'est pas respectée lorsque l'on utilise le front-tracking du fait de la zone de mélange introduite par cette méthode. En réalité, dans la méthode front-tracking standard, les propriétés physiques ainsi que l'application de la contrainte sur le champ de vitesse sont étalées sur une zone artificielle non physique correspondant au lissage de l'interface. Il en résulte une contrainte de dilatabilité qui est imposée sur tous les volumes de contrôle dans lesquels la fonction indicatrice de phase est non nulle. Ceci a été pris en compte par la définition d'une fonction indicatrice de phase, dite élargie H^{ext} , qui englobe tous les volumes de contrôle dans lesquels la fonction indicatrice de phase est non nulle, pour permettre d'assurer les bilans traduisant la dilatabilité du gaz [eqs 3.37 et 3.38]. Par la suite, on utilisera donc cette fonction indicatrice de phase élargie dans la relation (3.37).

Préambule aux chapitres 4 et 5

Les chapitres 4 et 5 présentent le développement du code diphasique incompressible-faible Mach. L'ordre de présentation des chapitres et des cas tests traités correspond à la démarche méthodologique qui a été suivie.

Lors de ma première année de thèse, j'ai eu à ma disposition plusieurs codes du LIMSI, permettant la simulation de différentes catégories d'écoulements :

- Code 1 : écoulements monophasiques incompressibles
- Code 2 : écoulements monophasiques faible Mach
- Code 3 : écoulements diphasiques incompressibles isothermes avec front-tracking
- Code 4 : écoulements diphasiques incompressibles-faible Mach sans front tracking

Des étapes de validation préliminaires ont été requises afin de m'approprier ces codes et les diverses méthodes numériques associées. Ces étapes préliminaires sont décrites dans le chapitre 4.

Les principaux développements de mon travail de thèse ont ensuite porté sur la construction, à partir d'éléments des codes 3 et 4, d'un nouveau code diphasique incompressible-faible Mach avec prise en compte de l'interface à l'aide de la méthode de front-tracking. Dans le chapitre 5, on présente au travers du traitement de cas tests, les difficultés associées à l'implémentation de l'équation de l'énergie dans le code. Plusieurs étapes ont dû être franchies afin de proposer des solutions permettant le développement d'un code capable de simuler avec précision des écoulements diphasiques anisothermes avec une phase gazeuse compressible. La progression dans la complexité des cas tests présentés, illustre la démarche qui a été suivie.

Dans un premier temps, le code a été testé sur des configurations permettant de vérifier la conservation de l'énergie lorsque l'interface doit rester immobile (*Cavité fermée chauffée I, II, et Cavité fermée différentiellement chauffée I et II*). Ces cas tests ont permis de mettre en avant la difficulté à assurer la conservation de l'énergie lorsque l'on utilise la méthode de front-tracking standard pour traiter l'interface. Pour résoudre ce problème, une méthode hybride de traitement d'interface a alors été introduite.

Dans un second temps, des cas tests ont été développés pour tester les capacités du code à simuler des écoulements anisothermes dans lesquels l'interface se déplace (*Cavité ouverte chauffée avec seuil fixe ou adaptatif* ainsi que les cas *μ canaux isobare I, II, et III et isochore*). Une amélioration de la méthode hybride s'est alors avérée nécessaire pour pouvoir traiter avec précision ce type de configurations.

Un tableau récapitulatif des cas tests traités est présenté page 114.

Chapitre 4

Étapes préliminaires de vérification du code diphasique

Dans ce chapitre, on présente les étapes préliminaires de vérification de codes diphasiques existants développés au LIMSI. Ces étapes préliminaires sont nécessaires à l’appropriation des travaux qui ont été réalisés au laboratoire, et constituent une introduction à la simulation d’écoulements diphasiques et aux spécificités qui y sont liées. Le développement d’un code diphasique incompressible-faible Mach avec front-tracking sera présenté au chapitre 5. Il utilise des éléments présents dans les codes 3 et 4, qui auront été vérifiés lors de ces étapes préliminaires.

4.1 Modèle à un fluide incompressible-faible Mach sans front-tracking

Dans un premier temps, on implémente le modèle à un fluide introduit au §3.2, afin de permettre la simulation d’écoulements diphasiques constitués d’une phase liquide incompressible et d’une phase gazeuse compressible sous l’hypothèse faible Mach.

Cas test : *Cavité fermée chauffée I*

L’implémentation du modèle à un fluide est réalisée à partir d’un code incompressible développé au LIMSI préalablement validé avec le benchmark [56][10]. L’implémentation du modèle comporte deux étapes. Tout d’abord, la prise en compte de la nature compressible du gaz nécessite l’introduction des termes traduisant la dilatabilité du gaz, soit la variation de pression thermodynamique par $d\bar{P}/dt$ et de volume avec $\nabla \cdot \vec{u} \neq 0$. Puis, le modèle à un fluide est implémenté en introduisant la fonction indicatrice de phase H , permettant de passer d’une formulation incompressible pour le liquide, à une formulation compressible sous l’approximation faible Mach pour le gaz.

Configuration

Pour vérifier l’implémentation du modèle à un fluide, on traite le cas d’une bulle d’air de rayon $20 \mu\text{m}$ au sein d’une cavité 2D chauffée de dimension $100 \times 100 \mu\text{m}$ remplie d’eau. Le liquide étant incompressible, on étudiera l’élévation de la pression thermodynamique dans la bulle sous l’effet du chauffage. L’état initial consiste en un champ de température uniforme à 293.15K et une pression dans la bulle égale à 1.10^5Pa et en un champ de vitesse nul. Des conditions d’adhérence sont imposées aux parois, et le chauffage à $t > 0$ est réalisé en portant la température des parois à 343.15K . La tension superficielle ne sera pas prise en compte dans ce cas test.

On souhaite uniquement valider le modèle à un fluide incompressible-faible Mach dans un premier temps. Par conséquent, ce cas test est simulé sans faire intervenir de méthode de suivi d’interface. Pour effectuer la simulation, nous utiliserons une fonction indicatrice de phase H fixe et discontinue, contrairement au front-tracking standard où l’interface

est lissée sur quelques cellules §3.1.4.1 (soit H^{ft} lisse). La fonction indicatrice de phase matérialisant l'interface liquide/gaz est définie à partir du cercle de rayon $20 \mu\text{m}$ centré au milieu de la cavité par $H = 1$ pour toute cellule dont le centre est à l'intérieur du cercle, et $H = 0$ en dehors.

De par la nature incompressible du liquide, la transformation considérée correspond à un chauffage isochore. Il est alors possible de prédire la valeur finale que doit atteindre la pression thermodynamique dans le gaz à l'issue de la transformation. Par conséquent, pour vérifier l'implémentation du modèle on s'intéressera à la valeur de pression thermodynamique obtenue à l'état stationnaire. On remarquera que dans le cas présent, l'interface étant fixe, la conservation du volume est assurée de facto. Ainsi, l'évaluation de la pression thermodynamique ne dépendra que de la conservation du flux de chaleur ainsi que de la conservation de la masse (Eq. 3.37 §3.2.1).

Résultats et commentaires

L'évolution de la pression thermodynamique et de la masse de la bulle, obtenues pour différents maillages 32×32 , 64×64 , 128×128 et 256×256 , sont respectivement tracées Fig. 4.1 et Fig. 4.2. Les champs de vitesse et de température à $t = 1, 5$ ms sont donnés Fig. 4.3.

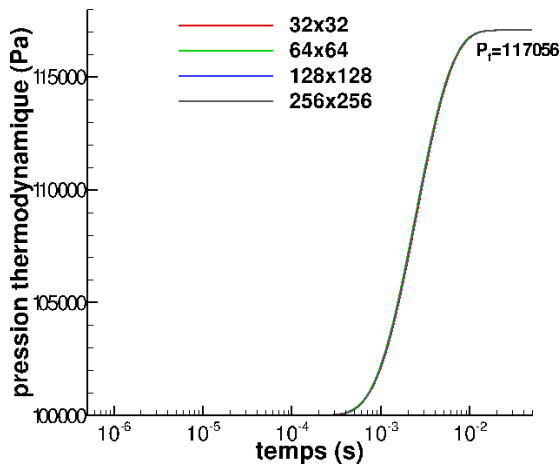


FIGURE 4.1 – Évolution de la pression thermodynamique dans la bulle au cours du temps

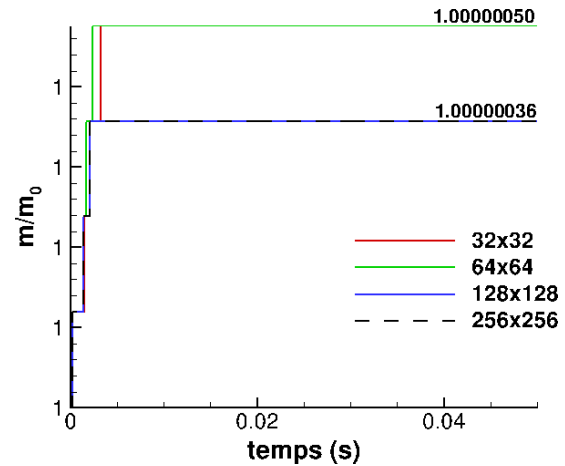


FIGURE 4.2 – Évolution de la masse de gaz au cours du temps

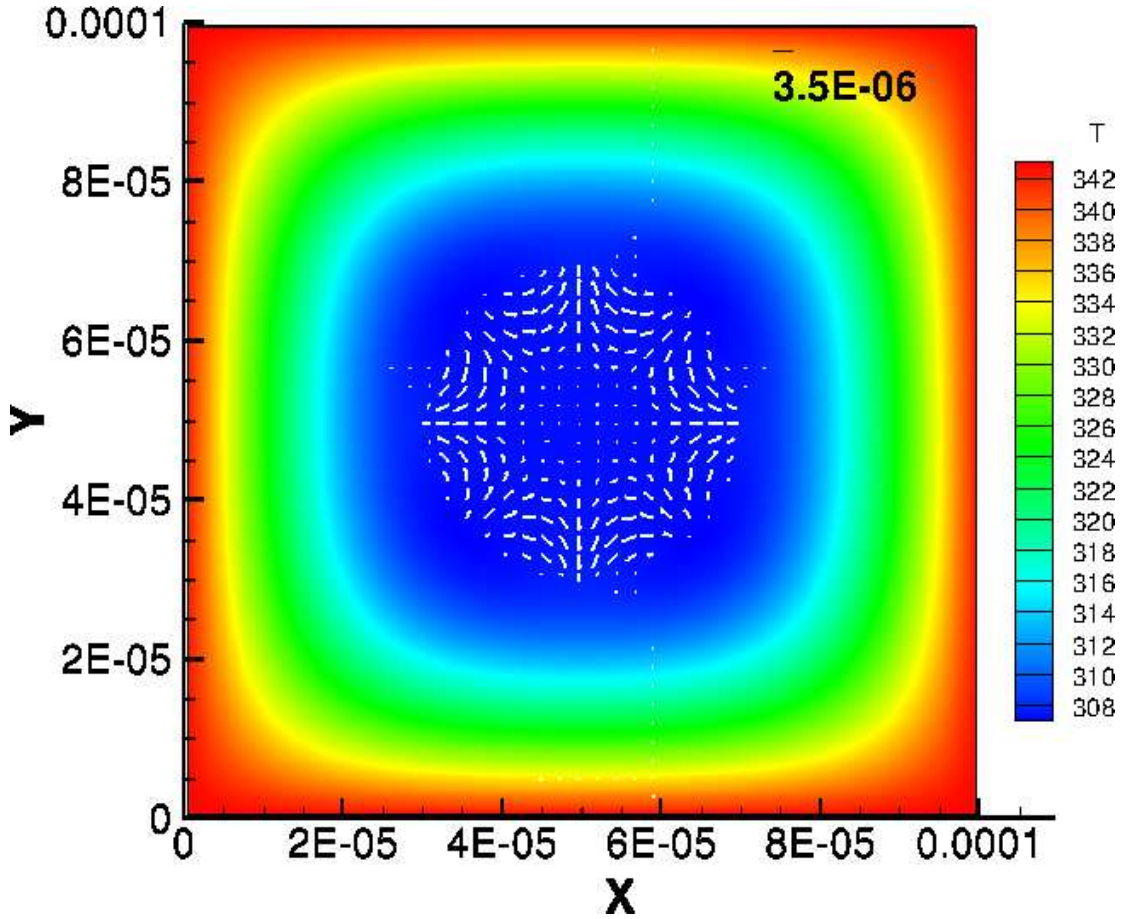


FIGURE 4.3 – Champ de température et de vitesse à $t = 1,5$ ms, maillage 256×256

On peut observer sur la Fig.4.3, le champ de vitesse dans le gaz, induit par le gradient de température dans le gaz, tandis que le liquide incompressible reste bien au repos ($|\vec{u}_{liq}|_{max} \approx 10^{-9} m.s^{-1}$ à proximité de l'interface et $|\vec{u}_{liq}|_{max} \approx 10^{-13} m.s^{-1}$ loin de l'interface). La transformation considérée étant isochore, la valeur finale de la pression attendue est donnée par $\bar{P}_f = \bar{P}_0(T_f/T_0) = 117056 Pa$. L'élévation de la pression thermodynamique n'est pas immédiate, elle débute seulement lorsque le flux de chaleur devient significatif dans le gaz, après avoir diffusé dans le liquide depuis les parois. L'évolution de la pression thermodynamique au cours du temps est tracée Fig.4.1 et l'on peut observer que la pression à l'état stationnaire est identique ($P_{f_{sim}} = 117056 Pa$ quel que soit le maillage) à la pression prédite par la théorie. La figure Fig.4.2 montre que la conservation de la masse est bien respectée quel que soit le maillage utilisé.

Les résultats obtenus pour les différentes résolutions sont très satisfaisants, même lorsqu'un maillage grossier tel que 32×32 est utilisé.

4.2 Modèle à un fluide incompressible-faible Mach avec front-tracking (configuration isotherme)

Dans un second temps, le front-tracking est implémenté dans le code diphasique à partir des routines disponibles au LIMSI. La validation de l'implémentation d'une méthode de traitement d'interface s'effectue en considérant plusieurs aspects, dont la capacité de la méthode à simuler correctement les déformations d'une inclusion gazeuse ou liquide. Cette validation peut notamment être réalisée en comparant les résultats numériques avec les résultats expérimentaux donnant la forme de bulles de gaz ascensionnelles soumises à un champ de gravité. On peut également compléter la validation par une comparaison des vitesses asymptotiques d'ascension des bulles de gaz. Cette validation qui nécessite une version de code 2D axisymétrique ou 3D, a été réalisée par le passé pour les sous-routines disponibles au laboratoire.

Dans cette partie, on s'intéressera à un critère de vérification important dans notre cas, au vu des échelles spatiales qui seront considérées : l'évaluation des courants parasites. Ces courants parasites, engendrés à l'interface par les méthodes de traitement d'interface lorsque la tension superficielle est prise en compte, peuvent se développer au cours du calcul et détruire l'interface.

Cas test : *Courants parasites I*

Comme cela a été indiqué au §3.2, le calcul de la tension de surface est crucial aux échelles d'espace qui seront considérées. Les sous-routines développées au laboratoire permettant la mise en œuvre de la méthode proposée par Shin et al [61] ont été implémentées dans le code diphasique afin de réduire significativement les courants parasites à l'interface.

Configuration

L'implémentation de la méthode est vérifiée en traitant une configuration identique à celle présentée dans [61], soit une bulle de rayon 0.25, localisée au centre d'une cavité 2D de dimension 1×1 . Le maillage utilisé est grossier 50×50 , et toutes les propriétés physiques sont égales à 1. Des conditions d'adhérence et d'adiabaticité sont imposées aux parois.

Résultats et commentaires

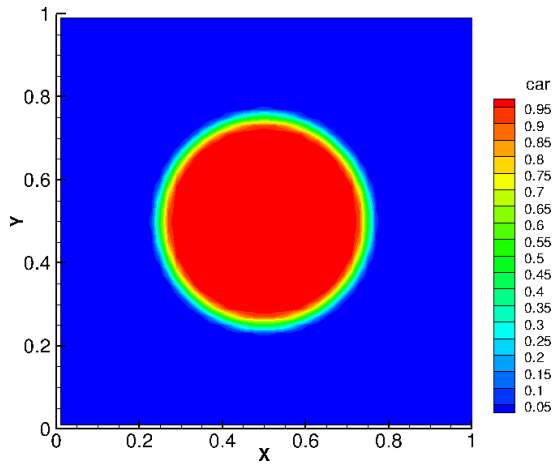


FIGURE 4.4 – Fonction indicatrice de phase dans le cas test sur les courants parasites [61]

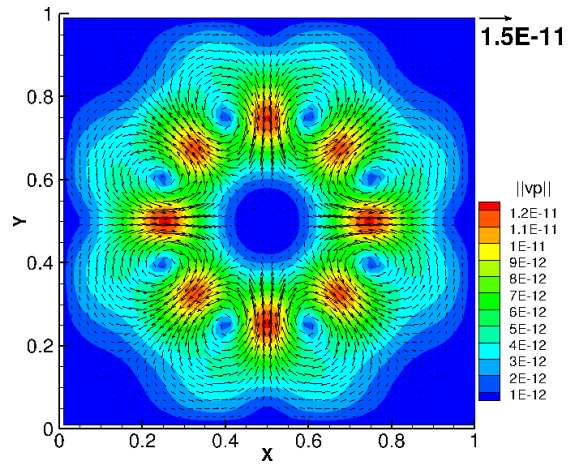


FIGURE 4.5 – Courants parasites engendrés en utilisant un modèle à un fluide incompressible/faible Mach [61]

En appliquant le traitement proposé par Shin et al [61], les vitesses associées aux courants parasites sont de l'ordre de $10^{-11} m.s^{-1}$. Ce résultat est à comparer avec les courants parasites générés par les méthodes de front-tracking standard qui sont de l'ordre de $10^{-4} m.s^{-1}$ et sont eux même très inférieurs de plusieurs ordres de grandeurs aux courants parasites engendrés par les méthodes VOF ou level-set standard.

Conclusion

À l'issue de cette étape préliminaire, deux codes ont été vérifiés : le code 3, pouvant simuler des écoulements isothermes avec suivi de l'interface à l'aide de la méthode de front-tracking et le code 4 permettant la simulation d'écoulements incompressibles-faible Mach, mais sans traitement de l'interface (interface fixe). Le développement du code diphasique incompressible-faible Mach avec front-tracking, présenté au chapitre suivant, s'appuie sur des éléments présents dans les codes 3 et 4.

Chapitre 5

Développement du code diphasique
incompressible-faible Mach avec
équation de l'énergie

Ce chapitre est consacré au développement d'un code de calcul qui puisse simuler des écoulements diphasiques anisothermes où l'interface se déplace. C'est un problème auquel peu de travaux ont été consacrés (cf §1.1), car on se confronte rapidement à de nombreuses difficultés comme on le verra dans ce chapitre.

Après l'implémentation de l'équation de l'énergie dans le Code 3, la définition de cas tests pertinents a permis de diagnostiquer l'origine des difficultés, qui sont inhérentes à l'utilisation de la méthode de front-tracking pour le traitement de l'interface. Une méthode hybride de traitement de l'interface a été proposée pour remédier aux problèmes rencontrés, légitimée par des éléments argumentés obtenus à partir des résultats de simulation des cas tests.

5.1 Modèle incompressible-faible Mach avec front-tracking sans déplacement de l'interface

L'équation de l'énergie est implémentée dans le code diphasique incompressible-faible Mach utilisant la méthode de front-tracking pour la prise en compte de l'interface. Le code obtenu est vérifié grâce à plusieurs cas tests développés spécifiquement pour vérifier la conservation de l'énergie. Les configurations simulées mettent en jeu des écoulements diphasiques anisothermes faisant intervenir la compressibilité du gaz.

5.1.1 Cas tests de vérification de l'implémentation de l'équation de l'énergie

5.1.1.1 *Cavité fermée chauffée II*

Configuration

Pour commencer, on reprend le cas test *Cavité fermée chauffée I* présenté au §4.1. C'est un cas test anisotherme mettant en jeu la dilatabilité du gaz. Ce cas test présente l'avantage d'avoir une solution théorique pour la pression thermodynamique à l'état stationnaire permettant ainsi la vérification de l'implémentation du modèle à un fluide. En revanche, contrairement au cas test simulé au §4.1, la version de code qui est testée cette fois-ci, utilise conjointement le modèle à un fluide et la méthode de front-tracking incluant l'amélioration du traitement des courants parasites.

Les critères permettant la vérification du code sont les mêmes qu'au §4.1 : la conservation de la masse et l'évolution de la pression thermodynamique dans le gaz, auxquelles s'ajoute cette fois, la conservation du volume de la bulle.

Résultats et commentaires

Les résultats présentés ci-dessous ont été obtenus pour plusieurs maillages 64×64 , 128×128 et 256×256 . On rappelle que la pression thermodynamique finale, calculée théoriquement en considérant une transformation isochore, vaut $\bar{P}_f = \bar{P}_i(T_f/T_i) = 117056$ Pa.

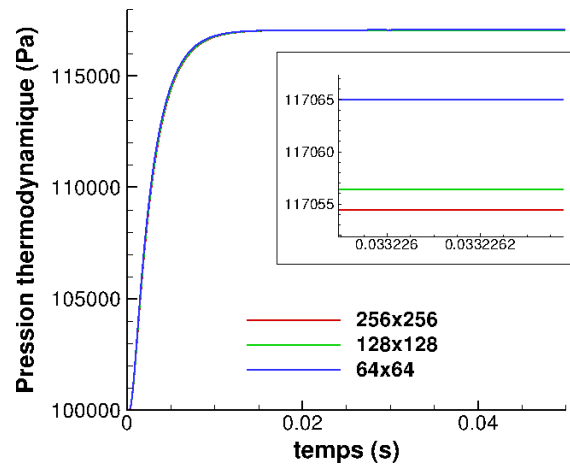


FIGURE 5.1 – Évolution de la pression thermodynamique dans la bulle au cours du temps avec la version du code utilisant le front-tracking

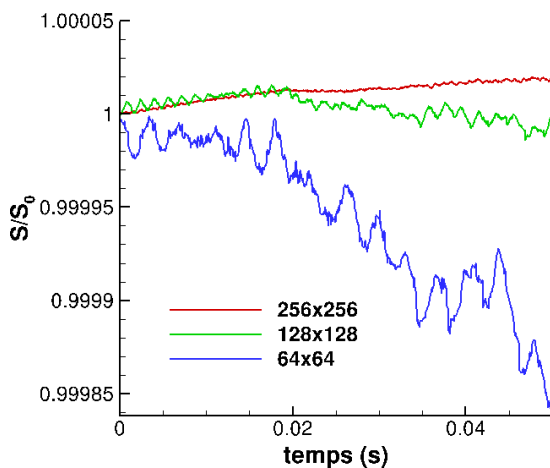


FIGURE 5.2 – Évolution de la surface de la bulle au cours du temps avec la version du code utilisant le front-tracking

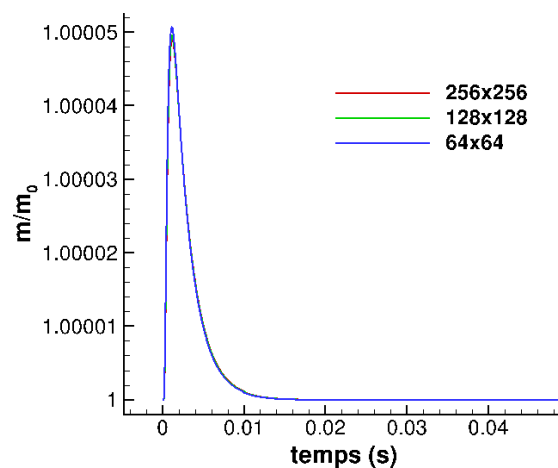


FIGURE 5.3 – Évolution de la masse de la bulle au cours du temps avec la version du code utilisant le front-tracking

Les résultats obtenus par simulation sont très satisfaisants. La pression thermodynamique à l'état stationnaire est obtenue avec une erreur relative de inférieure à 0,01%

(Fig. 5.1). La conservation de la masse (Fig.5.3) ainsi que la conservation de la surface de la bulle (Fig.5.2) sont correctement assurées.

On note toutefois qu'avec l'implémentation de la méthode de front-tracking, l'écart aux valeurs théoriques est plus important que dans le cas utilisant une fonction indicatrice de phase discontinue fixe (voir §4.1). Cet écart toutefois minime, observé sur la valeur finale de la pression thermodynamique, s'explique par l'accumulation de l'erreur sur la conservation de la masse et du volume du gaz (Eq. 3.37 §3.2.1). Enfin, l'implémentation de la méthode de front-tracking semble influencer sur la robustesse du code. En effet, contrairement aux résultats de la partie 4.1, l'implémentation du front-tracking n'a pas permis de simulations sur maillage un 32×32 , la représentation de l'interface devenant vraisemblablement trop grossière.

5.1.1.2 *Cavité fermée différentiellement chauffée I : conductivité thermique uniforme $k_{liq} = k_{gaz}$*

Pour poursuivre la vérification du code, on définit un nouveau cas test conçu pour vérifier spécifiquement la conservation de l'énergie lorsque des transferts de chaleur au sein d'un écoulement diphasique sont mis en jeu. Ce cas test doit permettre de vérifier la fiabilité du code dans des configurations comportant des conditions de chauffage et de refroidissement asymétriques. Cela permet contrairement aux cas traités dans les travaux antérieurs réalisés au LIMSI ([9] et [24]), d'obtenir des flux de chaleur et un champ de température non uniformes à l'état stationnaire, ce qui rend ce cas test très exigeant concernant la conservation de l'énergie notamment. Par ailleurs, le cas test développé est simple à implémenter, et possède une solution à l'état stationnaire qui peut être prédite par la théorie.

Configuration

La configuration étudiée est une cavité de dimension $100 \times 100 \mu m$ remplie d'eau avec une bulle d'air de rayon $20 \mu m$ localisée en son centre. Dans ce cas test, le liquide est initialement au repos et des conditions d'adhérence sont imposées aux parois. La température initiale est fixée à $T_0 = (T_1 + T_2)/2$ et la pression initiale dans la bulle à $t = 0$ est fixée à $P_0 = 10^5 Pa$. À $t > 0$ les températures $T_1 = 343.15 K$ et $T_2 = 293.15 K$ sont respectivement imposées sur les parois latérales droite et gauche de la cavité, tandis que des conditions d'adiabaticité sont imposées sur les parois supérieure et inférieure de la cavité. La gravité n'étant pas prise en compte, les conditions aux limites en température engendrent un transfert de chaleur dans la cavité qui s'effectue de la gauche vers la droite.

Le cas test est simulé avec les propriétés physiques suivantes : $c_{p_{liq}} = 4184 J.Kg^{-1}.K^{-1}$, $k_{liq} = 0,598 W.m^{-1}.K^{-1}$, $\mu_{liq} = 1000 Pa.s$ et une masse volumique fixée à $\rho_{liq} = 1000 Kg.m^{-3}$ pour le liquide. En effet, une première tentative de simulation avec un rap-

port de masse volumique de ≈ 1000 n'a pas pu être menée à terme. La capacité thermique est fixée à $c_{p_{gaz}} = 1004,5 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et la viscosité dynamique à $\mu_{gas} = 1,82 \cdot 10^{-5} \text{ Pa.s}$ pour l'air. La masse volumique de l'air est obtenue en utilisant la loi des gaz parfaits. Dans ce cas test, la tension superficielle est prise en compte et vaut 0.07 N/m . Enfin, la conductivité thermique est choisie uniforme dans les deux fluides et égale à k_{liq} , pour des raisons qui seront précisées plus loin.

Enfin, le calcul de la variation temporelle de la pression thermodynamique est réalisé en utilisant la fonction indicatrice de phase étendue proposée par Daru et présentée au §3.2.2. Cette fonction doit permettre d'assurer la justesse du bilan sur la divergence du champ de vitesse dans la zone compressible.

Critères de vérification

Un certain nombre de critères doit permettre d'entériner la vérification du code. Comme dans les cas tests *Cavité fermée chauffée I et II* présentés aux §4.1 et 5.1.1.1, on portera notre attention notamment sur la conservation de la masse et compte tenu du caractère incompressible du liquide, sur la conservation du volume (surface en 2D) de la bulle. De plus, le liquide étant initialement au repos et la gravité n'étant pas prise en compte, on s'attend à ce que la bulle reste immobile au cours de la simulation.

Enfin, on accordera une importance particulière à la variation de la pression thermodynamique dans le gaz qui est un critère de vérification très exigeant (cf Eq. 3.37 §3.2.1). La pression thermodynamique dans le gaz évolue au cours du temps sous l'effet du transfert de chaleur dans la cavité, pour atteindre une valeur constante à l'état stationnaire. La transformation étant isochore du fait de l'incompressibilité du liquide, la valeur de la pression thermodynamique dans le gaz à l'état stationnaire P_f peut être exactement prédite par $P_f = P_0(T_f/T_0)$. Il faut cependant avoir accès au champ de température stationnaire. Celui-ci est obtenu facilement en imposant une conductivité thermique uniforme comme il sera indiqué ci-dessous.

Solution analytique approchée

La recherche d'une solution analytique approchée du champ de température permet de mesurer la justesse de l'évaluation numérique de la pression thermodynamique lors du régime transitoire. En effet, la pression durant le régime transitoire peut être calculée à partir du champ de température, en utilisant la relation traduisant la conservation de la masse

$$\bar{P} = \frac{m_0}{\int_{bulle} \frac{dV}{rT}} \quad (5.1)$$

avec m_0 la masse initiale de la bulle. Si l'on tient compte du fait que la diffusivité thermique du gaz est très inférieure à celle du liquide, et que les vitesses engendrées

dans le gaz sont faibles, il est possible d'approcher l'évolution du champ de température au cours du temps, par une solution de diffusion pure et unidirectionnelle dans un mur plan d'épaisseur $2L$, ayant les propriétés physiques du liquide. Comme indiqué précédemment, la température initiale est fixée à $T_0 = (T_1 + T_2)/2$, puis les parois latérales du mur sont portées à la température T_1 et T_2 . Dans ces conditions, l'évolution du champ de température est donnée par [7]

$$T(x, t) = T_1 + (T_2 - T_1) \frac{x}{L} + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(T_2 - T_0) \cos(n\pi) - (T_1 - T_0)}{n} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \exp\left(\frac{-\alpha n^2 \pi^2 t}{L^2}\right) \quad (5.2)$$

La conductivité thermique étant uniforme, le champ de température à l'état stationnaire est linéaire et donné par $T(x) = -5.10^5 x + 343.15$ (avec T en Kelvin et x en mètre). La valeur finale de la pression dans la bulle peut alors être calculée et vaut $P_{th} = 99975 Pa$. De plus, les flux de chaleur dans chaque section verticale de la cavité doivent être égaux ($q'_{th} = 30 W/m$) à l'état stationnaire.

Résultats

On présente, pour plusieurs maillages 64×64 , 128×128 et 256×256 , l'évolution de la pression thermodynamique dans la bulle, l'erreur sur la conservation de la masse et sur le volume (surface en 2D) de la bulle au cours du temps, ainsi que les composantes de la vitesse du centre de masse de la bulle.

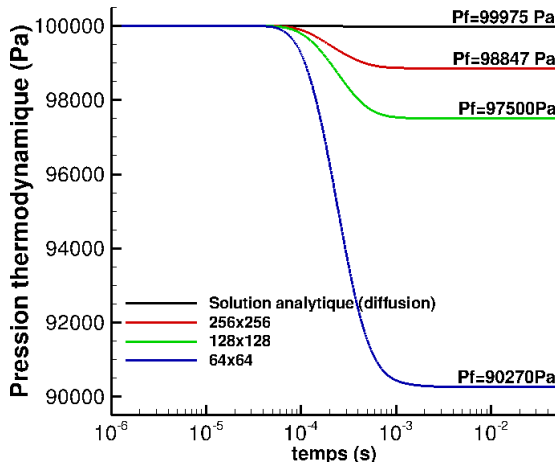


FIGURE 5.4 – Évolution de la pression thermodynamique dans la bulle en utilisant le front-tracking

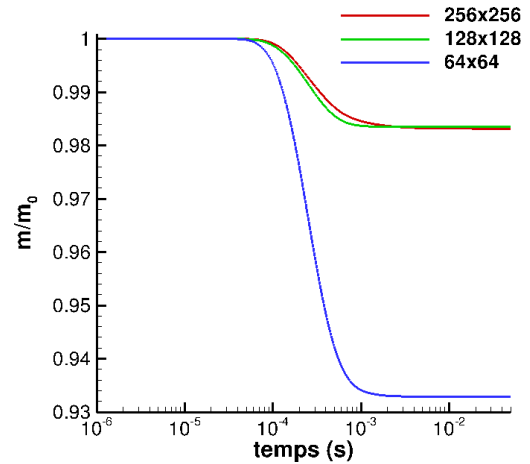


FIGURE 5.5 – Erreur sur la conservation de la masse en utilisant le front-tracking

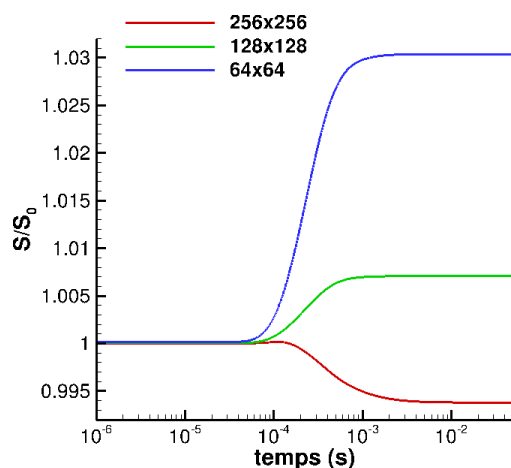


FIGURE 5.6 – Surface de la bulle en utilisant le front-tracking

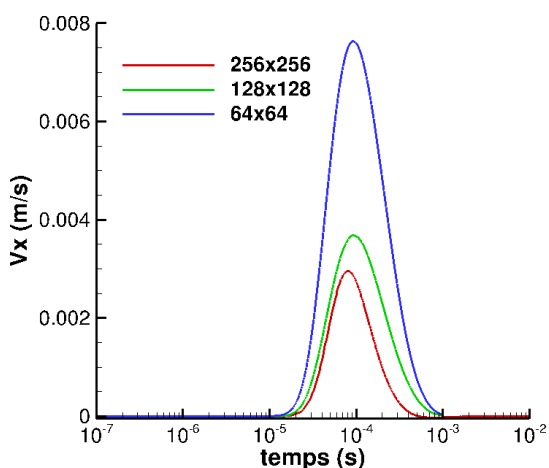


FIGURE 5.7 – Vitesse de déplacement du centre de masse (selon $O\vec{x}$) de la bulle en utilisant le front-tracking

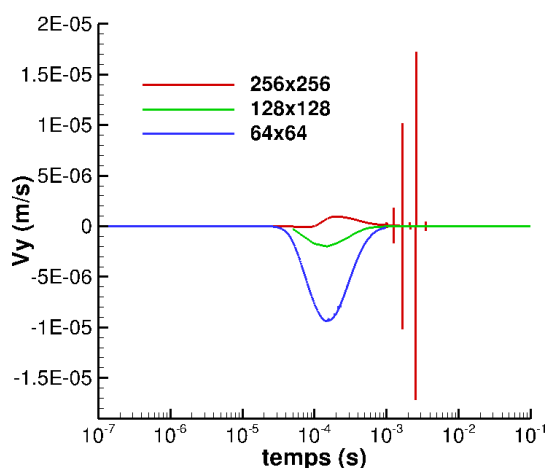


FIGURE 5.8 – Vitesse de déplacement du centre de masse (selon $O\vec{y}$) de la bulle en utilisant le front-tracking

Commentaires

Comme on peut le voir sur la Fig.5.4, la valeur stationnaire de la pression thermodynamique n'est pas satisfaisante, car entachée d'une erreur relative de l'ordre de 2,48% et 1,13% pour les maillages les plus raffinés 128×128 et 256×256 , et d'une erreur inacceptable pour le maillage le plus lâche 64×64 avec 9,71% d'erreur relative.

Cependant, la conservation de la masse semble correctement assurée pour le maillage 256×256 et 128×128 , tandis que pour le maillage 64×64 on observe sur la Fig.5.5 une perte de masse importante, et sur la Fig.5.6 un gain de volume non négligeable. Ces

résultats insatisfaisants sont obtenus en dépit de l'utilisation de la fonction indicatrice de phase étendue dans le calcul de la variation temporelle de la pression thermodynamique, fonction qui doit assurer en principe la conservation du volume (surface en 2D), soit $\int_{V(t)} [\nabla \cdot \vec{u}] H^{ext} dV = 0$ dans ce cas test (cf §3.2.2).

Par conséquent, l'erreur commise sur la conservation de la masse et du volume de la bulle ne peut suffire à expliquer l'erreur importante sur la valeur de la pression thermodynamique à l'état stationnaire.

Enfin, on notera que la bulle, dans les premiers instants de la simulation, se déplace horizontalement de la gauche vers la droite Fig. 5.7. Cela est constaté alors que l'on s'attend à avoir une bulle qui reste immobile ($\vec{g} = \vec{0}$ et transformation isochore). La vitesse verticale de la bulle reste négligeable (Fig. 5.8).

Le déplacement de la bulle de la gauche vers la droite est probablement dû à l'effet combiné d'une mauvaise imposition de la contrainte sur la divergence d'une part, ainsi qu'aux limites de la procédure d'interpolation du champ de vitesse à l'interface d'autre part.

En effet, la contrainte de divergence non nulle est imposée dans le gaz mais également dans une zone non physique créée par le lissage de l'interface.

$$\nabla \cdot \vec{u} = -\frac{H}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} \quad (5.3)$$

avec la fonction indicatrice de phase lissée H prenant des valeurs comprises entre 0 et 1 sur plusieurs cellules. Par conséquent, à l'issue de la procédure d'interpolation, on obtient une composante de vitesse normale à l'interface non nulle. Il en résulte alors l'advection de l'interface.

Il faut également prendre en compte la remarque de Peskin dans [49], qui note que la procédure d'interpolation du champ de vitesse à l'interface ne permet pas de conserver la contrainte de divergence sur la vitesse interpolée. Pour le cas d'écoulements incompressibles, cela se traduit par

$$\int_{V(t)} \nabla \cdot \vec{u} dV \neq 0 \quad (5.4)$$

ou encore

$$\int_{S(t)} \underbrace{\vec{u} \cdot \vec{n} \delta}_{\text{interpolée}} dS \neq 0 \quad (5.5)$$

Compte tenu de cette remarque, dans le cas compressible (lorsque $\nabla \cdot \vec{u} \neq 0$) si la procédure d'interpolation est utilisée, il n'y a donc aucune garantie que l'interface ne se déplace pas ; même si une fonction indicatrice de phase strictement discontinue ($H = 0$

ou 1) est utilisée pour imposer la contrainte sur la divergence. En d'autres termes même sans lissage de la contrainte sur la divergence, la procédure d'interpolation engendre intrinsèquement une erreur sur la contrainte du champ de vitesse interpolé qui, en l'occurrence, se traduit par l'advection de l'interface et une erreur sur la conservation du volume de la bulle. Enfin, notons que ce déplacement n'était pas visible dans les cas tests *Cavité fermée chauffée I et II* présentés aux §4.1 et 5.1.1.1 du fait d'un chauffage symétrique (les erreurs se compensant).

Pour permettre une analyse plus fine des résultats obtenus par la simulation, on peut revenir sur le calcul de la pression thermodynamique présenté au §3.2.1, et remarquer qu'il manque un élément pour analyser et expliquer ces résultats erronés. En effet, l'évaluation de la pression thermodynamique dépend certes de la conservation de la masse et du volume de la bulle, mais également de la conservation du flux de chaleur. Par conséquent, le cas test qui vient d'être simulé est modifié afin de permettre la vérification de la conservation du flux de chaleur. L'évolution de ce cas test est présentée ci-dessous.

5.1.1.3 *Cavité fermée différentiellement chauffée II : diffusivité thermique uniforme* $\alpha_{liq} = \alpha_{gaz}$

Au vu des résultats obtenus au §5.1.1.2, un nouveau cas test a été conçu pour permettre la vérification de la conservation du flux de chaleur lors du régime transitoire. Ce critère de vérification supplémentaire doit apporter de nouveaux éléments pour identifier l'origine des erreurs sur les résultats obtenus au §5.1.1.2.

Configuration

Le cas test consiste comme précédemment en une bulle de gaz de rayon $20 \mu m$ située au centre d'une cavité fermée de dimensions $100 \times 100 \mu m$ remplie d'eau. À l'état initial, la pression thermodynamique dans le gaz est fixée à $10^5 Pa$ et un champ de température uniforme et égal à $318,15 K$ est imposé. Le liquide est initialement au repos, et des conditions d'adhérence sont imposées aux parois. À $t > 0$ les températures $T_1 = 343,15 K$ et $T_2 = 293,15 K$ sont respectivement imposées sur les parois latérales droite et gauche de la cavité, tandis que des conditions d'adiabaticité sont imposées sur les parois haute et basse. La gravité n'étant pas prise en compte dans ce cas test, le transfert de chaleur dans la cavité s'effectue de la gauche vers la droite. De plus, le liquide étant considéré incompressible, la bulle doit rester immobile au cours du temps.

Afin de vérifier la conservation du flux de chaleur, on imposera une diffusivité thermique uniforme dans tout le domaine de calcul, égale à α_{liq} . De cette façon, on pourra comparer les flux de chaleur obtenus par simulation numérique avec les flux de chaleur calculés à partir de la solution analytique approchée durant le régime transitoire. Comme dans le cas test précédent *Cavité fermée différentiellement chauffée I* §5.1.1.2,

la conductivité thermique est choisie uniforme sur tout le domaine de calcul, égale à k_{liq} . Cela permet d'obtenir un profil de température linéaire à l'état stationnaire. Ainsi les flux de chaleur dans chaque section verticale de la cavité doivent être égaux à l'état stationnaire : $\int k \frac{\partial T}{\partial x} \vec{n} dl = cste$. Les flux de chaleur peuvent alors être comparés avec la valeur théorique $q'_{th} = 30$ W/m.

Par conséquent, la capacité calorifique du gaz est fixée de façon à obtenir une diffusivité thermique dans le gaz égale à celle du liquide $c_{pgaz} = c_{pliq} * \rho_{liq} / \rho_{0gaz}$, avec ρ_{0gaz} la masse volumique initiale du gaz. Les autres propriétés physiques sont fixées à : $k_{gaz} = 0.6$ W.m⁻¹.K⁻¹, et $\mu_{gaz} = 1,82.10^{-5}$ Pa.s pour le gaz, et à $\rho_{liq} = 100$ kg.m⁻³, $k_{liq} = 0.6$ W.m⁻¹.K⁻¹, $\mu_{liq} = 1000$ Pa.s, pour le liquide. La capacité calorifique du liquide est modifiée et fixée à $c_{pliq} = 41,84$ J.Kg⁻¹.K⁻¹ pour les besoins du calcul.

Solution analytique approchée et critères de vérification

La solution analytique est obtenue de façon similaire au cas test précédent (voir §5.1.1.2) en utilisant une diffusivité thermique uniforme.

Les critères de vérification portent à nouveau sur l'évolution de la pression thermodynamique dans la bulle au cours du temps, l'erreur sur la conservation de la masse et du volume de la bulle, les composantes de la vitesse du centre de masse de la bulle. Dans ce cas test, on regardera en également l'évolution du flux de chaleur au cours du temps en différentes sections de la cavité. En notant L la dimension de la cavité selon $O\vec{x}$, les flux de chaleur sont évalués aux sections définies en $x = L/4; 3L/4$ pour les sections définies uniquement dans le liquide, et en $x = 4L/10, 6L/10$ pour les sections qui traversent les deux phases.

Résultats

Les critères de vérification, obtenus pour les maillages 64×64 , 128×128 et 256×256 , sont présentés ci-dessous.

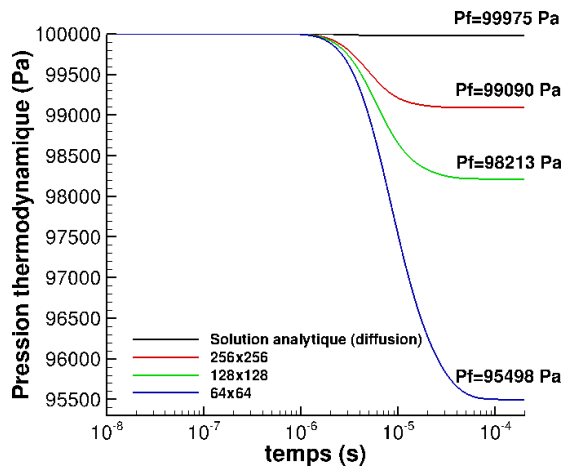


FIGURE 5.9 – Évolution de la pression thermodynamique dans la bulle en utilisant le front-tracking

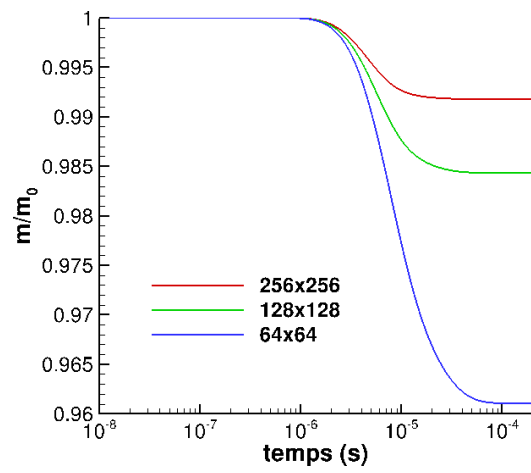


FIGURE 5.10 – Erreur sur la conservation de la masse en utilisant le front-tracking

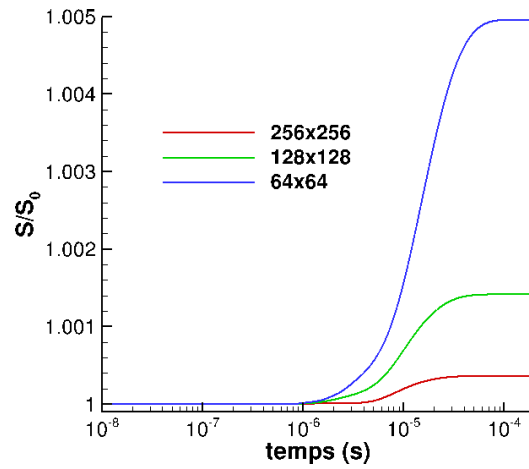


FIGURE 5.11 – Surface de la bulle en utilisant le front-tracking

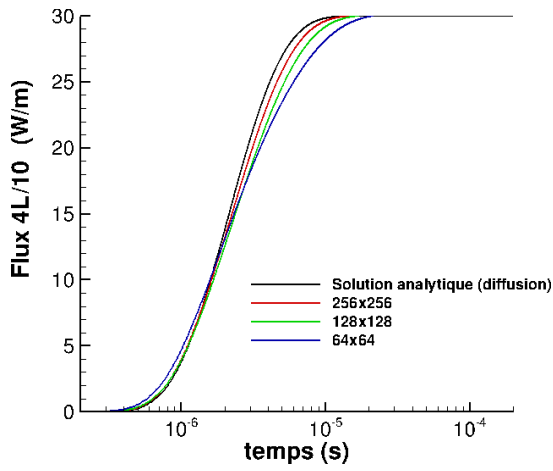


FIGURE 5.12 – Flux en $x = 4L/10$

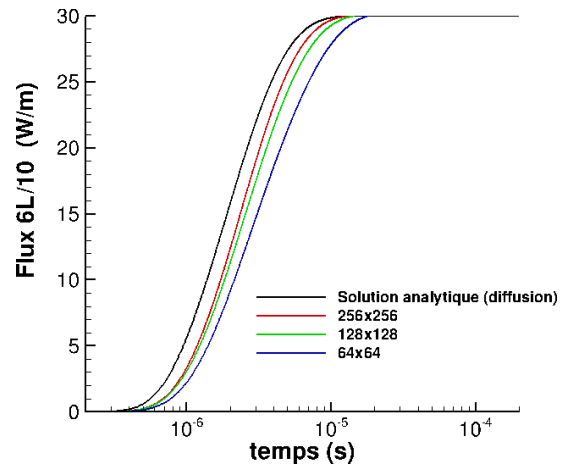


FIGURE 5.13 – Flux en $x = 6L/10$

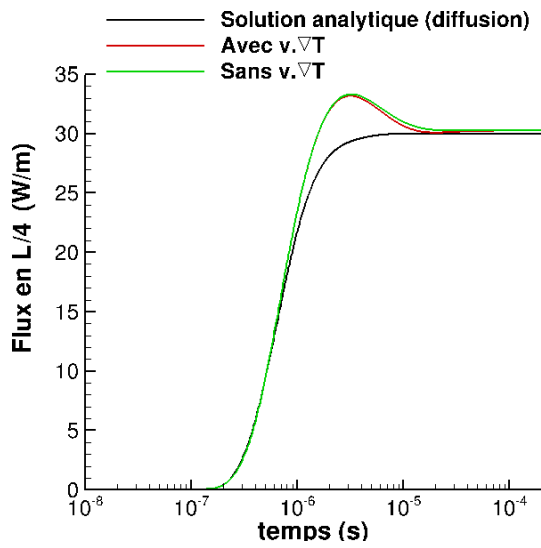


FIGURE 5.14 – Flux en $x = L/4$ (liquide) avec et sans prise en compte de $\vec{u} \cdot \nabla T$, maillage 64×64

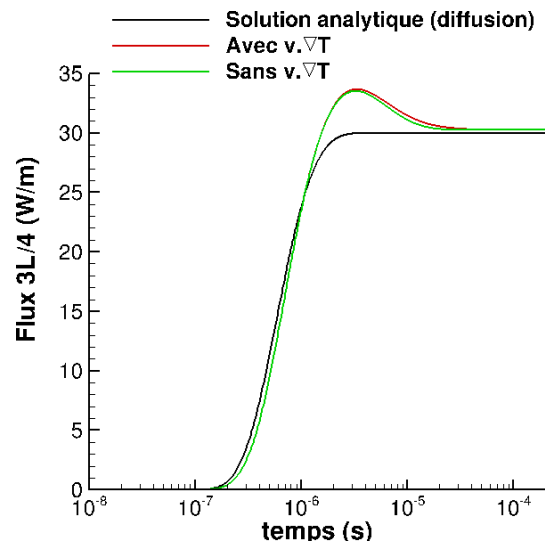


FIGURE 5.15 – Flux en $x = 3L/4$ (liquide) avec et sans prise en compte de $\vec{u} \cdot \nabla T$, maillage 64×64

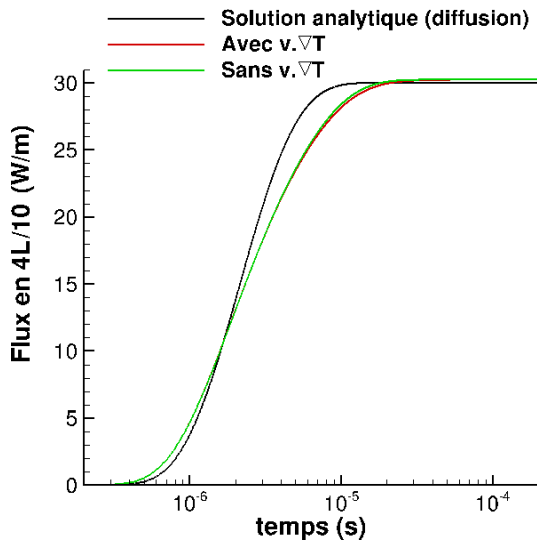


FIGURE 5.16 – Flux en $x = 4L/10$ (liquide-gaz) avec et sans prise en compte de $\vec{u} \cdot \nabla T$, maillage 64×64

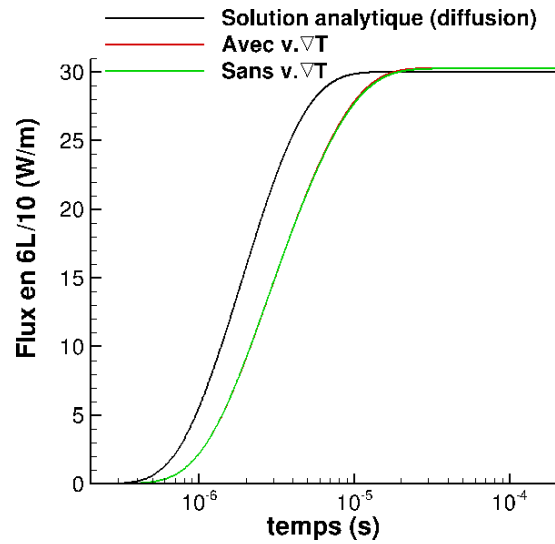


FIGURE 5.17 – Flux en $x = 6L/4$ (liquide-gaz) avec et sans prise en compte de $\vec{u} \cdot \nabla T$, maillage 64×64

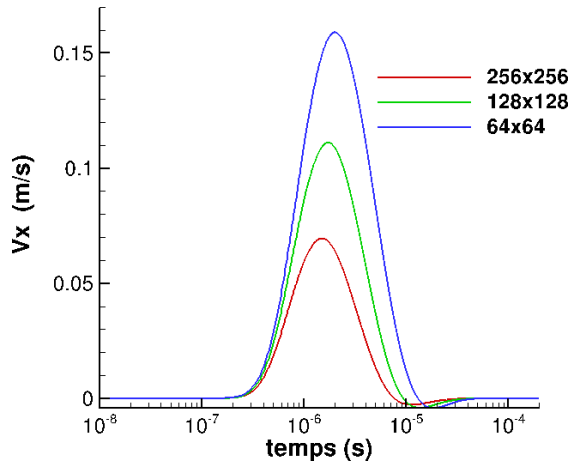


FIGURE 5.18 – Vitesse du centre de masse de la bulle selon $O\vec{x}$ obtenue en utilisant le front-tracking

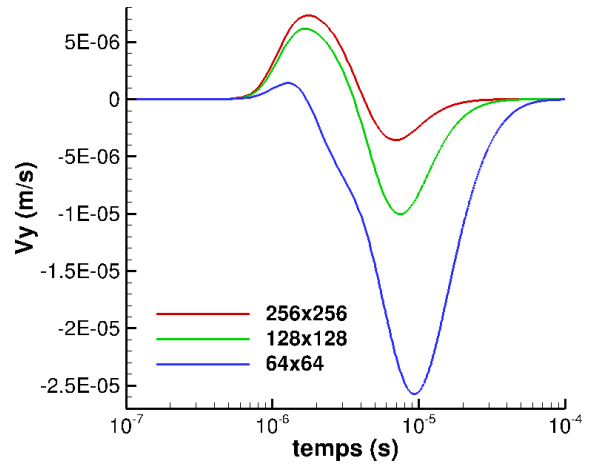


FIGURE 5.19 – Vitesse du centre de masse de la bulle selon $O\vec{y}$ obtenue en utilisant le front-tracking

Analyse

Les résultats de simulation du cas test modifié sont sensiblement meilleurs que ceux obtenus précédemment (la configuration étant plus « favorable » que la précédente, les propriétés thermophysiques étant uniformes), mais l'erreur sur le calcul de la pression thermodynamique reste trop importante au vu des maillages utilisés. En effet, la pression

thermodynamique à l'état stationnaire est calculée avec une erreur relative légèrement inférieure au 1% pour le maillage le plus raffiné 256×256 , et supérieure à 1,5% et à 4% respectivement pour les maillages 128×128 et 64×64 (Fig. 5.9). Le volume est correctement conservé dans ce cas test quel que soit le maillage utilisé (Fig. 5.11). La perte de masse est faible pour les maillages 256×256 et 128×128 , mais importante pour le maillage grossier 64×64 , avec une erreur de l'ordre de 4%. Il n'y a donc a priori pas de corrélation entre la perte de masse et la conservation de volume, contrairement à ce que les résultats du cas test précédent *Cavité fermée différentiellement chauffée I* §5.1.1.2 semblaient indiquer. Enfin, on observe toujours Fig. 5.18 une translation horizontale importante de la bulle quel que soit le maillage utilisé, tandis que le déplacement vertical de la bulle reste négligeable (Fig. 5.19).

Les figures 5.14 et 5.15 montrent que le flux de chaleur diffusif est mal estimé. En effet, on peut observer sur les Figs. 5.14 et 5.15 que le flux de chaleur n'est pas correctement évalué durant le régime transitoire dans le liquide. Avant d'atteindre la valeur stationnaire théorique, les flux de chaleur calculés numériquement aux sections $x = L/4$ et $x = 3L/4$ sont surestimés, et dépassent, aux alentours de $t = 2.10^{-6}s$, le flux de chaleur correspondant à la solution analytique de diffusion pure.

Les sections concernées par la surestimation du flux se situent uniquement dans le liquide. Or, dans le liquide, on a

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \underbrace{\vec{u} \cdot \nabla T}_{=0} = \nabla \cdot (\alpha \nabla T) \quad (5.6)$$

avec la vitesse qui doit être nulle dans le liquide, ce qui donne finalement

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx \nabla \cdot (\alpha \nabla T) \quad (5.7)$$

on devrait donc retrouver la courbe analytique, car la situation est proche d'un processus de diffusion pure dans le liquide. En réalité, à cause des erreurs de troncature, des résidus issus de la procédure multigrilles utilisée pour le calcul de la pression π , et des courants parasites engendrés à proximité de l'interface, la vitesse n'est pas exactement égale à zéro dans le liquide ($|\vec{u}|_{max} \approx 10^{-4} m.s^{-1}$ à proximité de l'interface et de l'ordre de $|\vec{u}|_{max} \approx 10^{-6} m.s^{-1}$ loin de l'interface). Par conséquent le terme $\vec{u} \cdot \nabla T$ n'est pas strictement nul dans le liquide. Afin d'évaluer l'impact du terme $\vec{u} \cdot \nabla T$ sur le calcul du champ de température, et de voir si ce terme est responsable de l'erreur commise, une seconde simulation sans prise en compte de $\vec{u} \cdot \nabla T$ dans l'équation de l'énergie a été réalisée. On peut observer sur les Figs. 5.14 et 5.15 que l'erreur commise sur $\vec{u} \cdot \nabla T$ contribue peu à l'erreur commise sur l'évaluation du flux de chaleur.

Par conséquent, l'erreur ne semblant pas a priori être générée dans le liquide ($d\bar{P}/dt = 0$

et influence de $\vec{u} \cdot \nabla T$ quasi nulle), il faut porter notre attention sur l'interface pour trouver l'origine de l'erreur sur le champ de température dans le liquide.

Erreur sur la pression thermodynamique \bar{P} . À partir de l'analyse des figures 5.9, 5.10 et 5.11, on peut conclure que l'erreur sur le calcul de la variation temporelle de la pression thermodynamique ne peut être uniquement due à l'erreur commise sur la conservation de la masse et du volume de la bulle de gaz, car $m/m_0 \rightarrow 1$ et $S/S_0 \rightarrow 1$.

Précisément, les pentes des flux obtenues en $4Lx/10$ et $6Lx/10$ (Figs. 5.12 et 5.13) sont différentes de celles données par la solution analytique correspondant à de la diffusion pure. Cette différence peut s'expliquer par les vitesses qui sont engendrées dans le gaz, et/ou par la non conservation du flux de chaleur à l'interface. Les Figs. 5.16, 5.17 montrent que l'erreur ne provient probablement pas des vitesses engendrées dans le gaz. Ainsi, on peut pressentir que c'est le flux de chaleur diffusif qui est mal estimé à l'interface, et qui contribue à l'erreur sur le calcul de la pression thermodynamique.

À l'interface, la condition de saut sur la masse doit se traduire par la continuité des vitesses normales, et dans le cas présent, par une vitesse nulle à l'interface. Or ce n'est pas le cas (ce qui est cohérent avec le déplacement de la bulle observé Fig.5.18) en raison du lissage de l'interface comme cela a été expliqué au §5.1.1.2. Par conséquent, la relation de saut en énergie qui se traduit dans notre cas par la continuité des flux de chaleur conductifs à travers l'interface n'est pas non plus respectée. L'origine du problème semble donc provenir essentiellement du lissage de l'interface. Cette interprétation des résultats est cohérente avec les résultats observés dans le cas test précédent (cf §5.1.1.2), où l'erreur est amplifiée avec la discontinuité de propriétés physiques dont le rapport est important.

Par ailleurs, du fait de l'uniformité de la conductivité thermique, les flux de chaleur à l'état stationnaire convergent tous vers la même valeur, en l'occurrence la valeur théorique attendue $q'_{th} = 30W.m^{-1}$.

L'erreur sur l'évaluation du flux de chaleur semble donc provenir a priori du terme $H/(\rho c_p)$. En effet, on a au premier pas de temps $d\bar{P}/dt = 0$, et l'influence de $\vec{u} \cdot \nabla T \approx 0$ est très faible comme cela a été montré précédemment. Le champ de température qui est alors calculé aux premiers instants est déjà erroné, ce qui entraîne une mauvaise évaluation de $d\bar{P}/dt$, qui intervient par la suite comme terme source dans l'équation de l'énergie (3.34c). Il s'en suit une accumulation de l'erreur au cours du temps. L'origine de l'erreur semble donc provenir du lissage de la discontinuité des propriétés physiques, qui ne permet pas un calcul correct du champ de température. Cette mauvaise évaluation du champ de température est également à l'origine de la perte de masse. En effet, le volume de la bulle est correctement conservé, c'est donc la masse volumique, fonction

de la pression et de la température, qui est mal évaluée. La perte de masse ne peut pas être imputée au déplacement de la bulle car le déplacement commence bien avant que la masse de la bulle ne décroisse, et par ailleurs, ce déplacement se fait à volume quasi constant.

En résumé, c'est donc en premier lieu le champ de température qui est mal évalué, cela à cause du lissage des propriétés physiques. Le champ de température erroné engendre par la suite un calcul de la pression faux, et la combinaison des deux donne une masse volumique incorrecte qui se traduit par la perte de masse de gaz. Enfin, le champ de température étant mal calculé dans le gaz, et la condition de saut en énergie n'étant pas respectée à l'interface, le transfert de chaleur du gaz vers le liquide est modifié ce qui engendre une erreur sur le champ de température dans le liquide.

5.1.2 Fonction indicatrice de phase échelon H_{ech}

5.1.2.1 Conservation du flux de chaleur

Dans cette partie, on cherche à identifier l'origine de l'erreur sur le calcul du flux de chaleur conductif, en particulier à l'interface. On traitera du lissage de l'interface, et de la localisation de l'interface sur le maillage eulérien.

5.1.2.2 Lissage de l'interface

La remarque de Peskin dans [49] permet d'obtenir un premier élément de compréhension concernant la provenance de l'erreur commise sur l'évaluation du flux de chaleur conductif. Dans [49], Peskin mentionne que l'interpolation du champ de vitesse à l'interface ne conserve pas la contrainte sur la divergence de la vitesse. Cela se traduit dans notre cas par

$$\int_{V(t)} \nabla \cdot \vec{u} dV = \int_{S(t)} \vec{u} \cdot \vec{n} \delta dS \neq 0 \quad (5.8)$$

Ce résultat est dû à l'approximation discrète de la fonction de Dirac δ ou de manière équivalente au lissage de l'interface. Par analogie, si on applique un raisonnement identique, il est légitime de supposer que l'égalité suivante n'est probablement pas non plus vérifiée

$$\int_{V(t)} \nabla \cdot (k \nabla T) H dV = \int_{S(t)} k \nabla T \cdot \vec{n} \delta dS \neq \dot{q}_{vrai} \quad (5.9)$$

à cause de l'approximation de la fonction de Dirac δ au niveau discret d'une part, et du lissage de la conductivité thermique k sur une zone non physique d'autre part. Cette réflexion confirme ce qui a été pressenti dans les commentaires au §5.1.1.3 : la source d'erreur sur l'évaluation de la conduction thermique semble provenir du lissage de l'interface.

Enfin, on notera que le lissage de l'interface n'est pas rigoureusement compatible avec

l'approximation qui est faite pour les relations de saut. En effet si l'on considère un écoulement eau/air, la masse de l'interface n'est pas négligeable devant la masse de l'air. Par conséquent, l'approximation consentie §2.1.3, qui consiste à négliger la masse volumique de l'interface devient génératrice d'erreurs. En effet, sans cette approximation, les conditions de saut sont différentes ($\vec{q}_{liq} \neq \vec{q}_{gaz}$ et condition de saut sur la quantité de mouvement différente de la relation de Laplace lorsque le fluide est au repos).

5.1.2.3 Localisation de l'interface

On aborde maintenant un deuxième point à même d'expliquer l'origine de l'erreur commise sur l'évaluation du champ de température. Pour cela, on considère désormais une interface non lissée dont il reste à définir la localisation sur le maillage eulérien. Pour choisir où localiser cette interface, on fera deux remarques.

Premièrement, lorsque l'on utilise les volumes finis, les grandeurs scalaires (propriétés physiques, pression, température) sont définies aux points du maillage qui sont également les centres des volumes de contrôle. Dans cette approche, les scalaires sont considérés uniformes dans toute la cellule. Cette approximation engendre de l'erreur et devient ambiguë lorsque les points du maillage se rapprochent d'une singularité. On retrouve cette configuration dans les écoulements diphasiques lorsque la singularité, matérialisée par l'interface, coupe un volume de contrôle et ne coïncide pas avec la face de celui-ci, ce qui engendre une erreur de discrétisation à proximité de l'interface.

Deuxièmement, le respect de la conservation du flux de chaleur lorsqu'il y a discontinuité de la conductivité thermique, se traduit au niveau discret par la recherche de la conductivité thermique à l'interface des volumes de contrôle. Il a été montré que l'évaluation de la conductivité thermique à l'interface d'une cellule par une moyenne harmonique, donne de bons résultats lorsque la discontinuité de la conductivité thermique est localisée à l'interface d'un volume de contrôle [47]. Mais cette méthode donne de bons résultats uniquement lorsque la conductivité thermique change de manière discontinue d'une cellule à l'autre.

Conclusion

Lorsque l'on utilise la méthode de front-tracking standard, l'interface ne coïncide généralement pas avec les faces des volumes de contrôle, et les propriétés physiques sont lissées sur quelques cellules (typiquement de l'ordre de 4 cellules). Dès lors, l'utilisation du front-tracking dans sa forme standard ne semble pas adaptée pour assurer correctement la conservation du flux de chaleur.

5.1.2.4 Introduction d'une fonction indicatrice de phase échelon

Compte tenu des remarques précédentes, une première mesure simple pouvant être prise pour améliorer le calcul du flux de chaleur, est de considérer une interface strictement discontinue et qui coïncide avec les faces des volumes de contrôle. Cette mesure doit améliorer le calcul du flux de chaleur conductif à l'interface, en rétablissant la conservation du flux de chaleur au niveau discret.

Dans un premier temps, on fixe uniquement la discontinuité des propriétés physiques aux interfaces des volumes de contrôle, en ne faisant aucune hypothèse sur un lissage ou non de ces propriétés physiques. On applique, dans le même esprit que Patankar dans [47], le raisonnement qui considère que l'évaluation du flux conductif à l'interface d'une cellule doit donner le même résultat quelle que soit la portion de domaine utilisée pour le calcul. Avec un pas d'espace constant, ce raisonnement appliqué à la direction $O\vec{x}$ se traduit par

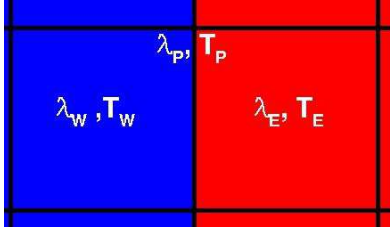


FIGURE 5.20 –

$$q_P = q_W = q_E \quad (5.10)$$

avec les flux de chaleur évalués à l'ouest q_W , et à l'est q_E de l'interface (point p), ainsi que le flux de chaleur évalué à l'interface q_P . Ces flux de chaleur sont donnés par

$$q_E = k_E \frac{T_E - T_P}{\Delta x} \quad (5.11a)$$

$$q_W = k_W \frac{T_P - T_W}{\Delta x} \quad (5.11b)$$

$$q_P = k_p \frac{T_E - T_W}{2\Delta x} \quad (5.11c)$$

avec les conductivités thermiques et températures définies dans les cellules à l'ouest k_W, T_W et à l'est k_E, T_E de l'interface, ainsi que la conductivité thermique et la température à l'interface k_p, T_p ; et Δx le pas d'espace constant. La conductivité thermique à l'interface est donc donnée par

$$k_P = \frac{2k_E k_W}{k_E + k_W} \quad (5.12)$$

qui n'est autre que la moyenne harmonique des conductivités thermiques définies dans les cellules voisines considérées. En utilisant la méthode de front-tracking standard, on a

$$k_E = k_{gaz}H_E + (1 - H_E)k_{liq} \quad (5.13a)$$

$$k_W = k_{gaz}H_W + (1 - H_W)k_{liq} \quad (5.13b)$$

si l'on remplace (5.13a) et (5.13b) dans (5.12), le numérateur devient

$$k_E k_W = k_{gaz}^2 H_E H_W + k_{liq}^2 (1 - H_E)(1 - H_W) + k_{gaz} k_{liq} [H_E(1 - H_W) + H_W(1 - H_E)] \quad (5.14)$$

et le dénominateur devient

$$k_E + k_W = k_{gaz}(H_E + H_W) + k_{liq} [(1 - H_W) + (1 - H_E)] \quad (5.15)$$

On en conclut, qu'une manière simple de retrouver la moyenne harmonique, et ainsi d'assurer la conservation du flux de chaleur au niveau discret malgré la discontinuité des propriétés physiques, est de prendre au choix $H_E = 0$ et $H_W = 1$ ou $H_E = 1$ et $H_W = 0$.

Cela implique la redéfinition de la fonction indicatrice de phase H comme une fonction échelon, que nous noterons par la suite H_{ech} . Dorénavant, la fonction indicatrice de phase H_{ech} est utilisée pour marquer l'interface et la discontinuité des propriétés physiques. Cela revient à considérer une interface et des propriétés physiques strictement discontinues, avec la discontinuité localisée sur les faces des volumes de contrôle.

5.1.2.5 Calcul et utilisation de H_{ech}

La fonction indicatrice de phase qui sera utilisée par la suite sera une fonction échelon, soit une fonction de Heaviside strictement discontinue. Cette fonction notée H_{ech} , est calculée à partir de la fonction indicatrice de phase lisse H_{ft} du front-tracking standard, qui a été utilisée jusqu'à présent dans les simulations. On utilise une valeur seuil, qui peut a priori être quelconque dans l'optique d'assurer les bilans. Cependant, il est souhaitable de ne pas définir la discontinuité matérialisée par ∇H_{ech} trop loin de l'interface lagrangienne. Par conséquent, la valeur seuil est fixée à $s = 0,5$. Le calcul de H_{ech} s'effectue ainsi de la façon suivante

$$H_{ech} = 1 \text{ si } H_{ft} > s \quad (5.16a)$$

$$H_{ech} = 0 \text{ sinon} \quad (5.16b)$$

À l'intérieur d'un pas de temps, la fonction H_{ech} est utilisée en remplacement de H_{ft} pour localiser les différentes phases, définir et marquer la discontinuité des propriétés physiques, et imposer les forces surfaciques via ∇H_{ech} (cf §5.2.2.4). La prise en compte

des termes traduisant la nature dilatable du gaz soit $d\bar{P}/dt$ dans l'équation de l'énergie (voir ci-dessous) et $\nabla \cdot \vec{u} \neq 0$ dans l'équation de continuité, s'effectue également à l'aide de la fonction H_{ech} . Enfin, H_{ech} permet de définir les contours des intégrales apparaissant au numérateur et au dénominateur de la relation (3.37) donnant $d\bar{P}/dt$.

Toutefois, la gestion et l'advection de l'interface d'un pas de temps à l'autre, soit du pas n au pas $n + 1$, est toujours réalisée à l'aide de marqueurs qui sont advectés avec l'écoulement (front-tracking). Le traitement de l'interface s'effectue donc à l'aide d'une méthode hybride, combinant un maillage lagrangien pour le suivi matériel et temporel de l'interface, ainsi qu'une fonction indicatrice de phase échelon utilisée à l'intérieur des pas de temps.

5.1.2.6 Calcul et application de $d\bar{P}/dt$ et de $\nabla \cdot \vec{u} \neq 0$

Il faut qu'il y ait une certaine cohérence dans la manière dont sont calculés et imposés les termes traduisant la compressibilité du gaz, soit $d\bar{P}/dt$ et $\nabla \cdot \vec{u} \neq 0$. On commence par raisonner sur le terme source de l'équation de l'énergie $d\bar{P}/dt$, puis on en tirera des conséquences pour $\nabla \cdot \vec{u} \neq 0$.

Pour que le calcul de \bar{P} soit correct et précis, il faut que les bilans soient vérifiés. Cela nécessite qu'il y ait une cohérence entre la définition des contours d'intégrales de bilans, la définition des propriétés physiques, la définition du domaine compressible, et l'application de la contrainte de divergence du champ de vitesse. La fonction indicatrice de phase échelon étant utilisée pour marquer la discontinuité des propriétés physiques, il est nécessaire, notamment pour assurer la conservation du flux de chaleur comme expliqué précédemment, d'utiliser H_{ech} pour définir les contours des intégrales de bilan qui apparaissent dans le calcul de $d\bar{P}/dt$:

$$\frac{d\bar{P}}{dt} = \frac{\int_{V(t)} [\nabla \cdot (k\nabla T) (\gamma - 1) - \gamma \bar{P} \nabla \cdot \vec{u}] H_{ech} dV}{\int_{V(t)} H_{ech} dV} \quad (5.17)$$

Par cohérence, la contrainte sur la divergence du champ de vitesse doit donc être calculée et imposée à l'aide de H_{ech} , donc sans lissage :

$$\nabla \cdot \vec{u} = H_{ech} \left[\nabla \cdot (k\nabla T) (\gamma - 1) - \frac{d\bar{P}}{dt} \right] \frac{1}{\gamma \bar{P}} \quad (5.18)$$

Ainsi, l'emploi de la fonction indicatrice de phase élargie H^{ext} qui apparaissait dans le calcul de $d\bar{P}/dt$ pour assurer le bilan sur le champ de divergence (cf §3.2.2) n'est plus nécessaire. Enfin, pour que la contrainte $\nabla \cdot \vec{u} \neq 0$ soit correctement calculée, il est impératif que le terme $d\bar{P}/dt$ soit exclusivement appliqué dans la zone compressible, soit imposé sans lissage à l'aide de H_{ech} .

Par ailleurs, on notera qu'il est impératif, pour des questions de cohérence, d'utiliser une seule et unique fonction indicatrice de phase dans les bilans intégraux Eq. (5.17) et dans la définition des propriétés physiques. En effet, divers essais utilisant l'emploi combiné de H_{ech} et H_{ft} ont été menés, et ont tous donné des résultats erronés.

Remarque

Le raisonnement qui vient d'être appliqué à la conservation du flux de chaleur peut également s'appliquer à la continuité des contraintes tangentielles. Effectivement, l'emploi simultané d'une fonction indicatrice de phase strictement discontinue et d'une viscosité à l'interface évaluée à l'aide d'une moyenne harmonique, permet de respecter la relation de saut de quantité de mouvement tangentiel à l'interface.

5.1.2.7 Résultats des cas tests *Cavité fermée différentiellement chauffée I et II* obtenus avec H_{ech}

Pour valider la méthode de traitement d'interface hybride, on simule avec H_{ech} , les configurations *Cavité fermée différentiellement chauffée I et II* préalablement traitées à l'aide de H_{ft} (cf §5.1.1.2 et 5.1.1.3).

Résultats avec H_{ech} du cas test *Cavité fermée différentiellement chauffée II*

Le cas test présenté au §5.1.1.3 utilisant une diffusivité thermique uniforme est simulé avec une fonction indicatrice de phase échelon. Les critères de vérification restent les mêmes : l'évolution de la pression thermodynamique dans la bulle, l'erreur sur la conservation de la masse et du volume de la bulle au cours du temps. Dans ce cas test, on regardera également l'évolution du flux de chaleur au cours du temps en différentes sections de la cavité : en $x = L/4; 3L/4$ pour les sections définies uniquement le liquide, et en $x = 4L/10; 6L/10$ pour les sections qui traversent les deux phases. Pour finir, on tracera la variation des deux composantes de vitesse du centre de masse de la bulle au cours du temps. Les résultats des simulations, effectuées pour plusieurs maillages 64×64 , 128×128 et 256×256 sont présentés ci-dessous

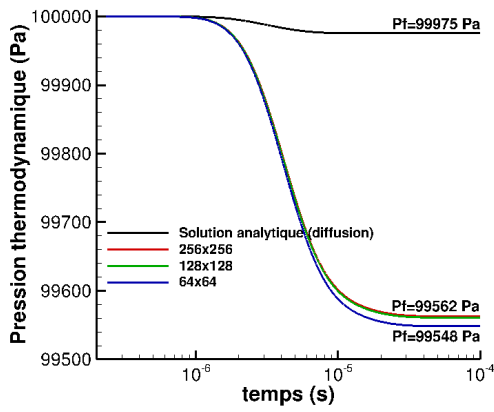


FIGURE 5.21 – Évolution de la pression thermodynamique dans le gaz au cours du temps

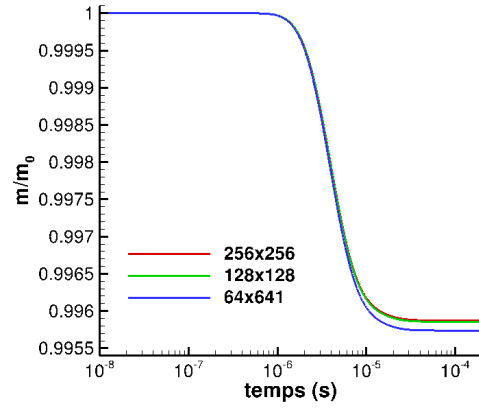


FIGURE 5.22 – Conservation de la masse du gaz au cours du temps

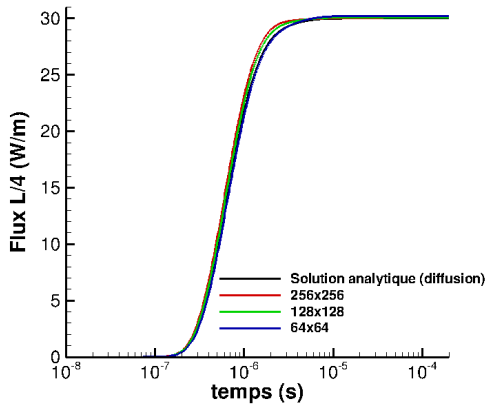


FIGURE 5.23 – Comparaison du flux de chaleur obtenu par calcul en utilisant H_{ech} avec le flux de chaleur théorique pour la section de la cavité située en $x = L/4$

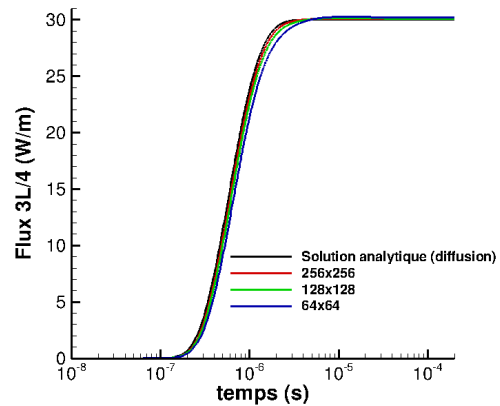


FIGURE 5.24 – Comparaison du flux de chaleur obtenu par calcul en utilisant H_{ech} avec le flux de chaleur théorique pour la section de la cavité située en $x = 3L/4$

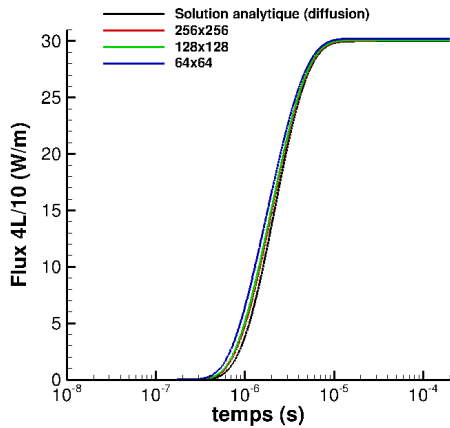


FIGURE 5.25 – Comparaison du flux de chaleur obtenu par calcul en utilisant H_{ech} avec le flux de chaleur théorique pour la section de la cavité située en $x = 4L/10$

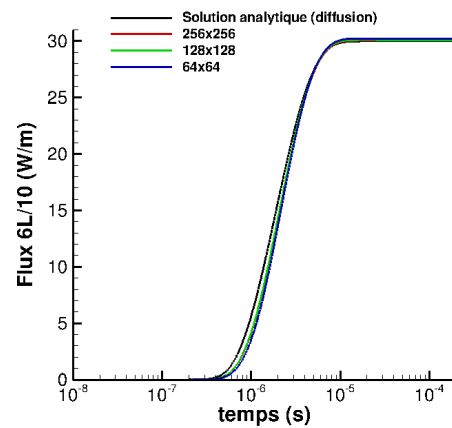


FIGURE 5.26 – Comparaison du flux de chaleur obtenu par calcul en utilisant H_{ech} avec le flux de chaleur théorique pour la section de la cavité située en $x = 6L/10$

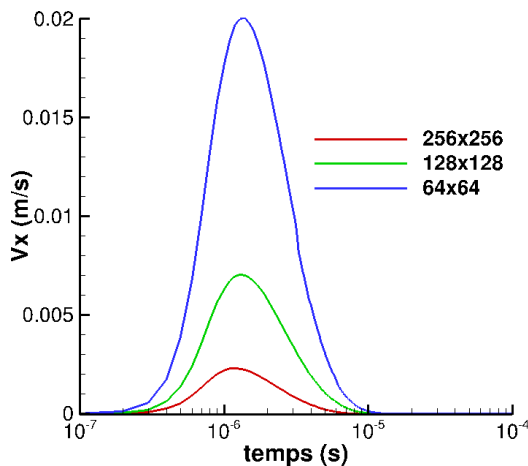


FIGURE 5.27 – Vitesse du centre de masse de la bulle selon $O\vec{x}$ obtenue en utilisant H_{ech}

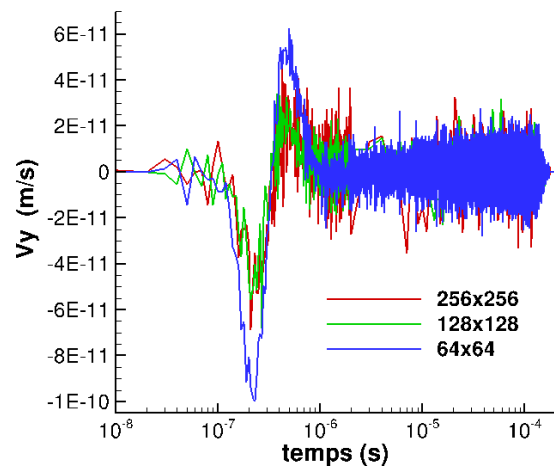


FIGURE 5.28 – Vitesse du centre de masse de la bulle selon $O\vec{y}$ obtenue en utilisant H_{ech}

Commentaires Avec la modification apportée à la fonction indicatrice de phase, la valeur de la pression thermodynamique est obtenue avec une erreur relative inférieure à 0,5% quel que soit le maillage utilisé (Fig.5.21). Cependant on peut tout de même remarquer que les courbes ne convergent pas exactement vers la valeur théorique. En effet, bien que la vitesse de déplacement du centre de masse soit faible (cf Fig.5.27 -

avec tout de même un intensité inférieure de 2 ordres de grandeur par rapport au cas 5.1.1.3 Fig. 5.18), elle n'est pas nulle. Cela est dû à la procédure d'interpolation qui est utilisée pour calculer la vitesse à l'interface (cf §5.1.1.2). Il en résulte une légère translation de la bulle vers la droite, soit vers la paroi froide. Par conséquent, la température moyenne dans la bulle est plus basse que la température moyenne théorique attendue et la pression à l'état stationnaire est inférieure à la valeur théorique attendue. Cette erreur sur la pression se répercute sur la masse volumique, et le volume étant parfaitement conservé, sur la conservation de la masse avec une erreur relative légèrement inférieure à 0,5% pour tous les maillages (Fig.5.22). Enfin, la conservation du volume (surface en 2D) est strictement assurée. La composante verticale de la vitesse, tracée Fig.5.28, est négligeable.

Pour finir, on remarque sur les Figs. 5.23 à 5.26, que l'utilisation d'une fonction indicatrice de phase échelon permet d'évaluer correctement le flux de chaleur instationnaire.

TABLE 5.1 – Tableau comparatif : résultats obtenus avec le **front-tracking standard** H^{ft} et résultats obtenus avec H_{ech} ($\alpha_{liq} = \alpha_{gaz}$)

maillage	\bar{P}_f/\bar{P}_{th}	m/m_0	S/S_0	$ Vx_{max} $
256 × 256	0,9911/0,9959	0,9918/0,9959	1,0004/1	6,95.10 ⁻² /2,28.10 ⁻³
128 × 128	0,9824/0,9959	0,9843/0,9959	1,0014/1	1,11.10 ⁻¹ /6,99.10 ⁻³
64 × 64	0,9552/0,9957	0,9610/0,9957	1,0050/1	1,59.10 ⁻¹ /1,08.10 ⁻²

Résultats avec H_{ech} du cas test *Cavité fermée différentiellement chauffée I*

À titre de comparaison, on présente les résultats de la première configuration §5.1.1.2 en utilisant cette fois la fonction indicatrice de phase échelon H_{ech} . On présente les critères de vérification suivants : champs de température et de vitesse à $t = 4.10^{-4}s$, évolution de la pression thermodynamique dans la bulle, erreur sur la conservation de la masse, et variation de la composante horizontale de la vitesse du centre de masse de la bulle au cours du temps. Les résultats des simulations, obtenus pour les maillages 64 × 64, 128 × 128 et 256 × 256, sont présentés ci-dessous.

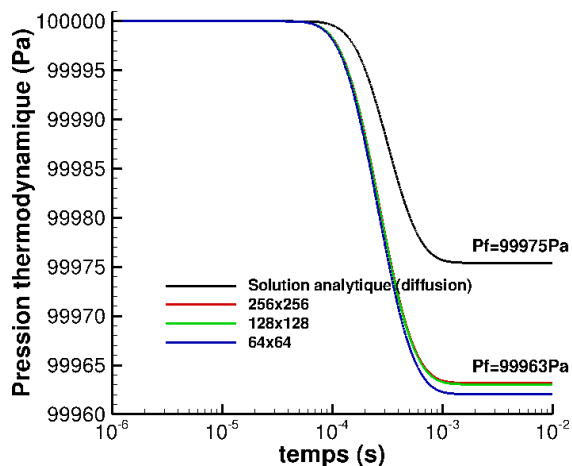


FIGURE 5.29 – Évolution de la pression thermodynamique dans la bulle en utilisant une fonction indicatrice de phase échelon

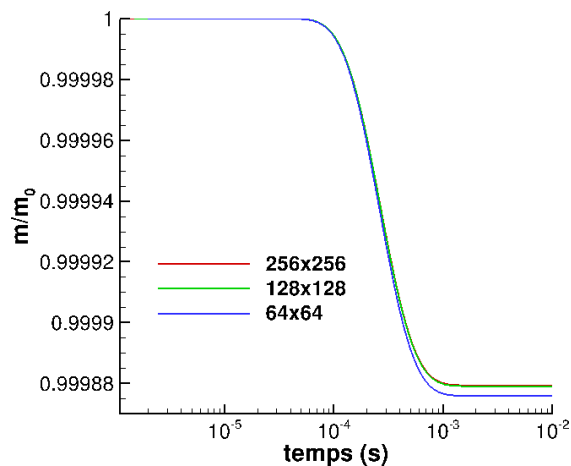


FIGURE 5.30 – Erreur sur la conservation de la masse en utilisant une fonction indicatrice de phase échelon

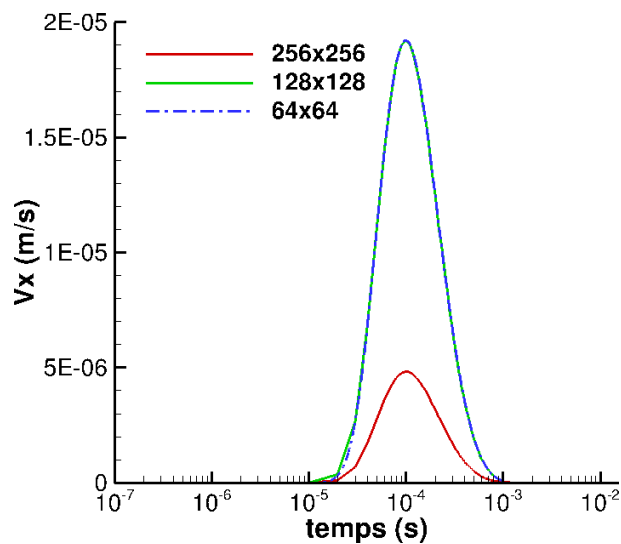


FIGURE 5.31 – Vitesse du centre de masse le bulle selon $O_{\vec{x}}$ pour les calculs utilisant H_{ech}

TABLE 5.2 – Résultats numériques comparés à la théorie pour l'état stationnaire

$\frac{x}{L}$	0	0.4	0.5	0.6	1
$\frac{ T - T_{th} }{T_{th}}$	3.10^{-13}	5.10^{-9}	1.10^{-8}	1.10^{-8}	1.10^{-13}
$\frac{ q - q_{th} }{q_{th}}$	1.10^{-11}	8.10^{-12}	3.10^{-12}	6.10^{-12}	1.10^{-11}

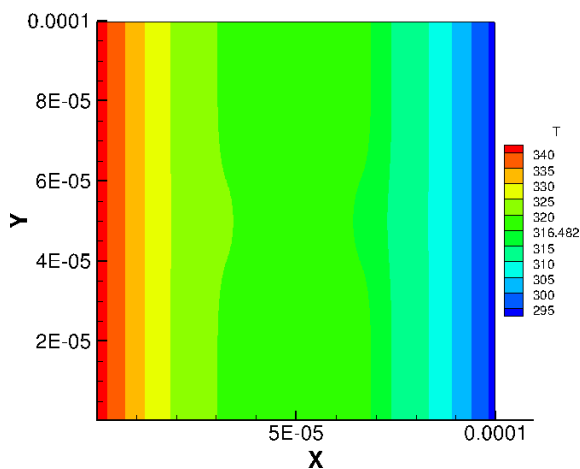


FIGURE 5.32 – Champ de température à $t = 4.10^{-4}s$ lorsque H_{ech} est utilisé

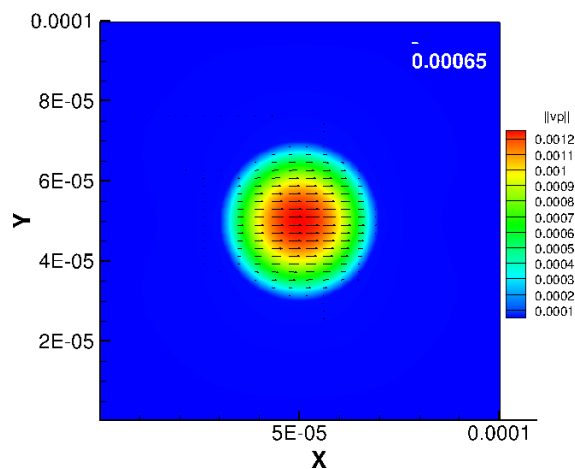


FIGURE 5.33 – Champ de vitesse à $t = 4.10^{-4}s$ lorsque H_{ech} est utilisé

Commentaires Comme la gravité n'est pas prise en compte, le transfert de chaleur se réduit à un processus de diffusion dans le liquide. Toutefois, de faibles vitesses sont observées dans le gaz dues au caractère compressible de l'air. Les champs de température et de vitesse à l'instant $t = 4.10^{-4}s$, sont présentés sur les Figs. 5.32 et 5.33. On peut observer sur la Fig.5.32, que le champ de température est distordu par la présence de la bulle. Sur la Fig. 5.33, on voit que la vitesse dans le liquide est parfaitement nulle, tandis que dans le gaz, de faibles vitesses sont engendrées par les effets de compressibilité. L'utilisation d'une fonction indicatrice de phase échelon permet de garder la bulle immobile (Fig. 5.31), bien que les conditions de température imposées engendrent localement un écoulement dans le gaz (Fig. 5.33).

La bulle subit une transformation isochore et la pression dans la bulle évolue au cours du temps à cause du changement de température dans celle-ci. Cela peut être observé

Fig.5.29, où l'évolution de la pression est tracée. La pression décroît car la température moyenne à l'intérieur de la bulle baisse.

Sur le même graphique (Fig. 5.29), la comparaison de la pression calculée numériquement avec la prédiction théorique montre qu'un bon accord est obtenu en temps et en amplitude. En effet, l'erreur relative commise sur la valeur stationnaire de la pression thermodynamique est de l'ordre de 0,012% quelque soit le maillage utilisé pour mener le calcul. Cependant, pour les mêmes raisons que celles exposées au §5.1.2.7, on peut tout de même remarquer que les courbes ne convergent pas exactement vers la valeur théorique. Néanmoins, cette erreur relative est à comparer avec les 1,13% obtenus dans le meilleur des cas lorsque le front-tracking standard avait été utilisé sur un maillage 256×256 . Enfin, la conservation du volume (surface en 2D) est strictement assurée, et l'erreur sur la conservation de la masse est négligeable (Fig. 5.30). La Fig. 5.29 montre enfin, que le transfert de chaleur est dominé par le processus de diffusion de la chaleur, l'allure des courbes de simulation et analytique étant quasi similaire.

Quelques valeurs de la température à l'état stationnaire extraites à mi-hauteur de la cavité dans le plan vertical médian sont indiquées dans le tableau 5.2. Un très bon accord est obtenu avec la prédiction théorique $T_{th}(x) = -5.10^5x + 343$ où l'abscisse x est en mètres et la température T en Kelvin. Le flux de chaleur est calculé avec $q'(x) = \int_0^L q''(x, y)dy$ en plusieurs sections de la cavité. Les valeurs calculées, reportées dans le tableau 5.2, montrent également un très bon accord avec la prédiction théorique $q'_{th} = 30$ W/m.

Pour conclure, les résultats obtenus en utilisant la fonction indicatrice de phase échelon sont très satisfaisants. Les résultats numériques montrent que la conservation de la masse, du volume et de l'énergie est correctement assurée, ce qui permet d'être confiant sur la capacité et la fiabilité de l'outil numérique à traiter ce type de configurations.

TABLE 5.3 – Tableau comparatif : résultats obtenus avec la méthode de front-tracking standard H^{ft} et résultats obtenus avec H_{ech} ($k_{liq} = k_{gaz}$)

maillage	\bar{P}_f/\bar{P}_{th}	m/m_0	S/S_0	$ Vx_{max} $
256×256	0,9887/0,9999	0,9832/0,9999	0,9938/1	$2,47.10^{-3}/6,9.10^{-6}$
128×128	0,9752/0,9999	0,9835/0,9999	1,0071/1	$5,16.10^{-3}/2,6.10^{-5}$
64×64	0,9029/0,9999	0,9329/0,9999	1,0304/1	$1,03.10^{-2}/8,0.10^{-5}$

Conclusion

Le code a été testé sur une configuration permettant de vérifier la conservation de l'énergie. Ce cas test a permis de mettre en évidence la difficulté à assurer la conservation de l'énergie lorsqu'on utilise la méthode de front-tracking standard pour traiter l'interface. L'analyse des résultats de simulation a permis, sur la base d'éléments argumentés (mis en cause du lissage de l'interface notamment) de proposer une méthode hybride de traitement d'interface. Celle-ci combine l'utilisation d'une fonction indicatrice de phase échelon au sein d'un même pas de temps et la méthode de front-tracking pour suivre l'interface d'un pas de temps à l'autre. Les résultats obtenus avec la méthode hybride sont très satisfaisants, ce qui donne confiance dans la capacité du code à traiter ce type de configurations.

5.2 Modèle incompressible-faible Mach avec front-tracking et déplacement de l'interface

Dans les cas tests présentés précédemment, les transformations étaient isochores, et l'interface immobile. Pour élargir le champ d'application du code, il est nécessaire d'inclure le mouvement de l'interface dans les cas tests. La simulation d'écoulement anisotherme en présence d'une phase compressible avec mouvement de l'interface est complexe. En effet, dans la littérature, les travaux couplant transfert de chaleur, compressibilité d'une phase, et déplacement de l'interface sont très peu nombreux et concernent des cas d'application 1D.

Dans les prochaines parties, des cas tests anisothermes 2D, comprenant un écoulement diphasique (liquide incompressible-gaz compressible) où l'interface se déplace sont développés. Les cas tests impliquent un déplacement de l'interface engendrée par la dilatabilité du gaz (*Cavité ouverte chauffée I, II*) couplé ou non à l'advection d'une bulle (*μ canal isochore I, II et III et μ canal isobare*).

5.2.1 Dilatation isobare d'une bulle

5.2.1.1 *Cavité ouverte chauffée avec un seuil fixe*

Dans ce cas test, on cherche à simuler la dilatation thermique isobare d'une bulle d'air à l'intérieur d'une micro-cavité remplie d'eau. C'est un problème où la nature compressible du gaz est utilisée pour convertir la sollicitation thermique en variation de volume de la bulle. On souhaite étudier avec ce cas test, une situation dans laquelle l'expulsion d'une partie du liquide est réalisée à partir d'un chauffage en paroi. Cette situation dans laquelle la cavité est ouverte, pourrait être rencontrée dans un dispositif de type micro-pompe.

La transformation simulée sera considérée comme isobare. Le calcul du volume de la bulle qui doit être atteint à l'état stationnaire est obtenu à partir de $V_f = V_0(T_f/T_0) = 1,17056 V_0$.

Configuration

Le cas test développé consiste en une bulle d'air de rayon $20 \mu m$ contenue dans une cavité de dimensions $80 \times 80 \mu m$ remplie d'eau, ouverte sur son côté droit. À l'état initial les deux fluides sont au repos et la pression dans le gaz est fixée à $P_0 = 10^5 Pa$. Le champ de température initial est uniforme dans la cavité, égal à $293,15 K$. Le chauffage est appliqué sur la paroi latérale gauche de la cavité où la température est fixée à $343,15 K$, tandis que des conditions d'adiabaticité sont imposées sur les parois supérieure, inférieure, ainsi que sur le côté ouvert de la cavité. Des conditions d'adhérence sont imposées aux parois. En revanche, les conditions aux limites en pression et en vitesse sur la frontière ouverte de la cavité nécessitent un traitement spécifique dû à la nature du problème étudié.

La définition de ces conditions aux limites, est un problème difficile et d'actualité. L'objectif de la thèse ne s'inscrit pas dans cette démarche, c'est pourquoi nous avons choisi, pour cette étude, d'imposer des conditions dynamiques "simples", permettant d'assurer la conservation de la masse.

Conditions aux limites en pression et en vitesse sur la frontière ouverte

Dans la configuration présente, il est plus facile de choisir une condition aux limites qui ait un sens physique sur la vitesse plutôt que sur la pression. Cela est dû à l'utilisation du modèle faible Mach, et plus particulièrement à la décomposition de la pression en plusieurs composantes.

Tout d'abord, seul le gradient de pression π apparaît dans l'équation de conservation de quantité de mouvement, et peut par conséquent, induire un mouvement du fluide. Cependant, l'échelle de la pression dynamique π est d'ordre $\mathcal{O}(Ma^2)$ par rapport à la pression thermodynamique $\bar{P} = P^{(0)}$. Par conséquent, il est difficile de trouver une valeur de π pouvant être choisie comme condition aux limites pour la pression et qui ait une signification physique.

Toutefois, avec l'utilisation d'une méthode de prédiction projection basée sur la pression, on peut choisir d'imposer la condition aux limites sur la vitesse, la condition aux limites sur la pression étant alors déduite de la condition de compatibilité (Eq.A.17 de l'annexe). Dans notre cas, nous choisissons une condition aux limites sur la vitesse, simple, qui permet d'assurer la conservation de la masse globale du domaine de calcul,

soit $\int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{u} dV = 0$. L'implémentation numérique de la condition aux limites dynamique a nécessité une adaptation de l'algorithme de résolution du code. Les détails sur le calcul et l'application des conditions aux limites sont donnés en annexe A.3.

Solution analytique approchée

Comme dans les cas tests précédents, de par les faibles vitesses mises en jeu, et en tenant compte du fait que la diffusivité thermique du gaz est très grande devant celle du liquide, on peut rechercher une solution analytique approchée donnant le champ de température au cours du temps. Cette solution analytique correspond à un processus de diffusion pure dans un mur plan d'épaisseur $2L$, ayant les propriétés thermiques du liquide, et dont les parois sont portées à la température T_W . Dans ces conditions, le profil de température est donné par [7]

$$T(x, t) = (T_W - T_0) \left[1 - \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{2n-1} \cos\left(A_n \frac{x}{L}\right) \exp\left(-A_n^2 \frac{\alpha t}{L^2}\right) \right] + T_0 \quad (5.19)$$

avec T_0 la température initiale du domaine de calcul, et $A_n = (2n-1)\pi/2$. Considérant la présente situation (2D) et faisant l'hypothèse que la surface de la bulle est un disque, alors la moyenne spatiale de la masse volumique de la bulle est obtenue par :

$$\bar{\rho} = \frac{4\bar{P}_0}{r} \int_0^{R(t)} \frac{\sqrt{R^2 - x^2}}{T(x, t)} dx \quad (5.20)$$

La masse de la bulle ne variant pas au cours du temps, l'aire s'écrit

$$S(t) = \frac{m}{\bar{\rho}} = \frac{S_0}{T_0} \left[\int_0^{R(t)} \frac{\sqrt{R^2 - x^2}}{T(x, t)} \right]^{-1} \approx \frac{S_0}{T_0} \left[\int_0^{R_0} \frac{\sqrt{R^2 - x^2}}{T(x, t)} \right]^{-1} \quad (5.21)$$

Résultats en utilisant un seuil fixe $s = 0.5$

Le cas test est simulé en utilisant une fonction indicatrice de phase de type échelon H_{ech} afin d'assurer la conservation de la masse et du flux de chaleur. On rappelle que cette fonction échelon est définie en utilisant une valeur de seuil fixe égale à $s = 0,5$ (cf §5.1.2.1). On présente les évolutions de la masse et du volume (surface en 2D) de la bulle au cours du temps obtenues pour plusieurs maillages 32×32 , 64×64 et 128×128 .

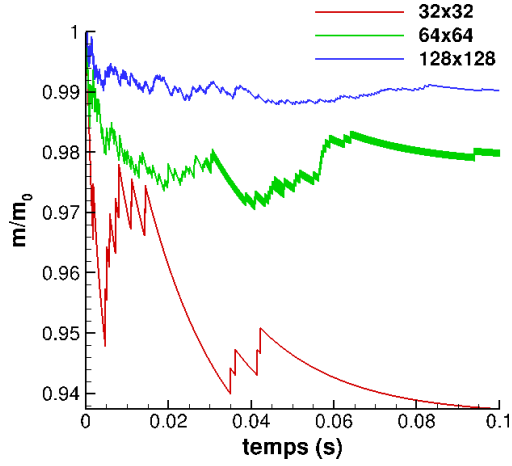


FIGURE 5.34 – Erreur sur la conservation de la masse lorsque un seuil fixe $s = 0.5$ est utilisé

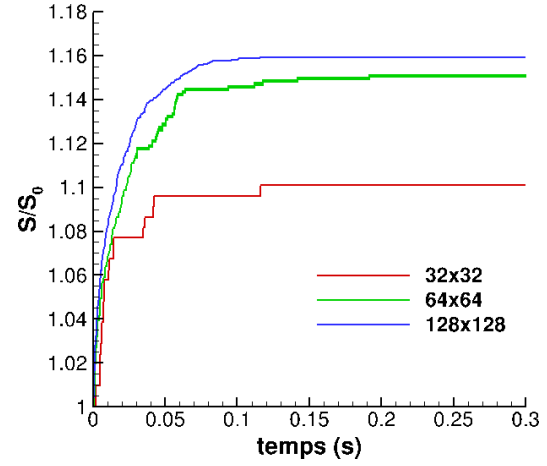


FIGURE 5.35 – Évolution de la surface de la bulle au cours du temps lorsque un seuil fixe $s = 0.5$ est utilisé

Commentaires

Malgré l'utilisation d'une fonction indicatrice de phase échelon, les résultats obtenus en utilisant une valeur fixe du seuil $s = 0,5$ montrent des écarts à la conservation de la masse trop élevés et non satisfaisants, même lorsque le maillage est raffiné (Fig. 5.34). Enfin on observe que la valeur finale du volume de la bulle n'est pas correcte ($S_f/S_0 = 1,17$) quelque soit le maillage employé (Fig. 5.35).

Pour expliquer ces résultats, et comprendre d'où proviennent les erreurs, il faut regarder l'expression qui donne la variation du volume de la bulle

$$\frac{dV}{dt} = \int_{V(t)} \nabla \cdot \vec{u} H_{ech} dV = \int_{V(t)} \left[\nabla \cdot (k \nabla T) (\gamma - 1) - \underbrace{\frac{d\bar{P}}{dt}}_0 \right] \frac{H_{ech}}{\gamma \bar{P}} dV \quad (5.22)$$

ainsi que la relation donnant la masse de la bulle

$$m = \bar{P} \int_{V(t)} \frac{H_{ech}}{rT} dV \quad (5.23)$$

avec dans le cas considéré $\bar{P} = cste$ et $d\bar{P}/dt = 0$. En regardant ces deux expressions, on peut en conclure que la source de l'erreur peut provenir, soit d'un champ de température incorrect, soit d'un contour d'intégrale défini par H_{ech} faux, ou bien d'une combinaison des deux.

Tout d'abord, dans la configuration traitée, le terme $d\bar{P}/dt$ qui intervient dans l'équation

de l'énergie est nul, et les termes advectifs sont négligeables. En effet lors de la transformation, la zone où les vitesses engendrées sont importantes (à droite de la bulle où le liquide est expulsé) est différente de la zone où le gradient de température est important (sur l'interface gauche de la bulle). Par conséquent, on peut pressentir qu'une éventuelle erreur sur le champ de température provienne, soit d'une mauvaise évaluation du terme diffusif, soit d'une erreur sur la définition de la fonction indicatrice de phase H_{ech} . En effet, H_{ech} sert à traduire la discontinuité des propriétés physiques, et celles-ci apparaissent notamment dans l'équation de conservation de l'énergie. Mais a priori, le fait d'utiliser une fonction indicatrice de phase échelon permet une évaluation correcte des flux diffusifs comme cela a été montré précédemment (§5.1.2.1).

L'origine de ces erreurs semble donc être la mauvaise définition du contour de l'intégrale, ou en d'autres termes, l'interface représentée par (∇H_{ech}) n'est pas définie au bon endroit sur le maillage eulérien. Le contour de l'intégrale étant défini en réalité à l'aide de H_{ech} , il faut alors étudier la façon dont H_{ech} est définie et calculée.

5.2.2 Fonction indicatrice de phase échelon H_{ech} avec seuil adaptatif

On a montré qu'il est nécessaire de garder le caractère discontinu de H_{ech} pour assurer la conservation des flux de chaleur. Par ailleurs, le contour de l'intégrale est fonction de la valeur seuil utilisée pour définir H_{ech} à partir de la fonction indicatrice de phase lisse du front-tracking standard H_{ft} . Par conséquent, rechercher le contour d'intégrale qui convienne revient à calculer la valeur de seuil la plus adaptée.

En outre, le critère de choix de la valeur doit permettre d'assurer la conservation de la masse lorsque le changement de phase n'est pas considéré, ainsi que la conservation du volume dans le cas de transformations isochores. La conservation du flux de chaleur est, quant à elle, a priori correctement assurée depuis l'introduction de la fonction indicatrice de phase échelon.

Afin d'assurer la convergence sur la température et la pression, une boucle sur l'énergie a été implémentée. À l'issue de cette boucle, l'algorithme doit avoir convergé sur T , \bar{P} , et donc sur ρ , ce qui doit permettre de conserver la masse. Au vu des résultats produits en 5.2.1.1, il manquait visiblement un élément pour que toute la boucle converge correctement vers la bonne solution dans le cas où l'interface est advectée, c'est à dire vers la solution qui conserve l'énergie, la masse et le volume (surface en 2D) pour des transformations isochores. La boucle sur l'énergie a donc été modifiée pour inclure le calcul d'une fonction indicatrice de phase échelon définie à l'aide d'un seuil adaptatif, afin de satisfaire les bilans dans le cas où l'interface est mobile. La procédure de recherche du seuil est donnée ci-dessous.

5.2.2.1 Calcul de la valeur du seuil s

Pour définir la méthode qui permette d'obtenir la valeur correcte de seuil, on doit commencer par étudier le comportement de l'erreur sur la masse et le volume en fonction des valeurs de seuil. Comme la conservation de la masse du gaz est la conséquence de la conservation de l'énergie et du volume du gaz, on ne s'intéressera qu'à l'erreur sur la masse. Par ailleurs, le comportement du volume de la bulle en fonction des variations des valeurs de seuil est monotone.

On constate sur la figure 5.36, que pour un pas de temps donné, le comportement de l'erreur sur la masse en fonction des valeurs de seuil est monotone. Par conséquent, une procédure de dichotomie peut être utilisée pour rechercher la valeur de seuil qui minimise l'écart à la conservation de la masse.

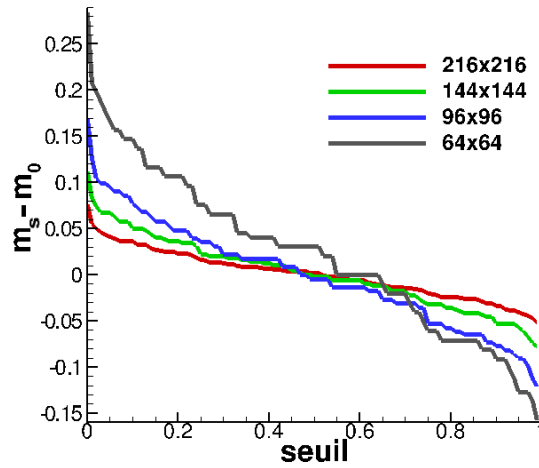


FIGURE 5.36 – Erreur sur la conservation de la masse en fonction des valeurs du seuil pour plusieurs maillages (sur un pas de temps)

La valeur de seuil qui minimise l'erreur sur la masse dépend du maillage comme on peut le voir sur la figure 5.36. Cette valeur varie également au cours du temps. La procédure de recherche du seuil optimum est la suivante : pour une valeur de seuil fixée, on effectue la boucle sur l'énergie qui, une fois convergée, donne la masse de la bulle m_s associée au seuil s . Puis selon le signe de l'écart $\Delta m = m_s - m_0$ la valeur du seuil est modifiée par dichotomie. Dans le cas d'écoulements isochores, une procédure identique est utilisée, avec comme objectif, la minimisation de l'erreur non pas sur la masse, mais sur le volume.

5.2.2.2 Remarques sur la procédure de recherche de seuil

Tout d'abord, l'interface est usuellement lissée sur 2 mailles de part et d'autre de l'interface dans la méthode front-tracking. La procédure de seuil dispose donc de 4 cel-

lules aux alentours de l'interface sur lesquelles le seuil peut varier. La procédure ne peut donc apporter un ajustement du contour de l'intégrale que dans cette limite.

Avec l'utilisation de l'approche volumes finis, les quantités scalaires, dont H_{ft} , sont définies au centre des cellules. On peut alors remarquer, qu'il existe une variation de seuil minimale en dessous de laquelle les volumes de contrôle ne basculent pas d'une phase à l'autre. Cette variation de seuil minimale est fonction de la distance entre l'interface et le centre des cellules. Cette distance est propre à chaque volume de contrôle. Par conséquent, il est difficile de prédire combien de cellules peuvent basculer d'une phase à l'autre lorsque le seuil varie. Cette variation de seuil minimale explique les paliers que l'on peut observer Fig. 5.36.

Par conséquent, le contrôle du contour de l'intégrale, et par extension du volume de la bulle (et de la masse) est donc borné, et n'est réalisé que pour des valeurs discrètes. Le contrôle le plus fin que l'on puisse espérer correspond, a priori, à ΔV (respectivement $\rho\Delta V$). En pratique, ce contrôle s'effectue au mieux à $\Delta V \times n$ (respectivement $\rho\Delta V \times n$), avec n le nombre de cellules changeant de phase lorsque la valeur de s change. Ce nombre de cellules n varie au cours du temps, dépend de la forme de l'inclusion, du maillage utilisé, ainsi que de la localisation de l'interface sur le maillage eulérien et des phénomènes physiques mis en jeu (transfert de chaleur, advection, etc..).

Par conséquent la définition des critères de convergence sur le volume et sur la masse qui sont utilisés dans la procédure de recherche de seuil doit s'effectuer selon les cas traités. Pour les cas où la bulle reste quasi circulaire, en tenant compte de la symétrie de la bulle, on peut espérer contrôler le volume au mieux à $4 \times \Delta V$ (on gagne ou perd 4 cellules au minimum aux points cardinaux lorsque la valeur de seuil est modifiée), et la masse à $4 \times \rho\Delta V$. C'est ce critère de convergence qui a été utilisé pour les simulations réalisées au cours de cette thèse.

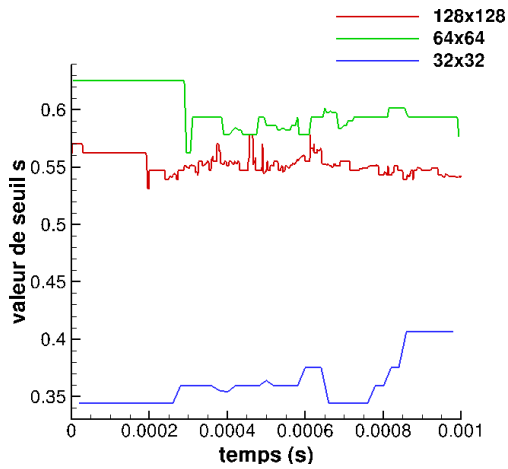


FIGURE 5.37 – Seuil obtenu à l’issue de la procédure de recherche de seuil (zoom), cas *Cavité ouverte chauffée*

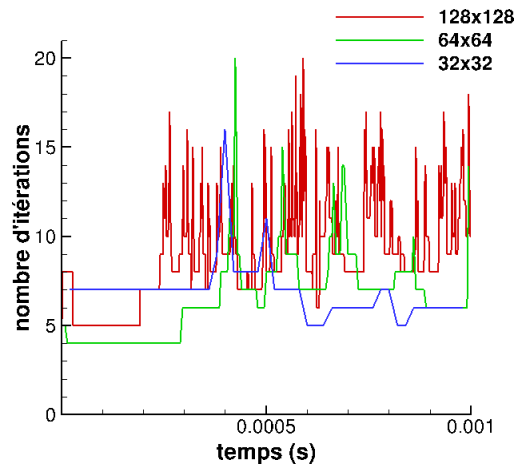


FIGURE 5.38 – Nombre d’itérations réalisées dans la procédure de recherche de seuil (zoom), cas *Cavité ouverte chauffée*

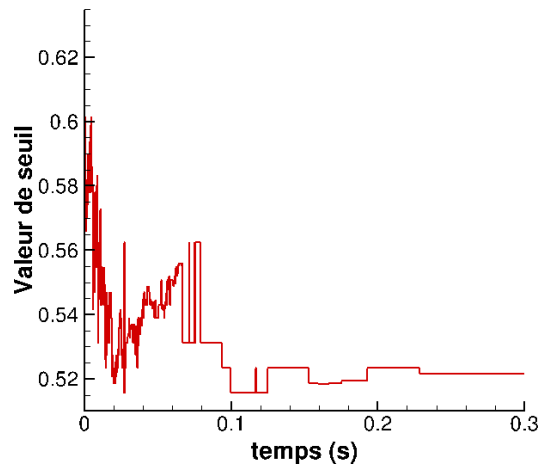


FIGURE 5.39 – Seuil obtenu à l’issue de la procédure de recherche de seuil durant l’intégralité de la simulation, maillage 64×64

On remarque sur la figure 5.38 que le nombre d’itérations nécessaires pour trouver la valeur de seuil appropriée, augmente avec le raffinement du maillage. C’est pénalisant car le coût de la procédure augmente très rapidement lorsque l’on raffine le maillage. En outre, le coût est encore plus important lorsqu’on cherche à conserver la masse, car dans ce cas la procédure de recherche de seuil comprend également la résolution de l’équation de l’énergie.

Cette augmentation du nombre d'itérations est liée au choix du critère de convergence. En effet, ΔV devient plus petit lorsque l'on raffine le maillage et par conséquent, le critère devient plus sévère.

Si l'on recherche l'efficacité de calcul (en terme de temps), il faut alors définir un critère de convergence qui traduise l'erreur sur la conservation du volume et de la masse que l'on peut tolérer. Il s'agit alors d'effectuer un compromis entre la performance et la précision.

Pour finir, on observe sur les Figs. 5.37 et 5.39 que la valeur de seuil optimum varie au cours du temps. Cette variation est liée à la localisation de l'interface sur la grille eulérienne, à la forme de la bulle ainsi qu'aux phénomènes physiques qui sont mis en jeu (transfert de chaleur, dilatation de la bulle). À l'état stationnaire le seuil évolue peu (Fig. 5.39).

5.2.2.3 Cavit e ouverte chauff e avec un seuil adaptatif

Le cas test *Cavit e ouverte chauff e avec seuil fixe* (§5.2.1.1) est simul e   nouveau avec cette fois-ci, la fonction indicatrice de phase  chelon calcul e   partir d'un seuil adaptatif. Les r sultats obtenus sont pr sent s ci-dessous.

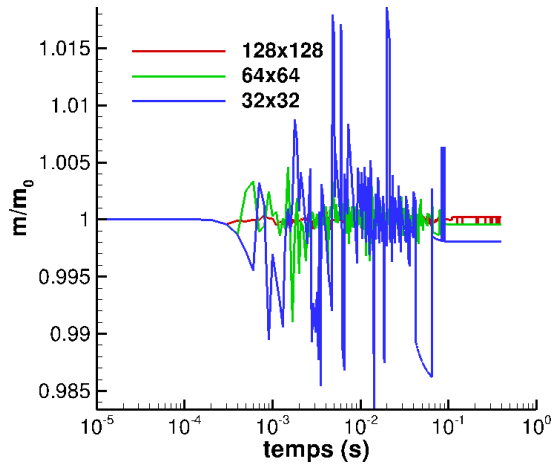


FIGURE 5.40 – Erreur sur la conservation de la masse avec valeur de seuil adaptative pour plusieurs maillages : 32×32 ; 64×64 et 128×128

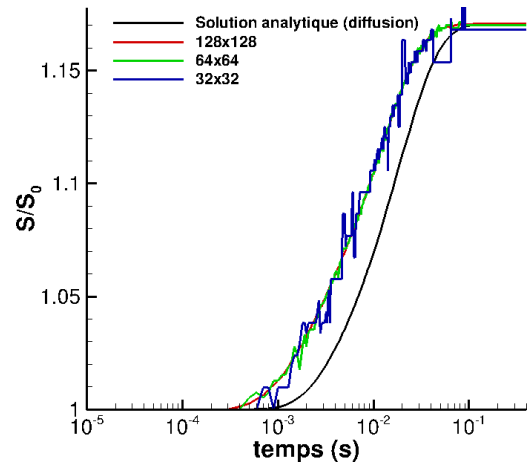


FIGURE 5.41 –  volution de la surface de la bulle au cours du temps : valeur de seuil adaptative vs front-tracking (maillage 64×64)

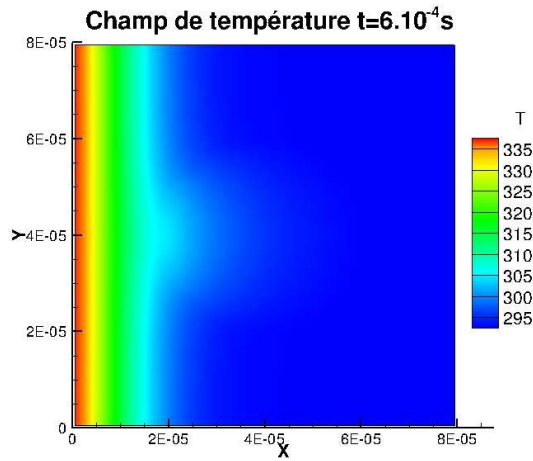


FIGURE 5.42 – Champ de température à $t = 6.10^{-4} s$

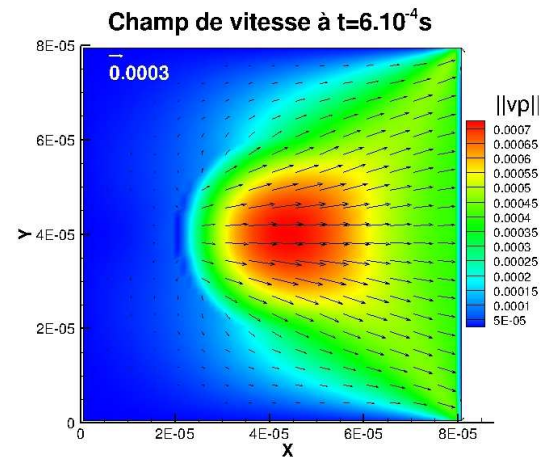


FIGURE 5.43 – Champ de vitesse à $t = 6.10^{-4} s$

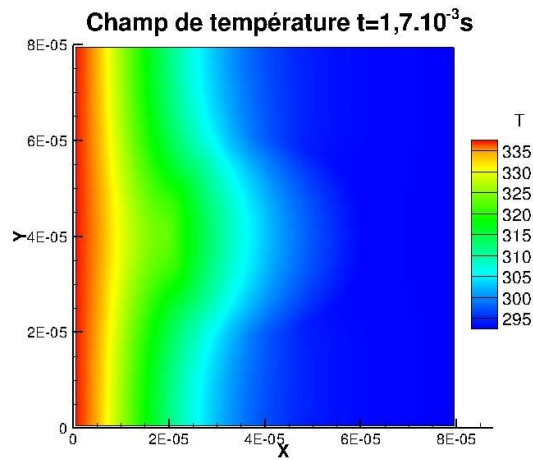


FIGURE 5.44 – Champ de température à $t = 1,7.10^{-3} s$

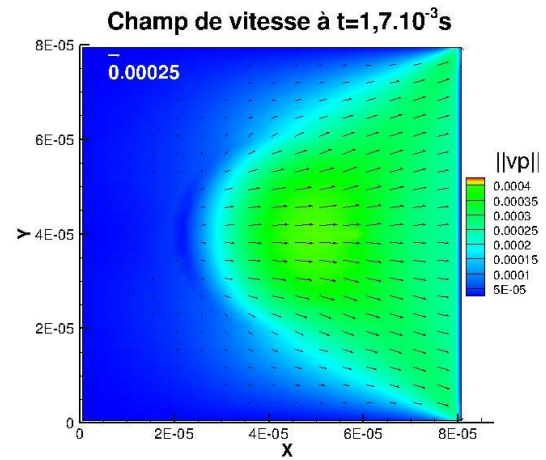


FIGURE 5.45 – Champ de vitesse à $t = 1,7.10^{-3} s$

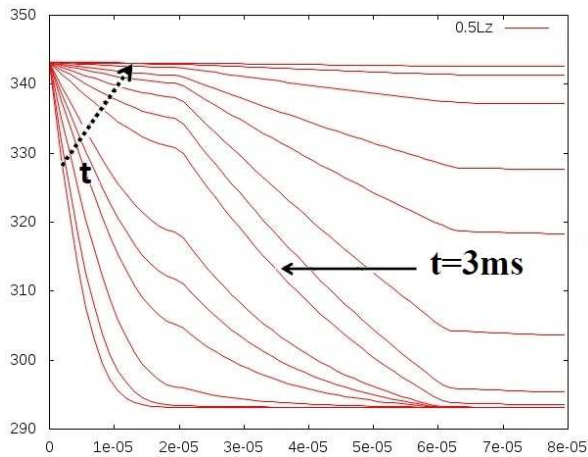


FIGURE 5.46 – Profil de température à mi-hauteur de la cavité

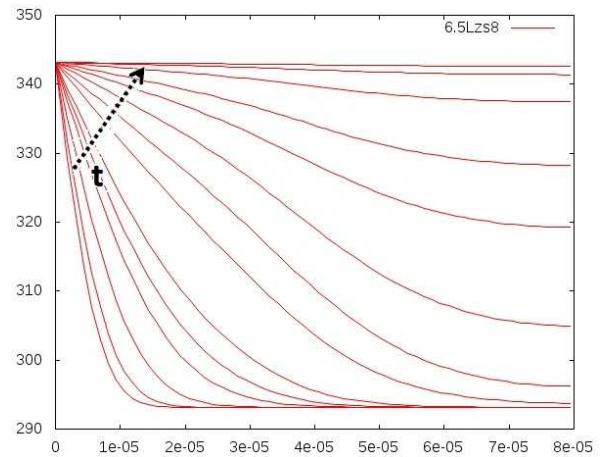


FIGURE 5.47 – Profil de température à $y = 0, 65H = 65 \mu m$

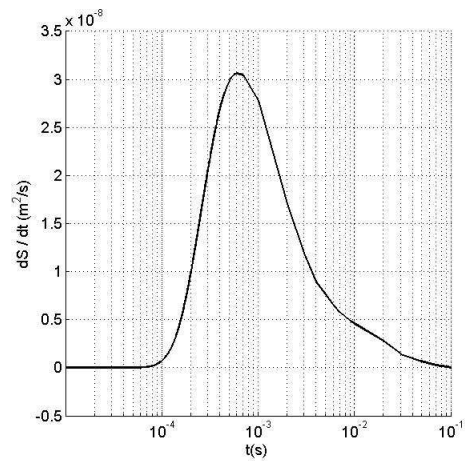


FIGURE 5.48 – Dérivée temporelle du volume de la bulle (surface en 2D)

Commentaires

L'évolution temporelle de la surface de la bulle, représentée sur la figure 5.41, montre qu'un laps de temps ($\approx 3.10^{-4} s$) est nécessaire avant que la bulle ne commence à grossir. La bulle croît ensuite jusqu'à atteindre une valeur d'équilibre. La dérivée temporelle présentée sur la figure 5.48 indique que le taux de croissance augmente dans un premier temps ($3.10^{-4} s < t < 6,4.10^{-4} s$), atteint rapidement une valeur maximum avant de décroître jusqu'à la valeur finale.

Les profils de température à mi-hauteur de la cavité et à $y = 65 \mu m$ sont représentés

pour différents instants sur les Figs. 5.46 et 5.47. La présence de la bulle est bien visible sur la Fig.5.46. Par opposition, les profils présentés sur la Fig. 5.47 sont lisses car seule la phase liquide est présente en $y = 65 \mu m$.

Aux tous premiers instants $t < 3.10^{-4} s$, en l'absence de gravité, le transfert de chaleur est assuré par diffusion dans le liquide. Le changement de température est imperceptible dans la bulle et le bilan des flux traversant l'interface est nul. La relation (3.36) donnant $\nabla \cdot \vec{u}$, montre qu'à pression constante, le taux de croissance de la bulle est gouverné par le bilan des flux de chaleur sur l'interface. Par conséquent, la surface de la bulle reste égale à la valeur initiale. La diffusion de la chaleur devient ensuite perceptible dans la bulle, générant un gradient de température non uniforme qui induit la mise en mouvement de l'air. Dans cette phase, le flux reçu par la bulle depuis le liquide chaud (à gauche) est plus important que le flux perdu vers le liquide froid (à droite) et la surface de la bulle croît fortement. À titre d'illustration, sont présentés sur les Figs.5.42 et 5.43 les champs de température et de vitesse à l'instant $t = 6.10^{-4} s$. La perturbation du champ de température est nette dans la partie gauche de la bulle, tandis qu'elle reste imperceptible dans sa partie à droite (Fig.5.42). Le champ de vitesse (Fig. 5.43), montre que la bulle est bien à l'origine de l'écoulement dans la cavité. Une accélération est visible dans la bulle, tandis que l'enveloppe parabolique du champ de vitesse est le résultat de la condition aux limites appliquée sur la frontière ouverte (profil uniforme). Pour un temps supérieur à $t = 6.10^{-4} s$, le flux de chaleur provenant du liquide chaud diminue du fait de l'élévation de température de l'air à proximité de l'interface, réduisant ainsi le taux de croissance de la bulle (Fig. 5.48). Ceci est illustré par les profils de température et de vitesse à l'instant $t = 1,7.10^{-3} s$ représentés sur les Figs.5.44 et 5.45. La Fig.5.46 montre que pour un temps supérieur à $t = 3.10^{-3} s$ environ, le profil de température devient quasi-linéaire dans le plan médian de la bulle, les flux entrant et sortant tendent ainsi à se compenser, et le taux de croissance de la bulle devient très faible. L'état final est obtenu lorsque la température est uniforme dans la cavité, égale à $T_w = 343,15 K$. L'aire de la bulle peut alors être évaluée à partir de la loi d'état des gaz parfaits soit dans le cas présent $S_f = S_0(T_f/T_0) = 1,17056 S_0$.

Pour finir, les résultats obtenus avec un seuil adaptatif sont très corrects tant sur la conservation de la masse (Fig.5.40) avec une erreur globalement inférieure au pourcent, que sur l'évolution du volume (surface en 2D) de la bulle au cours du temps, où la valeur finale est évaluée avec une erreur inférieure à 0,002 pour les maillages 128×128 , 64×64 et 32×32 .

Synthèse

L'utilisation d'une fonction échelon est nécessaire pour assurer la conservation du flux de chaleur mais le choix de la valeur du seuil qui permet de définir la fonction indicatrice de phase échelon H_{ech} à partir de la fonction indicatrice de phase lisse H_{ft} est crucial pour

assurer la conservation de la masse. Cette valeur seuil, qui permet de garantir la conservation de la masse, est différente pour chaque maillage. Elle varie au cours du temps, et dépend de la position de l'interface par rapport au maillage eulérien. Par conséquent, la méthode hybride de traitement d'interface a été complétée en implémentant une procédure qui permette d'ajuster ce seuil au cours du temps. Cependant, dans les cas test *Cavité ouverte chauffée avec seuil fixe ou adaptatif*, le déplacement de l'interface était dû à la nature dilatante du gaz. Il existe des configurations où l'interface se déplace à cause de l'advection de la bulle. Ce type de configurations sera traité dans les §5.2.3.1 à 5.2.4.1.

TABLE 5.4 – Tableau comparatifs : résultats obtenus avec H_{ech} et un seuil fixe de $s = 0,5$ et résultats obtenus avec H_{ech} et un seuil adaptatif

maillage	V_f/V_{th}	m/m_0
128×128	0,9533/1,0002	0,9898/1,0002
64×64	0,9526/0,9996	0,9813/0,9996
32×32	0,9405/0,9980	0,9403/0,9980

5.2.2.4 *Courants parasites II, avec la fonction indicatrice de phase échelon ajustée*

L'utilisation de H_{ech} modifie l'application de la tension superficielle. En effet, du fait de la discontinuité de la fonction H_{ech} et de l'utilisation de l'approche introduite dans [61] (voir §3.1.4.7), la tension superficielle est appliquée via ∇H_{ech} , qui représente cette fois-ci une fonction de Dirac δ . La tension superficielle réapparaît alors comme une force surfacique, et n'est plus modélisée comme une force volumique dont l'influence sur le fluide est identique à la force surfacique (approche CSF [4] et approche de Shin et al [61]). La localisation de l'interface $\nabla H_{ech} \neq 0$ pouvant varier au cours du temps à cause de l'ajustement du seuil à partir duquel est calculé H_{ech} , il faut vérifier que le calcul et l'application de la force interfaciale n'engendrent pas de courants parasites importants.

À cette fin, le cas test *Courants parasites I* présenté au §4.2 est repris en utilisant la fonction indicatrice de phase échelon qui est adaptée au cours du temps à l'aide de la procédure d'ajustement du seuil. On rappelle que dans la méthode hybride proposée, H_{ech} est utilisée pour définir les propriétés physiques du monofluide alors que la force surfacique est imposée via ∇H_{ech} . Les résultats de cette simulation sont présentés ci-dessous.

Résultats

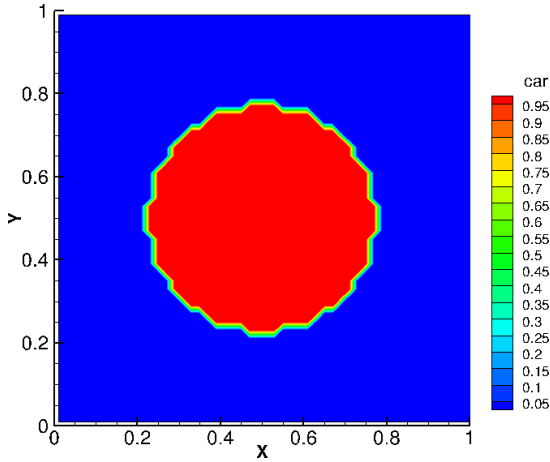


FIGURE 5.49 – Fonction indicatrice de phase échelon ajustée (maillage 50×50)

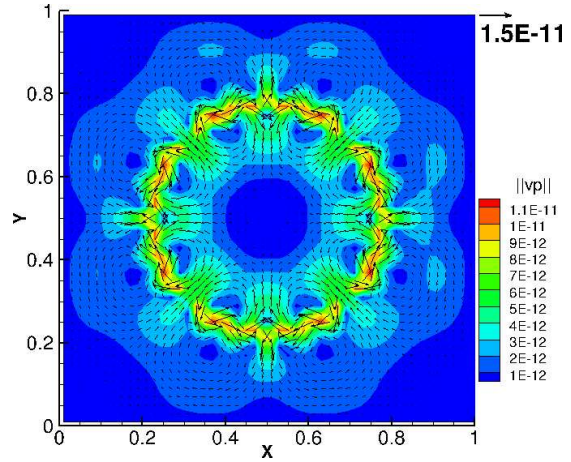


FIGURE 5.50 – Courants parasites engendrés en utilisant un modèle mono-fluide incompressible-faible Mach et la fonction indicatrice de phase échelon ajustée (maillage 50×50)

Commentaires

Les résultats de simulation sont quasi identiques à ceux obtenus au §4.2 pour le cas test *Courants parasites I*, avec des courants parasites de l'ordre de $10^{-11} m.s^{-1}$. La modification de la méthode de front-tracking standard n'influence donc pas la qualité de l'évaluation des courants parasites, qui reste inférieure de plusieurs ordres de grandeurs aux courants parasites engendrés par les méthodes VOF, level-set et front-tracking standard.

On remarquera sur la figure 5.50 que les courants parasites sont légèrement plus localisés autour de l'interface que sur la figure 4.5. Ceci est dû à l'application de la tension surfacique via le terme ∇H , conjuguée au caractère discontinu de la fonction caractéristique.

On cherche maintenant à décrire un écoulement liquide gaz en microcanal avec transfert de chaleur. Les deux configurations qui sont présentées ci-dessous traitent de l'advection d'une bulle d'air au sein d'un microcanal rempli d'eau et chauffé ou refroidi en paroi. Cette fois-ci, dans les cas tests *μcanal isochore I, II et III*, le déplacement de l'interface est engendré par l'advection d'une bulle, tandis que dans le cas test *μcanal isobare* le déplacement de l'interface est engendré par la dilatabilité du gaz couplée à l'advection de la bulle.

5.2.3 Advection isochore d'une bulle

On souhaite simuler l'advection d'une bulle dans un microcanal chauffé ou refroidi. On cherche, dans le cas test présenté ci-dessous, à contrôler la variation de la pression au sein de la bulle via l'application de sollicitations thermiques sur les parois du canal.

5.2.3.1 μ canal isochore I

On considère maintenant un microcanal chauffé et (ou refroidi) rempli d'eau, à l'intérieur duquel une bulle d'air est advectée par un débit massique imposé à l'entrée du canal $u_i = u_o = 0.5$ mm/s (ρ_{liq} étant constant). Le chauffage est assuré, soit sur la totalité des parois du canal, soit localisé. Enfin, le débit massique en sortie de canal est fixé égal au débit massique entrant. De ce fait, de par le caractère incompressible du liquide, la transformation simulée est isochore, et on étudie la variation de la pression thermodynamique au sein du gaz engendrée par les conditions de chauffage ou de refroidissement. Compte tenu du caractère isochore de la transformation, la valeur finale que doit atteindre la pression thermodynamique au sein de la bulle peut être facilement calculée, soit $P_f = P_0(T_f/T_0) = 117056$ Pa avec $\bar{P}_0 = 10^5$ Pa. Les simulations sont menées en utilisant la méthode de front-tracking hybride avec seuil adaptatif présentée dans la partie 5.2.2. Le seuil est calculé de manière à conserver la masse.

À l'état initial, le champ de température est uniforme et égal à $T = 293,15$ K, et la vitesse est nulle. À $t > 0$, on impose un chauffage uniforme sur les parois du microcanal : $x \in [0; L]$ $T(x, t) = T_w = 343,15$ K $\forall t > 0$, tandis que des conditions d'adiabaticité sont imposées sur les frontières ouvertes du canal. Les simulations sont réalisées avec des conditions de glissement aux parois, la longueur d'établissement dynamique n'étant pas l'objectif de la simulation.

Solution analytique

À des fins de validation, on développe une solution analytique en considérant un processus de diffusion pure dans un milieu homogène ayant les propriétés thermiques du liquide. Le champ de température est alors donné par [7]

$$\frac{T(x; t) - T_0}{T_w - T_0} = 1 - \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{2n-1} \cos\left(A_n \frac{x}{L}\right) e^{-A_n^2 \frac{4\alpha t}{H^2}} \quad (5.24)$$

avec $A_n = (2n-1)\frac{\pi}{2}$

Une fois le champ de température connu, la pression dans la bulle peut être calculée en considérant la conservation de la masse $m = \int_{V_b} \rho dV = \text{constante}$ et en utilisant l'équation des gaz parfait $P_b = \rho r T$. On rappelle qu'avec l'approximation faible Mach,

la pression thermodynamique ne dépend que du temps $P_b = P_b(t)$, on obtient alors :

$$P_b(t) = m_0 \left[\int_{V_b} \frac{dV}{rT(x, t)} \right]^{-1} \quad (5.25)$$

Résultats

On présente ci dessous les champs instantanés de température et de vitesse à $t = 0,5 \text{ ms}$ pour un maillage 96×192 , l'évolution de la pression thermodynamique de la bulle au cours du temps, ainsi que la conservation de la masse et du volume (surface en 2D) de la bulle obtenues pour les maillages 64×128 et 96×192 .

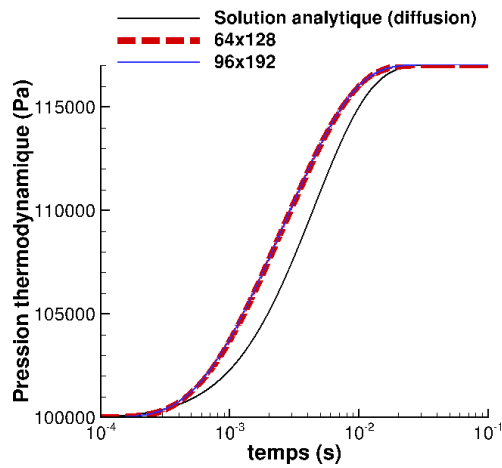


FIGURE 5.51 – Variation de la pression thermodynamique dans la bulle au cours du temps

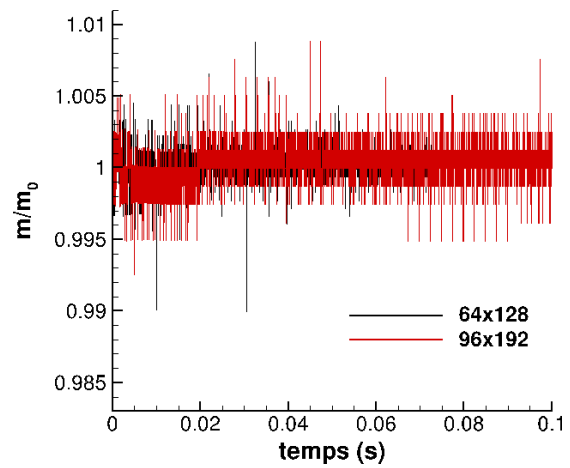


FIGURE 5.52 – Comportement de l'erreur sur la conservation de la masse au cours du temps

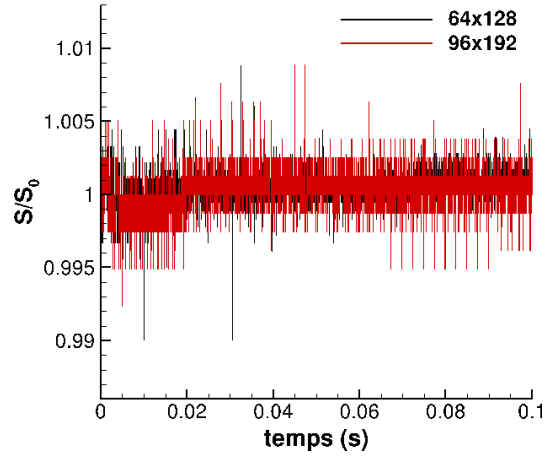


FIGURE 5.53 – Comportement de l’erreur sur la conservation du volume (surface en 2D) au cours du temps

Commentaires

L’écoulement est principalement longitudinal et unidirectionnel ($O\vec{x}$), tandis que le transfert de chaleur est réalisé dans la direction transverse (Fig. 5.54). Comme la diffusivité thermique du gaz est plus importante que celle du liquide, la diffusion thermique est plus rapide dans le gaz, ce qui crer un pont thermique. Ce phénomène peut être observé sur la Fig.5.54 à $t=0.002$ s, où la présence de la bulle se devine dans le champ de température. On peut également voir sur la Fig.5.54 l’influence du champ de température sur le champ de vitesse au sein du gaz. En effet, dans la bulle, la direction et l’orientation des vecteurs vitesse sont influencés par le gradient de température au sein du gaz.

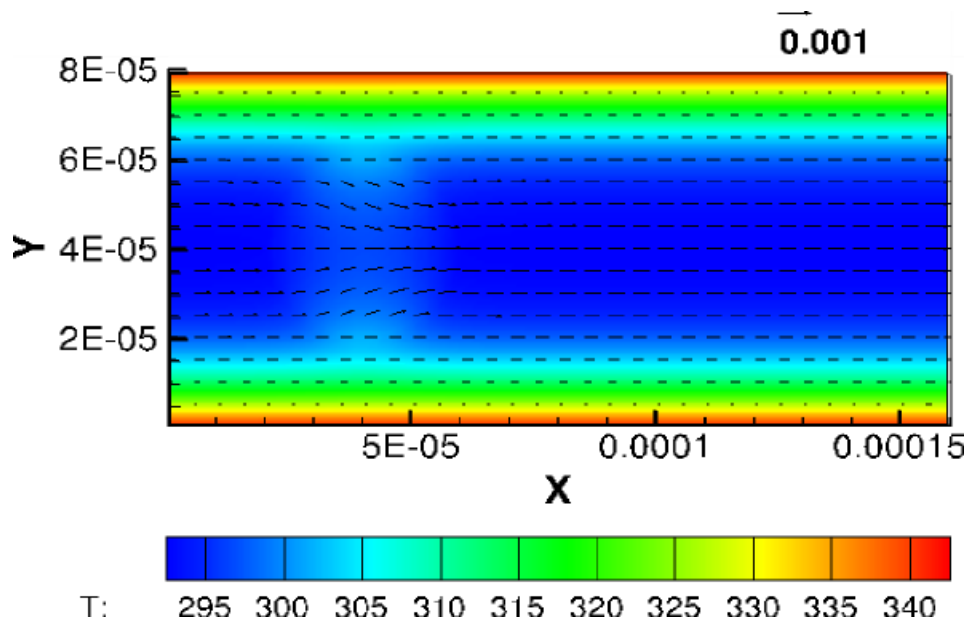


FIGURE 5.54 – Champs instantanés de température et de vitesse à $t = 0,5 \text{ ms}$ pour un maillage 96×192

En raison de la diffusion de la chaleur dans le liquide, la pression n'augmente pas immédiatement. Un délai est nécessaire pour que l'augmentation de la température dans la bulle soit significative. Il s'en suit une élévation de la pression induite par l'élévation de température qui est contrôlée et limitée par la résistance thermique du liquide séparant la bulle des parois.

Sur la Fig.5.51, les résultats de simulation sont superposés à la solution analytique correspondant à un processus de diffusion pure (1D) dans un milieu homogène sans mouvement, ayant les propriétés physiques du liquide. On observe un bon accord entre les résultats de simulation et la solution théorique attendue $P_f = 117056 \text{ Pa}$ à l'état stationnaire, avec une erreur relative faible ($\approx 0,005\%$).

La superposition de la solution théorique avec les résultats de simulation confirme que le transfert de chaleur est dominé par la diffusion dans le cas présent. On peut également constater que la présence du gaz accélère l'élévation de pression dans la bulle. Enfin, cette comparaison montre la capacité du code à satisfaire le principe de conservation de l'énergie. En effet, bien que la pression thermodynamique dans la bulle soit un scalaire uniquement dépendant du temps, son évolution est directement liée au champ de température dans la bulle.

L'évolution temporelle de la masse et de la surface de la bulle est tracée sur les Figs.5.52 et 5.53 : la conservation de la masse et de la surface sont correctement assurées ($|\text{erreur}| \approx$

0,005%) par l'algorithme.

On peut par ailleurs noter qu'à partir d'un chauffage modeste, la variation de pression thermodynamique dans le gaz est relativement intéressante (17% sans inertie thermique des parois).

En conclusion, la méthode de front-tracking hybride permet l'obtention de résultats tout à fait satisfaisants pour ce genre de configuration.

5.2.3.2 μ canal isochore II : chauffage et refroidissement alternatifs

Ces premières simulations ont été réalisées en imposant un chauffage continu sur les parois du microcanal. Il peut être intéressant de contrôler la pression thermodynamique au sein de la bulle via des sollicitations thermiques. Dans cette optique, des conditions aux limites uniformes mais dépendantes du temps sont maintenant imposées aux parois. Des opérations de chauffage et de refroidissement sont réalisées en utilisant successivement des températures chaudes $T_h = 343$ K et froides $T_c = 293$ K. Le temps de chauffage et de refroidissement des parois est fixé de façon à ce que l'état stationnaire puisse être atteint, soit une alternance chauffage et refroidissement toutes les 0,1 s. Les conditions initiales ainsi que les conditions aux limites qui sont imposées, sont les mêmes que pour le cas test μ canal isochore I.

Résultats

Trois échelons de température sont successivement imposés aux parois comme présenté sur la Fig.5.55. L'évolution de la pression dans la bulle est superposée sur le même graphique.

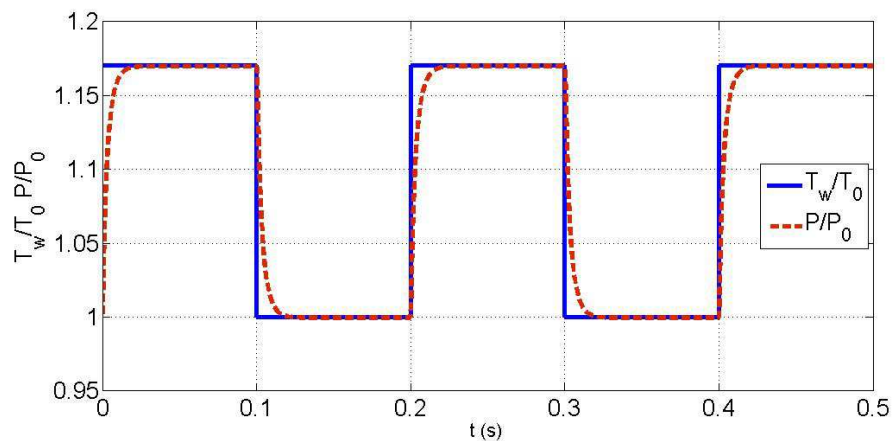


FIGURE 5.55 – Conditions de chauffage et évolution de la pression au cours du temps

Commentaires

On peut observer sur la figure 5.55 que la pression thermodynamique revient bien à sa valeur initiale après l'application de trois échelons de température. C'est un critère qui montre qu'il n'y a pas accumulation d'erreurs numériques au cours du temps même lorsqu'un maillage lâche est utilisé (ici 34×128). La parfaite superposition de $T(t)/T_w$ et $P(t)/P_0$ observée dans le cas présent est due au choix des conditions de chauffage. Des conditions de flux imposées produiraient des résultats différents.

Bien que la température et la pression semblent être parfaitement synchronisées, il existe un léger temps de retard de quelques millisecondes qui n'est pas visible sur la courbe (échelle cartésienne). Ce retard est dû à la diffusion de la chaleur dans le film liquide comme mentionné précédemment. Enfin, le temps de 0.5 s correspond au temps requis pour que la bulle parcoure entièrement le canal.

Enfin, la Fig.5.55 montre que des oscillations de pression dans la bulle peuvent être générées par des sollicitations thermiques appropriées.

5.2.3.3 μ canal isochore III : chauffage non uniforme

Nous allons maintenant examiner le cas de conditions de chauffage non uniformes imposées aux parois. Plus spécifiquement on considèrera la situation où le chauffage est synchronisé avec l'avancée de la bulle. La première moitié du canal est adiabatique, tandis qu'un échelon de température est imposé sur la seconde moitié du canal à partir d'un temps $t_0 = 0.36$ s. Ce temps est choisi de façon à ce que la bulle, à cet instant, ait atteint la seconde partie du canal. Les conditions de chauffage sont données par

$$\begin{cases} t > 0 & \forall x \in [0; L/2[& \partial T / \partial n = 0 \\ t < t_0 & \forall x \in [L/2; L] & \partial T / \partial n = 0 \\ t > t_0 & \forall x \in [L/2; L] & T(x; t) = T_w \end{cases} \quad (5.26)$$

Résultats

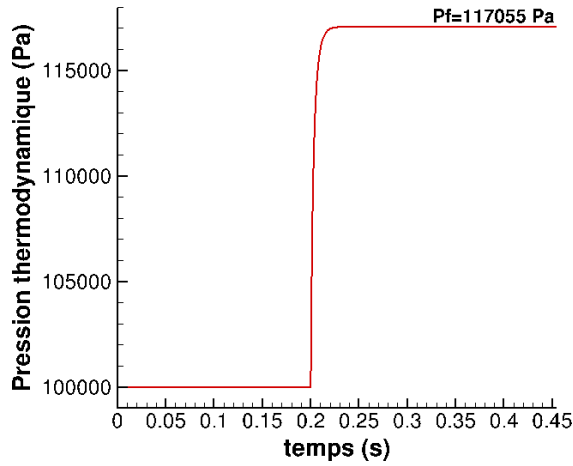


FIGURE 5.56 – Évolution de la pression thermodynamique au cours du temps

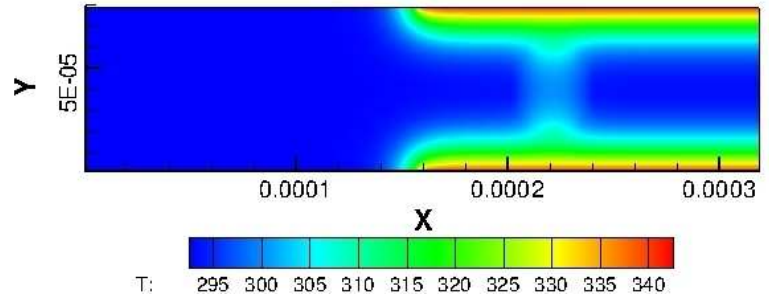


FIGURE 5.57 – Champ de température à $t = 0,362\text{ ms}$

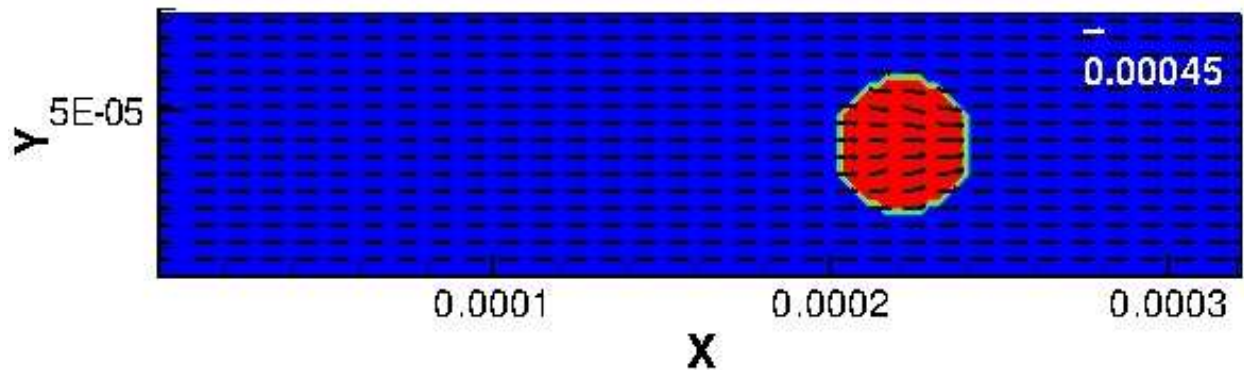


FIGURE 5.58 – Champ de vitesse à $t = 0,362\text{ ms}$

Commentaires

Dans un premier temps l'écoulement est adiabatique, la température est constante dans les deux fluides, et aucune variation de pression n'a lieu. À $t = 0.36\text{ s}$, lorsque le centre de la bulle est situé à environ $180\text{ }\mu\text{m}$ de l'entrée du canal ($R_b = 20\text{ }\mu\text{m}$), le chauffage est activé. Le transfert de chaleur est réalisé depuis les parois horizontales dans le liquide. Pour les mêmes raisons que celles décrites dans le cas précédent, on peut voir apparaître un pont thermique (Fig. 5.57).

Le champ de vitesse au même instant est présenté sur la figure 5.58. On peut observer un champ de vitesse quasi 1D, en raison des conditions de glissement imposées aux parois. On peut également voir sur la même figure le champ de vitesse dans le gaz qui résulte de la continuité des vitesses normales à l'interface et de l'influence du champ de température dans la zone compressible.

Par la suite, la pression s'élève rapidement jusqu'à l'état d'équilibre qui est obtenu alors que la bulle est toujours présente dans le canal. Le champ de température est alors uniforme dans la deuxième moitié du canal, égal à la température de paroi.

Enfin, comme la bulle subit une transformation isochore, la pression à l'état stationnaire est donnée par $P_f = P_0(T_w/T_0)$. Un bon accord est observé avec les résultats présentés sur la Fig.5.56.

Remarques sur l'amélioration apportée par la recherche de seuil

Les figures 5.59 et 5.60 montrent l'erreur sur la conservation de la masse pour une valeur seuil constante égale à 0.5, et une valeur de seuil ajustée dans le cas isochore de l'advection d'une bulle dans un microcanal chauffé. Le gain en précision est significatif.

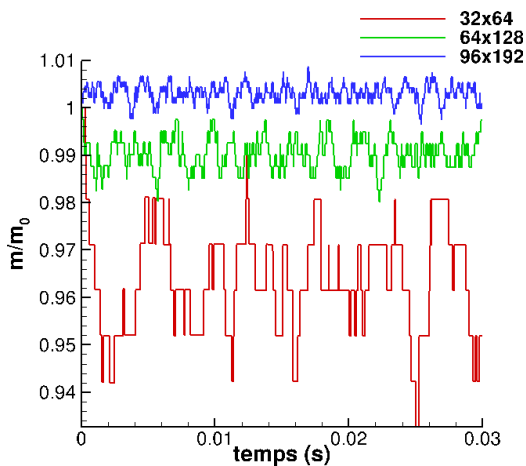


FIGURE 5.59 – Erreur sur la conservation de la masse avec un seuil fixe pour une bulle advectée dans un microcanal chauffé

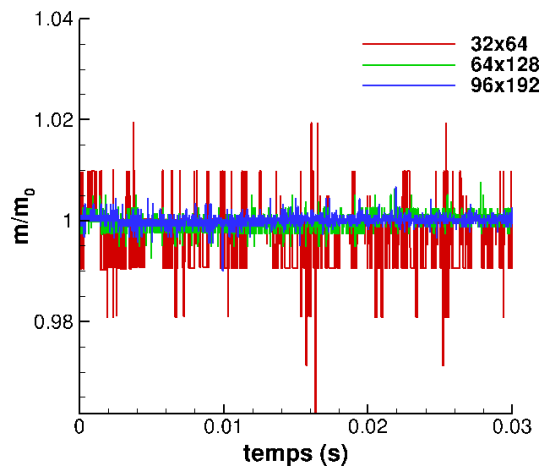


FIGURE 5.60 – Erreur sur la conservation de la masse avec un seuil adaptatif pour une bulle advectée dans un microcanal chauffé

On trace sur les figures ci-dessous les valeurs de seuil s utilisées pour le calcul de H_{ech} au cours du temps ainsi que le nombre d'itérations nécessaires dans la procédure de recherche de seuil dans le cas *μcanal isochore I*.

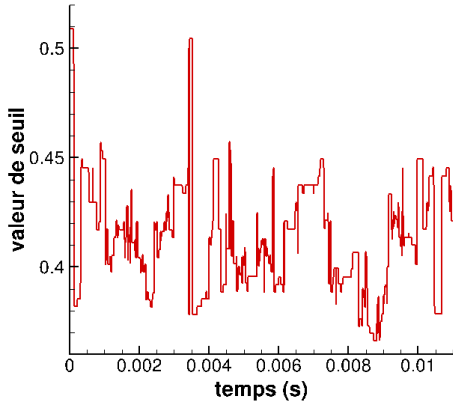


FIGURE 5.61 – Valeur du seuil s utilisée pour le calcul de H_{ech} en fonction du temps

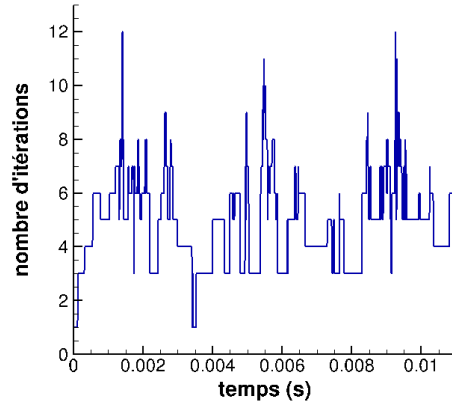


FIGURE 5.62 – Nombre d'itérations réalisées dans la procédure de recherche de seuil

On remarque Fig.5.61 que la valeur de seuil évolue au cours du temps et contrairement au cas *Cavité ouverte avec seuil adaptatif* présenté au §5.2.2.3, le seuil continue à évoluer fortement une fois la pression finale atteinte. En effet, contrairement au cas *Cavité ouverte avec seuil adaptatif* (§5.2.2.3), la bulle est continuellement advectée, même lorsque l'état stationnaire est atteint. Le seuil doit par conséquent être continuellement ajusté de manière à assurer la conservation du volume de la bulle. On remarque également (Fig. 5.62) que le nombre d'itérations effectuées dans la procédure de recherche du seuil varie au cours du temps. En moyenne 3 à 8 itérations sont nécessaires avec des pics pouvant atteindre 12 itérations.

5.2.4 Advection isobare avec dilatation d'une bulle

On souhaite maintenant provoquer une variation du volume de la bulle, advectée dans un microcanal, à partir de l'application d'un chauffage aux parois.

5.2.4.1 μ canal isobare

Dans la configuration simulée, la pression thermodynamique est fixe et égale à $P = P_0 = 10^5$ Pa. Le liquide entre dans le microcanal avec une vitesse d'entrée $u_i = u_o = 0.5$ mm/s. Le chauffage appliqué aux parois engendre une variation du volume (surface en 2D) de la bulle. La condition aux limites en sortie est adaptée de façon à assurer la conservation de la masse, comme dans les cas tests *Cavité ouverte chauffée avec seuil fixe ou adaptatif* (§5.2.1.1 et 5.2.2.3).

Solution analytique

Le gain de volume (surface en 2D) à l'état stationnaire peut être prédit en utilisant la loi des gaz parfaits $V_f = V_0(T_w/T_0)$, avec $V_0 = \pi R^2$ et $V_f = 1.1706 V_0$. Pour vérifier la conservation de l'énergie, une solution analytique de diffusion thermique est développée. En notant m_{V_0} , la masse contenue dans une bulle de volume (surface en 2D) V_0 , cette masse peut être calculée une fois le champ de température connu [7] :

$$m_{V_0}(t) = \int_{V_0} \rho dV = \frac{P_0}{r} \int_{V_0} \frac{dV}{T(x,t)} \quad (5.27)$$

En considérant un processus de diffusion pure dans un milieu 1D homogène ayant les propriétés thermiques du liquide, le profil de température est donné par :

$$\frac{T(x;t) - T_0}{T_w - T_0} = 1 - \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{2n-1} \cos\left(A_n \frac{x}{L}\right) e^{-A_n^2 \frac{4\alpha t}{H^2}} \quad \text{avec} \quad A_n = (2n-1)\frac{\pi}{2} \quad (5.28)$$

Le volume (surface en 2D) de la bulle peut être obtenu par :

$$V(t) \simeq V_0 \frac{m}{m_{V_0}(t)} \quad (5.29)$$

ce qui revient à considérer qu'à n'importe quel instant t , la bulle de masse m ($m = \text{constante}$) et une pseudo-bulle qui occuperait un volume (surface en 2D) constant V_0 (masse $m_{V_0}(t)$) ont la même masse volumique moyenne $\langle \rho \rangle$. On remarquera qu'une égalité stricte est obtenue dans l'Eq. (5.29) lorsque la température est uniforme dans la bulle, ce qui est vrai aux premiers instants, et à l'état stationnaire.

Résultats et commentaires

La simulation numérique a été réalisée sur les maillages 32×64 , 64×128 et 128×256 . On présente l'évolution de la pression thermodynamique dans la bulle au cours du temps, la conservation de la masse, ainsi que le champ de température et la localisation de la bulle à $t = 10^{-3}s$. On trace également sur les figures ci-dessous les valeurs de seuil s utilisées pour le calcul de H_{ech} au cours du temps ainsi que le nombre d'itérations qui ont été réalisées dans la procédure de recherche de seuil.

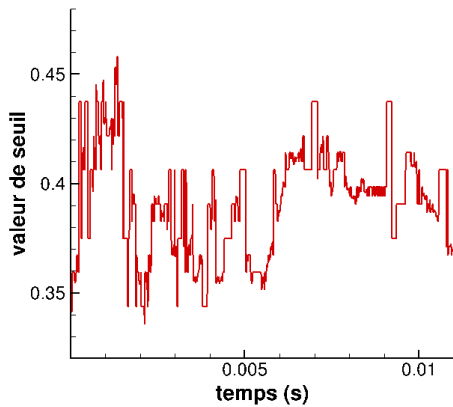


FIGURE 5.63 – Valeur du seuil s utilisée pour le calcul de H_{ech} en fonction du temps

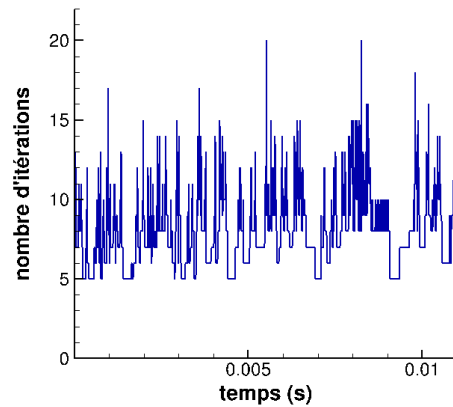


FIGURE 5.64 – Nombre d'itérations réalisées dans la procédure de recherche de seuil

Comme précédemment (*μ_{canal} isochore III*), on observe sur la Fig. 5.63 une variation de la valeur seuil toujours importante, même à la fin du transfert de chaleur. Cela est dû à l'advection de l'interface sur le maillage eulérien. La valeur seuil varie au cours du temps pour assurer la conservation de la masse lorsque le transfert de chaleur est actif, et de manière générale de façon continue du fait de l'advection de la bulle (à cause du déplacement de l'interface sur le maillage eulérien). Le nombre d'itérations effectuées dans la procédure de recherche de seuil varie lui aussi en fonction du temps (Fig. 5.64) et est plus important que dans le cas test précédent (*μ_{canal} isochore III*).

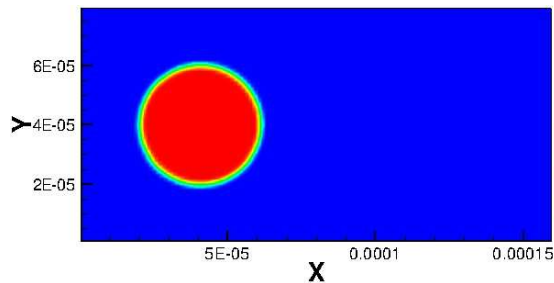


FIGURE 5.65 – Fonction indicatrice de phase à 10^{-3} s.

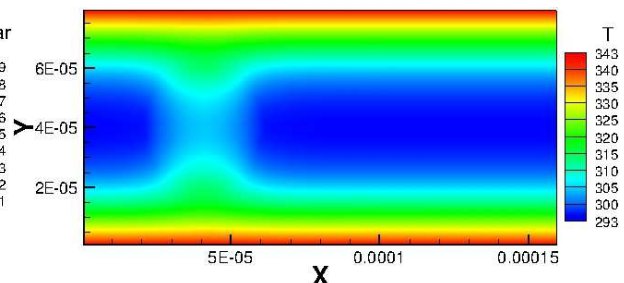


FIGURE 5.66 – Champ de température à 10^{-3} s.

La localisation de la bulle d'air dans le canal à $t = 10^{-3}$ s est présentée sur la figure 5.65, tandis que le champ de température au même instant est tracé sur la figure 5.66. Comme l'écoulement est longitudinal, le transfert de chaleur s'effectue principalement par diffusion dans la direction transverse. À cause d'un rapport important des diffusivités thermiques de l'air et du liquide $\simeq 150$, la bulle agit comme un pont thermique,

connectant les 2 couches de liquide en contact avec les parois.

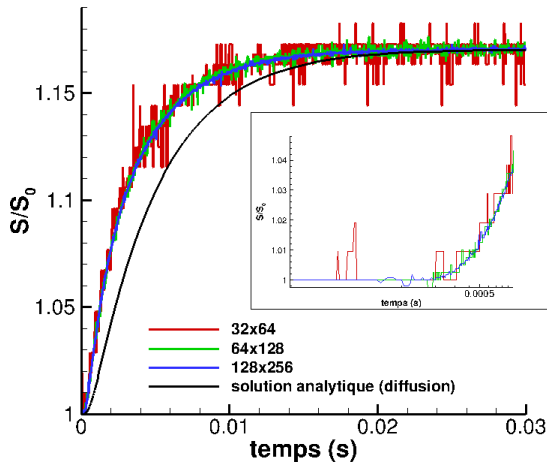


FIGURE 5.67 – Volume (surface en 2D) de la bulle en fonction du temps.

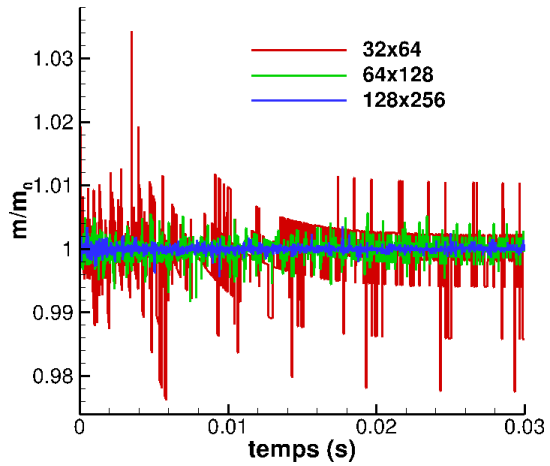


FIGURE 5.68 – Masse de la bulle en fonction du temps.

L'évolution temporelle du volume (surface en 2D) de la bulle est tracée sur la Fig. 5.67, et montre que la dilatation de la bulle commence après un certain délai, qui correspond au temps de diffusion de la chaleur des parois vers la bulle à travers le liquide. La dilatation se poursuit au cours du temps jusqu'à ce que l'état stationnaire soit atteint.

Le volume (surface en 2D) théorique, donné par la relation (5.29), est superposé sur la figure 5.67 avec le volume (surface en 2D) obtenu par simulation numérique. La comparaison montre que la méthode hybride procure une solution précise, car la solution à l'état stationnaire se superpose parfaitement avec la solution théorique. On peut observer l'effet du maillage sur les résultats, avec une erreur plus grande lorsque qu'un maillage grossier est utilisé ; mais la valeur moyenne reste acceptable. Cette erreur dépend du pas d'espace utilisé comme cela a été expliqué au paragraphe §5.2.2.2. Lorsque l'on compare la solution analytique traduisant un processus de diffusion pure avec les courbes de simulation, on voit apparaître l'impact de la présence du gaz, qui améliore l'élévation de température dans la bulle et par conséquent, la vitesse de dilatation de l'inclusion gazeuse. L'évolution de la masse au cours du temps obtenue pour les maillages 32×64 , 64×128 et 128×256 est présentée sur la Fig. 5.68. La masse est correctement conservée par le code, avec une erreur $\delta m/m$ inférieure à 0.1% pour tout les maillages. Enfin, la variation du volume (surface en 2D) de la bulle modifie le débit sortant du microcanal. Le débit en sortie du microcanal pourrait ainsi être contrôlé par une actuation thermique.

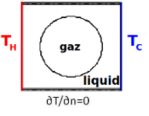
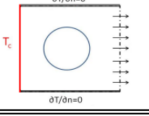
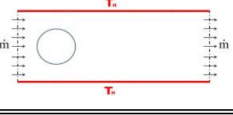

Conclusion

Dans ce chapitre, le code de calcul a été développé afin de pouvoir simuler des écoulements diphasiques anisothermes où l'interface se déplace. Ceci a nécessité la résolution de plusieurs problèmes, notamment l'établissement de procédures permettant le rétablissement de la conservation de l'énergie et de la masse. La définition de cas tests pertinents a permis de diagnostiquer l'origine des difficultés, celles-ci provenant de l'utilisation conjointe du front-tracking dans sa forme standard et d'un modèle à un fluide prenant en compte la dilatabilité du gaz.

L'analyse des résultats de simulation a permis, sur la base d'éléments argumentés (mise en cause du lissage de l'interface, puis du déplacement de l'interface) de proposer une méthode hybride de traitement d'interface pour remédier aux problèmes rencontrés. Cette méthode hybride, combine l'utilisation d'une fonction indicatrice de phase échelon ajustée au cours du temps au sein d'un même pas de temps, et la méthode de front-tracking pour suivre l'interface d'un pas de temps à l'autre. Les résultats qui ont été obtenus avec la méthode hybride sont très satisfaisants, et donnent confiance dans la capacité du code à simuler ce type de configurations.

5.3 Tableau récapitulatif des configurations traitées

TABLE 5.5 – Tableau récapitulatif des cas tests simulés

Dénomination	Schéma et conditions aux limites	Suivi de l'interface avec le Front-tracking	H_n lisse	$H_{echelon}$		Objectifs	Résultats	Page
				seuil fixe (=0,5)	seuil ajusté			
<i>Cavité fermée chauffée I</i>		✗	✗	✓	✗	Etape préliminaire de validation du code	Concluants	55
<i>Cavité fermée chauffée II</i>		✓	✓	✗	✗	Vérifier la conservation de l'énergie	Concluants	61
<i>Cavité fermée différenciellement chauffée I : conductivité thermique uniforme</i>		✓	✓	✗	✗	Vérifier la conservation de l'énergie (flux non nuls à l'état stationnaire)	Pression finale faussée + perte de masse + déplacement de la bulle	63
<i>Cavité fermée différenciellement chauffée II : diffusivité thermique uniforme</i>		✓	✓	✗	✗	Vérifier la conservation de l'énergie (flux non nuls à l'état stationnaire, contrôle des flux de chaleur pendant le régime transitoire et à l'état stationnaire)	Pression finale faussée + perte de masse + déplacement de la bulle + flux de chaleur diffusifs non conservatifs	68
<i>Cavité fermée différenciellement chauffée I et II avec fonction indicatrice de phase échelon H_{ech}</i>		✓	✗	✓	✗	Vérifier la conservation de l'énergie (flux non nuls à l'état stationnaire)	Concluants	80
<i>Cavité ouverte chauffée avec seuil fixe</i>		✓	✗	✓	✗	Vérifier la conservation de l'énergie lorsque l'interface se déplace	Perte de masse, et de volume	87
<i>Cavité ouverte chauffée avec ajustement du seuil</i>		✓	✗	✗	✓	Vérifier la conservation de l'énergie lorsque l'interface se déplace (dilatation de la bulle)	Concluants	95
<i>μcanal isochore avec conditions de chauffage I, II, et III</i>		✓	✗	✗	✓	Vérifier la conservation de l'énergie lorsque l'interface se déplace (advection de la bulle)	Concluants	101
							Concluants	105
							Concluants	106
<i>μcanal isobare</i>		✓	✗	✗	✓	Vérifier la conservation de l'énergie lorsque l'interface se déplace (advection + dilatation de la bulle)	Concluants	109

Chapitre 6

Conclusion générale et perspectives

L'objectif fixé pour cette thèse était de développer un outil numérique permettant la simulation et l'analyse physique d'écoulements multiphasiques liquide-gaz au sein de microstructures. Ces écoulements doivent, en outre, inclure le transfert de chaleur, et prendre en compte les effets de compressibilité de la phase gazeuse en vue de la simulation de systèmes tels que des micropompes, des dispositifs de mélange, des microéchangeurs de chaleur pour le refroidissement de systèmes électroniques etc... C'est un problème délicat, auquel peu de travaux ont été consacrés (cf §1.1).

Le travail de thèse présenté, montre que pour atteindre l'objectif initialement fixé, il est nécessaire de résoudre un certain nombre de problèmes inhérents à la méthode de traitement d'interface.

Lors de cette thèse, les travaux concernant la simulation d'écoulements diphasiques entrepris au LIMSI ont été poursuivis, avec le développement de nouveaux cas tests. Ceux-ci ont été définis dans le but de vérifier la conservation de l'énergie. Ces cas tests, en apparence simples, sont néanmoins très exigeants. En effet, l'obtention d'une solution précise (notamment sur la pression thermodynamique dans le gaz) nécessite que les conservations de l'énergie, de la masse, et du volume soient précisément assurées. En outre, les premiers cas tests développés (*cavité fermée différentiellement chauffée I,II*) ont permis de mettre en avant la difficulté à assurer la conservation de l'énergie lorsque l'on utilise la méthode de front-tracking standard pour traiter l'interface. En effet, le lissage de l'interface et de la fonction de Dirac (ou de manière équivalente de la fonction indicatrice de phase qui matérialise l'interface sur le maillage eulérien), ne permet pas d'assurer la conservation de l'énergie, à cause essentiellement de la perte de conservativité du flux de chaleur conductif au niveau discret. Pour rétablir la conservativité du flux de chaleur conductif au niveau discret et par conséquent la conservation de l'énergie, une méthode hybride a été proposée. Cette méthode combine l'utilisation d'une fonction indicatrice de phase échelon à l'intérieur d'un pas de temps avec le front-tracking pour suivre l'interface d'un pas de temps à l'autre. La fonction indicatrice de phase échelon H_{ech} est définie à partir de la fonction indicatrice de phase lisse du front-tracking standard H_{ft} à l'aide d'une valeur seuil $s = 0,5$.

Une seconde catégorie de cas tests a été développée pour vérifier la conservation de l'énergie lorsque l'interface se déplace (*Cavité ouverte avec seuil fixe ou adaptatif*, ainsi que les *μcanaux isobare et isochore*). Les résultats des simulations ont montré qu'il était indispensable d'ajuster la définition de la fonction indicatrice de phase échelon au cours du temps (s variable) pour assurer la conservation de la masse.

Les cas tests développés sont simples à implémenter et exigeants. Ils peuvent être de bons candidats pour servir de cas tests de référence afin de vérifier la conservation de l'énergie lorsque l'une des phases est compressible. En effet, la définition pertinente des

cas tests a permis, notamment au travers de bilans non satisfaisants dans le calcul de $d\bar{P}/dt$ et de $\nabla \cdot \vec{u} \neq 0$, d'identifier l'origine du problème.

Le code développé au cours de la thèse peut être utilisé pour simuler avec précision des écoulements anisothermes avec déplacement de l'interface. Cependant, il convient de choisir avec précaution le critère de convergence utilisé dans la procédure d'ajustement du seuil. En effet, la procédure peut devenir coûteuse lorsque l'on raffine le maillage. La valeur du critère doit faire l'objet d'un compromis précision-performance selon la précision des résultats et l'utilisation du code escomptées. La méthode hybride pourra également faire l'objet d'une parallélisation afin de diminuer les coûts de calculs.

Au regard de l'objectif initialement fixé, il reste des développements à apporter au code. Tout d'abord, il reste à prendre en compte l'interaction entre de multiples inclusions gazeuses. Il faudrait également étendre le code à trois dimensions d'espace, afin de pouvoir simuler des configurations réelles et procéder à la validation du modèle. Pour finir, le code développé donne accès au champ de température ainsi qu'à la pression thermodynamique, il est alors envisageable de considérer des écoulements liquide-vapeur avec changement de phase. En effet, l'accès à la pression thermodynamique ainsi qu'au champ de température doit permettre la modélisation de la courbe de saturation.

Bibliographie

- [1] R. Aris. *Vectors, tensors, and the basic equations of fluid mechanics*. Dover Publications, inc - Prentice-Hall, 1962.
- [2] N. Ashgriz and J.Y. Poo. FLAIR : Flux Line-Segment Model for Advection and Interface Reconstruction. *Journal of Computational Physics*, 93 :449–468, 1991.
- [3] M. Boger, F. Jaegle, and C.-D. Munz. A Pressure-Based Method for the Direct Numerical Simulation of Compressible Two-Phase Flows. *ILASS, 24th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*, 2011.
- [4] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, and C. Zemach. A Continuum Method for Modelling Surface Tension. *Journal of computational Physics*, 100 :335–354, 1992.
- [5] R. Caiden, R.P. Fedkiw, and C. Anderson. A Numerical Method for Two-Phase Flow Consisting of Separate Compressible and Incompressible Regions. *Journal of Computational Physics*, 166 :1–27, 2011.
- [6] J.-P. Caltagirone, S. Vincent, and C. Caruyer. A multiphase compressible model for the simulation of multiphase flow. *Computers & Fluids*, 50 :24–34, 2011.
- [7] H.S. Carslaw and J.C. Jaeger. *Conduction of heat in solids*. Oxford University Press, Oxford, NY, 1959.
- [8] Y.C. Chang, T.Y. Hou, B. Merriman, and S. Osher. A Level Set Formulation of Eulerian Interface Capturing Methods for Incompressible Fluid Flows. *Journal of Computational Physics*, 124 :449–464, 1996.
- [9] V. Daru, P. Le Quéré, M.-C. Duluc, and O. Le Maître. A numerical method for the simulation of low mach number liquid-gas flows. *Journal of Computational Physics*, 229 :8844–8867, 2010.
- [10] G. De Vahl Davis. Natural convection of air in a square cavity a bench mark numerical solution. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 3 :249–264, 1983.

- [11] R. B. DeBar. Fundamentals of the kraken code. Technical report, Lawrence Livermore Lab., 1974.
- [12] J.M. Delhaye. Jump conditions and entropy sources in two-phase systems, local instant formulation. *International Journal of Multiphase Flow*, 1 :395–409, 1974.
- [13] S. Dellacherie. On a diphasic low Mach number system. *ESAIM : M2AN*, 39(3) :487–514, 2005.
- [14] S. Dellacherie. Numerical resolution of a potential diphasic low mach number system. *Journal of Computational Physics*, 223 :151–187, 2007.
- [15] B. Després and F. Lagoutière. Contact discontinuity capturing schemes for linear advection and compressible gas dynamics. *Journal of Scientific Computing*, 16(4) :479–524, 2001.
- [16] D. Erickson, D. Li, and U.J. Krull. Modeling of DNA hybridization kinetics for spatially resolved biochips. *Analytical Biochemistry*, 317 :186–200, 2003.
- [17] R.P. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method). *Journal of Computational Physics*, 152 :457–492, 1999.
- [18] K. J. Geratz, R. Klein, C. D. Munz, S. Roller, and Forschungszentrum Karlsruhe Technik. Multiple Pressure Variable (MPV) Approach for Low Mach Number Flows Based on Asymptotic Analysis, 1996.
- [19] K. Goda. A Multistep Technique with Implicit Difference Schemes for Calculating Two- or Three-Dimensional Cavity Flows. *Journal of Computational Physics*, 30 :76–95, 1979.
- [20] Y. Hao and A. Prosperetti. A numerical method for three-dimensional gas-liquid flow computations. *Journal of Computational Physics*, 196 :126–144, 2004.
- [21] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39 :201–225, 1981.
- [22] J.M. Hyman. Numerical methods for tracking interfaces. *Physica 12D*, pages 396–407, 1984.
- [23] J.E. Pilliod Jr. and E. G. Puckett. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *Journal of Computational Physics*, 199 :465–502, 2004.
- [24] D. Juric, V. Daru, and M.-C. Duluc. Simulation d’écoulement liquide-gaz à l’intérieur d’une cavité chauffée. In *SFT Proceedings*, Presqu’île de Giens, mai 2004.

- [25] S. Kandlikar. History, advances, and challenges in liquid flow and flow boiling heat transfer in microchannels : A critical review. *Journal of Heat Transfer*, pages 034001–1–034001–15, August 2012.
- [26] R. Klein. Semi-Implicit Extension of a Godunov-type Scheme Based on Low Mach Number Asymptotics I : One-dimensional Flow. *Journal of Computational Physics*, 121 :213–237, 1995.
- [27] R. Klein. Multiple spatial scales in engineering and atmospheric low mach number flows. *ESAIM : M2AN*, 39(3) :537–559, 2005.
- [28] C. Kleinstreuer, J.Li, and J. Koo. Microfluidics of nano-drug delivery. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51 :5590–5597, 2008.
- [29] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, and G. Zanetti. Modelling Merging and Fragmentation in Multiphase Flows with SURFER. *Journal of Computational Physics*, 113 :134–147, 1994.
- [30] L. Lee and R.J. Leveque. An immersed interface method for incompressible Navier-Stokes equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 25(3) :832–856, 2003.
- [31] R.J. Leveque and Z. Li. The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 31(4) :1019–1044, 1994.
- [32] X. Liu and J.H. Lienhard. Extremely High Heat Flux Removal by Subcooled Liquid Jet Impingement. *Fundamentals of Subcooled Flow Boiling*, 217 :11–20, 1992.
- [33] J. Magnaudet, M. Rivero, and J. Fabre. Accelerated flows past a rigid sphere or a spherical bubble. Part I : Steady straining flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 284 :97–135, 1995.
- [34] A. Majda and J. Sethian. The Derivation and Numerical Solution of the Equation for Zero Mach number Combustion. *Combustion Science and Technology*, 42 :185–205, 1985.
- [35] A. Meister. Asymptotic single and multiple scale expansions in the low mach number limit. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 60(1) :256–271, 1999.
- [36] T. Ménard, S. Tanguy, and A. Berlemont. Coupling level set/VOF/ghost fluid methods : Validation and application to 3D simulation of the primary break-up of liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33 :510–524, 2007.
- [37] M. Mudawar and M.B. Bowers. Ultra-high critical heat flux (CHF) for subcooled water flow boiling - I : CHF data and parametric effects for small diameter tubes. *Internatioanl Journal of Heat and Mass Transfer*, 31 :1405–1428, 1999.

- [38] B. Müller. Low-Mach-number asymptotics of the Navier-Stokes equations. *Journal of Engineering Mathematics*, 34 :97–109, 1998.
- [39] C.-D Munz, S. Roller, R. Klein, and K.J. Geratz. The extension of incompressible flow solvers to the weakly compressible regime. *Computers & Fluids*, 32 :173–196, 2003.
- [40] J.Y. Murthy and S.R. Mathur. Computational Heat Transfer in Complex Systems : A Review of Needs and Opportunities. *Journal of Heat Transfer*, 134 :031016–1–031016–12, 2012.
- [41] W. F. Noh and P. Woodward. *SLIC (Simple Line Interface Calculation)*, volume 59. Springer Berlin / Heidelberg, 1976.
- [42] S. Osher and R. Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer, 2003.
- [43] S. Osher and R.P. Fedkiw. Level Set Methods : An Overview and Some Recent Results. *Journal of Computational Physics*, 169 :463–502, 2001.
- [44] S. Osher and J.A. Sethian. Fronts Propagating with Curvature Dependent Speed : Algorithm Based on Hamilton-Jacobi Formulation. *Journal of Computational Physics*, 79 :12–49, 1988.
- [45] M.R Pais, L.C. Chow, and E.T. Mahefkey. Surface Roughness and Its Effets in the Heat Transfer Mechanism in Spray Cooling. *Journal of Heat Transfer*, 114 :21–219, 1992.
- [46] S. Paolucci. On the filtering of sound from the navier-stokes equations. Unpublished, 1982.
- [47] S.V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Taylor&Francis, Whashington, DC, 1980.
- [48] C. S. Peskin. Numerical analysis of Blood Flow in the Heart. *Journal of computational physics*, 25 :220–252, 1977.
- [49] C. S. Peskin. The immersed boundary method. *Acta Numerica*, pages 479–517, 2002.
- [50] C. S. Peskin and D. M. McQueen. A general method for the computer simulation of biological systems interacting with fluids. *Biological Fluid Dynamics*, 1995.
- [51] S. Popinet and S. Zaleski. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30 :775–793, 1999.

- [52] B. F. Printz and C. S. Peskin. Improved Volume Conservation in the Computation of Flows with Immersed Elastic Boundaries. *Journal of computational physics*, 105 :33–46, 1993.
- [53] A. Prosperetti and G. Tryggvason. *Computational Methods for Multiphase Flow*. Cambridge university press, 2009.
- [54] E.G. Puckett. A volume-of-fluid interface tracking algorithm with applications to computing shock wave refraction. In *Proceedings of the Fourth International Symposium on Computational Fluid Dynamics*, pages 933–938, Davis, CA, 1991.
- [55] E.G. Puckett and J.S Saltzman. A 3D adaptative mesh refinement algorithm for multimaterial gas dynamics. *Physica D*, 60 :84–93, 1992.
- [56] P. Le Quéré. Accurate solutions to the square thermally driven cavity at high Rayleigh number. *Computers & Fluids*, 20(1) :29–41, 1991.
- [57] P. Le Quéré, R. Masson, and P. Perrot. A chebyshev Collocation Algorithm for 2D Non-boussinesq Convection. *Journal of Computational Physics*, 103(2) :320–335, 1992.
- [58] W. J. Rider and D. B. Kothe. Stretching and Tearing Interface Tracking Methods. *AIAA-95-1717*, pages 806–816, 1995.
- [59] M. Rudman. Volume-tracking methods for interfacial flow calculations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 24 :671–691, 1997.
- [60] R. Scardovelli and S. Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31 :567–603, 1999.
- [61] S. Shin, S.I. Abdek-Khalik, V. Daru, and D. Juric. Accurate representation of surface tension using the level contour reconstruction method. *Journal of Computational Physics*, 203 :493–516, 2005.
- [62] S. Shin and D. Juric. Modeling Three-Dimensional Multiphase Flow Using a Level Contour Reconstruction Method for Front Tracking without Connectivity. *Journal of Computational Physics*, 180 :427–470, 2002.
- [63] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A Level Set approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. *Journal of Computational Physics*, 114 :146–159, 1994.
- [64] H. Terashima and G. Tryggvason. A front-tracking/ghost-fluid method for fluid interfaces in compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 228 :4012–4037, 2009.

- [65] D.J. Torres and J.U. Brackbill. The Point-Set Method : Front-Tracking without Connectivity. *Journal of Computational Physics*, 165 :620–644, 2000.
- [66] M. D. Torrey, L. D. Cloutman, C. Mjolsness, and C. W. Hirt. NASA-VOF2D : A computer program for incompressible flows with free surfaces. Technical report, Los Alamos Nat. Lab., december 1985.
- [67] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y.-J. Jan. A Front-Tracking Method for the Computations of Multi-phase Flow. *Journal of Computational Physics*, 169 :708–759, 2001.
- [68] Jr-H. Tsai and L. Lin. Active microfluidic mixer and gas bubble filter driven by thermal bubble micropump. *Sensors and actuators A PHYSICAL*, 97–98 :665–671, 2002.
- [69] D.B. Tuckerman and R.F.W. Pease. High-Performance Heat Sinking for VLSI. *IEEE Electron Device Letters*, 2(5), 1981.
- [70] H.S. Udaykumar, R. Mittal, P. Rampunggoon, and A. Khanna. A Sharp Interface Cartesian Grid Method for Simulating Flows with complex Moving boundaries. *Journal of Computational Physics*, 174 :345–380, 2001.
- [71] S.O. Unverdi and G. Tryggvason. A Front-Tracking Method for Viscous, Incompressible, Multi-fluid Flows. *Journal of Computational Physics*, 100 :25–37, 1992.
- [72] J. Vanel, R. Peyret, and P. Bontoux. Pseudo spectral solution of vorticity stream function equations using the influence matrix technique. *Numerical Methods in Fluid Dynamics*, pages 463–475, 1986.
- [73] B. Yang, A. Prosperetti, and S. Takagi. The transient rise of a bubble subject to shape or volume changes. *Physics of Fluids*, 15(9) :2640–2648, 2003.
- [74] T. Ye, R. Mittal, H.S. Udaykumar, and W. Shyy. An Accurate Cartesian Grid Method for Viscous Incompressible Flows with Complex Immersed Boundaries. *Journal of Computational Physics*, 156 :209–240, 1999.
- [75] T. Ye, W Shyy, and J.N. Chung. A Fixed-Grid, Sharp-Interface Method for Bubble Dynamics and Phase Change. *Journal of Computational Physics*, 174 :781–815, 2001.
- [76] Z. Yin and A. Prosperetti. A microfluidic 'Blinking bubble' pump. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 15 :643–651, 2005.
- [77] Z. Yin and A. Prosperetti. 'Blinking bubble' micropump with microfabricated heaters. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 15 :1683–1691, 2005.

- [78] D.L. Youngs. An interface tracking method for a 3D eulerian hydrodynamics code. Tech. report, AWRE, 1984.
- [79] G.P. Zank and W.H. Matthaeus. The equations of nearly incompressible fluids. I. Hydrodynamics, turbulence, and waves. *Physics of Fluids A*, 3 :69–82, 1991.
- [80] G. Zhang and S.G. Kandlikar. A critical review of cooling techniques in proton exchange membrane fuel cell stacks. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37 :2412–2429, 2012.

Annexe A

Annexes

A.1 Méthodes numériques

Discretisation et avance en temps

Les équations décrivant l'écoulement (3.34a-3.34d) sont résolues sur un maillage décalé : les fonctions scalaires sont localisées au centre des volumes de contrôle, tandis que les composantes de la vitesse sont évaluées sur les faces des cellules. On utilise un schéma volumes finis centré d'ordre deux pour la discrétisation en espace (la discrétisation des équations est donnée en annexe A.2). L'avance en temps est réalisée en utilisant un schéma proposé par Vanel et al [72] qui combine un schéma d'Euler retardé d'ordre deux pour la discrétisation de la dérivée temporelle avec un schéma d'Adams-Bashforth pour l'évaluation des termes convectifs ; les termes diffusifs sont eux implicites.

Dans un premier temps, le système linéaire résultant de la discrétisation en temps est résolu par l'algorithme GMRES. La convergence sur le champ de température, la pression thermodynamique et par conséquent sur la masse volumique (et par extension sur la masse) nécessite une boucle de 2-3 itérations successives.

Dans un second temps, un algorithme de prédiction projection de type Goda [19] est utilisé pour calculer la vitesse et la pression dynamique. Les méthodes de prédiction projection s'appliquent aux écoulements incompressibles et faibles Mach, où la pression qui intervient dans l'équation de conservation de quantité de mouvement évolue au cours du temps, sans être directement gouvernée par une équation d'évolution. Dans ce type de méthode, la pression est utilisée pour assurer la satisfaction de la contrainte de divergence sur le champ de vitesse. La méthode s'appuie sur la décomposition de Helmholtz-Hodge :

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^* + \frac{2\Delta t}{\rho} \nabla \Phi^{n+1} \quad (\text{A.1})$$

avec \vec{u}^* la vitesse prédite, et Φ^{n+1} l'incrément de pression. La vitesse prédite u^* est tout d'abord calculée à partir de

$$\begin{aligned} \frac{3\rho^{n+1}u^* - 4\rho^n u^n + \rho^{n-1}u^{n-1}}{2\Delta t} + 2(\nabla \cdot (u^* \otimes u^*))^n - (\nabla \cdot (u^* \otimes u^*))^{n-1} \\ = \\ -\nabla \pi^n + \nabla \cdot \bar{\tau}^{n+1} + \sigma \kappa_{ft} \nabla H^{n+1} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

en considérant le gradient de pression dynamique $\nabla \pi$ au pas de temps antérieur n . Une fois u^* obtenue à partir de (A.2) et $\nabla \cdot \vec{u}^{n+1}$ à partir de (3.36), l'incrément de pression Φ^{n+1} est calculé de manière à imposer la contrainte sur la divergence

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla \Phi^{n+1} = \frac{\nabla \cdot u^* - \nabla \cdot \vec{u}^{n+1}}{2\Delta t} \quad (\text{A.3})$$

Cette équation de Poisson impliquant un rapport de densité important ($\rho_{liq}/\rho_{gaz} \approx 1000$) est résolue à l'aide d'une méthode multigrilles. Finalement, la décomposition d'Helmholtz-Hodge est utilisée pour mettre à jour la vitesse

$$\vec{u}^{n+1} = u^* - \frac{2\Delta t}{\rho} \nabla \Phi^{n+1} \quad (\text{A.4})$$

et la pression dynamique est incrémentée selon

$$\pi^{n+1} = \pi^n + \frac{3}{2} \Phi^{n+1} \quad (\text{A.5})$$

A.2 Discrétisation en espace des équations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement

Discrétisation de l'équation de l'énergie

La discrétisation en temps

$$\rho^{n+1} c_p^{n+1} \left[\frac{3T^{n+1} - 4T^n + T^{n-1}}{2\Delta t} + 2 \overbrace{(\vec{u} \cdot \nabla T)^n - (\vec{u} \cdot \nabla T)^{n-1}}^{\text{TNLT}} \right] = \nabla \cdot (k \nabla T^{n+1}) + \frac{d\bar{P}^{n+1,k}}{dt} \quad (\text{A.6})$$

Formulation incrémentale $\delta T = T^{n+1} - T^n$

$$\begin{aligned} \delta T - \frac{2\Delta t}{3\rho^{n+1}c_p^{n+1}} \nabla \cdot (k \nabla \delta T) \\ = \\ -\frac{2\Delta t}{3} \text{TNLT} + \frac{\delta T^n}{3} + \frac{2\Delta t}{3\rho^{n+1}c_p^{n+1}} \frac{d\bar{P}^{n+1,k}}{dt} + \frac{2\Delta t}{3\rho^{n+1}c_p^{n+1}} \nabla \cdot (k \nabla T^n) \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

La discrétisation en espace des termes non linéaires

$$\begin{aligned} \vec{u} \cdot \nabla T \\ = \\ 0.5 \left[\vec{u}_x(i, j) \frac{T(i+1, j) - T(i, j)}{\Delta x} + \vec{u}_x(i-1, j) \frac{T(i, j) - T(i-1, j)}{\Delta x} \right. \\ \left. + \vec{u}_y(i, j) \frac{T(i, j+1) - T(i, j)}{\Delta y} + \vec{u}_y(i, j-1) \frac{T(i, j) - T(i, j-1)}{\Delta y} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

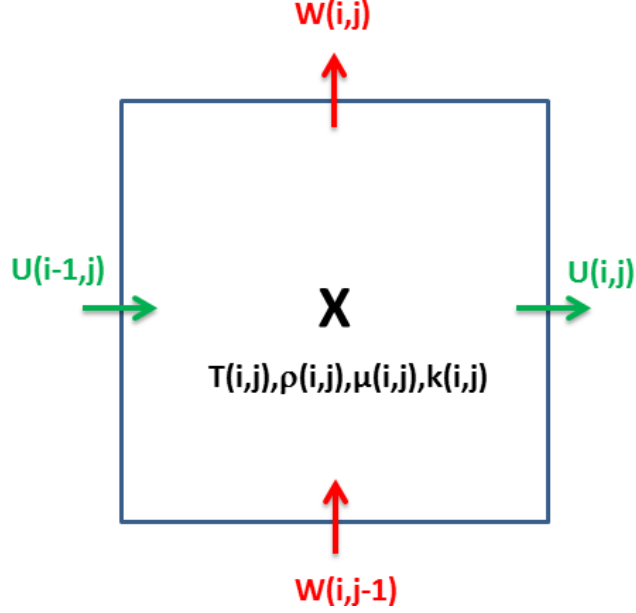


FIGURE A.1 – Maillage décalé

Discrétisation de l'équation de quantité de mouvement

La discrétisation en temps

$$\begin{aligned}
 & \frac{3\rho^{n+1}\bar{u}_x^{n+1} - 4\rho^n\bar{u}_x^n + \rho^{n-1}\bar{u}_x^{n-1}}{2\Delta t} + \overbrace{2(\rho\bar{u}_x \otimes \bar{u}_x)^n - (\rho\bar{u}_x \otimes \bar{u}_x)^{n-1}}^{\text{TNLU}} \\
 & = -\nabla\pi^n + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \left(\frac{\partial\bar{u}_x}{\partial x} - \frac{1}{3}\nabla \cdot \bar{u} \right) \right]^{n+1} + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial\bar{u}_x}{\partial y} + \frac{\partial\bar{u}_y}{\partial x} \right) \right]^{n+1} + \sigma^{n+1}\kappa^{n+1}\nabla H^{n+1}
 \end{aligned} \tag{A.9}$$

Formulation incrémentale $\delta\bar{u}_x = \bar{u}_x^{n+1} - \bar{u}_x^n$

$$\begin{aligned}
 & \delta\bar{u}_x \left[1 - \frac{2\Delta t}{3\rho^{n+1}} \left(\nabla \cdot (\mu\nabla) + \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] - \frac{2\Delta t}{3\rho^{n+1}} \left[-\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} (\mu\nabla \cdot \bar{u}) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial\bar{u}_y}{\partial x} \right) \right] \\
 & = \frac{2\Delta t}{3\rho^{n+1}} \left\{ -\text{TNL} - \nabla\pi^n + \nabla \cdot (\mu\nabla\bar{u}_x^n) + \left(\frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial\bar{u}_x^n}{\partial x} \right) \right\} + \frac{4\rho^n - 3\rho^{n+1}}{3\rho^{n+1}}\bar{u}_x^n - \frac{\rho^{n-1}}{3\rho^{n+1}}\bar{u}_x^{n-1}
 \end{aligned} \tag{A.10}$$

La discrétisation en espace des termes non linéaires dans la direction $\vec{o}\vec{x}$

$$\begin{aligned} CN &= \left[\frac{\rho(i+1, j+1) + \rho(i+1, j)}{2} u_y(i+1, j) + \frac{\rho(i, j+1) + \rho(i, j)}{2} u_y(i, j) \right] 0.5 \\ CS &= \left[\frac{\rho(i+1, j-1) + \rho(i+1, j)}{2} u_y(i+1, j-1) + \frac{\rho(i, j-1) + \rho(i, j)}{2} u_y(i, j-1) \right] 0.5 \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{aligned} CE &= \left[\frac{\rho(i+2, j) + \rho(i+1, j)}{2} u_x(i+1, j) + \frac{\rho(i+1, j) + \rho(i, j)}{2} u_x(i, j) \right] 0.5 \\ CW &= \left[\frac{\rho(i-1, j) + \rho(i, j)}{2} u_x(i-1, j) + \frac{\rho(i+1, j) + \rho(i, j)}{2} u_x(i, j) \right] 0.5 \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

soit finalement

$$\begin{aligned} & \left[CN \frac{u_x(i, j+1) + u_x(i, j)}{2} - CS \frac{u_x(i, j-1) + u_x(i, j)}{2} \right. \\ & \quad + \\ & \left. CE \frac{u_x(i+1, j) + u_x(i, j)}{2} - CW \frac{u_x(i-1, j) + u_x(i, j)}{2} \right] \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

La discrétisation en espace des termes non linéaires dans la direction $\vec{o}\vec{y}$

$$\begin{aligned} CE &= \left[\frac{\rho(i+1, j+1) + \rho(i, j+1)}{2} \vec{u}_x(i, j+1) + \frac{\rho(i, j) + \rho(i+1, j)}{2} \vec{u}_x(i, j) \right] 0.5 \\ CW &= \left[\frac{\rho(i, j+1) + \rho(i-1, j+1)}{2} \vec{u}_x(i-1, j+1) + \frac{\rho(i, j) + \rho(i-1, j)}{2} \vec{u}_x(i-1, j) \right] 0.5 \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

$$\begin{aligned} CN &= \left[\frac{\rho(i, j+2) + \rho(i, j+1)}{2} \vec{u}_y(i, j+1) + \frac{\rho(i, j+1) + \rho(i, j)}{2} \vec{u}_y(i, j) \right] 0.5 \\ CS &= \left[\frac{\rho(i, j) + \rho(i, j-1)}{2} \vec{u}_y(i, j-1) + \frac{\rho(i, j+1) + \rho(i, j)}{2} \vec{u}_y(i, j) \right] 0.5 \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

soit finalement

$$\begin{aligned} & \left[CN \frac{u_y(i, j+1) + u_y(i, j)}{2} - CS \frac{u_y(i, j-1) + u_y(i, j)}{2} \right. \\ & \quad + \\ & \left. CE \frac{u_y(i+1, j) + u_y(i, j)}{2} - CW \frac{u_y(i-1, j) + u_y(i, j)}{2} \right] \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

A.3 Conditions aux limites

Un débit massique constant est imposé à l'aide d'un profil de vitesse uniforme à l'entrée du canal tandis que la condition aux limites en sortie du canal est calculée de manière à assurer la conservation de la masse. Des conditions aux limites de glissement sont imposées sur les parois horizontales du canal. En intégrant l'Eq.(A.3) sur l'ensemble du domaine de calcul, on obtient la relation de compatibilité :

$$\frac{\int_{\Omega} \nabla \cdot u^* - \nabla \cdot u^{n+1} dV}{2\Delta t} = \int_{\Omega} \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \Phi^{n+1} \right) dV \quad (\text{A.17})$$

où la vitesse prédite à l'entrée $u^*|_{\Gamma_e}$ est imposée et la contrainte sur la divergence $\nabla \cdot u^{n+1}$ est connue à partir de l'Eq.(3.36). En tenant en compte que la masse volumique du liquide est constante et en prenant une valeur constante de l'incrément en pression $\nabla \Phi^{n+1}$ à la sortie de canal, il existe alors deux possibilités pour imposer les conditions aux limites :

- soit on choisit d'imposer $u^*|_{\Gamma_e} \neq 0$, et alors $\nabla \Phi^{n+1}|_{\Gamma_{out}}$ est directement calculé à partir de l'Eq.(A.17). La valeur obtenue est imposée comme condition aux limites en sortie lorsque l'on résout l'équation de Poisson sur Φ^{n+1} Eq.(A.3)
- soit on choisit de fixer $\nabla \Phi^{n+1}|_{\Gamma_{out}} = 0$, et $u^*|_{\Gamma_e}$ est calculé à partir de l'équation (A.17). La valeur obtenue est imposée en condition aux limites lors du calcul de la vitesse prédite u^* .

L'une ou l'autre de ces deux manières de procéder, permet d'assurer la conservation de la masse. Plus généralement, on peut remarquer que via la relation de compatibilité Eq.(A.17), la connaissance de la conditions aux limite sur la vitesse permet de déduire la condition aux limite sur l'incrément en pression et réciproquement.

A.4 Continuité des contraintes

Par la formulation en $\nabla \cdot \bar{\tau}$ on a la continuité des contraintes tangentielles (la relation de saut sur la quantité de mouvement à l'interface donne ce résultat lorsque l'on ne considère pas de surfactants ou d'effet marangoni, soit $\nabla \sigma = 0$). Pour assurer cette continuité au niveau discret, il faut évaluer avec précaution la viscosité dynamique qui intervient dans le tenseur de viscosité. Par exemple pour \vec{u}_x en 2D il faut évaluer la viscosité dynamique au nord et sud du volume de contrôle relatif à \vec{u}_x . Ces points où doit être évalué la viscosité μ se situent à l'intersection des volumes de contrôle où sont définis les scalaires. La contrainte tangentielle s'exprime de la façon suivante dans la direction $O\vec{x}$

$$\sigma_{xy} = \mu \left[\frac{\partial \vec{u}_x}{\partial y} + \frac{\partial \vec{u}_y}{\partial x} \right] \quad (\text{A.18})$$

la continuité des contraintes tangentielles s'écrit au niveau discret

$$\underbrace{\mu_N \left[\frac{\vec{u}_N - \vec{u}_n}{\Delta y/2} + \frac{\vec{u}_{NE} - \vec{u}_{NP}}{\Delta x} \right]}_{\text{I}} = \underbrace{\mu_P \left[\frac{\vec{u}_n - \vec{u}_P}{\Delta y/2} + \frac{\vec{u}_E - \vec{u}_P}{\Delta x} \right]}_{\text{II}} = \underbrace{\mu_n \left[\frac{\partial \vec{u}_x}{\partial y} + \frac{\partial \vec{u}_y}{\partial x} \right]}_{\text{III}} \quad (\text{A.19})$$

en utilisant u_n comme variable intermédiaire

$$u_n = \frac{\mu_N \left(\frac{\vec{u}_N}{\Delta y/2} + \frac{\vec{u}_{NE} - \vec{u}_{NP}}{\Delta x} \right) - \mu_P \left(\frac{\vec{u}_E - \vec{u}_P}{\Delta x} - \frac{\vec{u}_P}{\Delta y/2} \right)}{\frac{\mu_P + \mu_N}{\Delta y/2}} \quad (\text{A.20})$$

puis en insérant (A.20) dans le terme I (ou II) et par identification en utilisant l'égalité (A.19) qui donne I=III (ou II=III) on obtient

$$\mu_n = 2 \frac{\mu_N \mu_P}{\mu_N + \mu_P} \quad (\text{A.21})$$

Pour garantir au niveau discret la continuité des contraintes tangentielles il faut donc utiliser la moyenne harmonique pour évaluer la viscosité dynamique. Dans la direction parallèle à la composante de la vitesse considérée il n'y a pas de difficultés particulières, et la viscosité est alors prise comme la moyenne algébrique des volumes adjacents.

Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques pour la microfluidique

Résumé : Ce travail de thèse est consacré à la modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques liquide-gaz mettant en jeu des transferts de chaleur. La simulation de configurations où la prise en compte des effets de compressibilité de la phase gazeuse est indispensable (micropompes, microactionneurs, etc...) a nécessité l'utilisation d'un modèle original, considérant le liquide incompressible et le gaz compressible sous l'hypothèse faible Mach. Lors de cette thèse, ce modèle a été implémenté dans un code diphasique prenant en compte l'interface à l'aide d'une méthode de front-tracking. Des cas tests ont été développés spécifiquement afin de vérifier la conservation de l'énergie pour des configurations de complexité croissante. Les résultats des cas tests ont permis de mettre en évidence la difficulté à assurer la conservation de l'énergie lorsque l'interface n'est pas discontinue mais lissée, comme c'est le cas dans la méthode de front-tracking standard. Une méthode de traitement d'interface hybride a été proposée, rétablissant le caractère discontinu de l'interface avec la reconstruction d'une fonction indicatrice de phase échelon, tandis que le déplacement de l'interface est assuré d'un pas de temps à l'autre à l'aide du front-tracking. Les résultats obtenus avec cette nouvelle méthode hybride sont très satisfaisants, la méthode hybride permettant d'assurer la conservation de l'énergie et de la masse avec précision dans les simulations.

Modeling and numerical simulation of multiphase flow for microfluidics

Abstract : This thesis is devoted to the modeling and the numerical simulation of liquid-gas flows in non isothermal micro-cavities or micro-channels. The objective is to describe two-phase flows in which compressibility of the gaseous phase plays a key role (as for instance in micropumps, microactuators, etc...). An original model is developed, considering in the same computational domain, an incompressible liquid and a compressible gas under the low Mach approximation. This model has been implemented in a code using the front-tracking method for the interface description. In order to check the proper satisfaction of the energy balance, specific test cases have been developed considering several configurations of increasing complexity. It has been shown from these test cases that energy conservation can hardly be satisfied when the interface is described by the means of a smooth function, which is done in the standard front-tracking method. An hybrid method has been proposed, restoring the discontinuous nature of the interface. It makes use of a step function combined with the front-tracking method. Results obtained with this new hybrid method show that mass conservation and energy balance are very properly enforced during the computations.