Développement d'une méthode compressible avec évaporation pour la simulation d'interface résolue dans le cadre de l'atomisation.

Romain Canu

▶ **To cite this version:**

Romain Canu. Développement d'une méthode compressible avec évaporation pour la simulation d'interface résolue dans le cadre de l'atomisation.. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Normandie Université, 2019. Français. NNT : 2019NORMR016 . tel-02271925

HAL Id: tel-02271925

https://theses.hal.science/tel-02271925

Submitted on 27 Aug 2019

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.

Normandie Université

THÈSE

Pour obtenir le diplôme de doctorat

Energétique

Préparée au sein de l'Université de Rouen Normandie

Développement d'une méthode compressible avec évaporation pour la simulation d'interface résolue dans le cadre de l'atomisation

Présentée et soutenue par
Romain CANU

Thèse soutenue publiquement le 24/06/2019 à 14h devant le jury composé de		
M. Marc MASSOT	Professeur, Ecole Polytechnique	Rapporteur
M. Adrien TOUTANT	Maître de Conférence HDR, Université de Perpignan	Rapporteur
M. Arnaud MURA	Professeur, Institut PPrime	Examinateur
M. Giovanni GHIGLIOTTI	Maître de Conférence, Université Grenoble Alpes	Examinateur
M. François-Xavier DEMOULIN	Professeur, Université de Rouen Normandie	Directeur de thèse
M. Benjamin DURET	Maître de Conférence, Université de Rouen Normandie	Co-encadrant de thèse
M. Thibaut MENARD	Maître de Conférence, Université de Rouen Normandie	Invité

Thèse dirigée par François-Xavier DEMOULIN, laboratoire CORIA (UMR 6614)

UNIVERSITÉ DE ROUEN NORMANDIE

ED PSIME

UMR 6614 CORIA COMPLEXE DE RECHERCHE INTERPROFESSIONNEL EN AEROTHERMOCHIMIE

Doctorat, Université de Rouen et CORIA - France

Cette thèse a été réalisée sous la direction de François-Xavier DEMOULIN avec un financement de la région Normandie, du 01 Octobre 2016 au 30 Septembre 2019.

Edition date *July 4, 2019*

Remerciements

Je remercie Madame Armelle Cessou, directrice de l'Unité Mixte de Recherche 6614 CORIA, de m'avoir accueilli au sein de ce laboratoire.

Je remercie Messieurs
Marc Massot, professeur à l'École Polytechnique
Adrien Toutant, maître de conférence à l'Université de Perpignan
d'avoir accepté de rapporter ce travail, et
Arnaud Mura, professeur à l'Institut PPrime
Giovanni Ghigliotti, maître de conférence à l'Université de Grenoble Alpes
Thibaut Ménard, maître de conférence à l'Université de Rouen Normandie
François-Xavier Demoulin, professeur à l'Université de Rouen Normandie
Benjamin Duret, maître de conférence à l'Université de Rouen Normandie
d'avoir accepté de faire partie du jury de cette thèse.

Je souhaite remercier François-Xavier Demoulin, mon directeur de thèse, et Benjamin Duret, mon co-encadrant de thèse, pour leur accompagnement, leurs conseils et leur disponibilité.

Je remercie également Julien Réveillon, Jorge Brandle de Motta et Thibaut Ménard pour leurs conseils lors des différentes réunions d'équipe.

Je remercie l'équipe administrative, en particulier Valérie Thieury, Nathalie Delahaye et Sally Lequesne ainsi que Claire Annic, Shirley Le Corre et Amandine Cyr pour le projet Neptune et Laure Paris et Leila Lahcen de l'École Doctorale.

Je remercie l'équipe informatique et notamment Cédric Chambrelan, Guillaume Edouard et Alexis Boulet pour leur aide.

Un merci particulier à Alexandre Poux qui a pu ressusciter mon disque dur qui envisageait un repos prolongé avant la fin des trois années de thèse.

Je remercie l'ensemble des doctorants avec lesquels j'ai pu entretenir de très nombreuses conversations ; je ne sais pas si le Dirac est reconnu comme unité du débit de parole mais je pense que ça me conviendrait parfaitement.

Enfin, un grand merci à mes parents Sylvie et Daniel, à ma sœur Julie et à Jérémie pour m'avoir soutenu tout au long de cette thèse et notamment lors des

moments de doute. Une pensée particulière pour mon frère Matthieu.

Résumé

Cette thèse montre le développement d'un code de calcul pour les simulations numériques directes d'écoulements diphasiques compressibles avec évaporation. Un couplage entre les méthodes Level Set et VOF est réalisé pour le suivi d'interface. Afin de résoudre les équations de la mécanique des fluides, une méthode basée sur la pression est employée et, pour découpler la vitesse de la pression, une méthode de projection est effectuée. Cette méthode permet l'implicitation des termes liés à l'acoustique et donc de diminuer la contrainte sur le pas de temps. Le liquide et le gaz sont traités de manière compressible permettant des variations locales des masses volumiques grâce à l'utilisation d'équations d'état. L'évaporation est simulée de deux manières différentes ; une première, où un taux d'évaporation constant est employé et une seconde, où ce taux est calculé par la thermique. Parallèlement à ce sujet, une étude de la distribution des courbures dans une injection de liquide est réalisée. Cette étude permet d'étendre le concept de distribution des tailles de gouttes dans un spray et d'améliorer les informations disponibles dans le modèle ELSA. Enfin, une autre étude est effectuée sur la recherche d'un critère, basé sur les courbures à l'interface, pour estimer la qualité d'une simulation.

This PhD thesis shows the development of a numerical method for solving two-phase flows with vaporisation. A coupling between Level Set and VOF methods is realised for the interface capturing. In order to solve fluid mechanics equations, a pressure based method is employed and, to decouple velocity and pressure, a projection method is performed. This method allows the implicitation of the acoustic terms and the time step constraint reduction. Liquid and gas are considered as compressible allowing local density variations with equations of state. The vaporisation is computed in two different ways ; a first one where the vaporisation rate is constant and a second one, where this rate is calculated by thermodynamics. Along with this topic, a study on curvature distribution in a liquid injection configuration is realised. This study allows to extend the drop size distribution concept in a spray and to improve available informations on ELSA model. Finally, an other study is performed on the development of a criterion, based on interface curvatures, which estimates the quality of a simulation.

Table des Matières

Page

1 Introduction 19

2 État de l'art 25

2.1 Rappel sur les écoulements diphasiques 25

2.2 Méthode pour la simulation des écoulements turbulents 26

2.3 Suivi d'interface 27

2.3.1 Interface diffuse 27
2.3.2 Approche lagrangienne 29
2.3.3 Méthode VOF 33
2.3.4 Méthode Level Set 35
2.3.5 Méthode Particle Level Set 39
2.3.6 Méthode CLSVOF 41

2.4 Simulation d'écoulements compressibles 43

2.4.1 Méthodes basées sur les solveurs de Riemann 43
2.4.2 Méthodes implicites 46

2.5 Simulations de changements de phase 50

3 Développement d'un algorithme compressible avec changement de phase 55

3.1 Introduction 55

3.2 Présentation du code de calcul 55

3.2.1 Équations de Navier-Stokes incompressibles 55
3.2.2 Méthode de projection 56
3.2.3 Suivi d'interface 58
3.2.4 Méthode Ghost Fluid 58
3.2.5 Maillage MAC cartésien 58
3.2.6 Discrétisation temporelle 59

3.3 Développement du formalisme compressible 60

3.3.1 Équations de Navier Stokes compressibles 60
3.3.2 Méthodes numériques 61

3.4 Résultats 75
3.4.1 Tube à choc diphasique . . . 75
3.4.2 Colonne d'eau oscillante . . . 77
3.4.3 Configuration Turbulente Homogène Isotrope avec changement de phase . . . 83
3.5 Implémentation de l'équation de l'énergie 87
3.5.1 Démonstration de l'équation de l'énergie . . . 88
3.5.2 Équation pour la fraction massique de vapeur . . . 93
3.5.3 Méthode numérique . . . 94
3.5.4 Résultats . . . 98
3.6 Conclusion 106

4 Vers une description complète de l'atomisation basée sur les courbures . . . 107
4.1 Introduction 107
4.2 Une définition étendue de la distribution de taille de gouttes 109
4.3 Équations fondamentales et méthodes numériques 113
4.3.1 Équations de Navier-Stokes et méthode de capture d'interface . . . 113
4.3.2 Estimation des courbures principales . . . 113
4.4 Définitions des espaces de représentation des courbures principales 115
4.5 Résultats 122
4.5.1 Instabilité de Rayleigh-Plateau . . . 123
4.5.2 Collision de gouttes . . . 131
4.5.3 Configuration Turbulente Homogène Isotrope . . . 134
4.6 Conclusion 148

5 Critère de Qualité de Résolution de l'Interface . . . 151
5.1 Introduction 151
5.2 Équations fondamentales et méthodes numériques 155
5.2.1 Équations de Navier-Stokes et méthode de capture d'interface . . . 155
5.2.2 Configuration numérique . . . 155
5.3 Niveau de résolution de l'interface dans les écoulements diphasiques turbulents 157
5.3.1 Échelles de l'interface pouvant être résolues . . . 157
5.3.2 Résolution d'interface pour préserver la masse et la quantité de surface . . . 158
5.3.3 Impact sur la distribution du spray et la courbure . . . 159
5.4 Qualité de Résolution de l'Interface : IRQ local 161
5.4.1 Définitions précédentes de l'IRQ . . . 161
5.4.2 IRQ_κ basé sur la courbure . . . 162
5.4.3 PDF de l'IRQ et analyse globale . . . 164

5.5 Application à l'injection d'un jet liquide 166
5.6 Conclusion 172

6 Conclusion et perspectives 175

Liste des tableaux

Table		Page
3.1	Conditions initiales pour le cas de la colonne d'eau oscillante. Les indices L et R correspondent respectivement à gauche ("Left") et droite ("Right").	79
3.2	Erreur relative (%) pour un CFL=0.1, N_x est le nombre de mailles.	82
4.1	Propriétés physiques de l'instabilité de Rayleigh-Plateau	123
4.2	Propriétés physiques du cas collision de gouttes.	132
4.3	Propriétés physiques du cas THI (unités S.I.).	135
5.1	Paramètres physiques du cas ECN Spray A original avec $We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$.	167
5.2	Paramètres physiques du cas ECN Spray A avec $We \simeq 10$ et $Re \simeq 5795$.	170
5.3	Paramètres physiques du cas ECN Spray A idéal avec $We \simeq 2.5$ et $Re \simeq 5795$.	171

Liste des figures

Figure **Page**

1.1 Combustion du carburant après injection et atomisation [1]. 19
1.2 Schématisation du processus d'atomisation. 20
1.3 Représentation du phénomène de ballottement [5]. 21
1.4 Représentation du phénomène de cavitation sur une hélice [6]. 22

2.1 Représentation schématique d'une interface entre un milieu liquide et un milieu gazeux. 25
2.2 Représentation schématique d'une interface diffuse à gauche et d'une interface discontinue à droite [9]. 28
2.3 Exemple de simulation utilisant la méthode SPH en astrophysique [27]. 29
2.4 Représentation du noyau de la méthode SPH attribuant à chaque particule une certaine influence sur la particule cible [28]. 30
2.5 Exemple d'approche lagrangienne avec des marqueurs répartis en surface [48]. 32
2.6 Exemple de valeurs de la fraction volumique de liquide dans le cas d'une méthode VOF [51]. 33
2.7 Reconstruction de l'interface par une méthode SLIC (gauche) [70] et par une méthode PLIC (droite) [71]. 36
2.8 Lignes de contour représentatives de la méthode Level Set. La ligne bleue correspond à la ligne de niveau 0, soit l'interface [74]. 37
2.9 Représentation de particules de part et d'autre de l'interface avec la méthode Particle Level Set. La ligne bleue correspond à la ligne de niveau 0, soit l'interface [86]. 39
2.10 Représentation d'une onde de choc, d'une onde de raréfaction et d'une surface de contact sur un diagramme spatio-temporel pour un cas tube à choc [108]. 44
2.11 Représentation de la transition en "marche d'escalier" [122]. 48

3.1 Localisation des différentes variables sur un maillage de type MAC en 2D. 59
3.2 Schéma explicatif pour le calcul du flux ρv en $\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}\right)$. Cas avec $v > 0$ à gauche et $v < 0$ à droite. Le rectangle en trait noir plein correspond au flux total. Le rectangle en trait pointillé noir correspond au flux calculé sur une demi-cellule. Le rectangle en trait pointillé rouge correspond au flux déduit sur l'autre demi-cellule. 65
3.3 Schéma explicatif pour le calcul du flux ρu au niveau de la croix. 67

3.4 Localisation des différentes variables sur un maillage MAC pour le calcul de $\vec{\nabla} \cdot \bar{\bar{\tau}}$. 69
3.5 Localisation des différentes variables sur un maillage MAC pour le calcul du terme en $\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}\right)$. 70
3.6 Schéma explicatif pour le calcul des nouveaux coefficients de la matrice dans le cas d'une méthode multigrille. Les huit mailles représentées ici correspondent à une seule maille de la grille plus grossière. 73
3.7 Pas d'Euler de l'algorithme compressible. 76
3.8 Profils de vitesse (gauche) et de masse volumique (droite) à $t = 8 \times 10^{-4}$ s. La ligne continue représente la théorie et les cercles représentent le résultat de la simulation pour un maillage avec 256 mailles et $dt = 8 \times 10^{-6}$ s. La ligne pointillée représente la localisation de l'interface liquide/gaz. 77
3.9 Profil de pression à $t = 8 \times 10^{-4}$ s. La ligne continue représente le résultat de la simulation pour un maillage avec 256 mailles et $dt = 8 \times 10^{-6}$ s. La ligne pointillée représente la localisation de l'interface liquide/gaz. 77
3.10 Cas test de la colonne d'eau oscillante. 79
3.11 Évolution de la vitesse en fonction du temps pour différents maillages, CFL=0.1 .--- 32 mailles,−-− 64 mailles, −−− 128 mailles, ··· 256 mailles, - - - 512 mailles. La ligne continue représente la solution de référence. 80
3.12 Erreur relative sur la masse de liquide en fonction du temps pour différents maillages, CFL=0.1.--- 32 mailles,−-− 64 mailles, −−− 128 mailles, ··· 256 mailles, - - - 512 mailles 81
3.13 Erreur relative sur la masse d'air en fonction du temps pour 512 mailles et un CFL=0.1. 81
3.14 Évolution de la vitesse en fonction du temps pour 512 mailles.--- CFL=0.01, ··· CFL=0.1. La ligne continue représente la solution de référence. 82
3.15 Erreur relative sur la masse de liquide (droite) et de gaz (gauche) en fonction du temps pour 512 mailles. La ligne pointillée représente un CFL=0.1 et la ligne continue représente un CFL=0.01. 82
3.16 Évolution de la vitesse en fonction du temps pour différentes méthodes avec 256 mailles et CFL=0.01. ·····, Level Set; − − , CLSVOF; ——, solution de référence. A droite, zoom de la figure de gauche. 83
3.17 Représentation de la surface pour la configuration THI avec $\phi = 10\%$. . 86
3.18 Évolution de la masse volumique moyenne de gaz en fonction du temps. ○ : résultats avec évaporation, × : résultats sans évaporation. Ligne continue : solution de référence avec évaporation. 86
3.19 Évolution de la masse de liquide m_l et de la masse de gaz m_g divisées par la masse totale m_{tot} en fonction du temps. Ligne pointillée (axe de gauche) : $m_l(t)$, ligne continue (axe de droite) : $m_g(t)$. 87
3.20 Schéma représentant une discrétisation dans un formalisme monodimensionnel. θ représente la pondération du point i par la distance à l'interface Γ [143]. 95

3.21 Pas d'Euler de l'algorithme compressible avec résolution de l'évaporation. 99
3.22 Cas de validation pour la diffusion de la température. 100
3.23 Solution attendue pour le cas de validation pour la diffusion de la température. 100
3.24 Profil de température pour le cas de diffusion de température avec 64 mailles. 101
3.25 Configuration de la poche d'air froid convectée en 2D. 102
3.26 Champ de température (en K) pour le cas de la poche d'air froid convectée à différents instants. À gauche, le champ à $t = 1.2\times10^{-7}$ s ; au centre, le champ à $t = 1.0 \times 10^{-5}$ s et à droite, le champ à $t = 3.9 \times 10^{-5}$ s. 102
3.27 Champ de température (en K) pour le cas de la goutte qui s'évapore. Le cercle noir correspond au contour $\phi = 0$ de la fonction distance à l'interface au temps initial. Le cercle blanc correspond à ce même contour au temps final $t = 8.9 \times 10^{-7}$ s. 104
3.28 Champ de vitesse (en $m{\cdot}s^{-1}$ à gauche) et de pression (en Pa à droite) pour le cas de la goutte qui s'évapore. Le cercle noir correspond au contour $\phi = 0$ de la fonction distance à l'interface au temps initial. Le cercle blanc correspond à ce même contour aux temps $t = 2.2\times10^{-7}$ s (gauche) et $t = 8.9 \times 10^{-7}$ s (droite). 105
3.29 À gauche : évolution du pourcentage de perte de masse totale en fonction du temps. À droite : évolution de la masse de liquide (ligne continue) et de la masse de gaz (ligne pointillée) adimensionnées par la masse totale initiale en fonction de temps. 105

4.1 Représentation des plans principaux perpendiculaires sur lesquels sont calculées les courbures principales [187]. 110
4.2 Différentes topologies avec des courbures de Gauss différentes. Une hyperboloïde avec $G < 0$ à gauche, un cylindre avec $G = 0$ au milieu et une sphère avec $G > 0$ à droite [187]. 111
4.3 Lien entre la DSD et la SCD pour une distribution connue de gouttes sphériques. 112
4.4 Mean Gauss Diagram 116
4.5 Method Comparison 124
4.6 Rayleigh Plateau instability 124
4.7 Domaine de calcul pour l'instabilité de Rayleigh-Plateau avec R, le rayon du cylindre initial ; R_{dom}, la taille du domaine dans les directions y et z ; L, la longueur du domaine dans la direction x ; r, la distance par rapport à l'arête du domaine et ϕ, la fonction distance à l'interface 125
4.8 Mean Gauss Diagram 127
4.9 k1k2 Diagram 128
4.10 Gauss Cumulative 128
4.11 Total Cumulative 129
4.12 Level Set 129
4.13 Level Set 130

4.14 Évolution de la surface pour le cas d'une collision de gouttes à $t_a = 0.0\ s$ (en haut à gauche) ; $t_b = 7.4632 \times 10^{-5}\ s$ (en haut à droite) ; $t_c = 1.5264 \times 10^{-4}\ s$ (en bas à gauche) ; $t_d = 4.3608 \times 10^{-4} s$ (en bas à droite) . . . 132
4.15 Mean Gauss Diagram . . . 133
4.16 Régions considérées pour l'extraction de la distribution des courbures tout au long du processus d'atomisation. . . . 135
4.17 Visualisation de l'interface liquide/gaz pour le cas THI avec $\alpha_l = 1\%$, avec les évolutions temporelles de $\bar{\Sigma}$ and $\bar{H}$. Les lignes continues représentent les signaux instantanés des valeurs moyennes de H et $\bar{\Sigma}$. Les lignes pointillées représentent les valeurs moyennes moyennées en temps de H et $\bar{\Sigma}$. . . . 137
4.18 PDF moyennée en temps de la courbure moyenne pour $\alpha_l = 1\%$. . . . 138
4.19 Extraction de la NDD et de la VDD à partir de PDF(H). Lignes continues : résultats DNS, lignes pointillées : représentation de la taille de maille dx, ∘ : proposition d'une distribution log-normale. . . . 139
4.20 Double PDF des courbures de surface pour $\alpha_l = 1\%$. Haut : double PDF(H,G), bas : double PDF($\kappa_1 - \kappa_2$,$\kappa_1 + \kappa_2$). . . . 141
4.21 Haut : Visualisation de l'interface liquide/gaz pour $\alpha_l = 5\%$. Bas : PDF de H moyennée en temps. . . . 142
4.22 Double PDF des courbures de surface pour $\alpha_l = 5\%$. Haut : double PDF(H, G), bas : double PDF($\kappa_1 - \kappa_2$, $\kappa_1 + \kappa_2$). . . . 144
4.23 Visualisation de l'interface liquide/gaz pour $\alpha_l = 10\%$ (haut), $\alpha_l = 50\%$ (centre) et $\alpha_l = 90\%$ (bas). . . . 145
4.24 PDF moyennée en temps de H. Haut : $\alpha_l = 10\%$, centre : $\alpha_l = 50\%$, bas : $\alpha_l = 90\%$. . . . 146
4.25 Double PDF moyennée en temps de (H, G) (gauche) et de ($\kappa_1 - \kappa_2$, $\kappa_1 + \kappa_2$) (droite) pour $\alpha_l = 10\%$ (haut), $\alpha_l = 50\%$ (centre) et $\alpha_l = 90\%$ (bas). . . . 147

5.1 Représentation de la surface pour une configuration THI avec $\phi = 5\%$ (haut) et $\phi = 10\%$ (bas) pour un maillage $32 \times 32 \times 32$ (gauche) et $256 \times 256 \times 256$ (droite). . . . 156
5.2 Erreur relative de la masse en fonction du temps (gauche) pour une configuration THI avec $\phi = 10\%$ pour différents maillages. ·····, $32 \times 32 \times 32$; - - - , $64 \times 64 \times 64$; − − , $128 \times 128 \times 128$; —·—, $192 \times 192 \times 192$; ——, $256 \times 256 \times 256$. L'ordre de convergence est montré à droite (ordre 1 en ligne continue et ordre 2 en ligne traitillée). 158
5.3 Convergence en maillage de la densité de surface moyenne Σ pour une configuration THI avec $\phi = 5\%$ (croix) et $\phi = 10\%$ (cercle). . . . 159
5.4 Cumulative moyennée en temps de $1/|\kappa_1 + \kappa_2|$ pour une configuration THI avec $\phi = 10\%$ pour différents maillages. ·····, $32 \times 32 \times 32$; - - - , $64 \times 64 \times 64$; − − , $128 \times 128 \times 128$; ——, $256 \times 256 \times 256$. . 160
5.5 PDF moyennée en temps de $1/|\kappa_1 + \kappa_2|$ pour une configuration THI avec $\phi = 10\%$ pour différents maillages. ·····, $32 \times 32 \times 32$; - - - , $64 \times 64 \times 64$; − − , $128 \times 128 \times 128$; ——, $256 \times 256 \times 256$. . . . 161

5.6 Représentation de la surface pour une configuration THI avec $\phi = 5\%$ pour $IRQ = \frac{1}{\Delta x|\kappa_1+\kappa_2|}$ (gauche) et $IRQ = \frac{1}{2\Delta x\ max(|\kappa_1|,|\kappa_2|)}$ (droite). Les surfaces en noir ont un IRQ inférieur à 2. 163
5.7 Exemples de valeurs d'IRQ pour une sphère (plan de coupe 2D) pour différents maillages. 164
5.8 Représentation de la surface pour une configuration THI avec $\phi = 5\%$ (haut) et $\phi = 10\%$ (bas) pour un maillage $32 \times 32 \times 32$ (gauche) et $256 \times 256 \times 256$ (droite). Les surfaces en noir ont un IRQ inférieur à 2. 165
5.9 Cumulative moyennée en temps de l'IRQ pour une configuration THI avec $\phi = 5\%$ (gauche) et $\phi = 10\%$ (droite) pour différents maillages. ·····, $32 \times 32 \times 32$; - - -, $64 \times 64 \times 64$; – –, $128 \times 128 \times 128$; ——, $256 \times 256 \times 256$. La zone hachurée correspond à un IRQ inférieur à 2. 166
5.10 PDF moyennée en temps de l'IRQ pour une configuration THI avec $\phi = 5\%$ (gauche) et $\phi = 10\%$ (droite) pour différents maillages. ·····, $32 \times 32 \times 32$; - - -, $64 \times 64 \times 64$; – –, $128 \times 128 \times 128$; ——, $256 \times 256 \times 256$. La zone hachurée correspond à un IRQ inférieur à 2. 166
5.11 Représentation de la surface du cas Spray A à $t = 1.6 \times 10^{-5}\ s$. Les surfaces en noir ont un IRQ inférieur à 2. Gauche : cas Spray A original ($We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$) ; centre : bas Weber et bas Reynolds ($We \simeq 10$ et $Re \simeq 5795$) ; droite : cas le mieux résolu ($We \simeq 2.5$ et $Re \simeq 5795$). 168
5.12 Évolution temporelle du pourcentage de surface avec un IRQ inférieur à 1 (gauche) et inférieur à 2 (droite) pour le cas Spray A original ($We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$). 169
5.13 PDF de l'IRQ moyennée en temps pour le cas Spray A original ($We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$) (en haut à gauche), le bas Weber et bas Reynolds ($We \simeq 10$ et $Re \simeq 5795$) (en haut à droite) et le cas le mieux résolu ($We \simeq 2.5$ et $Re \simeq 5795$) (bas). La partie hachurée correspond à la zone sous-résolue ($IRQ < 2$). 169
5.14 Évolution temporelle du pourcentage de surface avec un IRQ inférieur à 1 (gauche) et inférieur à 2 (droite) pour le cas Spray A avec un bas Weber et un bas Reynolds ($We \simeq 10$ et $Re \simeq 5795$). 171
5.15 Évolution temporelle du pourcentage de surface avec un IRQ inférieur à 1 (gauche) et inférieur à 2 (droite) pour le cas Spray A le mieux résolu ($We \simeq 2.5$ et $Re \simeq 5795$). 172
5.16 Projected Mass Density (PMD en $\mu g \cdot mm^{-2}$) moyennée en temps pour le cas Spray A original ($We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$). En haut : résultats expérimentaux ; en bas : résultats DNS. Les résultats sont présentés entre 1.1 D_{inj} et 19.9 D_{inj}. 173
5.17 Profils radiaux de la fraction volumique de liquide moyenne à 1.1 D_{inj} (gauche) et 19 D_{inj} (droite) pour le cas Spray A original ($We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$). ——, résultats DNS; ·····, résultats expérimentaux. . 173

Chap. 1 | Introduction

Généralités

L'étude des écoulements diphasiques intervient dans de nombreux domaines. Un de ces domaines concerne l'injection de carburant dans les moteurs qui est un des sujets étudiés au COmplexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie (CORIA), laboratoire dans lequel s'est effectuée cette thèse.

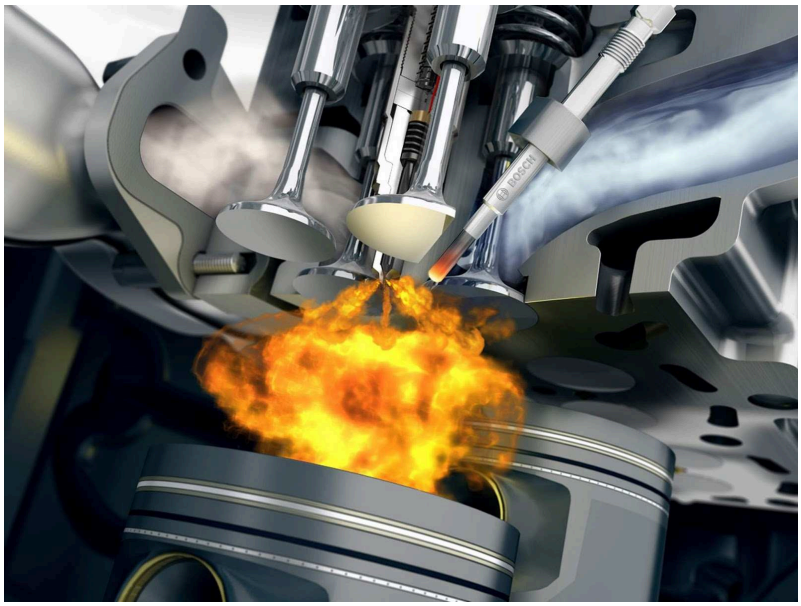


Figure 1.1 – Combustion du carburant après injection et atomisation [1].

Afin de produire l'énergie nécessaire au fonctionnement du véhicule, l'air et le carburant sont injectés dans la chambre de combustion où ce dernier va s'évaporer. La combustion de ce mélange air/carburant a ensuite lieu et l'énergie produite lors de cette combustion est transformée en énergie mécanique faisant avancer le véhicule (Figure 1.1).

Entre le moment de l'injection et celui de l'évaporation, le jet de carburant subit plusieurs modifications de structure : il s'agit du processus d'atomisation (Figure 1.2). Tout d'abord, le jet liquide en sortie d'injecteur est sujet à une atomisation primaire. Trois mécanismes entrent alors en jeu liés aux forces aérodynamiques, à la tension de surface et à la viscosité. La tension de surface tend à minimiser l'interface entre le liquide et le gaz et donc réduit les instabilités, apparaissant au niveau de l'interface, dues au cisaillement qui, au contraire, étire l'interface. La viscosité, elle, dissipe l'énergie cinétique et empêche donc les structures de se former. Les forces aérodynamiques, quant à elles, sont déstabilisatrices et sont proportionnelles au carré de la différence de vitesse entre le jet liquide et l'écoulement gazeux. Dans les systèmes d'injection classiques, ces forces sont prépondérantes et l'énergie engendrée en surface est alors suffisante pour empêcher l'effet stabilisateur de la tension de surface. Les instabilités de surface sont donc amplifiées jusqu'au détachement du jet initial de structures ligamentaires. Ces instabilités ont beaucoup été étudiées [2, 3, 4]. Ensuite, l'atomisation se poursuit avec une atomisation secondaire. Les structures détachées du jet initial subissent à leur tour les effets de l'écoulement gazeux et se divisent en gouttes de plus en plus petites. Les gouttes se divisent ainsi jusqu'à ce que les forces de tension de surface deviennent importantes comparées aux forces aérodynamiques ou que l'énergie cinétique liée au cisaillement soit dissipée. Les petites gouttes restantes sont transportées par l'écoulement formant une phase dispersée. La forte quantité d'interface créée lors du processus d'atomisation permet, pour le cas de l'injection de carburant, une évaporation plus rapide du liquide nécessaire à la combustion.

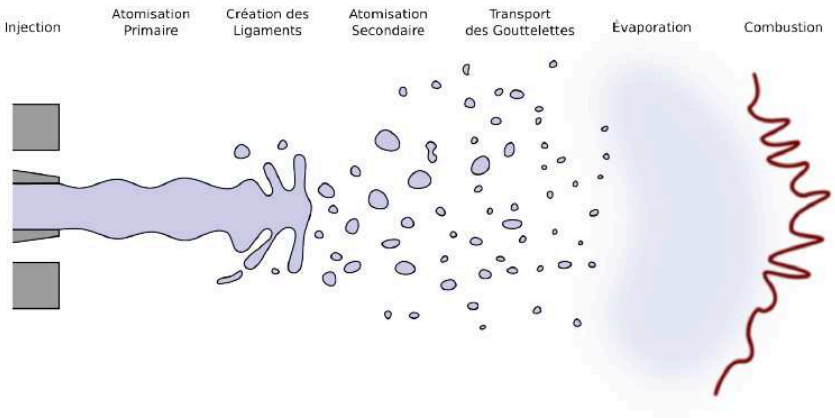


Figure 1.2 – Schématisation du processus d'atomisation.

C'est dans ce contexte que s'inscrit cette thèse, et plus particulièrement le deuxième chapitre dans lequel la réalisation d'un code de calcul pour simuler des écoulements diphasiques compressibles avec changement de phase est effectuée, à partir du code ARCHER développé au CORIA depuis plusieurs années. Même si des codes incompressibles existent déjà pour simuler ce genre de phénomène, la prise en compte de la compressibilité est nécessaire dans certains cas. En effet, des modifications de la masse volumique peuvent apparaître dans des cas de dilatations thermiques (augmentation de la température), de mélanges de fluides avec des densités différentes, d'évaporation en milieu confiné où le volume de gaz augmente. La compressibilité est également nécessaire dans les écoulements possédant un fort nombre de Mach où des ondes acoustiques sont présentes bien que ces écoulements ne représentent pas le principal objectif de cette thèse. Concernant les jets liquides et plus particulièrement la sortie de l'injecteur, le liquide est fortement accéléré faisant chuter la pression et provoquant l'apparition de cavitation. Cette cavitation génère également une création de volume et une divergence non nulle de la vitesse.

Figure 1.3 – Représentation du phénomène de ballottement [5].

La prise en compte de la compressibilité n'est pas uniquement nécessaire pour les études d'injection de liquide dans les moteurs. Des effets non négligeables peuvent apparaître dans d'autres domaines d'application comme les hydroliennes, les vagues déferlantes, le phénomène de ballottement (Figure 1.3), les interactions vagues/structures... En effet, le phénomène de cavitation apparaît également lors du mouvement

des pales d'une hélice (Fig.1.4) et l'impact des bulles d'air entraînées par les vagues déferlantes ne peut pas être négligé.

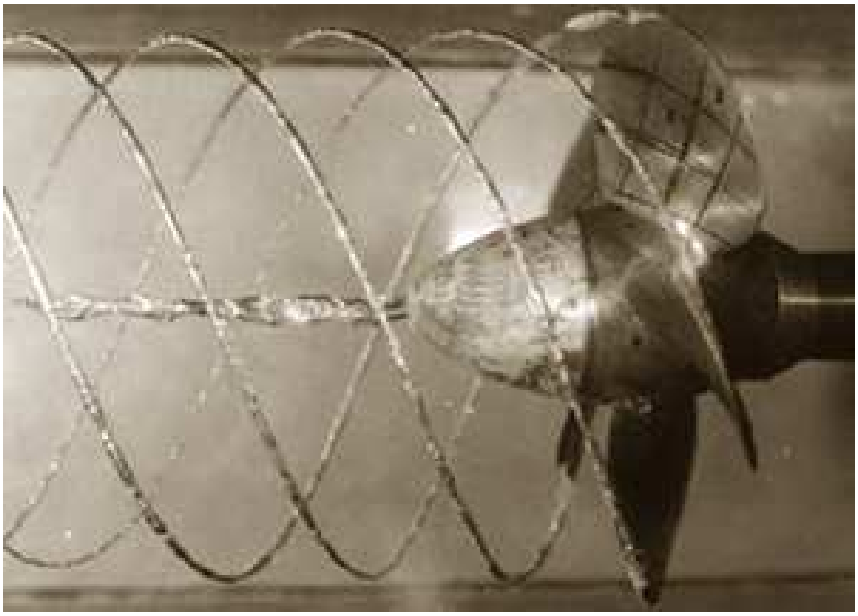


Figure 1.4 – Représentation du phénomène de cavitation sur une hélice [6].

Dans le contexte des impacts violents dans les écoulements diphasiques, comme par exemple dans l'impact des jets liquides ou dans les vagues déferlantes, il est bien connu que la présence de bulles ou l'entraînement d'air à côté d'une structure ont des conséquences importantes à la fois sur l'écoulement, les structures mais aussi sur le milieu environnant à travers la propagation du son [7]. Dans le réseau du développement des énergies marines, il a été montré que les violentes expansions/compressions du gaz en raison de la propagation d'ondes acoustiques, qui peuvent également se développer en ondes de choc dans le pire des cas, ont un fort impact sur la vague incidente. De plus, la force des vagues déferlantes entraîne de très hautes charges hydrodynamiques sur les infrastructures sous marines, en particulier dans le cas de vagues plongeantes. Par exemple, une estimation de la force d'impact (énergie et pression) est importante dans la conception des éoliennes offshore.

Toutes ces conséquences montrent l'importance de prendre en compte les effets de la compressibilité.

Plan de la thèse

Cette thèse se compose de quatre principaux chapitres et présente une partie centrée sur le développement d'un code de calcul de type DNS avec suivi d'interface et introduction des effets de compressibilité vers une prise en compte complète de la vaporisation. Puis, d'autres parties, où l'on exploite le code de calcul pour améliorer la compréhension des écoulements liquide/gaz, sont exposées.

La chapitre 2 présente une étude bibliographique. Après un bref rappel sur les différentes méthodes de simulations numériques existantes, une présentation de l'état de l'art sur les approches numériques pour le suivi d'interface est réalisé. Puis, une revue des codes de calcul utilisés pour la simulation d'écoulements compressibles est présentée ainsi que ceux employés dans les calculs de changement de phase.

Le chapitre 3 concerne le développement d'un code de calcul simulant les écoulements diphasiques compressibles avec changement de phase. Les différentes modifications du code ARCHER pour le passage dans un formalisme compressible sont présentées, que ce soit au niveau du suivi d'interface ou au niveau de la résolution des différents termes des équations de Navier-Stokes. Puis, l'implémentation de l'équation de l'énergie et de l'évaporation est traitée.

Les chapitres 4 et 5 concernent directement l'étude d'écoulements liquide/gaz à l'aide du code de calcul développé permettant d'apporter de nouvelles informations sur la physique de l'interface. Le code ARCHER incompressible est ici employé pour les différentes simulations. Le chapitre 4 présente une définition étendue de la distribution de tailles de gouttes basée sur les courbures locales de l'interface liquide/gaz ; permettant une description continue tout au long du processus d'atomisation. Les résultats sur une instabilité de Rayleigh-Plateau ainsi que sur différentes configurations Turbulentes Homogènes et Isotropes (THI) représentatives des processus d'atomisation sont présentés.

Le chapitre 5 introduit une proposition visant à évaluer le niveau de résolution d'un calcul impliquant une interface complexe. La définition d'un critère sur la qualité de résolution est proposée et discutée. Les résultats sur des configurations THI et des injections de carburant sont analysés.
Enfin, une conclusion et différentes perspectives à ce travail sont abordées.

Chap. 2 | État de l'art

Dans ce chapitre, nous présenterons, tout d'abord, un rappel sur les notions rencontrées lors d'écoulements diphasiques, puis les différentes méthodes pour simuler les écoulements turbulents. Ensuite, les méthodes utilisées pour le suivi d'interface lors de simulation d'écoulements diphasiques seront étudiées. Une liste des différents solveurs existants pour simuler les écoulements compressibles ainsi que les changements de phase suivra. Enfin, une présentation de la stratégie retenue pour le développement de notre code de calcul sera effectuée.

2.1 Rappel sur les écoulements diphasiques

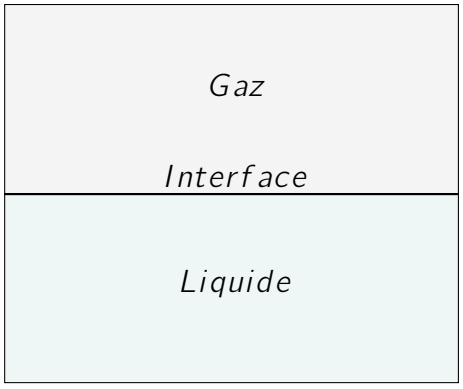


Figure 2.1 – Représentation schématique d'une interface entre un milieu liquide et un milieu gazeux.

Pour situer le contexte de ce travail, quelques notions fondamentales sont évoquées avec, tout d'abord, l'écoulement diphasique qui est un écoulement constitué de deux phases différentes qui peuvent être solides, liquides ou gazeuses. Dans cette thèse, il s'agira uniquement de phases liquides et gazeuses. Ces deux phases sont en interaction et sont séparées par une interface (Figure 2.1) qui a une épaisseur nulle. Certaines méthodes de suivi d'interface tentent de conserver cette épaisseur nulle,

cependant d'autres méthodes la considère comme une zone de mélange d'une certaine épaisseur entre les deux phases. Ces phases liquides et gazeuses sont compressibles par nature. Néanmoins, dans le cas où le nombre de Mach (rapport entre la vitesse du fluide et la vitesse du son dans ce même fluide) est faible, elles peuvent être considérées comme incompressibles. Ainsi, leur masse volumique reste constante. Dans notre cas, la prise en compte de la compressibilité est nécessaire. Pour cela des équations d'état pour la masse volumique peuvent être utilisées à l'instar de l'équation des gaz parfaits pour la phase gazeuse et l'équation de Tait pour la phase liquide. Lorsque l'on traite l'écoulement dans son ensemble, une attention particulière doit être portée au niveau de l'interface. En effet, les différentes grandeurs étudiées comme la masse volumique ou la pression ne sont pas continues à travers l'interface. Ainsi, des conditions de saut doivent être utilisées au niveau de cette interface quand on résout des écoulements diphasiques.

2.2 Méthode pour la simulation des écoulements turbulents

Quand il s'agit de simulations numériques, principalement trois approches pour représenter la turbulence existent : DNS, LES et RANS. Les simulations de type RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes), comme leur nom l'indique, résolvent les équations de Navier-Stokes de manière moyennée. Les différents champs apparaissant dans ces équations sont décomposés en un champ moyen et un champ fluctuant. Ces simulations permettent de résoudre un domaine relativement grand car seul l'écoulement moyen est représenté. Ensuite, l'approche LES (Large Eddy Simulation) consiste à appliquer un filtre spatial aux équations de Navier-Stokes ; c'est-à-dire que seules les plus grandes structures de la turbulence sont simulées. Les structures sous résolues sont prises en compte à l'aide de modèles de sous-maille. Par exemple, les tensions de Reynolds de sous-maille sont souvent représentées sous la forme d'un terme de frottement visqueux supplémentaire pour lequel le modèle calcule une viscosité turbulente. Ces deux types de simulations, et plus particulièrement RANS, sont ceux utilisés à l'échelle industrielle en raison de leur coût en temps de calcul qui reste raisonnable et de leur capacité à résoudre de grands domaines. Le dernier type de simulation est la DNS (Direct Numerical Simulation) qui vise à représenter toutes les échelles de la turbulence, de l'échelle de Kolmogorov jusqu'à l'échelle intégrale. C'est la méthode la plus directe car elle ne nécessite pas de modèle supplémentaire. Mais pour être précise, elle nécessite un maillage très affiné et donc conséquemment,

c'est la méthode la plus coûteuse en temps de calcul. Ainsi, seul un petit domaine de l'espace physique peut être simulé. Cependant, en raison de sa plus grande précision, elle peut être utilisée comme référence pour les autres types de simulations.

Cette thèse étant axée sur la simulation numérique directe d'écoulements compressibles diphasiques, on se focalisera, par la suite, sur les différentes méthodes de suivi d'interface d'une part et sur les codes existants simulant les écoulements compressibles d'autre part.

2.3 Suivi d'interface

Diverses méthodes peuvent être utilisées pour le suivi d'interface. Elles sont la plupart du temps employées dans des solveurs incompressibles et ne sont pas encore largement utilisées dans les solveurs compressibles. Elles peuvent être classées en deux catégories : les méthodes eulériennes et les méthodes lagrangiennes. Une autre catégorie élargit le concept d'interface ; il s'agit des méthodes à interface diffuse.

2.3.1 Interface diffuse

La méthode d'interface diffuse [8] permet de s'affranchir de la reconstruction de l'interface puisque celle-ci n'existe plus au sens propre du terme. En effet, la méthode d'interface diffuse est basée sur le modèle de champ de phase. Par exemple, dans le cas d'un écoulement diphasique avec une phase liquide et une phase gazeuse, ce champ tend vers 0 dans la partie gazeuse et vers 1 dans la partie liquide. Au niveau de l'interface, ce champ varie continûment entre 0 et 1 créant ainsi une zone de mélange où la séparation entre les deux phases n'est pas clairement apparente (Figure 2.2). Ainsi, l'interface est épaissie suivant un profil qui peut soit être imposé ou qui correspond à une zone de diffusion numérique.

Différents modèles existent pour traiter cette zone de mélange. Abgrall [10] et Karni [11] proposent un modèle à quatre équations combinant les équations de conservations de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie avec une équation de transport pour la variable $\xi = \frac{1}{\gamma - 1}$. Cependant, ce modèle étant limité aux gaz parfaits, Saurel et Abgrall [8], ainsi que Shyue [12], l'étendent en utilisant une équation d'état plus générale. Des modèles à cinq équations existent également [13, 14]. Allaire et al. [13] résolvent les équations de conservation de la quantité

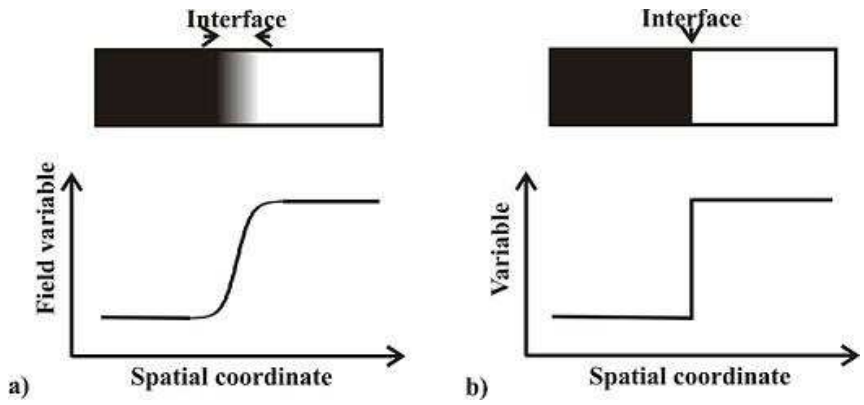


Figure 2.2 – Représentation schématique d'une interface diffuse à gauche et d'une interface discontinue à droite [9].

de mouvement et de l'énergie et pour la masse, une équation pour chaque phase est développée. De plus, une équation de transport de la fraction volumique est résolue et, pour clore le problème, des conditions isobares ou isothermes sont employées.

Ces méthodes possèdent une zone de mélange qui s'étend sur plusieurs mailles autour de l'interface. Cela permet d'obtenir une fonction continue qui peut être résolue de façon standard avec des schémas de type différence finie ou volume fini. Afin de contrôler l'échelle d'épaississement de l'interface, certains auteurs utilisent des interfaces diffuses où la zone de mélange est plus réduite [15, 16, 17]. Un profil tangente hyperbolique est utilisé pour représenter l'interface sur une maille tout en conservant les modèles de mélange. Afin de bien prendre en compte les conditions de saut au niveau de l'interface des équations de relaxation sont utilisées [18]. Bien que donnant de bons résultats dans certains cas, cette approche n'est pas celle retenue dans cette thèse. Plus de détails sur ces méthodes sont disponibles dans Saurel et Pantano [19].

Le calcul de la tension de surface nécessite un traitement particulier pour reproduire son effet sur une interface épaissie. Ainsi, elle peut être directement prise en compte dans un tenseur des contraintes modifié [20]. Les équations à résoudre pour l'écoulement sont écrites de telle sorte qu'elles soient valides à la fois dans les deux phases et dans la zone de mélange. Un paramètre est utilisé afin de déterminer l'épaisseur de la zone de mélange. Quand on le fait tendre vers 0, afin que l'interface retrouve sa propriété de discontinuité, les équations résolues habituellement sont retrouvées. Ce type d'interface est souvent utilisé dans des solveurs de Riemann, qui

seront vus plus en détail dans une prochaine sous partie, avec des méthodes de type Godunov [8], [21]. Il est employé, par exemple, dans la simulation d'interaction entre solides et fluides [22] ou de changements de phases [23, 24].

2.3.2 Approche lagrangienne

Concernant l'approche lagrangienne, elle repose sur l'utilisation de marqueurs qui sont suivis au cours du temps. Ces marqueurs peuvent être répartis en volume, comme dans la méthode SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) initialement introduite par Gingold et Monaghan [25] et Lucy [26] dans le cadre de l'astrophysique. Ils représentent ainsi un fluide dans sa totalité et l'interface correspond au contour dessiné par les marqueurs (Figure 2.3). Dans cette méthode SPH, chaque élément de fluide représenté par les marqueurs a une certaine influence sur les autres. Plus les marqueurs sont proches les uns des autres, plus ils sont influents et inversement. Ainsi, chaque marqueurs se voit attribué un noyau à support compact (au-delà d'une certaine distance, l'influence d'un marqueur est négligé), normalisé (la somme des influences de chaque marqueurs doit valoir 1) et à symétrie radiale (l'influence d'un marqueur ne dépend que de la distance et non de la direction)(Figure 2.4).

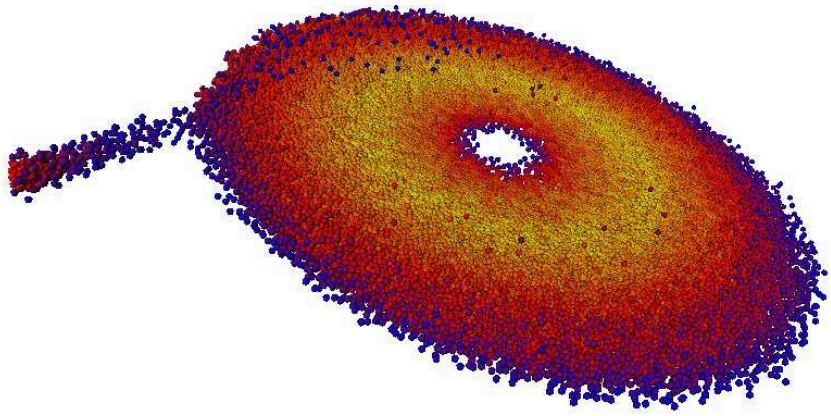


Figure 2.3 – Exemple de simulation utilisant la méthode SPH en astrophysique [27].

Dans les méthodes SPH originales, les conservations de la quantité de mouvement et du moment cinétique ne sont pas vérifiées. Afin de conserver exactement ces grandeurs, Gingold et Monaghan [29] utilisent un formalisme lagrangien avec un noyau approprié pour les particules. Dans le cas d'écoulements incompressibles possédant une surface libre, une autre difficulté apparaît ; il s'agit du traitement

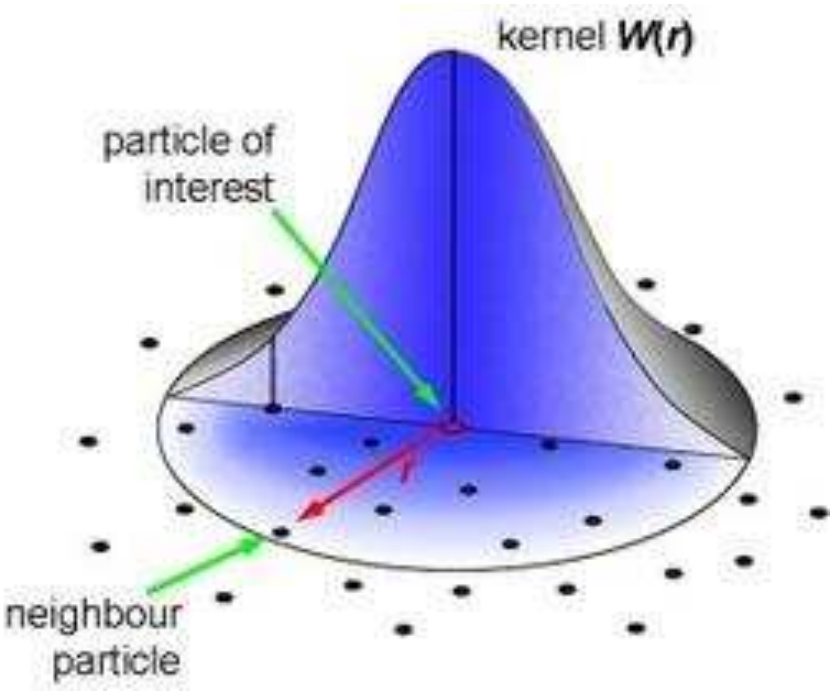


Figure 2.4 – Représentation du noyau de la méthode SPH attribuant à chaque particule une certaine influence sur la particule cible [28].

de la condition limite au niveau de cette surface libre qui est en mouvement. Monaghan [30] emploie des particules situées au niveau de l'interface qui repoussent les particules du fluide considéré à l'aide d'une force de la même forme que celle du potentiel de Lennard-Jones. De plus, dans le formalisme SPH, le traitement de l'incompressibilité n'est pas immédiat. Pour aborder le cas asymptotique des fluides complètement incompressibles, une première approche consiste à utiliser une méthode de projection adaptée au formalisme SPH [31] et à résoudre une équation de Poisson pour la pression en forçant la divergence de la vitesse à être nulle [32]. Même si ici l'incompressibilité est vérifiée, ce type de méthode peut conduire à des problèmes de conservation du volume [33]. De plus, la résolution de l'équation de Poisson sur une grille lagrangienne n'est pas évidente.

Ainsi, la plupart des méthodes SPH ont recours à un fluide faiblement compressible avec un nombre de Mach très faible. Monaghan [30] utilise une équation d'état qui rend le fluide légèrement plus compressible qu'il ne l'est en réalité. Cependant, même si cette compressibilité artificielle diminue la vitesse du son dans le fluide, celle-ci reste néanmoins très supérieure à la vitesse de l'écoulement moyen. La contrepartie est que le pas de temps chute, impliquant un coût de calcul plus important. Une étude analy-

tique a été réalisée par Violeau et Leroy [34] afin d'établir un critère de stabilité pour le pas de temps. Celui-ci dépend du noyau utilisé, de la vitesse du son et de la viscosité.

Nair et Tomar [35] ont couplé ces méthodes compressibles et incompressibles afin de simuler le comportement d'une bulle de gaz (compressible) dans du liquide (incompressible). Une autre méthode, basée sur le formalisme SPH faiblement compressible, est la méthode EDAC (Entropically Damped Artificial Compressibility) [36, 37]. Au lieu de résoudre une équation d'état pour la pression, elle résout une équation d'évolution basée sur la thermodynamique qui inclut un terme d'amortissement afin d'éviter les oscillations de pression observées dans la méthode faiblement compressible.

Concernant les conditions aux limites en SPH et notamment les parois, le problème vient qu'il n'existe pas de repère fixe où placer la paroi. Beaucoup d'articles traitent de ce sujet et différentes méthodes sont utilisées. La première est celle décrite précédemment qui emploie des particules qui repoussent le fluide [30]. Une autre est le recours à des particules "fantômes" qui sont situées dans un domaine fictif et qui sont exploitées par le noyau des particules du fluide de manière à simuler une paroi [38, 39]. Plus récemment, Chiron et al. [40] ont adapté l'opérateur laplacien à la géométrie utilisée et ont recours à un algorithme "cutface" pour pouvoir traiter les interactions fluide/paroi sur des géométrie 3D complexes.

Un problème récurrent dans les méthodes particulaires est la distribution des particules. En effet, dans certaines conditions, celles-ci peuvent se regrouper dans des endroits et créer un vide ailleurs. Une solution apportée par Adami et al. [41], et généralisée par Zhang et al. [42], est une formulation différente pour le transport de la vitesse. La vitesse est habituellement calculée à l'aide de la quantité de mouvement et la pression, à partir des fluctuations d'un champ constant. Cependant, le champ constant de pression à une influence sur le champ de vitesse provoquant la mauvaise répartition des particules. Ainsi, ils proposent d'ajouter un terme de contrainte supplémentaire dans l'équation de la quantité de mouvement qui a pour but de modifier la vitesse d'advection des particules sans changer la quantité de mouvement globale.

Les marqueurs peuvent également être répartis en surface [43] ; ils représentent ainsi directement l'interface et se déplacent suivant le champ de vitesse local (Figure

2.5). Une des premières utilisations de marqueurs en surface est celle de Unverdi et Tryggvason [44] pour la simulation d'écoulements visqueux incompressibles. Cette méthode est également utilisée par Tryggvason et al. [45] pour les écoulements multiphasiques ou encore par Juric et Tryggvason [46] et Tryggvason et Lu [47] pour les changements de phase. Elle consiste à résoudre un seul ensemble d'équations pour toutes les phases sur un maillage fixe à l'aide d'une méthode des volumes finis. L'interface est ensuite localisée par l'intermédiaire de marqueurs (des points en 2D et des surfaces en 3D) et de leurs connexions entre eux. La tension de surface, dans ce type de méthode, est résolue au niveau de l'interface et est ensuite transférée sur le maillage fixe afin d'être prise en compte dans la résolution des phases. Comme pour le cas des marqueurs répartis en volume, les conditions aux limites sont prises en compte à l'aide de marqueurs fictifs qui sont connectés aux marqueurs situés dans le domaine de simulation.

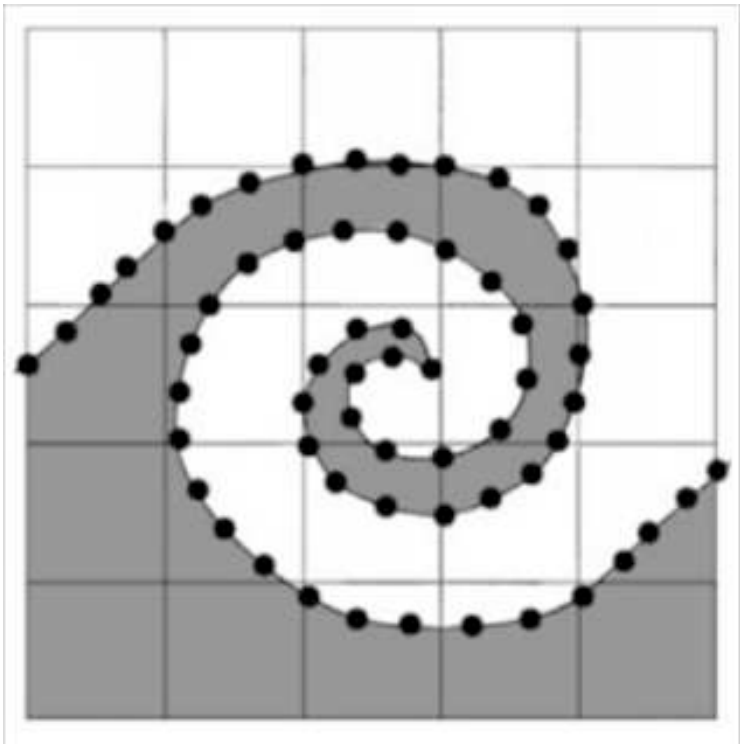


Figure 2.5 – Exemple d'approche lagrangienne avec des marqueurs répartis en surface [48].

Dans ces méthodes lagrangiennes, l'avantage est que l'interface peut être directement reconstruite à partir de la position des différents marqueurs. Cependant, ces derniers doivent être redistribuer à chaque pas de temps afin d'avoir une répar-

tition homogène dans le fluide ou au niveau de l'interface. De plus, les propriétés géométriques de l'interface, comme la normale ou la courbure, ne sont pas accessibles facilement [49] et des critères sont nécessaires afin de pouvoir prendre en compte les changements de topologie comme les ruptures ou les coalescences.

2.3.3 Méthode VOF

L'approche eulérienne, quant à elle, repose sur la résolution d'une équation de transport d'un scalaire sur maillage fixe. Deux méthodes principales existent : la méthode VOF (Volume Of Fluid) et la méthode Level Set. La méthode VOF [50] correspond au transport de la fraction volumique de liquide et à l'évaluation des flux volumique de liquide dus à la convection à partir de la position de l'interface. La fraction volumique de liquide est calculée dans chaque maille du domaine de calcul ; elle vaut 1 dans les mailles où il n'y a que du liquide et 0 dans celles qui contiennent seulement du gaz. L'interface se situe donc dans les mailles où la fraction volumique de liquide est comprise entre 0 et 1 (Figure 2.6).

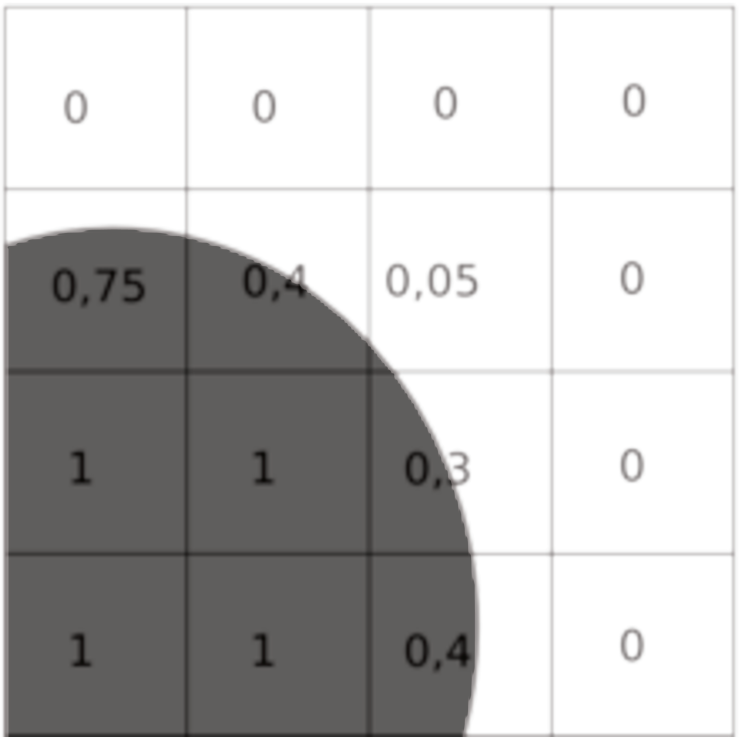


Figure 2.6 – Exemple de valeurs de la fraction volumique de liquide dans le cas d'une méthode VOF [51].

Il faut donc ensuite reconstruire l'interface à partir des valeurs obtenues. Diverses

approches ont été développées pour cela. La méthode SLIC (Simple Line Interface Calculation)(Figure 2.7(gauche)), initialement développée par Noh et Woodward [52], la reconstruit en utilisant des segments parallèles au maillage se localisant de telle manière que la valeur de la fraction volumique dans la maille soit respectée. Pour chaque maille, le segment est parallèle à une seule direction du maillage qui est choisie en fonction du sens de l'écoulement. Chorin [53] améliore la méthode en permettant, dans certains cas, l'alignement de l'interface avec plusieurs directions du maillage selon la valeur de la fraction volumique de liquide dans les mailles adjacentes. En d'autres termes, les segments représentants l'interface sont toujours parallèles au maillage mais, dans une même maille, l'interface peut être décrite par deux segments perpendiculaires (dans une configuration 2D). De plus, pour les besoins de l'auteur, des configurations du type "thin finger" sont possibles où deux interfaces parallèles sont présentes dans la même maille. Afin que le mouvement moyen de ce type de structure soit bien représenté, la méthode de Glimm [54] est utilisée. Des méthodes SLIC plus récentes [55] emploient des opérateurs multidimensionnels pour le calcul des coordonnées de la normale et du centre de masse dans le but de placer plus précisément l'interface dans la maille. Cependant, malgré ces différentes améliorations, le degré de précision de la méthode SLIC pour la reconstruction de l'interface reste assez peu élevé et, des structures non physiques de sous maille se détachant de la structure principale apparaissent régulièrement en raison des erreurs commises dans la reconstruction.

Une autre méthode est la PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation)(Figure 2.7(droite)) [56, 57], qui consiste, comme la SLIC, à représenter l'interface par un segment (un plan en 3D) placé de manière à conserver la fraction volumique de liquide. Cependant, ce segment est orienté de façon à respecter la normale à l'interface ce qui en fait une méthode plus précise que la SLIC. La méthode de Young [57] reconstruit l'interface dans chaque maille de façon à respecter la fraction volumique de liquide. Même si la précision est supérieure à celle de la SLIC, l'interface reste discontinue entre les différentes mailles. La méthode de DeBar [56], reprise ensuite par Ashgriz et Poo [58], reconstruit l'interface au niveau de la face des mailles permettant une meilleure continuité et convection de l'interface. Des améliorations de la PLIC ont été effectuées [59, 60] au niveau de l'advection de la faction volumique de liquide. Au lieu d'une partition de l'advection selon les différentes directions de l'espace, celle-ci est réalisée de manière non-fractionnée en avançant temporellement la fraction volumique

de liquide dans toutes les direction simultanément. Cela permet d'avoir une méthode d'ordre 2 à la fois spatialement et temporellement. Afin d'avoir une méthode d'ordre 2, notamment pour le calcul de la normale à l'interface, une méthode LVIRA (Least square Volume of fluid Interface Reconstruction Algorithm) a été développée [61, 62] qui, comme son nom l'indique, minimise l'erreur lors du calcul des coefficients du plan de l'interface par la méthode des moindres carrés.

Les méthodes VOF sont largement utilisées dans la littérature et diverses améliorations sont proposées comme pour le couplage avec la tension de surface [63, 64] ou bien seulement pour faciliter l'implémentation de la méthode en utilisant une équation tangente hyperbolique pour l'interface permettant de réduire les structures non physiques de sous maille [65]. Enfin, il existe également des méthodes de type Lagrangien augmenté [66, 67] qui utilisent une méthode VOF pour la résolution d'écoulements multiphasiques avec un formalisme "mono-fluide" pour les équations de Navier-Stokes. Ces méthodes sont de type prédicteur/correcteur avec l'utilisation du Lagrangien augmenté pour la partie prédiction et d'une méthode de projection pour la partie correction. L'emploi du Lagrangien augmenté permet de résoudre le couplage entre le vitesse et la pression dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement à l'aide d'un processus itératif. Cette méthode a également été adaptée afin de pouvoir prendre en compte la compressibilité [68].

Ainsi, ces méthodes VOF, de par leur nature, permettent une conservation de la fraction volumique de liquide (et donc de la masse de liquide) et gèrent implicitement les changements de topologie (rupture, coalescence). Bien qu'initialement, une meilleure précision était obtenue sur les caractéristiques de l'interface (normale et courbure) via une approche de type Level Set, de récents développements de la méthode VOF ont permis une amélioration du calcul de ces caractéristiques [69].

2.3.4 Méthode Level Set

La méthode Level Set [72, 73] repose sur la résolution d'une équation de transport Eq.2.1 pour la fonction distance à l'interface ϕ (Figure 2.8).

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{u}.\vec{\nabla}\phi = 0 \tag{2.1}$$

L'iso-surface $\phi = 0$ correspond donc à la position de l'interface. Par convention,

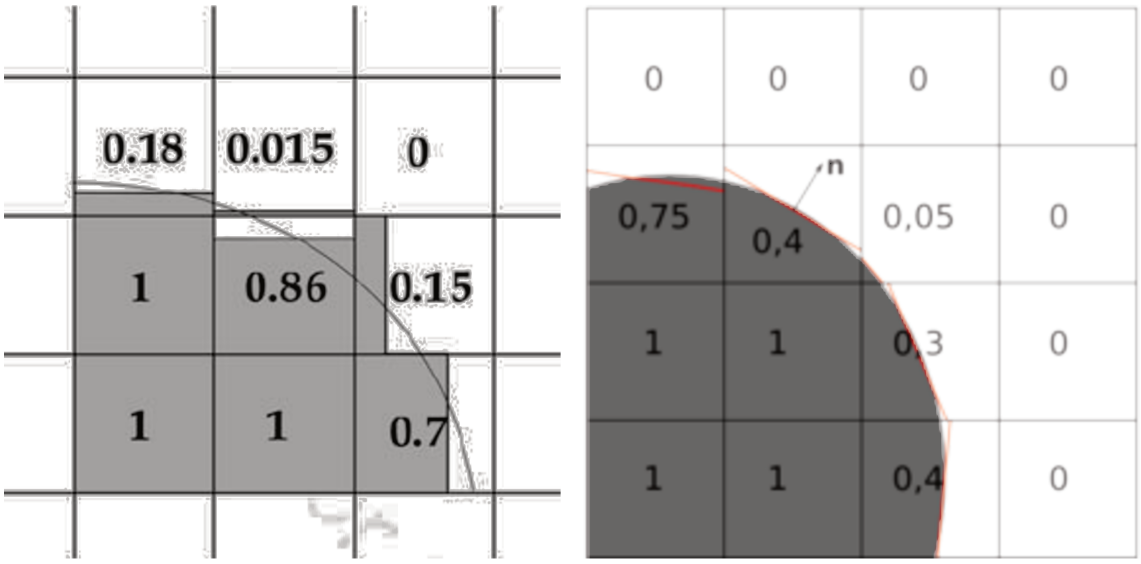


Figure 2.7 – Reconstruction de l'interface par une méthode SLIC (gauche) [70] et par une méthode PLIC (droite) [71].

les valeurs négatives de ϕ correspondent aux distances dans le gaz et les valeurs positives, aux distances dans le liquide. Cependant, lors du transport, la fonction ϕ peut perdre sa propriété de fonction distance. Il faut donc résoudre l'équation de redistanciation Eq.2.2 introduite par Sussman [73] qui repositionne les iso-surfaces à la bonne distance tout en conservant l'iso-surface $\phi = 0$. Cette approche très usitée consiste à résoudre l'équation suivante :

$$\frac{\partial d}{\partial \tau} = sign(\phi)(1 - |\vec{\nabla} d|) \tag{2.2}$$

avec $d = \phi$ au temps fictif $\tau = 0$ et $sign(\phi)$, le signe de la fonction distance lissée au niveau de l'interface. Eq.2.2 est résolue itérativement jusqu'à ce que la fonction distance soit retrouvée, c'est-à-dire $|\vec{\nabla}\phi| = 1$. Si l'on se trouve sur l'interface ($\phi = 0$ donc $sign(\phi) = 0$), la position de l'iso-surface de l'interface reste inchangée. La méthode Level Set permet de construire le champ distance à l'interface. Ce faisant, les caractéristiques 2D de l'interface sont dilatées au champ 3D ce qui permet une représentation très précise de l'interface et ainsi d'accéder aisément à la courbure κ et à la normale $\vec{n}$ à l'interface par :

$$\begin{cases} \vec{n} = \frac{\vec{\nabla}\phi}{|\vec{\nabla}\phi|} = \vec{\nabla}\phi \\ \kappa = -\vec{\nabla}.\vec{n} \end{cases} \tag{2.3}$$

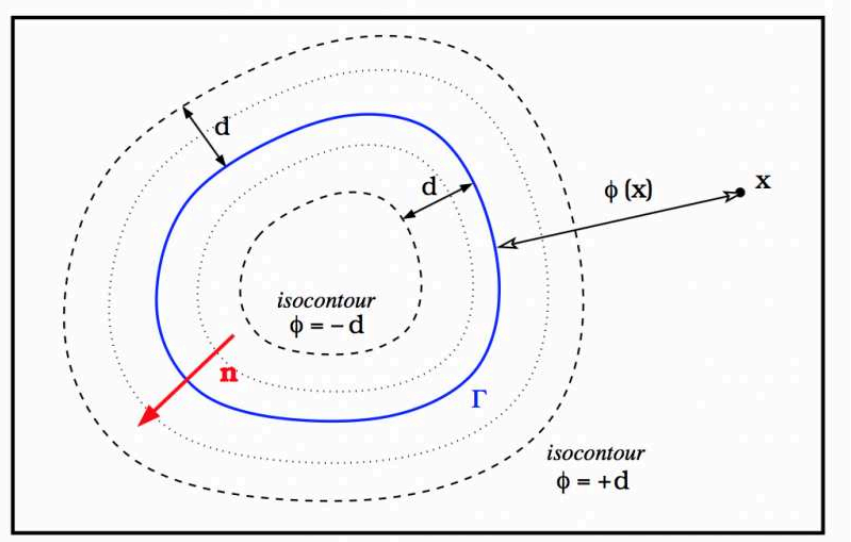


Figure 2.8 – Lignes de contour représentatives de la méthode Level Set. La ligne bleue correspond à la ligne de niveau 0, soit l'interface [74].

Cependant, elle ne garantit pas une bonne conservation de la masse de liquide et la réinitialisation de la fonction distance peut, dans certains cas, perturber l'iso-surface $\phi = 0$.

Afin d'éviter une réinitialisation de la fonction distance à chaque pas de temps, Adalsteinsson et Sethian [75] proposent de limiter les calculs dans une bande étroite autour de l'interface. La réinitialisation n'est effectuée que lorsque l'interface atteint la limite de la bande. Ils estiment que la taille idéale de cette bande est comprise entre 6 et 10 Δx de part et d'autre de l'interface, permettant un compromis entre le nombre de réinitialisations et la mise à jour de la bande autour de l'interface. Ensuite, pour s'affranchir totalement de la réinitialisation de la fonction distance, une méthode "Fast Marching" a été développée par Sethian [76, 77]. Elle consiste en une méthode rapide pour construire un champ de vitesses étendues qui sera utilisé pour le transport de la fonction distance. Ce champ de vitesses artificielles est construit de telle sorte que la propriété de fonction distance soit conservée $\left(|\vec{\nabla}\phi| = 1\right)$ à l'aide de la relation suivante :

$$\vec{\nabla} F_{ext} \cdot \vec{\nabla}\phi = 0 \tag{2.4}$$

avec F_{ext}, le champ de vitesses étendues. Le fait que la propriété de fonction distance soit conservée à l'aide de ce champ de vitesses permet d'éviter les étapes de réinitialisation.

Mut et al. [78] ont également développé un algorithme pour la réinitialisation de la fonction distance mais adapté pour les maillages non structurés. Ils accentuent leur développement sur une meilleure conservation de la masse que la méthode originale basée sur une préservation des volumes. Toujours dans le but d'avoir une meilleure conservation de la masse, des méthodes Level Set conservatives sont apparues. Initialement développées par Olsson et Kreiss [79, 80], elles consistent à résoudre une équation de transport de la fonction Heaviside basée sur la fonction distance ϕ. Cette fonction est lissée au niveau de l'interface. En utilisant ce type de méthode la surface délimitée par l'iso-surface $H(\phi) = 0.5$ doit être conservée. Pour éviter des oscillations au niveau de l'interface ainsi qu'un étalement de celle-ci, les auteurs utilisent un schéma TVD non linéaire. Le couplage de cette méthode avec un solveur incompressible se fait d'une manière similaire aux interfaces diffuses ; la discontinuité de la masse volumique et celle de la viscosité sont lissées au niveau de l'interface et la force de tension de surface devient une force de volume répartie sur les quelques mailles autour de l'interface. Cette méthode diminue les erreurs sur la conservation de la masse, cependant, le lissage des discontinuités au niveau de l'interface (notamment pour la tension de surface) tend à mal représenter les plus petites structures pouvant se former. Ainsi, Desjardins et al. [81] ont repris la méthode Level Set conservative en améliorant le traitement de ces discontinuités. L'interface est toujours représentée par une fonction tangente hyperbolique mais, la discontinuité de la masse volumique ainsi que la force de tension de surface sont traitées par une méthode Ghost Fluid afin qu'elles retrouvent leur caractère discontinu. Cette méthode a été étendue, par la suite, par Owkes et Desjardins [82] en utilisant une discrétisation discontinue de Galerkin pour le transport de la Level Set, afin d'en augmenter l'ordre de précision.

Dans les méthodes Level Set conservatives, des étapes de réinitialisation de la fonction distance sont à nouveau nécessaires afin de conserver le profil tangente hyperbolique et la masse. Comme vu précédemment, ces étapes peuvent déformer l'interface. McCaslin et Desjardins [83, 84] proposent donc une nouvelle équation pour la réinitialisation. Cette équation possède un coefficient multiplicatif supplémentaire, par rapport à l'équation traditionnelle, qui varie localement et qui dépend du taux de déformation de l'interface. Ce traitement diminue les déformations non physiques de l'interface selon les cas étudiés.

2.3.5 Méthode Particle Level Set

Afin de pallier aux différents problèmes de chaque méthode, des couplages entre les différentes méthodes existent. Une possibilité consiste à coupler la méthode Level Set avec une méthode lagrangienne ; elle est nommée Particle Level Set [85]. Des particules avec un certain rayon sont réparties tangentiellement autour de l'interface entre le liquide et le gaz puis sont advectées selon le champ de vitesse local. Ensuite, l'équation de transport de la fonction distance Eq.2.1, caractéristique de la méthode Level Set, est résolue. Si, à la suite de la résolution de ces deux équations, les particules ne sont plus tangentes à l'interface, l'iso-surface 0 de la fonction distance est réajusté afin de retrouver cette propriété. Enfin, le rayon des particules ainsi que leur nombre total doivent être modifiés pour les homogénéiser autour de la nouvelle interface. Ainsi, l'interface est représentée par l'iso-surface 0 de la fonction distance de la méthode Level Set et les particules servent à corriger la position de l'interface (Figure 2.9).

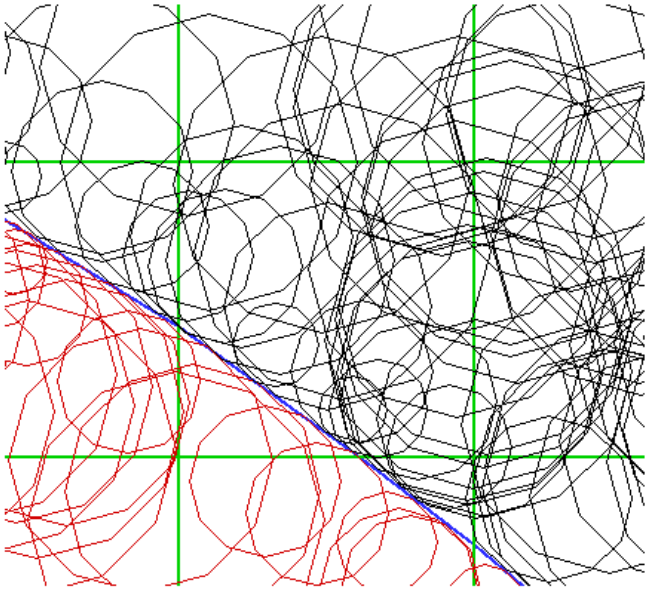


Figure 2.9 – Représentation de particules de part et d'autre de l'interface avec la méthode Particle Level Set. La ligne bleue correspond à la ligne de niveau 0, soit l'interface [86].

Enright et al. [87] ont amélioré la méthode en utilisant la méthode "Fast

Marching" pour la résolution de la fonction distance sur une bande étroite autour de l'iso-surface 0. De plus, ils utilisent des schémas numériques d'ordre peu élevé, contrairement aux études précédentes, car le recours aux schémas d'ordre élevé n'est plus nécessaire en raison de l'utilisation de particules.

Gaudlitz et Adams [88] ont testé différents algorithmes afin d'étudier la conservation de la masse pour le couplage Particle/Level Set. Ils en ont déduit que la discrétisation du terme de tension de surface joue un rôle important et que les meilleurs résultats sont obtenus à l'aide d'un maillage de type MAC. De plus, même si l'équation de réinitialisation de la fonction distance empêche normalement l'iso-surface 0 de bouger, en réalité, en raison de la discrétisation, cette dernière ne reste pas immobile. Cela entraîne des pertes de masse qui s'accumulent au cours de la simulation. Cependant, lors de la réinitialisation, les particules ne bougent pas ; ainsi, ils préconisent d'utiliser une correction de la fonction distance à l'aide des particules après l'étape de réinitialisation. Au contraire, Wang et al. [89] estiment que la correction de la fonction distance par les particules après l'étape de réinitialisation perturbe l'interface et ne conserve pas la bonne distance. Ils proposent donc de fixer l'iso-surface 0 pendant la réinitialisation et de ne plus effectuer la correction par les particules après cette étape. Cela permet de réduire le coût en temps de calcul et les perturbations de l'interface.

Toujours dans le but d'améliorer la conservation de la masse, Archer et Bai [90] ont développé une nouvelle méthode pour la redistribution des particules. En effet, ils ont remarqué qu'un mauvais ensemencement de particules pouvait être également responsable d'une perte de masse. C'est pourquoi leur méthode se base sur un non recouvrement des différentes particules entre elles lors de l'ensemencement.

Les méthodes précédentes sont basées essentiellement sur la méthode Level Set qui est ensuite corrigée par les particules. D'autres méthodes font le choix inverse ; c'est-à-dire qu'elles sont basées sur les particules et que c'est la fonction distance qui corrigent leur position. C'est le cas de la méthode de Ianniello et Mascio [91] où les particules sont transportées ainsi que les informations concernant la normale à l'interface $\vec{n}$ et le tenseur $\vec{\nabla}\vec{n}$ dont la trace donne la courbure. On parle, dans ce cas, de particules orientées. Un algorithme auto-adaptatif permet de redistribuer

les particules voire d'en ajouter dans le cas où l'interface est fortement déformée. Dans cette méthode, la fonction distance a un rôle secondaire et aucune équation de transport la concernant n'est résolue. L'iso-surface 0 est seulement reconstruite dans le but d'avoir une représentation continue de l'interface qui sera ensuite couplée avec les équations de Navier-Stokes. Vartdal et Bøckmann [92] ont repris cette méthode. Cependant, contrairement à Ianniello et Mascio, ils utilisent également les informations sur la courbure pour reconstruire l'iso-surface 0 de la fonction distance. Cela permet une meilleure représentation de l'interface notamment dans les régions où la courbure est élevée. Dans Trontin et al. [93], aucune réinitialisation de la fonction distance n'est effectuée car une nouvelle fois, celle-ci est reconstruite à partir des particules. Ici, une interpolation cubique est employée. Cette reconstruction de la fonction distance permet l'utilisation d'une méthode Ghost Fluid pour la force de tension de surface. En effet, l'interpolation cubique de la fonction distance améliore la précision sur le calcul des courbures locales.

Ce couplage entre la méthode Level Set et une méthode lagrangienne améliore grandement chacune des deux méthodes prises individuellement. Cependant, dans le cas d'interfaces complexes avec d'importantes déformations où de nombreux changements topologiques opèrent, le nombre de particules requises peut s'avérer très élevés et le coût en temps de calcul peut s'en trouver fortement impacté.

2.3.6 Méthode CLSVOF

Un autre couplage est entre les méthodes Level Set et VOF d'où le nom CLSVOF (Coupled Level Set VOF) [94, 95]. Ce couplage permet une bonne conservation de la masse grâce à la VOF et une représentation précise de l'interface et de ses propriétés géométriques grâce à l'approche Level Set et à la fonction distance. A partir de la Level Set représentative de l'interface, une interface plane est reconstruite dans chacune des mailles contenant l'interface et satisfait la relation suivante :

$$\phi^R_{i,j} = a_{i,j}(x - x_i) + b_{i,j}(y - y_j) + c_{i,j}(z - z_k) + d_{i,j} \tag{2.5}$$

Les différents coefficients de l'équation du plan a, b, c et d sont calculés de manière à minimiser l'erreur par rapport à la valeur de la fonction distance de la Level Set. Les coefficients a, b et c correspondent aux composantes de la normale à

l'interface et le coefficient d correspond à la distance du point considéré à l'interface. Ensuite, le volume de liquide dans la maille est obtenu en calculant l'intégrale de l'équation du plan normalisée par le volume de la maille. Ce volume n'étant pas initialement égal à la fraction volumique de liquide obtenue par la méthode VOF, une méthode itérative de Newton est utilisée pour trouver la position du plan respectant la fraction volumique de liquide. Il s'agit de modifier le coefficient d de l'équation du plan afin de permettre l'égalisation des deux volumes. Après cette étape de reconstruction de l'interface, la fraction volumique de liquide et la fonction distance de la Level Set sont convectées à l'aide de leur équation de transport. Ces équations étant résolues successivement selon les trois directions spatiales, une étape de reconstruction est effectuée entre chacune d'elles. Une équation finale vient ensuite coupler les trois directions. Cette méthode est celle qui a été retenue pour le suivi d'interface dans cette thèse et dans le code ARCHER développé par Ménard [86]. Elle sera expliquée plus en détail dans un chapitre ultérieur.

La plupart des méthodes utilisant le couplage VOF/Level Set sont assez similaires. Elles décomposent l'équation de transport de la fraction volumique de liquide et de la fonction distance selon les trois directions de l'espace. Cette méthode est, cependant, inadaptée dans le cas de maillages non-structurés. Afin d'y remédier, Yang et al. [96] emploient une méthode de Galerkin pour éléments finis pour le transport de la fonction distance et un schéma d'advection eulérien-lagrangien pour le transport de la fraction volumique de liquide ; et ce sur un maillage triangulaire non-structuré. D'autres utilisent des algorithmes "Edge Matched Flux Polygon Advection" multi-directionnels pour le transport de la fraction volumique sur des maillages non-uniformes [97, 98]. Zhao et Chen [99] ont, eux, développé une méthode CLSVOF sur un maillage "overset" permettant de gérer des maillages superposés en mouvement se chevauchant les uns les autres.

Un autre couplage entre les méthodes VOF et Level Set est la méthode VOSET [100]. Contrairement aux méthodes CLSVOF précédentes, elle ne résout pas d'équations pour la fonction distance. Elle résout uniquement une équation d'advection pour la fraction volumique de liquide et reconstruit la fonction distance seulement à l'aide d'un algorithme itératif purement géométrique.

En raison de la conservation de la masse et de la représentation précise de l'interface et des ses propriétés géométriques, le couplage entre les méthodes VOF et Level Set est souvent employé dans les simulations d'écoulements diphasiques, notamment lorsque d'importants changements topologiques opèrent. On peut citer par exemple des simulations d'instabilités [101], de ballottements [102], d'impacts de gouttes [103] ou encore d'atomisation [104] parmi tant d'autres.

2.4 Simulation d'écoulements compressibles

Concernant les écoulements compressibles, différentes méthodes sont utilisées. Elles reposent en général sur deux approches : l'utilisation de méthodes explicites ou l'utilisation de méthodes semi-implicites. Les méthodes explicites sont souvent basées sur les solveurs de Riemann, particulièrement adaptés pour les écoulements fortement compressibles à haut nombre de Mach. Afin de pouvoir prendre en compte les faibles nombres de Mach, ces méthodes sont étendues par divers moyens que l'on verra par la suite. Les méthodes semi-implicites, quant à elles, sont basées essentiellement sur des méthodes de projection ou des méthodes "all-speed".

2.4.1 Méthodes basées sur les solveurs de Riemann

Tout d'abord, les solveurs de Riemann ; ils résolvent les équations de Navier-Stokes en utilisant un schéma de Godunov. Ils peuvent être divisés en plusieurs catégories : les solveurs de Roe [105], les solveurs HLLC [106] et les solveurs HLLC préconditionnés [107]. Les solveurs HLLC (Harten Lax Van Leer Contact) consistent à estimer la vitesse de deux ondes qui peuvent être des ondes de choc ou de raréfaction mais aussi la vitesse de la surface de contact séparant deux milieux de densités et températures différentes (Figure 2.10). Ils sont très appropriés pour le calcul des ondes de choc, c'est-à-dire pour des écoulements avec un fort nombre de Mach. Cependant, ils ne tendent pas vers la limite incompressible pour les faibles nombres de Mach. Les solveurs HLLC préconditionnés pallient à ce problème en ajoutant un terme dans l'équation pour la pression afin de retrouver une divergence nulle de la vitesse quand le nombre de Mach tend vers 0. La contrainte majeure des solveurs de Riemann est la résolution explicite du système d'équations et donc, la prise en compte de la vitesse du son pour le calcul du pas de temps afin de respecter la condition CFL.

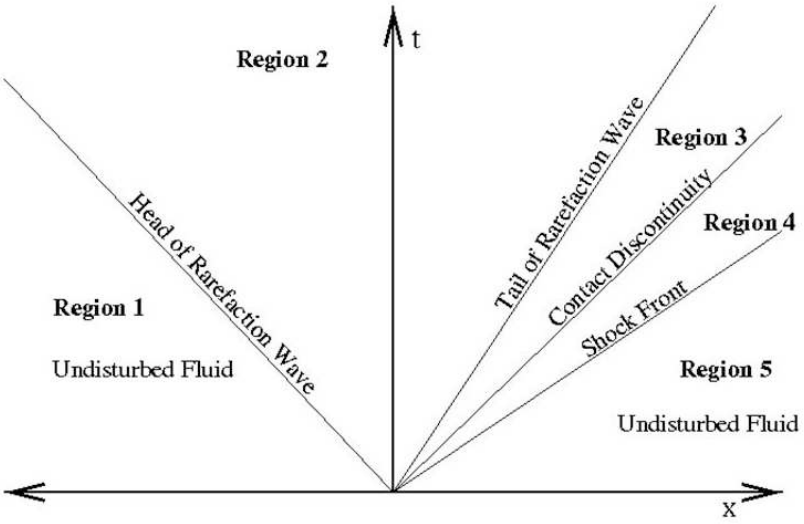


Figure 2.10 – Représentation d'une onde de choc, d'une onde de raréfaction et d'une surface de contact sur un diagramme spatio-temporel pour un cas tube à choc [108].

Des solveurs de Riemann ont également été développés pour les écoulements compressibles diphasiques. Dans leur article, Bo et Grove [109] présentent un solveur basé sur celui de Shu et Osher [110] mais en utilisant une méthode de suivi d'interface couplant la méthode VOF (Volume Of Fluid) avec la méthode Ghost Fluid. Cependant, il ne s'agit pas des méthodes VOF et Ghost Fluid usuelles. En effet, pour la méthode VOF, afin de tenir compte de la compressibilité, un terme correctif pour la divergence de la vitesse est ajouté aux équations traditionnelles incompressibles. Pour la méthode Ghost Fluid, il s'agit d'une version modifiée s'appuyant sur la résolution d'un problème de Riemann au niveau de l'interface.

D'une manière assez générale, la simulation d'écoulements diphasiques pour tous les nombres de Mach (incompressible vers fortement compressible), s'est faite en adaptant les solveurs de Riemann, initialement développés pour les haut nombre de Mach uniquement. Parmi ces adaptations, les méthodes de type AUSM (Advection Upstream Splitting Method) introduites par Liou et Steffen [111] sont particulièrement présentes dans la littérature, notamment les méthodes $AUSM +_u p$ [112] et SLAU [113]. Comme pour les solveurs de Riemann, les équations de Navier-Stokes sont écrites sous la forme d'un système d'équations aux dérivées partielles hyperboliques comprenant une dérivée temporelle des variables conservatives, une divergence des

flux convectifs et visqueux et un second membre pour les forces de volume (Eq 2.6).

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = f \tag{2.6}$$

avec $U = [\rho,\ \rho u,\ \rho E]$ et $F = [\rho u,\ \rho u^2 + P - \tau,\ (\rho E + P)u - u\tau]$.
Les équations sont discrétisées par une approche aux volumes finis et les flux sont calculés sur les faces des cellules. La manière de résoudre ces flux différencie les différents solveurs de Riemann entre eux. Dans les méthodes AUSM, des schémas upwind sont utilisés et les flux sont partagés en une partie convective et une partie acoustique pour la pression. De plus, les différentes quantités utilisées pour calculer les flux consistent en une interpolation des variables de part et d'autre de la face de la cellule à l'aide de schéma comme le WENO [114].

La méthode de Roe [105], qui résout également les problèmes de Riemann, consiste à linéariser les équations de Navier-Stokes sous forme hyperbolique à l'aide d'une matrice constante $\widetilde{A}$ qui tend vers la matrice jacobienne $A = \frac{\partial F}{\partial u}$ quand les variables u sont égales dans les parties droite et gauche du problème de Riemann. Cette méthode est utilisée, à l'origine, pour les problèmes de Riemann, donc pour les écoulements monophasiques à haut nombre de Mach. Cependant, elle est à la base de nouvelles méthodes pour les écoulements compressibles pour tout nombre de Mach. On peut citer par exemple Li et Tsubokura [115] qui utilisent une méthode de Roe en parallèle d'un préconditionnement à l'aide d'une matrice devant le terme temporel. Cette matrice a été initialement dérivée par Weiss et Smith [116] pour permettre la simulation d'écoulements à faible nombre de Mach. Ici, elle est utilisée pour la simulation d'écoulements compressibles turbulents. Cependant, ce type de méthode diminue la précision temporelle et est toujours confronté au problème de pas de temps réduits du à leur nature explicite.

La méthode de Osher [117, 110] est un couplage entre la méthode de Roe et un schéma de Lax-Friedrich pour le calcul des flux. Cette méthode permet la conservation de l'entropie contrairement à celle de Roe seule. Elle permet la simulation d'écoulements diphasiques compressibles. Koren et al [118] ont réutilisé cette méthode en la couplant avec une méthode Level Set pour le suivi d'interface et en

limitant le problème des oscillations de pression qui peuvent intervenir au niveau de l'interface entre deux fluides.

Kadioglu et al [119] ont combiné plusieurs méthodes dans leur algorithme. Lors d'un même pas de temps, ils résolvent les équations de Navier-Stokes une première fois avec une méthode explicite puis corrigent la valeur des différentes variables à l'aide d'un préconditionnement implicite. L'usage d'une méthode implicite pour corriger les valeurs permet d'alléger la restriction sur le pas de temps lors du calcul explicite. Par ce biais, ils sont en mesure d'utiliser un pas de temps jusqu'à quinze fois plus important que celui basé sur la condition CFL explicite. Ils remarquent que l'écriture des équations sous une forme conservative permet de capturer correctement les chocs et de calculer la bonne vitesse. Cependant, cette forme représente assez mal les discontinuités entre les différents éléments d'un écoulement multi-composant. Concernant la forme implicite des équations, c'est l'inverse ; la discontinuité de contact est bien représenté contrairement aux chocs et à leur vitesse. Ainsi, ils utilisent les deux approches suivant les cas, c'est-à-dire la méthode implicite pour les écoulements à faible nombre de Mach ne contenant aucun choc, et la méthode explicite lors de la présence d'un choc. Cette dernière est basée sur la méthode de Osher utilisant un schéma de Lax-Friedrich local pour les flux couplé à un schéma ENO d'ordre deux.

Nous ne traiterons pas ici de toutes les méthodes dérivées des solveurs de Riemann. Seules les principales sont mentionnées ; une liste détaillée dépasse le cadre de ce travail de thèse.

2.4.2 Méthodes implicites

Concernant les méthodes implicites ou semi-implicites, plusieurs catégories existent dont les méthodes basées sur la pression ou encore les méthodes Low Mach. Les méthodes basées sur la pression furent introduites initialement par Harlow et Amsden [120]. Dans leur travail, ils utilisent une méthode ICE (Implicit Continuous fluid Eulerian) qui permet de résoudre des écoulements monophasiques à tout nombre de Mach. Une équation de Poisson est résolue pour la pression soit de manière directe soit en utilisant une méthode de relaxation selon les cas. La masse volumique est, quant à elle, résolue par une équation d'état. Certains paramètres sont ajoutés dans les équations afin de les impliciter ou expliciter. Un terme de diffusion de masse est

ajouté dans certains cas dans l'équation de conservation de la masse afin d'améliorer la stabilité du code ou d'éliminer des erreurs de troncature indésirables. Enfin, pour les flux, des schémas centrés sont utilisés la majorité du temps excepté pour les initialisations violentes avec discontinuités où un schéma upwind est préféré.

Ces méthodes ont été étendue récemment pour les écoulements diphasiques. Miller et al. [121] utilisent une méthode basée sur la pression avec un algorithme s'apparentant à une méthode de projection dans le logiciel OpenFOAM. Pour assurer la bonne convergence des variables, une boucle de convergence est effectuée à chaque pas de temps jusqu'à ce que chaque variable ait un résidu associé assez faible. Le suivi d'interface est réalisé à l'aide d'une méthode de type VOF sans reconstruction de l'interface qui diffère de celle incompressible par l'ajout de nouveaux termes liés à la compressibilité.

Boger et al ont introduit dans [122] un solveur compressible basé sur la pression. Afin d'éviter un pas de temps trop petit du à la condition CFL basée sur l'acoustique, la partie acoustique des équations est résolue implicitement à l'aide d'un solveur de Poisson et seuls les termes convectifs sont résolus explicitement. Leurs équations sont adimensionnées faisant ainsi apparaître le nombre de Mach dans l'équation de la quantité de mouvement. Pour éviter une singularité lorsque le nombre de Mach tend vers zéro (limite incompressible), ils décomposent la pression en une pression thermodynamique et une pression hydrodynamique à l'aide d'une méthode MPV (Multiple Pressure Variables). Leur représentation de l'interface repose sur une méthode Level Set. La masse volumique est lissée lors de la méthode MPV et la transition thermodynamique est traitée de manière abrupte en "marche d'escalier", c'est-à-dire que l'interface correspond aux faces des mailles où la fonction distance de la méthode Level Set change de signe (Figure 2.11).

De même que pour Boger et al. [122], Huber et al. [123] utilisent un solveur compressible basé sur la pression avec une méthode Level Set pour le suivi d'interface. La particularité de leur algorithme provient de la prise en compte de la tension de surface. En effet, au lieu d'employer une méthode de projection habituelle, ici, chaque variable (masse volumique, vitesse, pression) est décomposée en deux champs ; un prenant en compte les effets de la tension de surface et l'autre non. Pour plus de

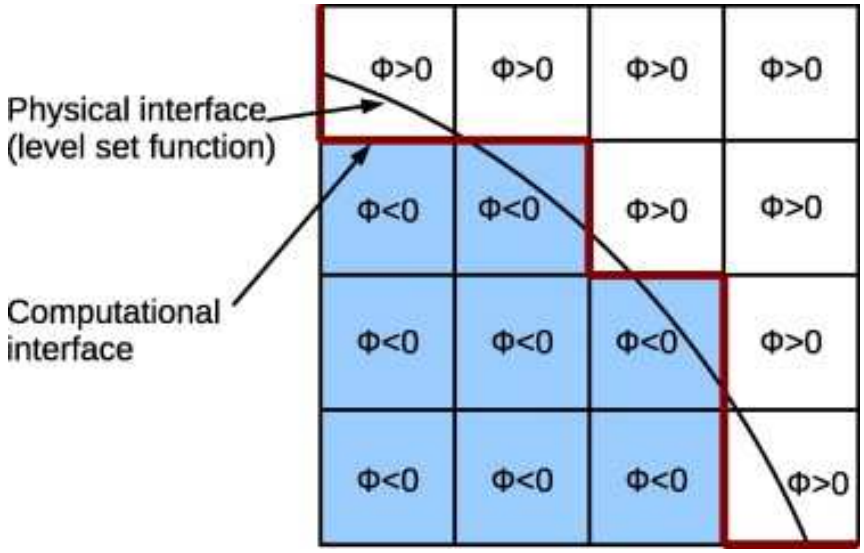


Figure 2.11 – Représentation de la transition en "marche d'escalier" [122].

clarté, les champs prenant en compte la tension de surface seront indicés "ST" par la suite et les autres seront indicés "0". La vitesse $\vec{u}_{ST}$ est choisie de manière à avoir une divergence nulle. Ainsi, ρ_{ST} est constant et est choisi comme étant nulle afin de simplifier les équations. La masse volumique totale se limite donc à ρ_0. Ensuite, deux équations sont à résoudre pour la vitesse (une pour $\vec{u}_0$ et l'autre pour $\vec{u}_{ST}$) ainsi que deux équations de Poisson pour les pressions P_0 et P_{ST}. La vitesse et la pression finales sont obtenues en additionnant les deux champs.

Dans leur article [124], Hou et Mahesh ont développé un algorithme entièrement implicite basé sur les équations de Navier-Stokes compressibles. Celles-ci sont adimensionnées de telle manière que l'on retrouve les équations incompressibles lorsque le nombre de Mach tend vers 0. De plus, cet algorithme permet de conserver l'énergie même pour les faibles nombres de Mach et les forts nombre de Reynolds. Les différentes équations sont intégrées en volume sur un volume de contrôle. Les termes en divergence représentant les flux sont ensuite convertis en intégrale de surface par le théorème de Green-Ostrogradski sur les faces du volume de contrôle. Le maillage utilisé est un maillage colocalisé où toutes les variables sont calculées au centre du volume de contrôle. Pour le calcul des flux, les vitesses sur les faces sont obtenues par projection et non par interpolation. Cependant, afin de conserver l'énergie, ils utilisent une intégration temporelle décalée ; les variables thermodynamiques P, T, ρ sont décalées temporellement d'un demi pas de temps par rapport à la vitesse. L'algorithme étant implicite, le pas de temps n'est pas contraint par l'acoustique ou la viscosité pour assurer la stabilité. Cependant, une boucle itérative est utilisée afin d'observer

une convergence des différentes variables. Cette méthode est reprise par Yilmaz et al dans [125].

Ces méthodes (Hou et Mahesh [124], Yilmaz [125]) sont des méthodes "all-speed" qui permettent la simulation d'écoulements à tout nombre de Mach avec une convergence vers le régime incompressible quand le nombre de Mach tend vers 0. Il en existe plusieurs sortes ; on peut citer, par exemple, Cordier et al. [126] qui utilisent une méthode "all-speed" Asymptotic-Preserving. Il s'agit d'un schéma conservatif où la divergence nulle de la vitesse est vérifiée pour le cas limite du régime incompressible. Contrairement à la méthode précédente, une méthodologie semi-implicite est employée où la pression est traitée de manière implicite et où les autres termes sont traités de manière explicite. Une nouvelle fois, l'implicitation des termes de pression permet d'avoir un pas de temps basé sur la vitesse convective et non sur l'acoustique. Un autre schéma "all-speed" est le schéma "Lagrange-Projection" utilisé notamment par Chalons et al. [127]. Ce schéma consiste en une décomposition des équations en trois sous-systèmes séparant les phénomènes acoustiques, de transport et de changement de phase. Le sous-système des phénomènes acoustiques est écrit en coordonnées lagrangiennes et est résolu de manière implicite. La résolution du sous-système des phénomènes de transport correspond à l'étape de projection d'où le nom du schéma "Lagrange-Projection".

Pour les écoulements diphasiques faiblement compressibles, des méthodes Low-Mach ou à densité variable sont parfois utilisées. Elles consistent à considérer le liquide comme étant incompressible et le gaz comme étant compressible. Cette technique a par exemple été utilisée par Daru et al [43]. Dans leur article, ils considèrent une partie liquide avec plusieurs inclusions gazeuses. Afin d'avoir une même équation pour les deux phases, une fonction de Heaviside H est intégrée dans celle-ci avec $H = 1$ pour la partie gazeuse et $H = 0$ pour la partie liquide. Au lieu de résoudre une équation de transport pour H afin de suivre l'interface liquide-gaz au cours du temps, une méthode lagrangienne est employée. Contrairement à un algorithme entièrement lagrangien (comme la méthode SPH [25, 26]) où les variables sont calculées au niveau de particules se déplaçant au cours du temps, ici, seule l'interface est représentée par des éléments. La fonction Heaviside est ensuite dérivée à partir de la position des différents éléments. Le reste de l'algorithme s'effectuant sur un maillage eulérien, l'interface doit donc être interpolée sur ce maillage. La méthode

utilisée est de type Immersed Boundary Method [128], cependant cela conduit à un lissage de l'interface sur plusieurs cellules. Néanmoins, comme le précise l'auteur, cela ne conduit nullement à une dissipation numérique en raison de l'épaisseur constante de l'interface au cours du temps. La pression est séparée en deux contributions : une pression thermodynamique uniforme spatialement et une pression hydrodynamique. L'algorithme principal consiste en une méthode de projection ; une première vitesse intermédiaire est calculée, ensuite, la pression hydrodynamique est obtenue en résolvant une équation de Poisson à l'aide d'une méthode multigrille, et enfin la vitesse finale est calculée avec la nouvelle valeur de la pression. Une boucle itérative est utilisée sur tout l'algorithme jusqu'à la convergence des différentes valeurs des variables.

Dans la suite de cette thèse, une méthode basée sur la pression a été choisie, utilisant une méthode CLSVOF pour le suivi d'interface. La majorité des cas étudiés étant à faible nombre de Mach, les méthodes basées sur les solveurs de Riemann semblaient inappropriées pour ce type d'application. Enfin, les méthodes à densité variable ont également été rejetées ; en effet, la prise en compte des différentes inclusions gazeuses peut s'avérer assez coûteuse dans le cas où leur nombre devient important.

2.5 Simulations de changements de phase

En plus du développement d'un code de calcul compressible, cette thèse a pour but de réaliser des simulations avec changement de phase. La majeure partie des codes simulant des changements de phase résolvent les équations dans un formalisme incompressible même si, ces dernières années, des codes compressibles les simulant commencent à apparaître. L'utilisation d'un formalisme incompressible implique des simulations en milieu ouvert pour permettre la dilatation des gaz lors de la vaporisation tout en gardant une masse volumique constante. C'est notamment pour résoudre ce problème que l'approche compressible est développée dans cette thèse.

Pour les codes incompressibles, différents types de suivi d'interface ont été utilisés. Juric et Tryggvason [46] utilisent la même méthode que Daru et al. [43] décrite précédemment pour le suivi d'interface, à savoir une méthode lagrangienne où l'interface est représentée par des points constituant un maillage mobile non structuré. Ces points sont ensuite interpolés sur un maillage fixe structuré 2D de type MAC à

l'aide d'une Immersed Boundary Method [128]. L'interface se déformant fortement, il est nécessaire d'ajouter ou de supprimer des points afin de conserver un espacement constant entre eux. Ils utilisent également une seule formulation pour les deux phases pour résoudre les équations de Navier-Stokes. Afin de pouvoir simuler les changements de phase et notamment l'ébullition, ils résolvent également l'équation pour l'énergie ainsi que le transfert de masse à travers l'interface, la chaleur latente et la tension de surface.

Schlottke et Weigand [129], eux, utilisent une méthode VOF avec une reconstruction de l'interface par la méthode PLIC pour simuler des déformations de gouttes avec évaporation. Afin de différencier la vapeur du gaz, ils emploient une seconde équation de VOF pour la phase vapeur résolue uniquement dans la phase gazeuse. Leur taux d'évaporation est calculée à l'aide du gradient de fraction massique de vapeur ; ce taux est présent dans le calcul de la divergence de la vitesse. En effet, lors de l'évaporation, malgré l'hypothèse d'incompressibilité, la divergence de la vitesse n'est plus nulle au niveau de l'interface en raison du volume de gaz créé. Pour garantir le bon calcul de divergence en présence d'un fort flux de Stefan, les auteurs insistent sur la nécessité de calculer correctement les vitesses dans le liquide et dans le gaz au niveau de l'interface, notamment avec le recours à un algorithme itératif dans les cellules où cette interface est présente. Concernant le calcul de la tension de surface, il s'effectue dans les forces de volume en utilisant le gradient de la fonction VOF lissée similairement à Brackbill et al. [130]. Ce lissage permet de diminuer les courants parasites pouvant apparaître au niveau de l'interface.

Ensuite, plusieurs études emploient la méthode Level Set pour le suivi d'interface couplée à une méthode Ghost Fluid pour les conditions de saut à travers cette interface [131], [132]. Une méthode de projection standard est utilisée pour découpler la vitesse de la pression. Afin de pouvoir simuler l'effet Leidenfrost, Villegas et al. [133] utilisent une nouvelle méthode Ghost Fluid permettant de traiter à la fois l'ébullition et l'évaporation qui apparaissent simultanément lors de l'effet Leidenfrost. Cette méthode, baptisée Ghost Fluid Thermal Solver for Boiling and Evaporation, sépare les régions où l'évaporation a lieu des régions où l'ébullition a lieu, en utilisant des conditions limites à l'interface hétérogènes. Chai et al. [134], eux, emploient une méthode ACLS (Accurate Conservative Level Set) qui remplace la fonction distance

habituelle par une fonction tangente hyperbolique. Cela permet d'éviter la perte de masse caractéristique de la méthode Level Set qui aurait une influence sur le processus d'évaporation. Afin de pallier à ce problème de conservation de la masse, d'autres auteurs utilisent un couplage entre les méthodes VOF et Level Set comme Duret et al. [135] ou Bouali et al. [136]. Cependant, au lieu de résoudre une équation pour l'énergie à l'instar des études précédentes, un scalaire passif est résolu pour représenter le processus d'évaporation et étudier les processus de mélange dans les écoulements diphasiques turbulents. Dans l'étude réalisée par Singh et Premachandran [98], la méthode CLSVOF est employée sur un maillage 2D non structuré pour simuler des changements de phase comme l'ébullition. La fonction distance est convectée à l'aide d'un schéma TVD (Total Variational Diminishing) et la fraction volumique de liquide, à l'aide d'un schéma EMFPA (Edge Matched Flux Polygon Advection), initialement proposé par Lopez et al. [137], permettant le calcul des flux sur un maillage non structuré. Pour le couplage vitesse/pression, un algorithme itératif SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations) est utilisé.

Concernant les codes compressibles traitant du changement de phase, on peut citer le code S3D de Wang et Rutland [138]. Ce code permet de simuler l'évaporation de gouttes sphériques en utilisant un couplage entre les méthodes eulériennes et lagrangiennes. Les gouttes sont traitées de manière lagrangienne en ne prenant en compte que la force de traînée ; les autres forces étant négligées. La phase porteuse est quant à elle résolue de manière eulérienne. Les équations de Navier-Stokes, de l'énergie et des espèces, résolues dans la phase porteuse, contiennent des termes sources prenant en compte les interactions entre le fluide et les particules présentes. Le même principe est employé dans l'étude de Bukhvostova et al. [139] où ils comparent leur code compressible avec un code incompressible utilisant une méthode pseudo-spectrale. Ils montrent ainsi, que dans la limite des écoulements possédant un faible nombre de Mach, ces deux codes donnent des résultats cohérents entre eux concernant les propriétés de l'écoulement et les transferts de masse. Cependant, une différence non négligeable apparaît au niveau des transferts thermiques montrant la nécessité de prendre en compte la compressibilité dans ce cas.

Dans leur article, Shao et al. [140] utilisent un code compressible à densité variable. Une méthode Level Set permet le suivi d'interface où la fonction distance

est transporté selon un principe semi-lagrangien. Une méthode Ghost Fluid est aussi employée pour la prise en compte des conditions de saut au travers de l'interface. Les équations de Navier-Stokes sont résolues à l'aide d'un schéma centré d'ordre 2 pour la discrétisation spatiale et un schéma semi-implicite itératif d'ordre 2 pour la discrétisation temporelle. Concernant les équations des espèces et de l'énergie pour le traitement de l'évaporation, un schéma centré d'ordre 2 est également utilisé mais avec un schéma semi-implicite de Crank-Nicolson pour la discrétisation temporelle. Le taux d'évaporation est calculé à l'aide du gradient de la fraction massique de vapeur ou du gradient de la température selon si la température est inférieure ou supérieure à la température de saturation ; cela permettant la simulation d'évaporation et d'ébullition. De plus, une équation de réaction chimique est également résolue afin de pouvoir simuler la combustion.

L'étude du changement de phase dans le cas d'écoulements à fort nombre de Mach avec onde de choc a également été effectuée par Houim et Kuo [141]. Pour cela, ils ont recours à un solveur de Riemann modifié couplé avec une méthode Level Set pour le suivi d'interface et une méthode Ghost Fluid pour les conditions de saut. Le système hyperbolique résolu prend en compte les équations de Navier-Stokes, de l'énergie, des espèces ainsi que les équations de réactions chimiques pour simuler les changements de phase et les réactions entre les espèces.

Enfin, Lee et Son [142] ont étudié l'effet du changement de phase sur l'expansion et l'effondrement d'une bulle de vapeur à l'aide d'un code compressible couplant les méthodes Level Set et Ghost Fluid sur un maillage de type MAC. Des schémas centrés d'ordre 2 sont utilisés ainsi que des schémas ENO d'ordre 2 pour les termes de convection. La pression est ici obtenue en combinant l'équation de conservation de quantité de mouvement et la divergence de la vitesse comme dans une méthode de projection classique et non à l'aide d'une équation d'état.

En partant de l'état de l'art précédent, cette thèse est bâtie sur le code ARCHER qui utilise un formalisme incompressible pour la simulation d'écoulements diphasiques avec le recours à une méthode de projection pour le couplage entre le vitesse et la pression. Le suivi de l'interface est basé sur un couplage entre les méthodes VOF et Level Set (CLSVOF) et le traitement du saut des variables au travers de cette interface

est réalisé à partir d'une méthode Ghost Fluid. Afin de traiter les écoulements avec évaporation et dans un confinement, et ainsi d'étendre les précédents travaux de Duret [143], j'ai choisi de développer une approche compressible basée sur la pression en reprenant les différents éléments du code et en les adaptant à cette nouvelle approche.

Chap. 3 | Développement d'un algorithme compressible avec changement de phase

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, deux principales parties sont étudiées. Après une présentation du code de calcul ARCHER, la première partie concerne le développement de ce code dans un formalisme compressible. L'implémentation de chaque terme est explicitée en détail. La seconde partie est plus centrée sur le développement de l'évaporation et l'implémentation de l'équation de l'énergie. Ces derniers développements font davantage office de perspectives pour une étude ultérieure. Ce travail a fait l'objet d'un article dans l'International Journal of Multiphase Flow [144].

3.2 Présentation du code de calcul

Les différentes simulations et implémentations effectuées durant cette thèse l'ont été avec le code de calcul ARCHER [95] qui est un code cartésien initialement incompressible. Cette sous-partie consiste à présenter le code original et ses spécificités.

3.2.1 Équations de Navier-Stokes incompressibles

Les équation de Navier-Stokes peuvent s'écrire de la manière suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\vec{\nabla} P + \vec{\nabla} \cdot (2\mu \bar{\bar{\epsilon}}) + \rho \vec{f} \end{cases} \tag{3.1}$$

avec ρ, la masse volumique $[kg \cdot m^{-3}]$; $\vec{u}$, le vecteur vitesse $[m \cdot s^{-1}]$; P, la pression $[Pa]$; μ, la viscosité dynamique $[kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}]$; $\bar{\bar{\epsilon}} = \frac{1}{2}\left(\vec{\nabla}\vec{u} + \vec{\nabla}\vec{u}^t\right)$, le tenseur des

taux de déformation $[s^{-1}]$ et $\vec{f}$, les forces de volume (dont la force gravitationnelle) par unité de masse $[N \cdot kg^{-1}]$.

Le code étant incompressible, les masses volumiques sont considérées constantes ; ainsi, les équations 3.1 peuvent se réécrire de la façon suivante :

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \\ \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \vec{u} = -\frac{\vec{\nabla} P}{\rho} + \frac{\vec{\nabla} \cdot (2\mu \bar{\bar{\epsilon}})}{\rho} + \vec{f} \end{cases} \tag{3.2}$$

Cependant, ces équations sont résolues sous leur forme conservative (3.1) afin, comme leur nom l'indique, de mieux respecter le principe de conservation sur une région délimitée du domaine.

3.2.2 Méthode de projection

Afin de pallier au couplage entre la vitesse et la pression dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, une méthode de projection est utilisée [145]. Une première vitesse $\vec{u}^*$ est calculée sans les termes liés à la pression ; c'est-à-dire sans le gradient de pression ni la force de tension de surface liée au saut de pression dans le cas d'écoulements diphasiques.

$$\frac{\partial \rho \vec{u}^*}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = \vec{\nabla} \cdot (2\mu \bar{\bar{\epsilon}}) + \rho \vec{f} \tag{3.3}$$

Ensuite, pour obtenir l'équation à résoudre pour la pression, une discrétisation temporelle est effectuée sur l'équation de conservation de la quantité de mouvement en faisant apparaître la vitesse intermédiaire $\vec{u}^*$.

$$\frac{\rho \vec{u}^{n+1} - \rho \vec{u}^*}{\Delta t} + \underbrace{\frac{\rho \vec{u}^* - \rho \vec{u}}{\Delta t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = \vec{\nabla} \cdot (2\mu \bar{\bar{\epsilon}}) + \rho \vec{f}}} - \vec{\nabla} P \tag{3.4}$$

La partie au-dessus de l'accolade correspond à l'équation 3.3 et donc à la vitesse intermédiaire $\vec{u}^*$. Ainsi, il reste :

$$\frac{\rho \vec{u}^{n+1} - \rho \vec{u}^*}{\Delta t} = -\vec{\nabla} P \tag{3.5}$$

Le code étant incompressible, la masse volumique est constante. De plus, dans le cas d'écoulements diphasiques, le suivi d'interface n'est pas effectué entre les temps t^* et t^{n+1} ; il n'y a donc pas de modification de phase dans la cellule considérée et la masse volumique reste la même entre ces deux temps. On peut donc diviser Eq 3.5

par ρ. En prenant la divergence de cette équation, on obtient :

$$-\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{\nabla}P}{\rho}\right)=\frac{\vec{\nabla}\cdot\vec{u}^{n+1}-\vec{\nabla}\cdot\vec{u}^{*}}{\Delta t} \tag{3.6}$$

La divergence de la vitesse devant être nulle, on a $\vec{\nabla}\cdot\vec{u}^{n+1}=0$ mais pas $\vec{\nabla}\cdot\vec{u}^{*}=0$ car $\vec{u}^{*}$ n'est pas la vitesse totale mais seulement une vitesse intermédiaire. Ainsi, pour calculer la pression, l'équation de Poisson suivante doit être résolue.

$$\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{\nabla}P}{\rho}\right)=\frac{\vec{\nabla}\cdot\vec{u}^{*}}{\Delta t} \tag{3.7}$$

On peut remarquer que le théorème de Helmholtz-Hodge est bien vérifié. En effet, ce théorème stipule que dans le cas d'un espace compact simplement connexe (c'est-à-dire sans "trou"), un champ de vecteur peut être décomposé en une partie rotationnelle (donc à divergence nulle) et une partie irrotationnelle pouvant se mettre sous la forme d'un gradient d'un champ scalaire. On retrouve ce résultat en prenant $\vec{u}^{*}$ pour le champ de vecteur, $\vec{u}^{n+1}$ pour sa partie rotationnelle et le terme de pression pour la partie irrotationnelle.
La pression est résolue à l'aide d'une méthode multigrille couplée avec un schéma Gauss-Seidel "Red-Black". Plus de détails concernant cette méthode seront présentés dans un formalisme compressible dans la prochaine partie.

Pour finir, la vitesse à l'instant suivant $n+1$ est obtenue en soustrayant le gradient de pression à la vitesse intermédiaire $\vec{u}^{*}$:

$$\vec{u}^{n+1}=\vec{u}^{*}-\Delta t\left(\frac{\vec{\nabla}P}{\rho}\right) \tag{3.8}$$

De récentes améliorations du code sont également présentes : le terme convectif est résolu en utilisant la méthode de Vaudor et al. [146] basée sur celle de Rudman. Elle permet une meilleure précision concernant les écoulements présentant un fort ratio de masse volumique. Cette méthode est basée sur le calcul des flux de masse à partir de la méthode VOF qui peuvent ensuite être utilisés dans le terme de convection sous un formalisme conservatif. Le terme de diffusion est calculé avec la méthode de Sussman et al. [147] qui permet de prendre en compte implicitement la condition de saut du tenseur des contraintes visqueuses [148].

3.2.3 Suivi d'interface

Concernant le suivi d'interface dans ARCHER, une méthode CLSVOF (Coupled Level Set Volume Of Fluid) est utilisée. Le principe de la méthode a déjà été reportée dans l'état de l'art et le passage de la méthode en compressible est étudié dans la prochaine section. Ainsi, pour plus de détails sur l'implémentation de cette méthode dans ARCHER, voir Ménard et al. [95, 86].

3.2.4 Méthode Ghost Fluid

Afin de traiter les différentes discontinuités à l'interface entre deux fluides dans le cas d'écoulements diphasiques, une méthode Ghost Fluid est employée [149, 131]. Elle consiste à prolonger chaque phase de part et d'autre de l'interface à l'aide de mailles fictives. Les variables discontinues sont étendues de l'autre côté de l'interface en prenant en compte les conditions de saut. Cela permet d'avoir un calcul de dérivée correct au niveau de l'interface qui ne prend pas en compte les valeurs de l'autre phase. Cette méthode est également utilisée dans les prochaines sections pour les conditions de saut en compressible.

3.2.5 Maillage MAC cartésien

Le maillage utilisé est un maillage cartésien décalé de type MAC (Marker And Cell)[150]. Il consiste à calculer les vitesses sur un maillage décalé d'une demi cellule par rapport au maillage où sont résolues les autres grandeurs. En considérant un seul et unique maillage, cela revient à calculer les différentes grandeurs (pression, masse volumique, fraction volumique de liquide, fonction distance, etc) au centre des cellules et les vitesses sur les faces de ces cellules (voir Figure 3.1).

Ce type de maillage permet une meilleure stabilité en raison du découplage de la pression et de la vitesse ainsi qu'une formulation adéquate des opérateurs de dérivée notamment celui de la divergence. En effet, prenons l'exemple du calcul de la pression où apparaît la divergence de la vitesse. Cette dernière se discrétise $\vec{\nabla} \cdot \vec{u^*} = \frac{u^*_{i+\frac{1}{2},j} - u^*_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x}$ dans la direction x, faisant ainsi une évaluation de la dérivée au centre de la maille (i,j), lieu de calcul de la pression P.

La plupart des dérivées utilisent un schéma centré d'ordre 2. En effet, en reprenant l'exemple précédent, en raison du décalage du maillage, la dérivée de u^* en (i,j) est équivalente à une dérivée dans un maillage avec un pas d'espace de $\frac{\Delta x}{2}$ ce

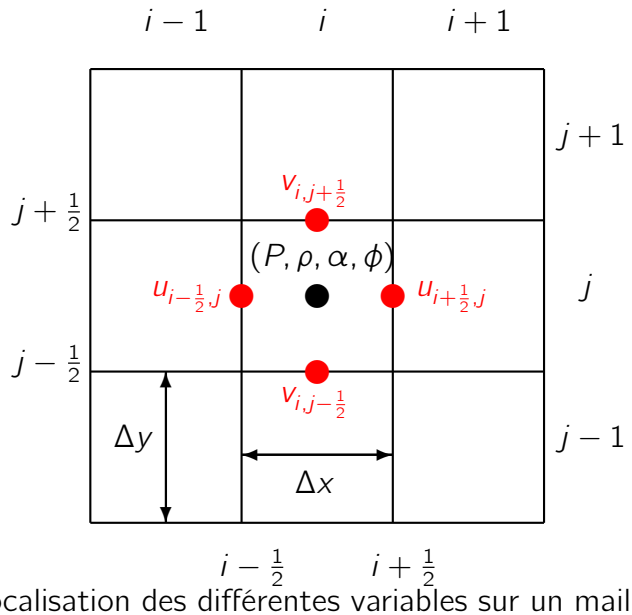


Figure 3.1 – Localisation des différentes variables sur un maillage de type MAC en 2D.

qui la rend plus précise :

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{u}^{*}=\frac{u^{*}_{i+\frac{1}{2},j}-u^{*}_{i-\frac{1}{2},j}}{2\frac{\Delta x}{2}} \tag{3.9}$$

Les termes convectifs $\vec{u}\cdot\vec{\nabla}$, quant à eux, sont résolus à l'aide d'un schéma WENO (Weighted Essentially Non Oscillatory) d'ordre 5 qui allie précision et robustesse en empêchant l'apparition d'oscillation à l'approche d'une discontinuité [151, 152]. De plus, ce schéma permet un meilleur traitement des forts gradients.

3.2.6 Discrétisation temporelle

Deux schémas de résolution temporelle sont disponibles : le schéma Euler d'ordre 1 et le schéma Runge Kutta d'ordre 2. Soit l'équation suivante à résoudre :

$$\frac{\partial y}{\partial t}=f\left(t,y\right) \tag{3.10}$$

Le schéma d'Euler consiste simplement à résoudre :

$$y^{n+1}=y^{n}+\Delta t f\left(t,y^{n}\right) \tag{3.11}$$

Les équations pour le schéma Runge Kutta d'ordre 2 du type prédicteur/correcteur sont :

$$y^{n+\frac{1}{2}}=y^{n}+\frac{\Delta t}{2}f\left(t,y^{n}\right) \tag{3.12}$$

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t f\left(t + \frac{\Delta t}{2}, y^{n+\frac{1}{2}}\right) \tag{3.13}$$

Ce schéma consiste donc à résoudre deux pas d'Euler, le premier avec un pas de temps deux fois plus petit et le second avec un pas de temps normal. Cependant, pour le second pas d'Euler, la fonction f utilisée est l'approximation au pas de temps intermédiaire.

Les prochaines sections sont dédiées à l'extension du code vers un formalisme compressible.

3.3 Développement du formalisme compressible

3.3.1 Équations de Navier Stokes compressibles

La méthode CLSVOF est couplée avec une méthode de projection pour effectuer des Simulations Numériques Directes (DNS) des équations de Navier Stokes compressibles.

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\vec{\nabla} P + \vec{\nabla} \cdot \left(2\mu \bar{\bar{\epsilon}} + \left(\zeta - \frac{2}{3}\mu\right) \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \bar{\bar{I}}\right) + \rho \vec{f} \end{cases} \tag{3.14}$$

avec ρ, la masse volumique $[kg \cdot m^{-3}]$; $\vec{u}$, le vecteur vitesse $[m \cdot s^{-1}]$; P, la pression $[Pa]$; μ, la viscosité dynamique $[kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}]$; ζ, la viscosité de volume $[kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}]$; $\bar{\bar{\epsilon}} = \frac{1}{2}\left(\vec{\nabla}\vec{u} + \vec{\nabla}\vec{u}^t\right)$, le tenseur des taux de déformation $[s^{-1}]$; $\vec{f}$, les forces de volume (dont la force gravitationnelle) par unité de masse $[N \cdot kg^{-1}]$ et $\bar{\bar{I}}$, la matrice identité.

Dans ce chapitre, le liquide et le gaz sont considérés comme étant compressibles. Au niveau de l'interface, la tension de surface est prise en compte en considérant le saut de variables à travers cette interface liquide/gaz.

$$\left[\vec{n} \cdot \left(P\bar{\bar{I}} - \bar{\bar{\tau}}\right) \cdot \vec{n}\right] = \sigma\kappa \tag{3.15}$$

avec σ, la tension de surface ; κ, la courbure totale ; $\vec{n}$, le vecteur normal à l'interface ; $\bar{\bar{\tau}}$, le tenseur des contraintes visqueuses défini par $\bar{\bar{\tau}} = 2\mu\bar{\bar{\epsilon}} + \left(\zeta - \frac{2}{3}\mu\right) \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \bar{\bar{I}}$ et la convention $[A] = A_l - A_g$ pour le saut de variables à travers l'interface.

Le système d'équations Eq.3.14 est fermé par deux équations d'état ; une pour chaque phase. Pour le liquide, une équation de Tait est utilisée alors que pour le gaz, il

s'agit d'une loi de Laplace pour un gaz parfait lors d'une transformation isentropique.

$$\begin{cases} \rho_g = \left(\frac{P}{C_\gamma}\right)^{\frac{1}{\gamma_g}} \\ \rho_l = \rho_0 \left(\frac{P-P_0}{B} + 1\right)^{\frac{1}{\gamma_l}} \end{cases} \tag{3.16}$$

Les indices g et l représentent respectivement le gaz et le liquide ; γ représente l'indice adiabatique ; P_0, une pression de référence ; ρ_0, une masse volumique de référence ; C_γ, une constante dépendant des conditions initiales du gaz parfait étudié et B, une constante dépendant du module d'élasticité isostatique K du fluide considéré. Ce module d'élasticité isostatique est lié à la compressibilité du fluide. Ces équations d'état ont été choisies pour des raisons de simplicité ; l'objectif de cette thèse n'étant pas de rechercher les équations d'état les plus adaptées pour les configurations étudiées.

3.3.2 Méthodes numériques

Suivi d'interface

L'interface est résolue à l'aide d'un algorithme CLSVOF. Cette méthode permet une représentation précise de l'interface grâce à la méthode Level Set tout en assurant la conservation de la masse grâce à la méthode VOF. L'algorithme générale peut être trouvé dans Ménard et al. [95]. Cependant, dans cette thèse, un terme supplémentaire lié à la compressibilité doit être pris en compte dans l'équation de la fraction volumique de liquide. Afin d'obtenir la nouvelle formulation de cette équation, il faut partir de l'équation de conservation de la masse en considérant $\rho = \alpha_l\rho_l + \alpha_g\rho_g$:

$$\frac{\partial\left(\alpha_l\rho_l + \alpha_g\rho_g\right)}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\left(\alpha_l\rho_l\vec{u} + \alpha_g\rho_g\vec{u}\right) = 0 \tag{3.17}$$

avec α_l et α_g, les fractions volumiques de liquide et de gaz. Cette équation est ensuite séparée en deux, une équation pour la partie liquide et l'autre pour la partie gazeuse :

$$\begin{cases} \frac{\partial\alpha_l\rho_l}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\left(\alpha_l\rho_l\vec{u}\right) = \dot{m} \\ \frac{\partial\alpha_g\rho_g}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\left(\alpha_g\rho_g\vec{u}\right) = -\dot{m} \end{cases} \tag{3.18}$$

avec $\dot{m}$, le terme source de masse en $[kg\cdot m^{-3}\cdot s^{-1}]$. Ce terme apparaît en changement de phase car, dans ce cas, la masse de liquide et celle de gaz ne sont pas conservées (par exemple, le liquide se transforme en gaz lors d'une évaporation). Cependant, en additionnant les deux équations, on doit avoir de nouveau un second membre nul

car la masse totale, elle, est conservée. En développant les différentes dérivées, on obtient :

$$\rho_l \left(\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_l \vec{u}) \right) + \alpha_l \left(\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \rho_l \right) = \dot{m} \tag{3.19}$$

Puis, en remplaçant par la dérivée particulaire $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla}$ et en réarrangeant les différentes termes, on a :

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_l \vec{u}) = -\frac{\alpha_l}{\rho_l} \frac{D\rho_l}{Dt} + \frac{\dot{m}}{\rho_l} \tag{3.20}$$

De même, pour la partie gazeuse :

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_g \vec{u}) = -\frac{\alpha_g}{\rho_g} \frac{D\rho_g}{Dt} - \frac{\dot{m}}{\rho_g} \tag{3.21}$$

En additionnant Eq.3.20 et Eq.3.21, on obtient la divergence de la vitesse :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = -\frac{\alpha_l}{\rho_l} \frac{D\rho_l}{Dt} - \frac{\alpha_g}{\rho_g} \frac{D\rho_g}{Dt} + \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) \tag{3.22}$$

En ajoutant et en soustrayant $\alpha_l \vec{\nabla} \cdot \vec{u}$ dans Eq.3.20 et en remplaçant la divergence par son expression Eq.3.22, on a:

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_l \vec{u}) = -\frac{\alpha_l}{\rho_l} \frac{D\rho_l}{Dt} - \alpha_l \left(-\frac{\alpha_l}{\rho_l} \frac{D\rho_l}{Dt} - \frac{\alpha_g}{\rho_g} \frac{D\rho_g}{Dt} + \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) \right) + \alpha_l \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + \frac{\dot{m}}{\rho_l} \tag{3.23}$$

Ensuite, on utilise la relation $\alpha_g = 1 - \alpha_l$ et on factorise par $\alpha_l (1 - \alpha_l)$ afin d'obtenir :

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \vec{\nabla} . (\alpha_l \vec{u}) = \alpha_l (1 - \alpha_l) \left(\frac{1}{\rho_g} \frac{D\rho_g}{Dt} - \frac{1}{\rho_l} \frac{D\rho_l}{Dt} \right) - \alpha_l \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) + \alpha_l \vec{\nabla} . \vec{u} + \frac{\dot{m}}{\rho_l} \tag{3.24}$$

Enfin, en faisant apparaître le terme $D = \frac{1}{\rho_g} \frac{D\rho_g}{Dt} - \frac{1}{\rho_l} \frac{D\rho_l}{Dt}$ représentant la compressibilité du fluide et en ne considérant aucun changement de phase ($\dot{m} = 0$), on arrive à l'expression pour la fraction volumique de liquide :

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_l \vec{u}) = \alpha_l (1 - \alpha_l) D + \alpha_l \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \tag{3.25}$$

Contrairement à la plupart des études utilisant la méthode CLSVOF, la pression

P et les masse volumiques ρ_l et ρ_g sont, ici, des variables locales. Dans l'algorithme CLSVOF incompressible, les équations de transport de la fraction volumique de liquide et de la Level Set ont la même formulation et sont partagées dans les trois directions d'espace. Pour plus de clarté, seulement l'équation de transport de la VOF est montré ci-dessous.

$$\begin{cases} \frac{\tilde{\alpha}_l - \alpha_l^n}{\Delta t} + \frac{\left(\alpha_l^n u\right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\alpha_l^n u\right)_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} = \tilde{\alpha}_l \frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} \\ \frac{\hat{\alpha}_l - \tilde{\alpha}_l}{\Delta t} + \frac{\left(\tilde{\alpha}_l v\right)_{j+\frac{1}{2}} - \left(\tilde{\alpha}_l v\right)_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} = \hat{\alpha}_l \frac{v_{j+\frac{1}{2}} - v_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} \\ \frac{\bar{\alpha}_l - \hat{\alpha}_l}{\Delta t} + \frac{\left(\hat{\alpha}_l w\right)_{k+\frac{1}{2}} - \left(\hat{\alpha}_l w\right)_{k-\frac{1}{2}}}{\Delta z} = \bar{\alpha}_l \frac{w_{k+\frac{1}{2}} - w_{k-\frac{1}{2}}}{\Delta z} \end{cases} \tag{3.26}$$

Ensuite, une équation finale couple les trois directions. Pour être cohérent avec l'équation de la Level Set qui n'a pas de terme supplémentaire lié à la compressibilité, le terme compressible D de Eq.3.25 est seulement ajouté dans l'équation finale et Eq.3.26 est résolu en suivant le formalisme incompressible de Ménard et al. [95]. Le terme $\alpha_l (1 - \alpha_l) D$ dans Eq.3.25 est implicité de deux manières différentes selon le signe de D afin d'assurer la stabilité de cette implicitation :

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_l^{n+1} - \bar{\alpha}_l}{\Delta t} = & -\bar{\alpha}_l \frac{w_{k+\frac{1}{2}} - w_{k-\frac{1}{2}}}{\Delta z} - \hat{\alpha}_l \frac{v_{j+\frac{1}{2}} - v_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \tilde{\alpha}_l \frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} \\ & + \alpha_l^{n+1} \left(\frac{w_{k+\frac{1}{2}} - w_{k-\frac{1}{2}}}{\Delta z} + \frac{v_{j+\frac{1}{2}} - v_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} + \frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right) + A_{comp} \end{aligned} \tag{3.27}$$

$$avec \quad \begin{cases} A_{comp} = \alpha_l^{n+1} (1 - \bar{\alpha}_l) D & si \quad D < 0 \quad et \quad \alpha_l < 1 \\ A_{comp} = \bar{\alpha}_l \left(1 - \alpha_l^{n+1}\right) D & si \quad D > 0 \quad et \quad \alpha_l > 0 \end{cases}$$

Une étape de réinitialisation de la Level Set est réalisée à chaque pas de temps de manière similaire aux travaux précédents pour la formulation incompressible ([131, 95]). Toutes les informations géométriques de l'interface sont obtenues à l'aide de la fonction Level Set ϕ. La courbure κ est calculée par $\kappa = \vec{\nabla} \cdot \vec{n}$ avec $\vec{n} = \vec{\nabla}\phi / |\vec{\nabla}\phi|$, le vecteur normal à l'interface.

Méthode de projection

Pour calculer la vitesse et la pression, l'équation de quantité de mouvement de Eq. 3.14 est résolue en utilisant une méthode de projection adaptée à la formulation compressible. Cette méthode permet de découpler la vitesse et la pression. Les modi-

fication nécessaires au formalisme compressible étant conséquentes, une présentation du calcul de la vitesse intermédiaire est effectuée dans le paragraphe suivant puis le calcul de la pression est détaillé ensuite.

Obtention de la vitesse intermédiaire

Une vitesse intermédiaire est d'abord calculée sans le terme de pression $-\vec{\nabla}P$ ni celui de tension de surface :

$$\vec{u}^* = \underbrace{\frac{\rho^n \vec{u}^n}{\rho^*} - \Delta t \frac{\vec{\nabla} \cdot ((\rho\vec{u})^n \otimes \vec{u}^n)}{\rho^*}}_{\text{I}} + \underbrace{\Delta t \frac{\vec{\nabla} \cdot \left(2\mu\bar{\bar{\epsilon}} - \frac{2}{3}\mu\vec{\nabla} \cdot \vec{u}^n \bar{\bar{I}}\right)}{\rho^*}}_{\text{II}} + \Delta t \vec{f} \tag{3.28}$$

ρ^* correspond à la masse volumique calculée avec $\rho = \alpha_l\rho_l + \alpha_g\rho_g$ mais avec la nouvelle valeur de α_l obtenue après la résolution de l'interface. Le terme visqueux II est résolue de la même manière que dans Sussman et al. [147]. Cette méthode prend directement en compte le saut du tenseur visqueux à travers l'interface. Il a d'abord été développé dans un formalisme incompressible, donc le terme $(-\frac{2}{3}\mu\vec{\nabla} \cdot \vec{u}\bar{\bar{I}})$ a été ajouté à ce formalisme. La viscosité de volume ζ est supposée négligeable. De plus, aucune viscosité artificielle n'est ajoutée dans ce travail.

Concernant le terme de convection I, la méthode de Vaudor et al. [146] est utilisé assurant une consistance entre les flux de masse et de quantité de mouvement. Le maillage est un maillage eulérien décalé donc la vitesse est calculée sur les faces des mailles et les autres variables (pression, masse volumique, fraction volumique de liquide, ...) sont calculées au centre des mailles. Cette méthode, initialement proposée par Rudman [153], consiste à calculer le flux de masse $\rho\vec{u}$ au centre des mailles en utilisant la conservation de la masse. Le flux de masse doit être connu au centre des mailles afin d'avoir un schéma centré d'ordre 2 pour l'opérateur divergence. Une présentation de l'algorithme peut être trouvé dans Vaudor et al. [146] et est détaillée dans le prochain paragraphe.

Ensuite, l'équation de quantité de mouvement est discrétisée de la manière suivante en utilisant la vitesse intermédiaire obtenue précédemment.

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^* - \Delta t \frac{\vec{\nabla}P}{\rho^*} \tag{3.29}$$

Résolution du terme convectif

Maintenant, nous allons voir la manière de résoudre le terme convectif. Il s'agit du terme $\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}\otimes\vec{u})$ présent dans Eq. 3.14. La méthode retenue est celle utilisée par Vaudor et al. [146] et initialement proposée par Rudman [153]. Elle a due également être adaptée dans un formalisme compressible en utilisant des masse volumiques locales pour le calcul des flux. Le maillage utilisé dans ARCHER étant de type MAC, la vitesse est calculée sur les faces des mailles (en notation indicée, cela revient à écrire les vitesses en $i\pm\frac{1}{2}$, $j\pm\frac{1}{2}$ et $z\pm\frac{1}{2}$). La résolution du terme convectif se faisant dans le cadre du calcul de la vitesse intermédiaire $\vec{u}^*$, celui-ci doit également être calculé au niveau des faces. Seul le calcul pour la composante u^* du vecteur $\vec{u}^*$ est décrit ; l'extension aux autres directions se faisant naturellement et plus de détails pouvant être trouvés dans Vaudor et al. [146]. Dans cette direction, le vecteur $\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}\otimes\vec{u})$ se réécrit de la façon suivante :

$$\left(\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}\otimes\vec{u})\right)\cdot\vec{e_x}=\frac{\partial(\rho u)\,u}{\partial x}+\frac{\partial(\rho v)\,u}{\partial y} \tag{3.30}$$

Il s'agit de la formulation en 2D, qui est choisie ici pour plus de clarté ; l'extension dans la troisième dimension étant évidente.

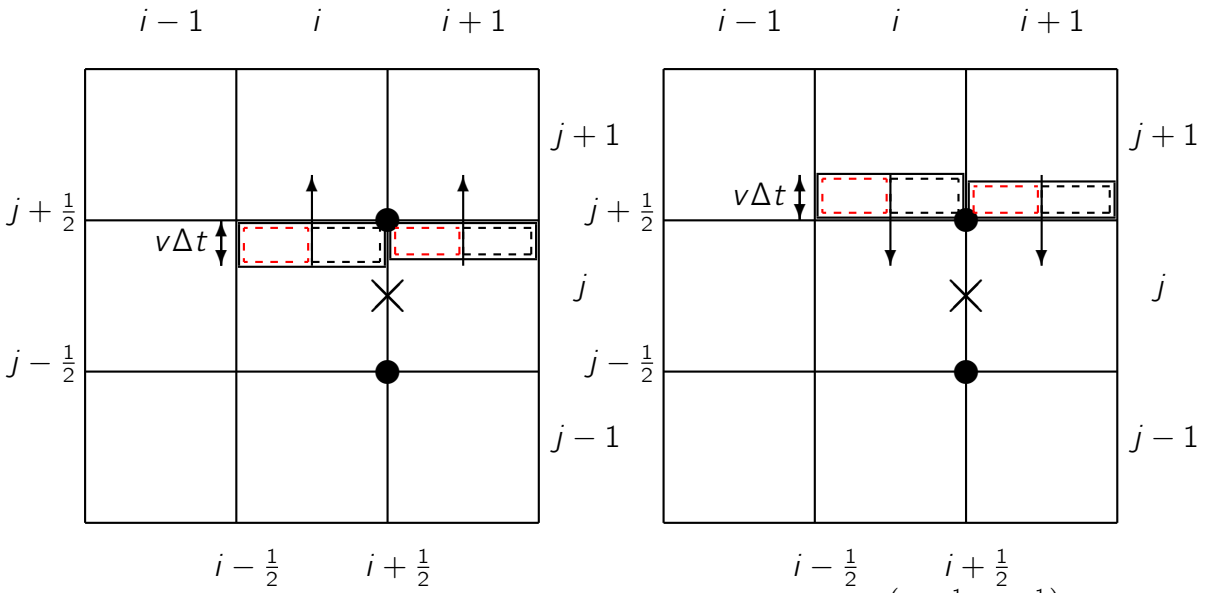


Figure 3.2 – Schéma explicatif pour le calcul du flux ρv en $\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)$. Cas avec $v>0$ à gauche et $v<0$ à droite. Le rectangle en trait noir plein correspond au flux total. Le rectangle en trait pointillé noir correspond au flux calculé sur une demi-cellule. Le rectangle en trait pointillé rouge correspond au flux déduit sur l'autre demi-cellule.

Tout d'abord, pour le calcul de la dérivée selon y, $\frac{\partial(\rho v)u}{\partial y}$, le flux ρv doit être

calculé en $\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)$ et en $\left(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)$ (Fig. 3.2) afin d'avoir le résultat en $\left(i+\frac{1}{2},j\right)$. Le calcul de ce flux se fait à l'aide du flux de fraction volumique de liquide obtenu lors de la résolution de l'interface (méthode CLSVOF) :

$$\rho v = \rho_l v \alpha_l + \rho_g v (1-\alpha_l) \tag{3.31}$$

Le flux de fraction volumique de liquide correspond à la portion de liquide contenue dans un volume $v\Delta t\Delta x$ qui est advectée vers la cellule voisine. Ainsi, deux cas doivent être différenciés : si $v\left(i,j+\frac{1}{2}\right) > 0$ alors la portion de liquide advectée est celle contenue en (i,j) (Figure 3.2 gauche) et si $v\left(i,j+\frac{1}{2}\right) < 0$ alors la portion de liquide advectée est celle contenue en $(i,j+1)$ (Figure 3.2 droite). De même, selon le signe de la vitesse, les masses volumiques ρ_l et ρ_g sont celles situées en j ou $j+1$. Par la suite, l'explication sera centrée sur le cas $v > 0$. Pour connaître le flux ρv en $\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)$, il faut calculer les flux sur les demi-cellules de part et d'autre du point $\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)$. Le flux sur la demi-cellule droite en (i,j) (rectangle noir en pointillés sur Figure 3.2) est obtenu en calculant la fraction volumique de liquide advectée sur cette demi-cellule multipliée par la masse volumique en (i,j) selon la relation Eq. 3.31. Le flux sur la demi-cellule gauche en $(i+1,j)$ (rectangle rouge en pointillés sur Figure 3.2) est, quant à lui, obtenu en ôtant le flux précédent calculé en $(i+1,j)$ au flux total (rectangle noir en trait plein sur Figure 3.2) en $(i+1,j)$ calculé lors de la résolution de l'interface. Le flux ρv en $\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)$ est la somme de ces deux "demi-flux". Le flux en $\left(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)$ est obtenu en effectuant les mêmes étapes avec $j-1$ au lieu de j.

Concernant la vitesse u présente dans $\frac{\partial(\rho v)u}{\partial y}$, elle est interpolée à l'aide d'un schéma WENO d'ordre 5. Le terme $\frac{\partial(\rho v)u}{\partial y}$ se discrétise alors de la manière suivante :

$$\frac{\partial\left(\rho v\right)u}{\partial y} = \frac{\left(\rho v u\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - \left(\rho v u\right)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} \tag{3.32}$$

Enfin, pour le calcul de la dernière dérivée selon x, $\frac{\partial(\rho u)u}{\partial x}$, les flux ρu doivent être calculés au centre des mailles en (i,j) et en $(i+1,j)$ pour que la dérivée soit en $\left(i+\frac{1}{2},j\right)$. La méthode utilisée pour calculer ces flux est différente de celle employée pour les flux ρv et ρw.

Cette méthode consiste à utiliser la conservation de la masse sur une demi-cellule

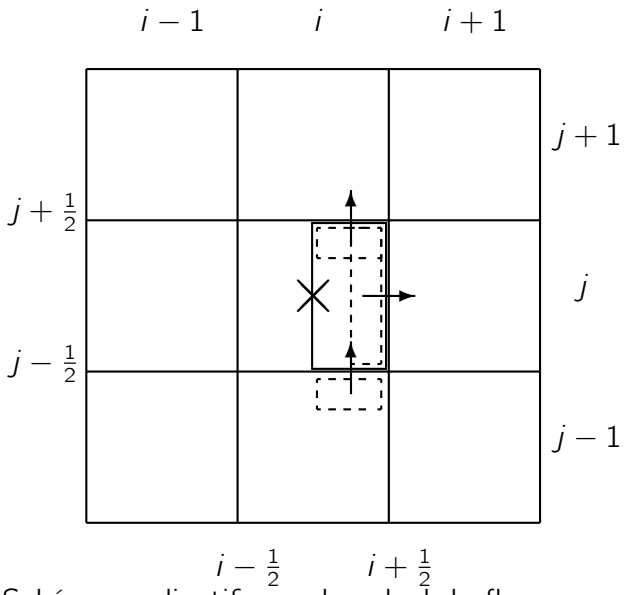


Figure 3.3 – Schéma explicatif pour le calcul du flux ρu au niveau de la croix.

(rectangle noir en trait plein sur Figure 3.3). De manière discrétisée, elle s'écrit :

$$\frac{\rho^{n+1}_{i+\frac{1}{4},j} - \rho^{n}_{i+\frac{1}{4},j}}{\Delta t} + \frac{(\rho u)_{i+\frac{1}{2},j} - (\rho u)_{i,j}}{\Delta x} + \frac{(\rho v)_{i+\frac{1}{4},j+\frac{1}{2}} - (\rho v)_{i+\frac{1}{4},j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} = 0 \tag{3.33}$$

Le flux recherché est $(\rho u)_{i,j}$. En l'isolant, on obtient :

$$(\rho u)_{i,j} = \frac{\left(\rho^{n+1}_{i+\frac{1}{4},j} - \rho^{n}_{i+\frac{1}{4},j}\right)\Delta x}{\Delta t} + (\rho u)_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\left((\rho v)_{i+\frac{1}{4},j+\frac{1}{2}} - (\rho v)_{i+\frac{1}{4},j-\frac{1}{2}}\right)\Delta x}{\Delta y} \tag{3.34}$$

Les flux ρv présents dans cette équation sont les mêmes que ceux calculés précédemment. De plus, le flux ρu en $\left(i+\frac{1}{2},j\right)$ est déjà calculé lors de la résolution de l'interface par la méthode CLSVOF. Ainsi, pour calculer ρu en (i,j), il ne reste plus qu'à déterminer les masses volumiques de mélange dans la demi-cellule aux instants n et $n+1$. Pour cela, la relation $\rho = \rho_l \alpha_l + \rho_g (1-\alpha_l)$ est utilisée avec α_l, la fraction volumique de liquide obtenue géométriquement dans la demi-cellule en question aux instants n (avant résolution de l'interface) et $n+1$ (après résolution de l'interface).
Enfin, la dérivée selon x, $\frac{\partial(\rho u)u}{\partial x}$, est discrétisée de la manière suivante :

$$\frac{\partial (\rho u)\, u}{\partial x} = \frac{(\rho u u)_{i+1,j} - (\rho u u)_{i,j}}{\Delta x} \tag{3.35}$$

Cela permet de clore la résolution du terme convectif utilisé dans le calcul de u^*.

Résolution du terme visqueux

Dans ce paragraphe, la manière de résoudre le tenseur des contraintes visqueuses est expliquée. Comme vu précédemment, la méthode est une adaptation de la méthode de Sussman ([147]) en compressible et consiste à ajouter au tenseur des contraintes visqueuses, le terme $(-\frac{2}{3}\mu\vec{\nabla}\cdot\vec{u}\bar{\bar{I}})$. Comme pour le terme convectif, le tenseur visqueux étant résolu lors du calcul de $\vec{u}^*$, il doit être calculé au niveau des faces de chaque maille. En notation matricielle, il s'écrit :

$$\bar{\bar{\tau}} = 2\mu\bar{\bar{\epsilon}} - \frac{2}{3}\mu\vec{\nabla}\cdot\vec{u}\bar{\bar{I}} = \begin{pmatrix} 2\mu\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right) & \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \mu\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & 2\mu\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right) & \mu\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) & \mu\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) & 2\mu\frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right) \end{pmatrix} \tag{3.36}$$

Pour plus de clarté, seul le calcul de la composante dans la direction x en 2D est expliqué. La composante u^* du vecteur $\vec{u}^*$ se situe en $\left(i+\frac{1}{2},j\right)$; ainsi, la composante selon la direction x de $\vec{\nabla}\cdot\bar{\bar{\tau}}$ doit également se situer en $\left(i+\frac{1}{2},j\right)$. En 2D, elle s'écrit :

$$\left(\vec{\nabla}\cdot\bar{\bar{\tau}}\right)\cdot\vec{e_x} = \frac{\partial\left(2\mu\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right)\right)}{\partial x} + \frac{\partial\left(\mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)\right)}{\partial y} \tag{3.37}$$

Afin d'être localisée en $\left(i+\frac{1}{2},j\right)$, les variables de la première dérivée doivent être calculées en $(i+1,j)$ et en (i,j) (voir Figure 3.4). En effet, s'agissant d'une dérivée selon la direction x, la coordonnée dans la direction y doit être la même que celle recherchée. La dérivée selon x se discrétise de la manière suivante :

$$\frac{\partial\left(2\mu\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right)\right)}{\partial x} = \frac{\left(2\mu\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right)\right)_{i+1,j} - \left(2\mu\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right)\right)_{i,j}}{\Delta x} \tag{3.38}$$

De même, les variables de la seconde dérivée de Eq.3.37 doivent être calculées en $\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)$ et en $\left(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)$ (voir Figure 3.4). La dérivée selon y se discrétise

de la manière suivante :

$$\frac{\partial\left(\mu\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\right)}{\partial y}=\frac{\left(\mu\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}-\left(\mu\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\right)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} \tag{3.39}$$

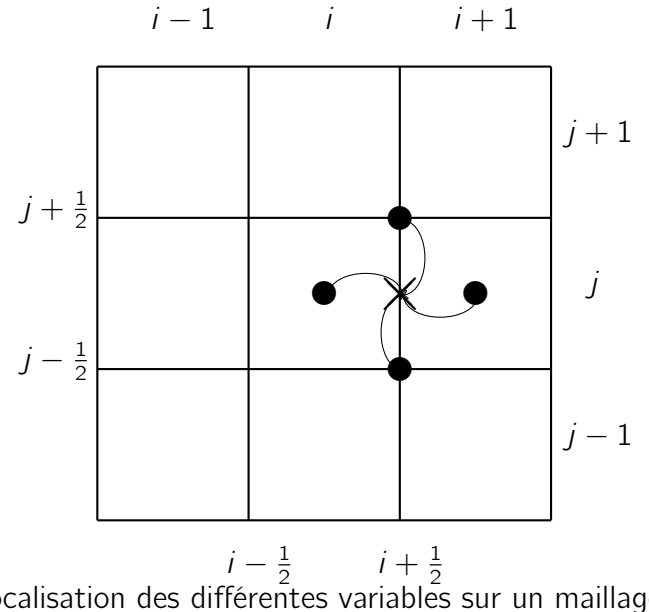


Figure 3.4 – Localisation des différentes variables sur un maillage MAC pour le calcul de $\vec{\nabla}\cdot\bar{\bar{\tau}}$.

Cette fois-ci, pour le calcul du terme en $\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)$, les variables de la dérivée selon x doivent être calculées en $\left(i+1,j+\frac{1}{2}\right)$ et en $\left(i,j+\frac{1}{2}\right)$, et celles de la dérivée selon y, en $\left(i+\frac{1}{2},j+1\right)$ et en $\left(i+\frac{1}{2},j\right)$ (voir Figure 3.5) pour les mêmes raisons que celles évoquées précédemment. Ainsi, le terme en $\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)$ se discrétise de la manière suivante :

$$\mu\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)=\mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1}-u_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta y}+\frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}}-v_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta x}\right) \tag{3.40}$$

Pour les termes en $\left(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)$, $(i+1,j)$ et (i,j), le principe reste le même. Enfin, concernant la viscosité dynamique μ, elle prend la valeur μ_l dans le liquide et μ_g dans le gaz. Dans les cellules mixtes où l'interface liquide/gaz est présente, la valeur de la viscosité est une moyenne harmonique des viscosités du liquide et du gaz pondérées par la fonction distance obtenue avec la méthode Level Set. Plus de détails sur la méthode sont disponibles dans la littérature [147, 146, 154].

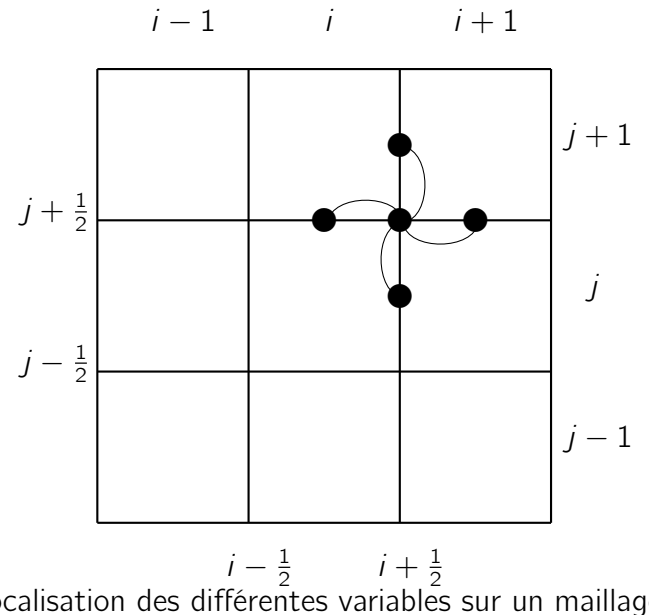


Figure 3.5 – Localisation des différentes variables sur un maillage MAC pour le calcul du terme en $\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}\right)$.

Détermination de la pression

La pression est calculée à l'aide d'un solveur de Poisson après la résolution de la vitesse intermédiaire $\vec{u}^*$. Pour obtenir l'équation à résoudre, il suffit d'appliquer l'opérateur de divergence sur l'équation Eq.3.29 :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u}^{n+1} = \vec{\nabla} \cdot \vec{u}^* - \vec{\nabla} \cdot \left(\Delta t \frac{\vec{\nabla} P}{\rho^*} \right) \tag{3.41}$$

L'expression de la divergence de la vitesse à l'instant $n+1$ est la même que celle utilisée dans le calcul de la fraction volumique de liquide (Eq.3.22) :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = -\frac{\alpha_l}{\rho_l} \frac{D\rho_l}{Dt} - \frac{\alpha_g}{\rho_g} \frac{D\rho_g}{Dt} + \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) \tag{3.42}$$

En considérant la masse volumique comme une fonction de la pression uniquement et en prenant le terme source de masse nul, Eq.3.42 peut être écrite comme suit :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = -\left(\frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2} + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} \right) \frac{DP}{Dt} \tag{3.43}$$

avec $c = \sqrt{\frac{\partial P}{\partial \rho}}$, la vitesse du son en $[m \cdot s^{-1}]$. Ensuite, en injectant Eq.3.43 dans Eq.3.41, on a :

$$-\vec{\nabla} \cdot \left(\Delta t \frac{\vec{\nabla} P}{\rho^*} \right) = -\left(\frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2} + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} \right) \frac{DP}{Dt} - \vec{\nabla} \cdot \vec{u}^* \tag{3.44}$$

Enfin, en développant la dérivée particulaire et en divisant par Δt, une équation de type Helmholtz est obtenue pour la pression :

$$\begin{aligned} -\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{\nabla}P^{n+1}}{\rho^*}\right)+\left(\frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2\Delta t^2}+\frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2\Delta t^2}\right)P^{n+1} \\ =\left(\frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2\Delta t^2}+\frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2\Delta t^2}\right)\left(P^n-\Delta t\vec{u}\cdot\vec{\nabla}P^n\right)-\frac{\vec{\nabla}\cdot\vec{u}^*}{\Delta t} \end{aligned} \tag{3.45}$$

On remarque que l'équation obtenue est similaire à Huber et al. [123] avec, ici, des termes dépendant de la fraction volumique. Le terme $\vec{\nabla}\cdot\vec{u}^*$ est résolu à l'aide d'un schéma centré d'ordre 2 et le terme $\vec{u}\cdot\vec{\nabla}P$, à l'aide d'un schéma WENO d'ordre 5 ([155]). La pression étant calculée au centre des mailles, le terme $\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{\nabla}P^{n+1}}{\rho^*}\right)$ doit être calculé au centre. Ainsi, la masse volumique utilisée doit se situer sur les faces. Pour ce faire, on utilise de nouveau la masse volumique calculée sur les demi-cellules lors de la résolution du terme convectif. La masse volumique sur la face correspond ainsi, à la moyenne des masses volumiques des demi-cellules situées de part et d'autre de la face. Le solveur de Poisson utilisé pour résoudre cette équation de type Helmholtz consiste en une méthode MGCG (MultiGrid preconditioned Conjugate Gradient) couplée avec le schéma itératif Gauss-Seidel "Red-Black". Cette méthode permet de résoudre un système linéaire de la forme $Ax = b$ par un procédé itératif qui converge si la matrice A est symétrique définie positive. Dans notre cas, le vecteur b correspond au second membre de l'équation Eq.3.45 auquel a été ajouté le terme correspondant au saut de pression à travers l'interface liquide/gaz. Ce terme prend en compte les forces de tension de surface et est résolu grâce à une méthode Ghost Fluid ([95]). L'avantage de la méthode Ghost Fluid est une représentation plus réaliste de l'interface (nette et infiniment fine) : les conditions de saut sont directement ajoutées à la position de l'interface à travers une modification locale des schémas numériques. La distance à l'interface est assurée par la fonction Level Set. Ensuite, le vecteur x correspond au vecteur solution ; il s'agit, dans notre cas, de la pression P^{n+1}. Les différentes composantes de ce vecteur sont la pression au centre de la maille (i, j, k) et la pression au centre des mailles voisines $((i+1, j, k) ; (i-1, j, k) ; (i, j+1, k) ; (i, j-1, k) ; (i, j, k+1) ; (i, j, k-1))$. Enfin, la matrice A correspond aux coefficients devant chaque terme de pression. La résolution du système linéaire se faisant, non pas sur une seule maille mais sur

l'ensemble des mailles du domaine de calcul, les composantes du vecteur x et de la matrice A sont en réalité des matrices dont les composantes représentent les différentes mailles du domaine.
Le terme à gauche du signe égal dans Eq. 3.45 peut se discrétiser de la manière suivante :

$$-\frac{\frac{P_{i+1,j,k}-P_{i,j,k}}{\rho_{i+\frac{1}{2},j,k}\Delta x}-\frac{P_{i,j,k}-P_{i-1,j,k}}{\rho_{i-\frac{1}{2},j,k}\Delta x}}{\Delta x}-\frac{\frac{P_{i,j+1,k}-P_{i,j,k}}{\rho_{i,j+\frac{1}{2},k}\Delta y}-\frac{P_{i,j,k}-P_{i,j-1,k}}{\rho_{i,j-\frac{1}{2},k}\Delta y}}{\Delta y}-\frac{\frac{P_{i,j,k+1}-P_{i,j,k}}{\rho_{i,j,k+\frac{1}{2}}\Delta z}-\frac{P_{i,j,k}-P_{i,j,k-1}}{\rho_{i,j,k-\frac{1}{2}}\Delta z}}{\Delta z}$$
$$+\left(\frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2\Delta t^2}+\frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2\Delta t^2}\right)_{i,j,k}P_{i,j,k} \tag{3.46}$$

Dans ce cas, les différents coefficients de la matrice A sont :

- Pour la pression $P_{i,j,k-1}$: $A(1)=-\frac{1}{\rho_{i,j,k-\frac{1}{2}}\Delta z^2}$
- Pour la pression $P_{i,j-1,k}$: $A(2)=-\frac{1}{\rho_{i,j-\frac{1}{2},k}\Delta y^2}$
- Pour la pression $P_{i-1,j,k}$: $A(3)=-\frac{1}{\rho_{i-\frac{1}{2},j,k}\Delta x^2}$
- Pour la pression $P_{i+1,j,k}$: $A(5)=-\frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},j,k}\Delta x^2}$
- Pour la pression $P_{i,j+1,k}$: $A(6)=-\frac{1}{\rho_{i,j+\frac{1}{2},k}\Delta y^2}$
- Pour la pression $P_{i,j,k+1}$: $A(7)=-\frac{1}{\rho_{i,j,k+\frac{1}{2}}\Delta z^2}$
- Pour la pression $P_{i,j,k}$: $A(4)=-\left(A(1)+A(2)+A(3)+A(5)+A(6)+A(7)\right)+\left(\frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2\Delta t^2}+\frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2\Delta t^2}\right)_{i,j,k}$

Pour traiter les différentes conditions aux limites, il faut remplacer les coefficients dans les mailles limites par les valeurs adéquates. Par exemple, dans le cas d'une condition de symétrie dans la direction x, on a en "$ideb$" : $P_{i-1,j,k}=P_{i,j,k}$. Ainsi, le coefficient $A(3)$ en "$ideb$" s'annule et le coefficient $A(4)$ se voit ajouter le terme $-\frac{1}{\rho_{i-\frac{1}{2},j,k}\Delta x^2}$. De même, en "$ifin$", $P_{i+1,j,k}=P_{i,j,k}$ annulant donc le coefficient $A(5)$ et ajoutant le terme $-\frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},j,k}\Delta x^2}$ au coefficient $A(4)$.

L'approche multigrille permet, elle, de converger plus rapidement vers la solution finale tout en lissant l'erreur. Elle consiste à résoudre le système linéaire sur la grille la plus fine puis à injecter la solution comme première approximation dans une grille plus grossière. L'étape est répétée jusqu'à la grille la plus grossière. Ces différentes étapes successives permettent de lisser l'erreur commise sur la solution ; en effet, le fait de résoudre sur une grille moins fine élimine les modes à haute fréquence. Ensuite, la solution avec l'erreur plus lisse est reportée sur les grilles de plus en plus fines afin

d'avoir, au final, une solution convergée plus lisse. Ce type de schéma est appelé V-cycle en raison de l'aller-retour entre les grilles fines et les grilles grossières.

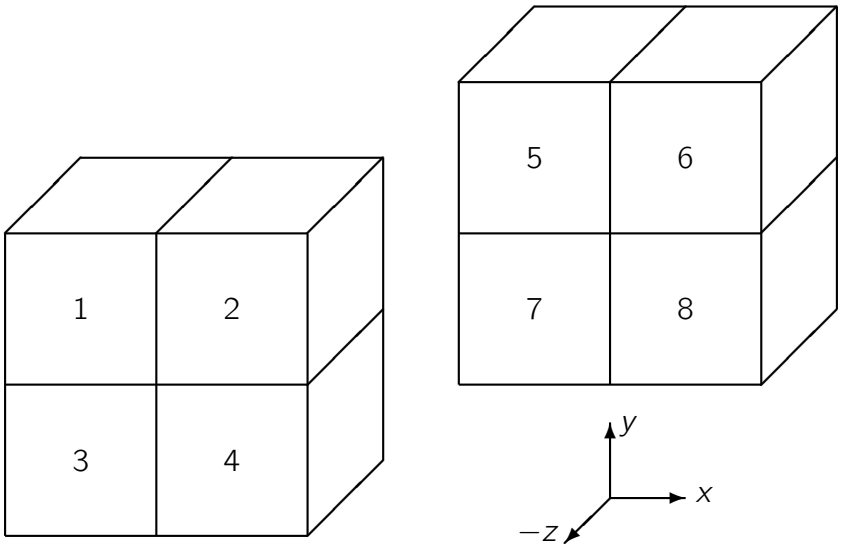


Figure 3.6 – Schéma explicatif pour le calcul des nouveaux coefficients de la matrice dans le cas d'une méthode multigrille. Les huit mailles représentées ici correspondent à une seule maille de la grille plus grossière.

Les différents coefficients de la matrice A doivent être interpolés sur les grilles plus grossières. Chaque nouvelle maille de la nouvelle grille correspond à huit mailles de la grille précédente plus fine (deux mailles dans chaque direction). Cependant, selon les coefficients, l'interpolation ne se fait pas sur les huit mailles. En effet, prenons l'exemple du coefficient $A(1) = -\frac{1}{\rho_{i,j,k-\frac{1}{2}}\Delta z^2}$: dans le cas d'une maille (i,j,k), il se situe sur la face en $k-\frac{1}{2}$. Donc, pour avoir ce coefficient sur la nouvelle maille, il faut effectuer une interpolation à partir des coefficients des mailles 1, 2, 3 et 4 (pour les indices des coefficients, se référer à la figure 3.6). L'interpolation consiste juste en une moyenne des valeurs précédentes. Le nouveau coefficient s'écrit donc :

$$A(1)_{nouv} = \frac{A(1)_1 + A(1)_2 + A(1)_3 + A(1)_4}{16} \tag{3.47}$$

La division par 16 vient de la division par 4 en raison de la moyenne sur 4 valeurs et d'une seconde division par 4 en raison de la modification du maillage. En effet, sur le nouveau maillage, on a $\Delta z_{nouv} = 2\Delta z$ et donc $\Delta z^2_{nouv} = 4\Delta z^2$. Le même principe s'applique pour les autres coefficients. Ainsi pour le coefficient $A(7)$ en $k+\frac{1}{2}$, l'interpolation se fait à partir des mailles 5, 6, 7 et 8 ; pour le coefficient

$A(5)$ en $i+\frac{1}{2}$, l'interpolation se fait à partir des mailles 2, 4, 6 et 8 ; etc $\cdots$ Pour le coefficient $A(4)$, c'est différent. Comme précédemment, il se calcule en sommant les six autres coefficients. Le terme supplémentaire lié à la compressibilité se trouvant au centre de la maille, l'interpolation se fait sur les huit mailles. En appelant ce terme supplémentaire C, son nouveau terme s'écrit :

$$C_{nouv} = \frac{C_1 + C_2 + C_3 + C_4 + C_5 + C_6 + C_7 + C_8}{8} \tag{3.48}$$

Cette fois-ci, la division est seulement par 8 en raison de la moyenne sur les huit mailles. Aucune division supplémentaire n'est requise car ce terme de dépend pas de la résolution du maillage. Le nouveau coefficient $A(4)_{nouv}$ se calcule ainsi de la manière suivante :

$$A(4)_{nouv} = -\left(A(1)_{nouv} + A(2)_{nouv} + A(3)_{nouv} + A(5)_{nouv} + A(6)_{nouv} + A(7)_{nouv}\right) + C_{nouv} \tag{3.49}$$

La manière de résoudre le système linéaire est la même qu'en incompressible. Plus d'explication sur la méthode Gauss-Seidel "Red-Black" ainsi que sur l'approche multigrille peuvent être trouvées dans Tatebe [156] et Zhang [157].

Finalisation

La vitesse finale est calculée à l'aide de Eq.3.29 en utilisant un schéma centré d'ordre 2 pour le gradient de pression. Un schéma Runge Kutta d'ordre 2 de type prédicteur correcteur est utilisé pour l'intégration temporelle. Enfin, la masse volumique et la vitesse du son pour le liquide et le gaz sont mises à jour grâce à Eq.3.16. Le terme de compressibilité D utilisé dans Eq.3.25 est résolu de manière à être cohérent avec le terme de pression :

$$D^{n+1} = \left(\frac{1}{\rho_g c_g^2} - \frac{1}{\rho_l c_l^2}\right)\left(\frac{P^{n+1} - P^n}{\Delta t} + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}P\right) \tag{3.50}$$

Concernant le calcul du pas de temps, une condition CFL similaire à celle utilisée par Kang et al. [158] est utilisée. En raison de la résolution implicite des termes acoustiques dans l'équation de la pression, la condition CFL est la même que pour les écoulements diphasiques incompressibles. Ainsi, le pas de temps est plus grand que celui obtenu avec un CFL acoustique basé sur la vitesse du son. Pour $CFL = 1$, la

condition CFL peut être écrite de la manière suivante :

$$\Delta t \left(\frac{(C_{cfl} + V_{cfl}) + \sqrt{(C_{cfl} + V_{cfl})^2 + 4\,(G_{cfl})^2 + 4\,(S_{cfl})^2}}{2} \right) \leq 1 \qquad (3.51)$$

avec $C_{cfl} = \frac{|u|_{max}}{\Delta x} + \frac{|v|_{max}}{\Delta y} + \frac{|w|_{max}}{\Delta z}$, $V_{cfl} = \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} + \frac{2}{\Delta z^2} \right) * max \left\{ \frac{\mu_l}{\rho_l}, \frac{\mu_g}{\rho_g} \right\}$, $G_{cfl} = \sqrt{\frac{|g|}{\Delta y}}$ et $S_{cfl} = \sqrt{\frac{\sigma |\kappa|}{min\{\rho_g, \rho_l\} * (min\{\Delta x, \Delta y, \Delta z\})^2}}$.

Un récapitulatif de l'ensemble de l'algorithme compressible est montré sur la figure 3.7.

3.4 Résultats

3.4.1 Tube à choc diphasique

Ce cas de validation est une configuration d'explosion sous-marine, basée sur le cas $III - A$ étudié dans Hu et Khoo [159] mais également dans Boger et al. [122] où des équations d'état similaires sont utilisées (équation des gaz parfaits pour le gaz et équation de Tait pour le liquide). Des bulles sont générées par l'explosion, et se dilatent rapidement dans l'eau. Une onde de choc se développe dans l'eau et une onde de raréfaction se réfléchit dans les bulles. Ce cas présente un fort ratio de pression et de masse volumique, ce qui est difficile à traiter sans des méthodes numériques robustes. Il s'agit d'un cas 1D avec une longueur du domaine de 1 m. Les conditions aux limites sont des conditions de type symétrie et les conditions initiales sont les suivantes :

$$(\rho, u, p, \gamma) = \begin{cases} (0.01, 0, 1000, 2), & \text{if } x < 0.5 \\ (1, 0, 1, 7.15) & \text{if } x > 0.5 \end{cases}$$

La figure 3.8 compare nos résultats avec la solution analytique, montrant un bon accord avec la théorie. La vitesse de l'onde est correctement capturée de même que le profil de masse volumique. Le profil de pression est aussi correctement capturé (Figure 3.9) sans oscillations. Ces résultats démontrent la précision et la robustesse de notre méthode basée sur la pression dans un contexte d'écoulements diphasiques.

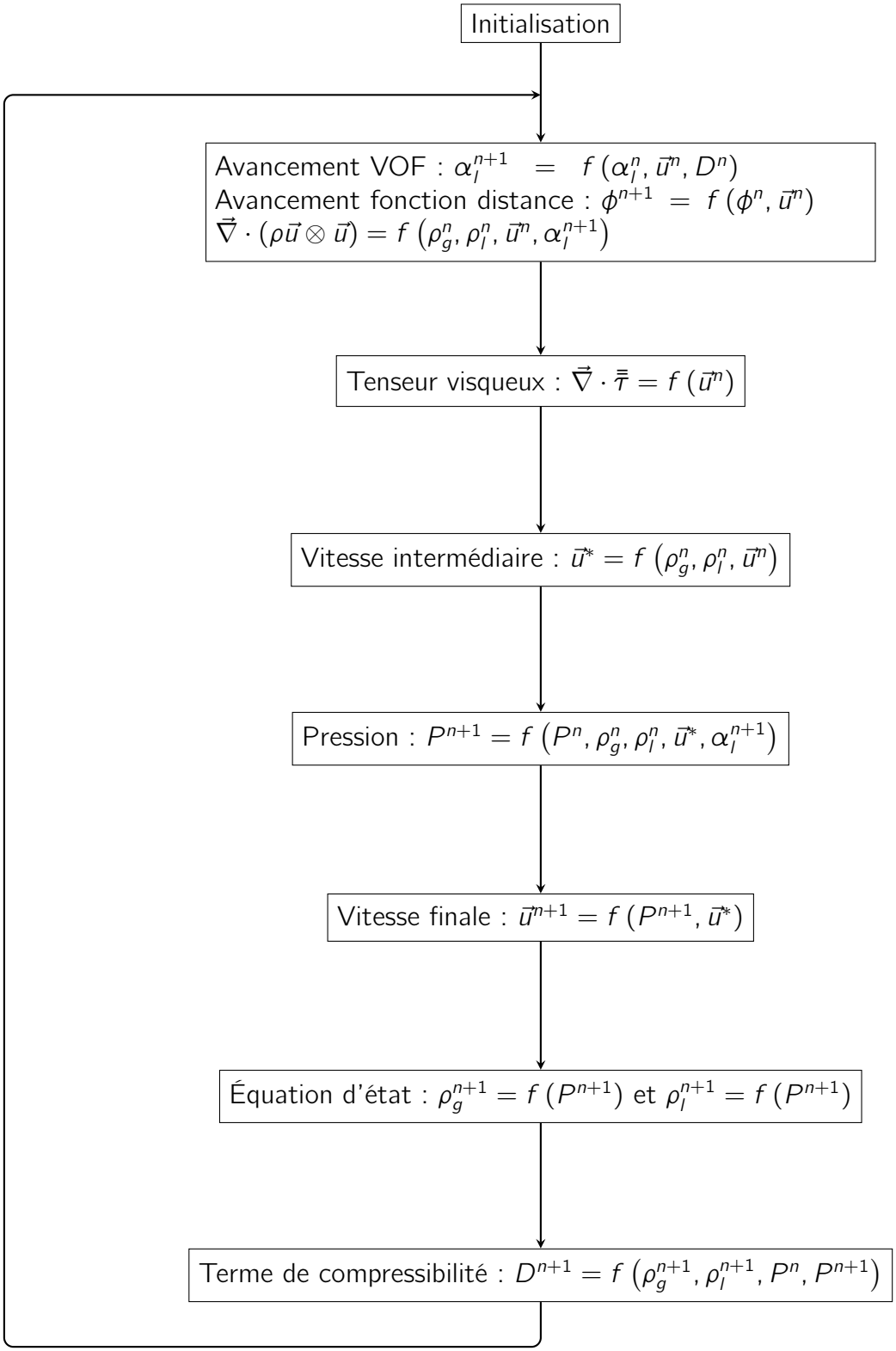


Figure 3.7 – Pas d'Euler de l'algorithme compressible.

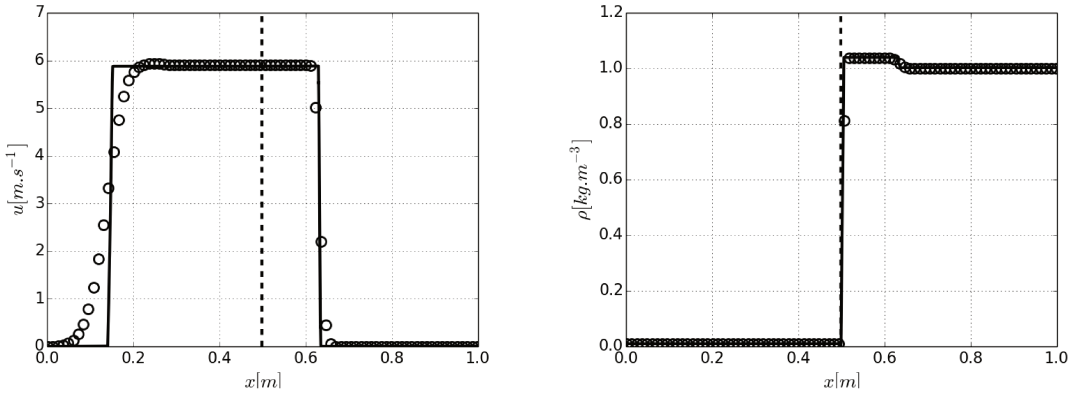


Figure 3.8 – Profils de vitesse (gauche) et de masse volumique (droite) à $t = 8{\times}10^{-4}$ s. La ligne continue représente la théorie et les cercles représentent le résultat de la simulation pour un maillage avec 256 mailles et $dt = 8 \times 10^{-6}$ s. La ligne pointillée représente la localisation de l'interface liquide/gaz.

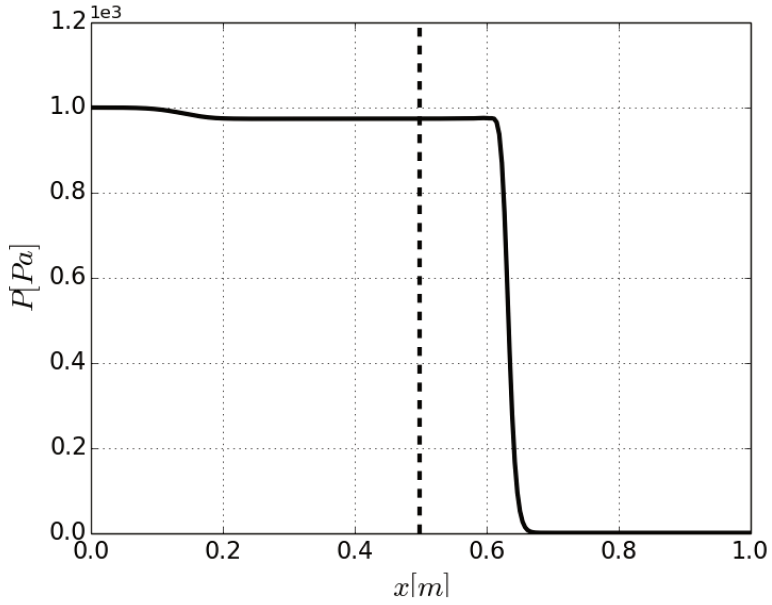


Figure 3.9 – Profil de pression à $t = 8 \times 10^{-4}$ s. La ligne continue représente le résultat de la simulation pour un maillage avec 256 mailles et $dt = 8 \times 10^{-6}$ s. La ligne pointillée représente la localisation de l'interface liquide/gaz.

3.4.2 Colonne d'eau oscillante

Dans le but de valider la méthode, un cas test représentant une colonne d'eau oscillante est réalisé (voir Figure 3.10). Ce cas correspond à l'oscillation d'une colonne d'eau entre deux colonnes d'air due à un gradient de pression initial. Le liquide comprime d'abord une première colonne d'air puis, quand la pression dans cette colonne est supérieure à l'inertie du liquide, l'air pousse le liquide vers la seconde colonne d'air

et ainsi de suite. Ce cas test peut être vu comme l'adaptation en 1D, dans une géométrie cartésienne, du cas Rayleigh-Plesset représentant l'oscillation d'une bulle d'air dans du liquide. Ce cas a été étudié précédemment ([43, 119, 118]) mais en imposant une vitesse initiale à la colonne de liquide au lieu d'un gradient de pression. Cependant, aucune solution de référence n'existe pour comparer avec les résultats numériques ; bien qu'une solution théorique puisse être développée en utilisant les conservations de la masse et de la quantité de mouvement et en considérant le liquide comme étant incompressible. La conservation de la masse exprimée sous la forme d'une conservation du débit donne :

$$\rho_l S u = \rho_l S \frac{dR}{dt} \tag{3.52}$$

avec S, une surface plane à une position donnée x ; R, la position de la première interface gaz/liquide ; ρ_l la masse volumique de liquide et u, la vitesse du liquide dans la direction x. En considérant le liquide incompressible, on a :

$$u = \frac{dR}{dt} \tag{3.53}$$

La vitesse du liquide dépend donc uniquement du temps. Ensuite, l'équation de la quantité de mouvement en 1D sans tension de surface ni viscosité s'écrit :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{\rho_l}\frac{\partial P}{\partial x} \tag{3.54}$$

En injectant Eq.3.53 dans Eq.3.54, on obtient :

$$\frac{d^2R}{dt^2} = -\frac{1}{\rho_l}\frac{\partial P}{\partial x} \tag{3.55}$$

Enfin, en intégrant Eq.3.55 entre la position de la première interface gaz/liquide R_1 et la position de la seconde interface R_2, l'équation pour l'évolution de la position de la première interface en fonction du temps est obtenue :

$$\frac{d^2R}{dt^2} = \frac{P|_{R_1} - P|_{R_2}}{\rho_l L} \tag{3.56}$$

avec $L = R_2 - R_1 = cst$, la longueur de la lame de liquide. Les pressions en R_1 et R_2 sont obtenues à l'aide d'une équation d'état. Ensuite, la vitesse est calculée avec Eq.3.53. Aucune solution analytique n'a été trouvée mais une solution de référence

peut facilement être calculée. Il est important de mentionner que la solution de référence ne considère aucune fluctuation de pression (hypothèse incompressible), ce qui n'est pas le cas de la méthode numérique présentée dans cette thèse. Ainsi, de légères différences peuvent être observées sur les résultats en comparant les deux approches.

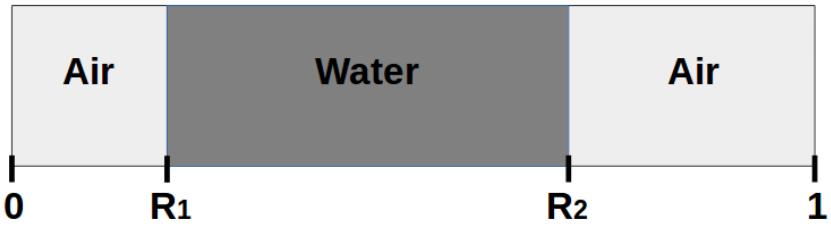


Figure 3.10 – Cas test de la colonne d'eau oscillante.

Les valeurs initiales de masse volumique et de pression sont référencées dans la Table 3.1. La pression dans la première colonne d'air est deux fois plus grande que celle dans la seconde colonne d'air et elle suit un profil linéaire dans la colonne d'eau. La colonne d'eau se situe entre $R_1 = 0.1\ m$ et $R_2 = 0.8\ m$ et la longueur totale du domaine est de $1\ m$. Pour l'équation de Tait dans Eq.3.16, les paramètres sont $B = 3.31 \times 10^8\ Pa$, $P_0 = 10^5\ Pa$ et $\rho_0 = 1000\ kg.m^{-3}$.

Air $0 \leq x \leq R_1$	Eau $R_1 \leq x \leq R_2$	Air $R_2 \leq x \leq 1$
$\gamma_g = 1.4$ $\rho_L = 1.169\ kg \cdot m^{-3}$ $P_L = 10^5\ Pa$	$\gamma_l = 7$ $\rho = 1000\ kg \cdot m^{-3}$ $P = \frac{P_R - P_L}{R_2 - R_1} x + \frac{P_L R_2 - P_R R_1}{R_2 - R_1}$	$\gamma_g = 1.4$ $\rho_R = 0.5845\ kg \cdot m^{-3}$ $P_R = 5 \times 10^4\ Pa$

Table 3.1 – Conditions initiales pour le cas de la colonne d'eau oscillante. Les indices L et R correspondent respectivement à gauche ("Left") et droite ("Right").

Pour cette configuration, le nombre de Mach atteint une valeur maximum de $M_a = 4.45 \times 10^{-3}$. Toutes les conditions aux limites sont des conditions de symétrie.

La figure 3.11 compare l'évolution de la vitesse de liquide en fonction du temps pour différents maillages par rapport à la solution de référence incompressible. Comme attendu, la valeur de la vitesse oscille ; initialement, le liquide accélère dans la direction

des x positifs dû au gradient de pression jusqu'au moment où la pression est la même dans tout le domaine. Ensuite, le liquide ralentit car la pression est plus grande dans la seconde colonne d'air, mais sa vitesse reste positive en raison de son inertie. Enfin, il y a de nouveau une accélération suivie d'un ralentissement pour les mêmes raisons mais dans la direction des x négatifs, d'où la valeur négative de vitesse. Une convergence en maillage est observée sur ce graphique. Une condition $CFL = 0.1$ est utilisée ici ; cependant, il s'agit de la condition basée sur la vitesse convective (similaire à Kwatra et al. [160] et Huber et al. [123]). Le pas de temps correspondant est environ 100 fois plus grand que celui obtenu à partir d'une condition CFL basée sur la vitesse du son.

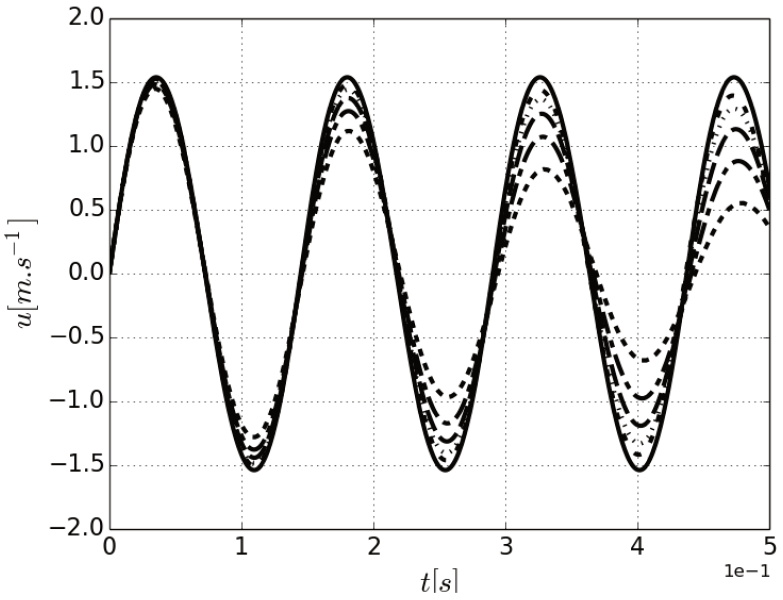


Figure 3.11 – Évolution de la vitesse en fonction du temps pour différents maillages, CFL=0.1 .--- 32 mailles,−-− 64 mailles, −−− 128 mailles, · · · 256 mailles, - - - 512 mailles. La ligne continue représente la solution de référence.

Concernant la conservation de la masse, une meilleure précision est obtenue en affinant le maillage (Figure 3.12) et l'erreur relative est inférieure à 0.1% pour les maillages avec plus de 256 mailles, comme montré sur les figures 3.12 et 3.13.

En utilisant une condition $CFL = 0.01$, à savoir un pas de temps environ 10 fois plus grand que celui obtenu avec une condition CFL basée sur l'acoustique, une convergence est également observée pour la vitesse (Figure 3.14) et pour la conser-

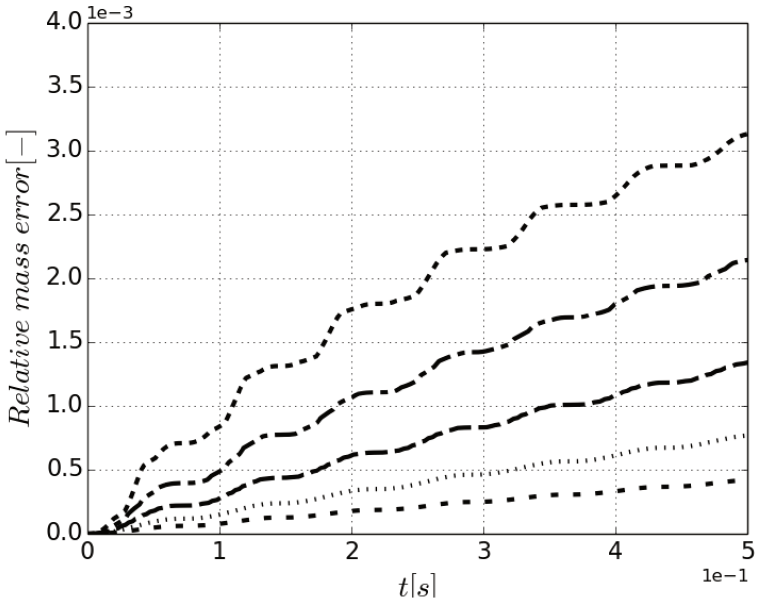


Figure 3.12 – Erreur relative sur la masse de liquide en fonction du temps pour différents maillages, CFL=0.1.--- 32 mailles,−−− 64 mailles, −−− 128 mailles, ··· 256 mailles, - - - 512 mailles

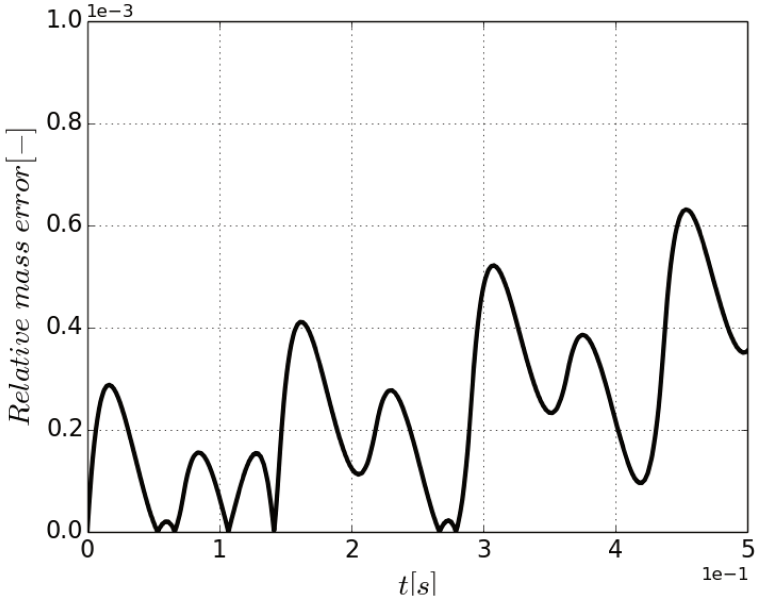


Figure 3.13 – Erreur relative sur la masse d'air en fonction du temps pour 512 mailles et un CFL=0.1.

vation de la masse (Figure 3.15). Concernant la vitesse, la courbe est plus proche de la solution de référence mais avec un léger décalage en fréquence. Pour la conservation de la masse, une erreur 10 fois plus faible est remarquée pour le liquide et l'air.

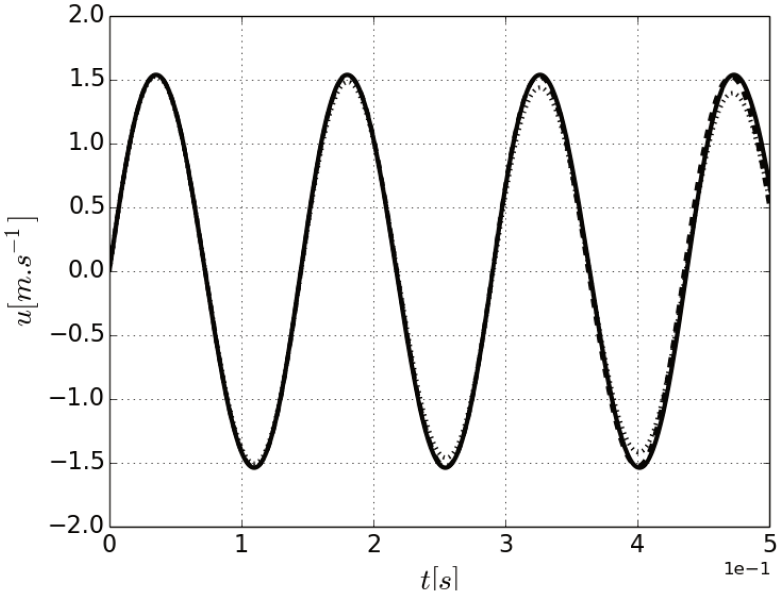


Figure 3.14 – Évolution de la vitesse en fonction du temps pour 512 mailles.--- CFL=0.01, ··· CFL=0.1. La ligne continue représente la solution de référence.

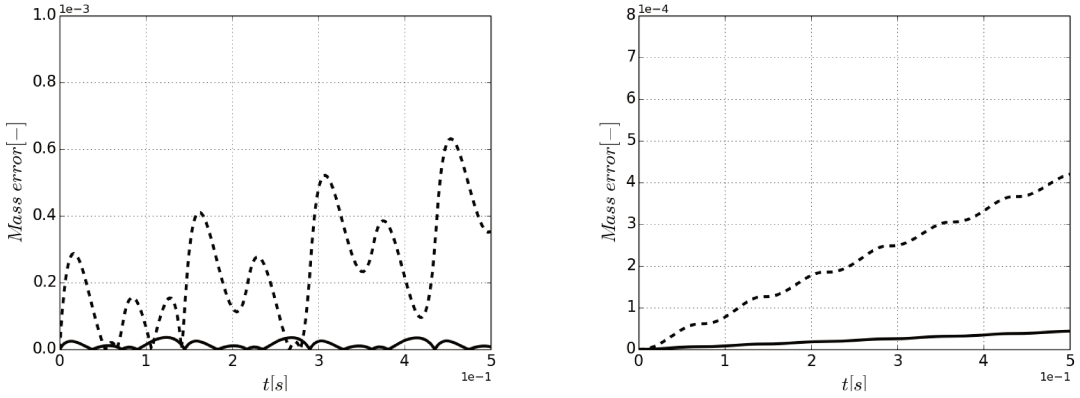


Figure 3.15 – Erreur relative sur la masse de liquide (droite) et de gaz (gauche) en fonction du temps pour 512 mailles. La ligne pointillée représente un CFL=0.1 et la ligne continue représente un CFL=0.01.

N_x	32	64	128	256	512
Erreur Amplitude	5.82	3.66	2.19	1.30	0.49
Erreur Fréquence	1.49	0.87	0.65	0.43	0.35

Table 3.2 – Erreur relative (%) pour un CFL=0.1, N_x est le nombre de mailles.

Les erreurs relatives pour les différents maillages sont reportées dans la Table 3.2 pour le premier maximum de vitesse et pour la fréquence calculée entre les deux premiers maximums de vitesse. Dans tous les cas, l'erreur relative décroît en affinant le maillage, illustrant ainsi la convergence et la précision de la méthode.

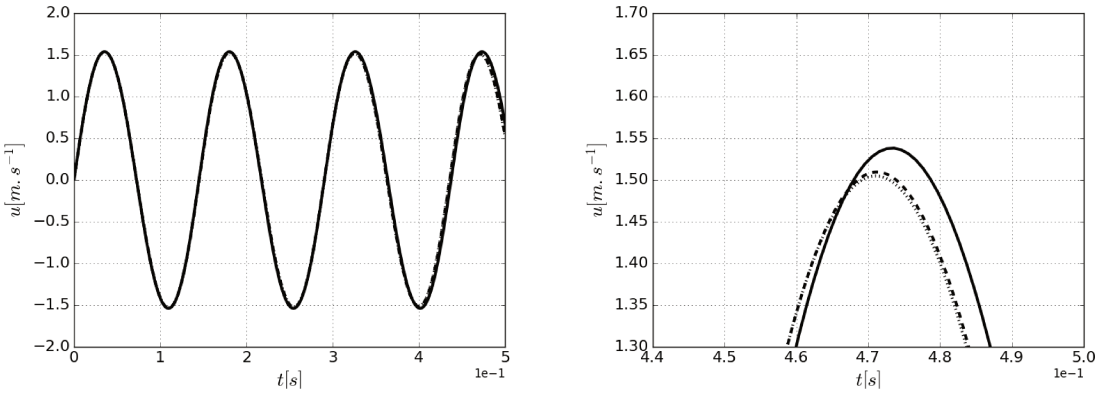


Figure 3.16 – Évolution de la vitesse en fonction du temps pour différentes méthodes avec 256 mailles et CFL=0.01. ·····, Level Set; – – , CLSVOF; ——, solution de référence. A droite, zoom de la figure de gauche.

Enfin, une comparaison entre notre méthode basée sur la CLSVOF et une méthode basée sur la Level Set, développée par Geoffroy Vaudor, est représentée sur la figure 3.16. Cette méthode utilise donc une approche Level Set pour le suivi d'interface et le terme convectif dans la conservation de la quantité de mouvement est résolu à l'aide d'un schéma WENO. Elle est basée sur celle de Huber et al. [123]. Sur la figure de gauche, des résultats similaires sont observés concernant les deux approches montrant un bon accord des méthodes. De plus, la méthode développée dans cette thèse améliore légèrement les résultats par rapport à la méthode basée sur la Level Set seule (figure de droite).

3.4.3 Configuration Turbulente Homogène Isotrope avec changement de phase

Similairement à Duret et al. [135], l'idée est de rechercher l'influence du processus d'évaporation sur une turbulence homogène et isotrope diphasique ; mais cette fois-ci l'influence sur la dynamique de l'écoulement (pression, vitesse) est considérée. Contrairement au travail de Duret et al. [135] qui utilise un scalaire passif pour représenter l'évaporation et le processus de mélange, dans cette thèse, un terme source de masse est directement employé dans les équations de conservation de la masse et de la pression. Ainsi, la masse volumique du gaz augmentera en raison de l'évaporation.

Représentation du processus d'évaporation

Dans cette configuration, le changement de phase est considéré. En développant l'équation de conservation de la masse dans Eq.3.14 en une équation pour la masse volumique de liquide et une équation pour la masse volumique de gaz (Eq.3.57), un terme source de masse est introduit :

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{u}) = \dot{m} \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{u}) = -\dot{m} \end{cases} \tag{3.57}$$

avec $\dot{m}$, le terme source de masse en $[kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}]$. Il est négatif lors d'une évaporation de liquide. Ensuite, les équations pour la fraction volumique de gaz et de liquide sont obtenue en développant Eq.3.57.

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_l \vec{u}) = -\frac{\alpha_l}{\rho_l} \frac{D\rho_l}{Dt} + \frac{\dot{m}}{\rho_l} \\ \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_g \vec{u}) = -\frac{\alpha_g}{\rho_g} \frac{D\rho_g}{Dt} - \frac{\dot{m}}{\rho_g} \end{cases} \tag{3.58}$$

En ajoutant ces deux équations, on obtient la divergence de la vitesse :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = -\frac{\alpha_l}{\rho_l} \frac{D\rho_l}{Dt} - \frac{\alpha_g}{\rho_g} \frac{D\rho_g}{Dt} + \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) \tag{3.59}$$

Enfin, en ajoutant et en soustrayant $\alpha_l \vec{\nabla} \cdot \vec{u}$ dans l'équation pour la fraction volumique de liquide et en remplaçant les différents termes par leur expression, l'équation de la fraction volumique de liquide contenant le changement de phase est exprimé comme suit :

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_l \vec{u}) = \alpha_l (1 - \alpha_l) D + \alpha_l \vec{\nabla} \cdot \vec{u} - \alpha_l \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) + \frac{\dot{m}}{\rho_l} \tag{3.60}$$

L'équation de la pression est également modifiée lors d'un changement de phase :

$$\begin{aligned} -\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{\nabla} P^{n+1}}{\rho^*} \right) + \left(\frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2 \Delta t^2} + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2 \Delta t^2} \right) P^{n+1} = \\ \left(\frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2 \Delta t^2} + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2 \Delta t^2} \right) (P^n - \Delta t \vec{u} \cdot \vec{\nabla} P^n) - \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{u}^*}{\Delta t} + \frac{\dot{m}}{\Delta t} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) \end{aligned} \tag{3.61}$$

Le nouveau terme dans l'équation de la pression (Eq.3.61) vient de la nouvelle expression de la divergence de la vitesse.

Configuration numérique

Pour ce cas de validation Turbulent Homogène Isotrope, le forçage et les paramètres physiques utilisés dans Duret et al. [135] sont appliqués pour un maillage 256^3 et une fraction volumique de liquide initiale $\phi = 10\%$. Les masses volumiques initiales sont $\rho_g = 25.0\ kg \cdot m^{-3}$ et $\rho_l = 753.0\ kg \cdot m^{-3}$. La pression est $P = 9.06 \times 10^6\ Pa$ et pour l'équation de Tait, les paramètres utilisés sont $B = 1.038 \times 10^9\ Pa$, $P_0 = 10^5\ Pa$ et $\rho_0 = 750\ kg \cdot m^{-3}$. L'indice d'adiabaticité pour le liquide est $\gamma_l = 1.215$ et pour le gaz $\gamma_g = 1.4$. Concernant l'évaporation, un taux constant d'évaporation $\dot{m} = -1\ kg \cdot cm^{-3} \cdot s^{-1}$ est choisi. Cette valeur est seulement appliquée dans les mailles contenant une interface ; dans toutes les autres, $\dot{m}$ est nul. Ainsi, la masse volumique du gaz augmente localement grâce au terme source de masse dans l'équation de la pression. Cette configuration peut seulement être réalisé en utilisant un formalisme compressible ou faiblement compressible comme celui présenté dans cette thèse. De plus, l'interface liquide/gaz est directement influencée par le processus d'évaporation à travers l'équation de la fraction volumique de liquide ; la masse de liquide diminue et la masse de gaz augmente alors que la masse totale reste constante.

Résultats

De manière similaire aux configurations THI présentées dans des travaux précédents, des phénomènes de ruptures et de coalescences sont observées (voir Figure 3.17). Puisque le nombre de Mach est très bas dans les deux phases, les effets dus à la compressibilité sont négligeables : la masse volumique de gaz reste constante dans les simulations sans évaporation. Cependant, si un changement de phase est considéré, la masse volumique de gaz augmente avec le temps et une dilatation est générée dans les zones proches de l'interface en raison du flux de Stefan. Ce flux correspond à la production du gaz au niveau de l'interface et à son transport dans la direction normale à cette interface.

Sur la figure 3.18, l'évolution de la masse volumique moyenne du gaz est représentée. Comme attendu, la masse volumique reste constante dans le cas sans évaporation, et augmente si le terme source de masse n'est plus nul. Même si $\dot{m}$ est constant, le profil de la masse volumique n'est pas linéaire à cause de la quantité de surface qui évolue pendant le processus. En effet, le nombre de mailles contenant une interface varie. Cependant, il est toujours possible de prévoir la variation de la masse volumique $\frac{\partial \rho_g}{\partial t}$ induite par l'évaporation si $\dot{m}$ est constant et si les mailles où

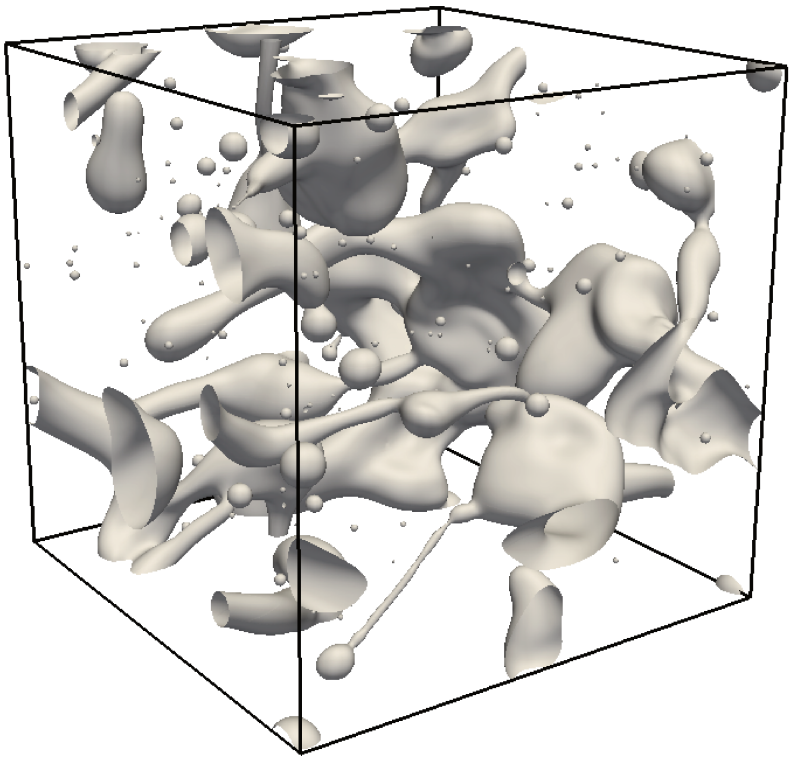


Figure 3.17 – Représentation de la surface pour la configuration THI avec $\phi = 10\%$.

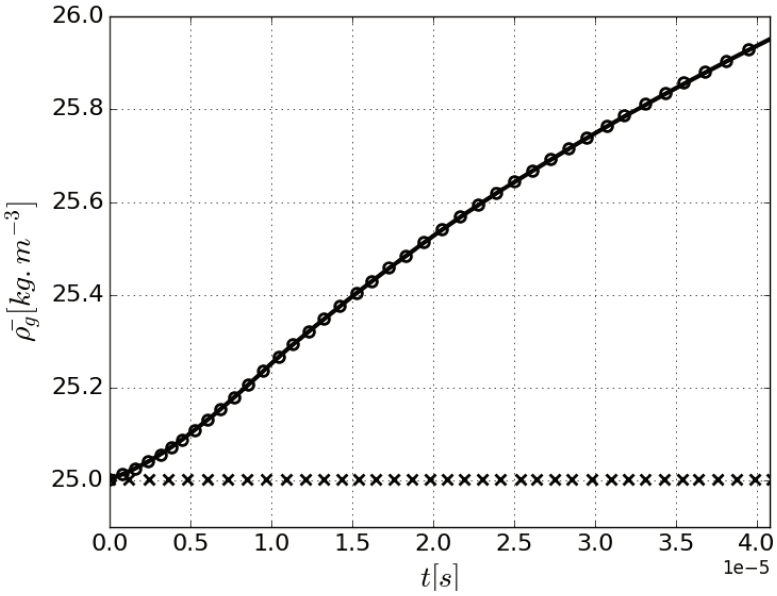


Figure 3.18 – Évolution de la masse volumique moyenne de gaz en fonction du temps. ∘ : résultats avec évaporation, × : résultats sans évaporation. Ligne continue : solution de référence avec évaporation.

l'évaporation a lieu sont identifiées. Ensuite, la variation au cours du temps de ρ_g est déduite comme on le voit sur la figure 3.18. Le profil de la masse volumique obtenue est très proche de la référence, montrant la capacité de l'algorithme à représenter un processus d'évaporation.

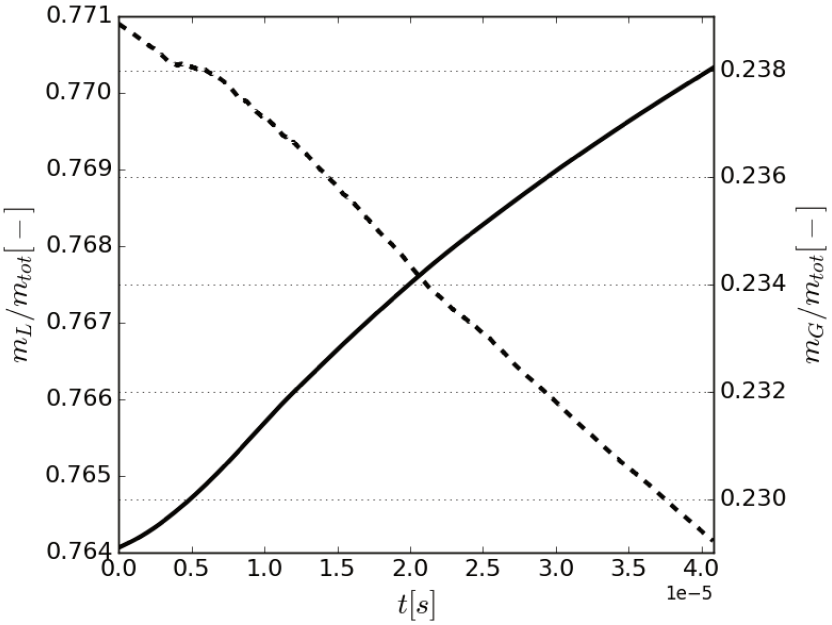


Figure 3.19 – Évolution de la masse de liquide m_l et de la masse de gaz m_g divisées par la masse totale m_{tot} en fonction du temps. Ligne pointillée (axe de gauche) : $m_l(t)$, ligne continue (axe de droite) : $m_g(t)$.

Pendant l'évaporation, la masse totale doit être conservée ; la masse gagnée par le gaz doit être perdue par le liquide. Cet équilibre est observé sur la figure 3.19, où l'on voit la masse de liquide décroître et la masse de gaz croître en même temps. En ajoutant ces deux masses, on a une estimation de la masse totale. La différence entre la masse totale initiale et la masse totale finale obtenue à la fin de la simulation est inférieure à 0.2%. Cela montre une excellente conservation de la masse permise par le couplage CLSVOF pour la résolution de l'interface ainsi qu'une simulation précise du transfert de masse entre le liquide et le gaz dû à l'évaporation.

3.5 Implémentation de l'équation de l'énergie

Dans la section précédente, l'évaporation consistait uniquement en l'ajout d'un terme source constant de masse dans l'équation de la fraction volumique de liquide ainsi que dans l'équation de la pression. Dans cette partie, l'équation de l'énergie ainsi que

celle de la fraction massique de vapeur sont implémentées afin de pouvoir calculer un taux d'évaporation plus réaliste dépendant de l'énergie du système.

3.5.1 Démonstration de l'équation de l'énergie

Dans un premier temps, il a fallu dériver l'équation de l'énergie sous sa forme générale dans un formalisme compressible.
L'énergie totale E est la somme de l'énergie interne ϵ et de l'énergie cinétique :

$$E = \epsilon + \frac{\vec{u} \cdot \vec{u}}{2} \tag{3.62}$$

Les grandeurs sont définies par unité de masse $[J \cdot kg^{-1}]$.
L'équation de conservation de l'énergie sous sa forme conservative est :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho E \vec{u}) = \vec{\nabla} \cdot \left(\lambda \vec{\nabla} T\right) + \vec{\nabla} \cdot (\vec{u} \cdot \bar{\bar{\sigma}}) + \dot{Q} + \rho \vec{f} \cdot \vec{u} \tag{3.63}$$

avec ρ, la masse volumique $[kg \cdot m^{-3}]$; $\vec{u}$, le vecteur vitesse $[m \cdot s^{-1}]$; T, la température $[K]$; λ, la conductivité thermique $[W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}]$; $\bar{\bar{\sigma}}$, le tenseur des contraintes (ou tenseur de Cauchy) $[Pa]$; $\dot{Q}$, le terme de production d'énergie $[W \cdot m^{-3}]$ et $\vec{f}$, les forces de volume $[N \cdot kg^{-1}]$.

Le tenseur des contraintes $\bar{\bar{\sigma}}$ peut se réécrire à l'aide de la pression P et du tenseur des contraintes visqueuses $\bar{\bar{\tau}}$:

$$\bar{\bar{\sigma}} = -P\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}} \tag{3.64}$$

Sous sa forme générale, le tenseur des contraintes visqueuses s'écrit :

$$\bar{\bar{\tau}} = \mu \left(\vec{\nabla}\vec{u} + \vec{\nabla}\vec{u}^t\right) + \left(\zeta - \frac{2}{3}\mu\right) \vec{\nabla} \cdot \vec{u}\bar{\bar{I}} \tag{3.65}$$

avec μ, la viscosité dynamique $[kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}]$ et ζ, la viscosité de volume $[kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}]$.

En réécrivant le tenseur des contraintes et en faisant apparaître l'enthalpie massique $h = \epsilon + \frac{P}{\rho}$ $[J \cdot kg^{-1}]$, on obtient une nouvelle forme de l'équation de l'énergie :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho \vec{u} \left(\frac{||\vec{u}||^2}{2} + h\right)\right) = \vec{\nabla} \cdot \left(\lambda \vec{\nabla} T\right) + \vec{\nabla} \cdot (\vec{u} \cdot \bar{\bar{\tau}}) + \dot{Q} + \rho \vec{f} \cdot \vec{u} \tag{3.66}$$

Équation de la température

Pour obtenir l'équation de la température, on part de l'équation de l'énergie Eq.3.66. Tout d'abord, on développe la dérivée temporelle de l'énergie totale massique :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = \frac{\partial \left(\rho\epsilon + \rho\frac{||\vec{u}||^2}{2}\right)}{\partial t} = \epsilon\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \frac{||\vec{u}||^2}{2}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho\vec{u}\cdot\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \tag{3.67}$$

Ensuite, en utilisant l'équation de conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}) = 0, \tag{3.68}$$

l'équation de conservation de la quantité de mouvement sous sa forme non conservative

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}\vec{u} = -\frac{\vec{\nabla}P}{\rho} + \frac{\vec{\nabla}\cdot\bar{\bar{\tau}}}{\rho} + \vec{f}, \tag{3.69}$$

et la relation $\vec{u}\cdot\left(\vec{u}\cdot\vec{\nabla}\vec{u}\right) = \vec{u}\cdot\vec{\nabla}\left(\frac{||\vec{u}||^2}{2}\right)$, on a :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = -\epsilon\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}) + \rho\frac{\partial \epsilon}{\partial t} - \frac{||\vec{u}||^2}{2}\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}) - \rho\vec{u}\cdot\vec{\nabla}\left(\frac{||\vec{u}||^2}{2}\right) - \vec{u}\cdot\vec{\nabla}P + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}\cdot\bar{\bar{\tau}} + \rho\vec{f}\cdot\vec{u} \tag{3.70}$$

On utilise ensuite la relation de thermodynamique :

$$d\epsilon = Tds - Pdv = Tds + \frac{P}{\rho^2}d\rho \tag{3.71}$$

avec s, l'entropie massique $[J\cdot kg^{-1}\cdot K^{-1}]$ et $v = \frac{1}{\rho}$, le volume massique $[m^3\cdot kg^{-1}]$. La dérivée temporelle de l'énergie interne peut ainsi se réécrire de la façon suivante :

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} = T\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{P}{\rho^2}\frac{\partial \rho}{\partial t} = T\frac{\partial s}{\partial t} - \frac{P}{\rho^2}\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}) \tag{3.72}$$

En remplaçant cette expression dans l'équation de l'énergie totale, on a :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = -\epsilon\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}) + \rho T\frac{\partial s}{\partial t} - \frac{P}{\rho}\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}) - \frac{||\vec{u}||^2}{2}\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}) - \rho\vec{u}\cdot\vec{\nabla}\left(\frac{||\vec{u}||^2}{2}\right) - \vec{u}\cdot\vec{\nabla}P + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}\cdot\bar{\bar{\tau}} + \rho\vec{f}\cdot\vec{u} \tag{3.73}$$

En factorisant les termes en $\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u})$ et en remplaçant $\epsilon+\frac{P}{\rho}$ par l'enthalpie massique h, on obtient :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = -\left(\frac{||\vec{u}||^2}{2}+h\right)\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}) + \rho T\frac{\partial s}{\partial t} - \rho\vec{u}\cdot\vec{\nabla}\left(\frac{||\vec{u}||^2}{2}\right) - \vec{u}\cdot\vec{\nabla}P + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}\cdot\bar{\bar{\tau}} + \rho\vec{f}\cdot\vec{u} \tag{3.74}$$

Ensuite, la forme différentielle de l'enthalpie s'écrit :

$$dh = d\epsilon + \frac{1}{\rho}dP - \frac{P}{\rho^2}d\rho \tag{3.75}$$

En remplaçant $d\epsilon$ par son expression (Eq.3.71) :

$$dh = Tds + \frac{1}{\rho}dP \tag{3.76}$$

A partir de cette expression, on peut réécrire le gradient de pression de la façon suivante :

$$\vec{\nabla}P = \rho\vec{\nabla}h - \rho T\vec{\nabla}s \tag{3.77}$$

On a ainsi :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = -\left(\frac{||\vec{u}||^2}{2}+h\right)\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}) + \rho T\frac{\partial s}{\partial t} - \rho\vec{u}\cdot\vec{\nabla}\left(\frac{||\vec{u}||^2}{2}\right) + \rho T\,\vec{u}\cdot\vec{\nabla}s - \rho\vec{u}\cdot\vec{\nabla}h + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}\cdot\bar{\bar{\tau}} + \rho\vec{f}\cdot\vec{u} \tag{3.78}$$

En remarquant les développements suivants

$$\begin{cases} \vec{\nabla}\cdot\left(\rho\vec{u}\left(\frac{||\vec{u}||^2}{2}+h\right)\right) = \left(\frac{||\vec{u}||^2}{2}+h\right)\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{u}) + \rho\vec{u}\cdot\vec{\nabla}\left(\frac{||\vec{u}||^2}{2}\right) + \rho\vec{u}\cdot\vec{\nabla}h \\ \vec{\nabla}\cdot(\bar{\bar{\tau}}\cdot\vec{u}) = \vec{u}\cdot\vec{\nabla}\cdot\bar{\bar{\tau}} + \bar{\bar{\tau}} : \vec{\nabla}\vec{u} \end{cases} \tag{3.79}$$

et en ajoutant/soustrayant $\vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right)$ à Eq.3.78, on a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho E}{\partial t} &= -\vec{\nabla}\cdot\left(\rho\vec{u}\left(\frac{||\vec{u}||^2}{2}+h\right)\right) + \rho T\left(\frac{\partial s}{\partial t} + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}s\right) \\ &+\vec{\nabla}\cdot(\bar{\bar{\tau}}\cdot\vec{u}) - \bar{\bar{\tau}} : \vec{\nabla}\vec{u} + \vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right) - \vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right) + \rho\vec{f}\cdot\vec{u} \end{aligned} \tag{3.80}$$

En comparant cette expression avec Eq.3.66, on obtient une expression de la variation d'entropie :

$$\rho T\left(\frac{\partial s}{\partial t} + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}s\right) = \bar{\bar{\tau}} : \vec{\nabla}\vec{u} + \vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right) + \dot{Q} \tag{3.81}$$

Afin d'avoir une équation de la température, on utilise la relation thermodynamique suivante :

$$ds = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_P dT + \left(\frac{\partial s}{\partial P}\right)_T dP \tag{3.82}$$

avec $\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_P = \frac{c_P}{T}$ et $\left(\frac{\partial s}{\partial P}\right)_T = -\frac{\alpha_T}{\rho}$; c_P étant la capacité thermique isobare massique $[J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}]$ et α_T, le coefficient de dilatation isotherme $[K^{-1}]$. Ainsi, on a:

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} s = \frac{c_P}{T}\left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} T\right) - \frac{\alpha_T}{\rho}\left(\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} P\right) \tag{3.83}$$

En remplaçant dans Eq.3.81, on obtient l'équation de la température :

$$\rho c_P \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} T\right) = \alpha_T T \left(\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} P\right) + \bar{\bar{\tau}} : \vec{\nabla}\vec{u} + \vec{\nabla} \cdot \left(\lambda \vec{\nabla} T\right) + \dot{Q} \tag{3.84}$$

Dans le cas d'un gaz parfait où $\alpha_T = \frac{1}{T}$, on retrouve une expression équivalente à celle de Poinsot et Veynante [161].

Équation de la pression

Des termes supplémentaires apparaissent dans l'équation de la pression en raison des transferts thermiques. Pour obtenir la nouvelle équation pour la pression, on utilise la relation suivante :

$$dT = \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_\rho dP + \left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_P d\rho \tag{3.85}$$

Afin de réécrire le relation 3.85 à l'aide des coefficients thermoélastiques, les relations suivantes sont utilisées :

- $\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P = -\left(\frac{\partial s}{\partial P}\right)_T = \frac{\alpha_T}{\rho}$: l'égalité entre les dérivées partielles vient des relations de Maxwell
- $\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P = -\frac{1}{\rho^2}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P$: réécriture de la dérivée du volume massique sous la forme d'une dérivée de la masse volumique
- $\beta = \frac{1}{P}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho$ avec β, le coefficient de variation de pression à volume constant $[K^{-1}]$
- $\alpha_T = P\beta\chi_T$ avec $\chi_T = -\frac{1}{v}\left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T$, le coefficient de compressibilité isotherme $[Pa^{-1}]$. Cette égalité vient de la relation entre les dérivées partielles : $\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_v = -1$

On a donc :

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_\rho = \frac{\chi_T}{\alpha_T} \\ \left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_P = -\frac{1}{\alpha_T \rho} \end{cases} \tag{3.86}$$

En prenant $\frac{D\rho}{Dt} = -\rho\vec{\nabla}\cdot\vec{u}$, la dérivée particulaire de T s'écrit donc :

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{\chi_T}{\alpha_T}\frac{DP}{Dt} + \frac{\vec{\nabla}\cdot\vec{u}}{\alpha_T} \tag{3.87}$$

En réécrivant Eq.3.84 à l'aide de Eq.3.87, on a :

$$\left(\frac{\rho c_P \chi_T}{\alpha_T} - \alpha_T T\right)\left(\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}P\right) = -\frac{\rho c_P}{\alpha_T}\vec{\nabla}\cdot\vec{u} + \bar{\bar{\tau}} : \vec{\nabla}\vec{u} + \vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right) + \dot{Q} \tag{3.88}$$

Pour simplifier cette expression, deux relations thermodynamiques sont utiles : la relation de Mayer générale

$$c_P - c_V = \frac{T\alpha_T^2}{\rho\chi_T} \tag{3.89}$$

et la relation de Reech

$$\gamma = \frac{c_P}{c_V} = \frac{\chi_T}{\chi_S} \tag{3.90}$$

avec χ_S, le coefficient de compressibilité isentropique $[Pa^{-1}]$ et c_V, la capacité thermique isochore $[J\cdot kg^{-1}\cdot K^{-1}]$.
Le coefficient devant la dérivée particulaire de la pression peut se réécrire de la manière suivante :

$$\frac{\rho c_P \chi_T}{\alpha_T} - \alpha_T T = \frac{\rho\gamma c_V \chi_T - \alpha_T^2 T}{\alpha_T} = \frac{\rho\gamma c_V \chi_T - \rho\chi_T\left(\gamma - 1\right)c_V}{\alpha_T} = \frac{\rho c_V \chi_T}{\alpha_T} \tag{3.91}$$

En divisant Eq.3.88 par ce coefficient, on a :

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}P = -\frac{\gamma}{\chi_T}\vec{\nabla}\cdot\vec{u} + \frac{\alpha_T}{\rho c_V \chi_T}\left(\bar{\bar{\tau}} : \vec{\nabla}\vec{u} + \vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right) + \dot{Q}\right) \tag{3.92}$$

En utilisant le fait que $c_V\chi_T = c_P\chi_S$ (relation de Reech) et l'expression de la célérité du son c

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_S = \frac{1}{\rho\chi_S} = \frac{\gamma}{\rho\chi_T} \tag{3.93}$$

on obtient l'équation pour la pression :

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}P = -\rho c^2\vec{\nabla}\cdot\vec{u} + \frac{\alpha_T c^2}{c_P}\left(\bar{\bar{\tau}} : \vec{\nabla}\vec{u} + \vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right) + \dot{Q}\right) \tag{3.94}$$

Équation pour la masse volumique

L'équation de la masse volumique est également modifiée en présence de transferts thermiques. Pour avoir l'équation de la masse volumique, il suffit d'utiliser la

conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \rho = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \tag{3.95}$$

et d'extraire l'expression de $\vec{\nabla} \cdot \vec{u}$ de l'équation de la pression 3.94. Ainsi, on obtient :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \rho = \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} P \right) - \frac{\alpha_T}{c_P} \left(\bar{\bar{\tau}} : \vec{\nabla} \vec{u} + \vec{\nabla} \cdot \left(\lambda \vec{\nabla} T \right) + \dot{Q} \right) \tag{3.96}$$

3.5.2 Équation pour la fraction massique de vapeur

Concernant la fraction massique de vapeur, l'équation est semblable à celle du formalisme incompressible [131]. Seules les masses volumiques diffèrent ; elles deviennent locales au lieu d'être constantes. Elle s'écrit :

$$\frac{\partial Y_{vap}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} Y_{vap} = \frac{\vec{\nabla} \cdot \left(\rho_g D_{vap} \vec{\nabla} Y_{vap} \right)}{\rho_g} \tag{3.97}$$

avec Y_{vap}, la fraction massique de vapeur $[-]$ et D_{vap}, le coefficient de diffusion de la vapeur en $[m^2 \cdot s^{-1}]$. Elle est dérivée en utilisant les équations de conservation locales (voir Calimez [162]) ainsi que la loi de Fick.
La valeur du taux d'évaporation est obtenue à l'aide des conditions de saut au travers de l'interface appliquées à la fraction massique de vapeur Y_{vap} [162] et encore une fois de la loi de Fick :

$$\dot{\omega}_{vap} = -\frac{\rho_g D_{vap} \vec{\nabla} Y_{vap} \cdot \vec{n}}{1 - Y_{vs}} \tag{3.98}$$

avec $\dot{\omega}_{vap}$, le taux d'évaporation en $[kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}]$; Y_{vs}, la fraction massique de vapeur au niveau de l'interface liquide/gaz et $\vec{n}$, la normale à l'interface côté liquide. Y_{vs}, elle, est calculée en utilisant la relation suivante :

$$Y_{vs} = \frac{P_{vs} M_{vs}}{P_{vs} M_{vap} + \left(P_{atm} - P_{vs} \right) M_g} \tag{3.99}$$

avec P_{vs}, la pression de vapeur saturante en $[Pa]$, P_{atm}, la pression atmosphérique en $[Pa]$ et M_k, la masse molaire de k en $[kg \cdot mol^{-1}]$.
Pour calculer la pression de vapeur saturante, on utilise la relation de Clausius-Clapeyron :

$$P_{vs} = P_{atm} e^{-\frac{h_{vap} M_{vap}}{R} \left(\frac{1}{T_{int}} - \frac{1}{T_{eb}} \right)} \tag{3.100}$$

avec h_{vap}, l'enthalpie de vaporisation en $[J \cdot kg^{-1}]$, $R = 8.314 J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$, la constante des gaz parfaits, T_{int}, la température à l'interface en $[K]$ et T_{eb}, la température d'ébullition en $[K]$.

3.5.3 Méthode numérique

L'équation pour la température Eq.3.84 démontrée précédemment peut, dans notre cas, être allégée :

$$\rho c_P \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} T \right) = \alpha_T T \left(\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} P \right) + \vec{\nabla} \cdot \left(\lambda \vec{\nabla} T \right) \tag{3.101}$$

En effet, le terme source $\dot{Q}$ est nul si on ne considère aucune production d'énergie (par exemple liée au nucléaire) et le terme $\bar{\bar{\tau}} : \vec{\nabla} \vec{u}$ est supposé négligeable. Cette équation est résolue en deux parties. Une température intermédiaire T^* est d'abord calculée sans le terme de pression juste après le calcul de la vitesse intermédiaire $\vec{u}^*$. Le terme $\vec{u} \cdot \vec{\nabla} T$ est résolu à l'aide d'un schéma WENO d'ordre 5. Cependant, dans le cas d'écoulements diphasiques, afin d'éviter un gradient trop élevé au niveau de l'interface et un chauffage non physique, des extensions de type Aslam sont utilisées [163, 143]. Cela consiste à extrapoler la température de part et d'autre de l'interface pour que la discontinuité ne soit pas prise en compte dans le gradient. Ainsi, la température du gaz est extrapolée sur quelques mailles à l'intérieur du liquide et inversement. Un schéma WENO est donc utilisé sur la température du gaz et sur la température du liquide et le terme $\vec{u} \cdot \vec{\nabla} T$ correspondant est choisi en fonction du signe de la fonction distance obtenue avec la méthode Level Set. Ensuite, le terme $\vec{\nabla} \cdot \left(\lambda \vec{\nabla} T \right)$ se calcule selon un principe similaire à celui du calcul du tenseur des contraintes visqueuses consistant en un schéma centré d'ordre 2. Afin d'avoir la température au niveau du centre de chaque maille, le terme $\lambda \vec{\nabla} T$ doit se retrouver sur les faces des mailles. En 2D, il se discrétise de la manière suivante :

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\lambda \vec{\nabla} T \right) = \frac{\lambda_{i+\frac{1}{2},j} \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{\Delta x} - \lambda_{i-\frac{1}{2},j} \frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{\Delta x}}{\Delta x} + \frac{\lambda_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\Delta y} - \lambda_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{\Delta y}}{\Delta y} \tag{3.102}$$

On remarquera que la conductivité thermique λ se situe aussi sur les faces. Elle est interpolée en utilisant une méthode Ghost Fluid. Aussi, la capacité thermique isobare c_P, le coefficient de dilatation isotherme α_T et la masse volumique ρ présents dans Eq.3.101 prennent leur valeur liquide ou gazeuse également selon le signe de la fonction distance dans la maille considérée.

Un autre terme, qui n'est pas explicitement présent dans Eq.3.101, est également calculé dans T^* ; il s'agit du saut de $\lambda\vec{\nabla}T$ au travers de l'interface en présence de changement de phase [131] :

$$\left[\lambda\vec{\nabla}T\cdot\vec{n}\right] = \dot{\omega}_{vap}h_{vap} \tag{3.103}$$

Au niveau de l'interface, en considérant un formalisme 1D avec le liquide en $i+1$ et le gaz en i (voir Figure 3.20), il s'écrit :

$$\lambda_l\frac{T_{i+1}-T_{int}}{(1-\theta)\,\Delta x} - \lambda_g\frac{T_{int}-T_i}{\theta\Delta x} = \dot{\omega}_{vap}h_{vap} \tag{3.104}$$

avec T_{int}, la température interpolée à l'interface et $\theta = \frac{|\phi_i|}{|\phi_i|+|\phi_{i+1}|}$, la pondération par la fonction distance ϕ.

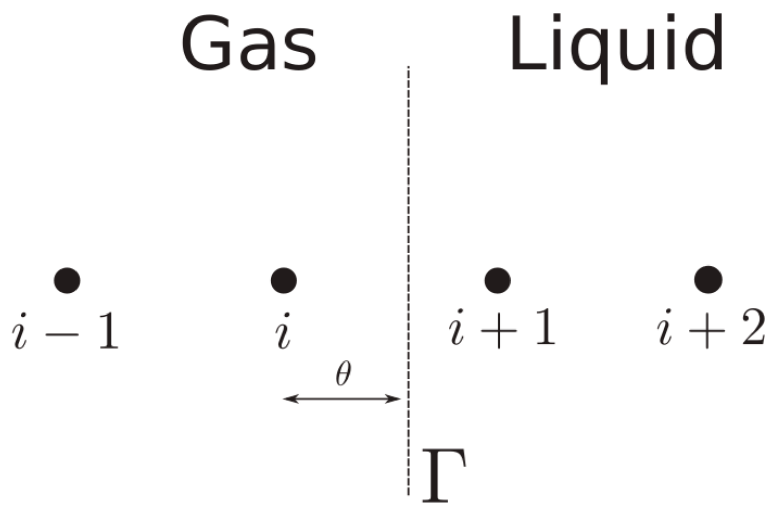


Figure 3.20 – Schéma représentant une discrétisation dans un formalisme monodimensionnel. θ représente la pondération du point i par la distance à l'interface Γ [143].

Après quelques étapes (voir Duret [143]), on a :

$$\lambda\frac{\partial T}{\partial x} = \lambda_{i+\frac{1}{2}}\frac{T_{i+1}-T_i}{\Delta x} - \frac{\dot{\omega}_{vap}h_{vap}\,(1-\theta)\,\lambda_g}{(1-\theta)\,\lambda_g+\theta\lambda_l} \tag{3.105}$$

La seconde partie de l'équation pour la température, contenant le terme de pression, est résolue après le calcul de la pression P et de la vitesse finale $\vec{u}^{n+1}$. Il consiste seulement à ajouter à T^* le terme $\frac{\alpha_T T}{\rho c_P}\frac{DP}{Dt}$ en prenant exactement le même $\frac{DP}{Dt}$ que celui résolu dans l'équation pour la pression.

Comme cela a été démontré précédemment, les équations pour la pression et la masse volumique sont modifiées lors de transferts thermiques. En négligeant les termes $\bar{\bar{\tau}} : \vec{\nabla}\vec{u}$ et $\dot{Q}$, l'équation pour la pression devient :

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}P = -\rho c^2 \vec{\nabla}\cdot\vec{u} + \frac{\alpha_T c^2}{c_P}\left(\vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right)\right) \tag{3.106}$$

En isolant la divergence de la vitesse, on a :

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{u} = -\frac{1}{\rho c^2}\left(\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}P\right) + \frac{\alpha_T}{\rho c_P}\left(\vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right)\right) \tag{3.107}$$

En utilisant cette nouvelle formulation de la divergence dans Eq.3.41, l'équation de la pression s'écrit :

$$\begin{aligned} -\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{\nabla}P^{n+1}}{\rho^*}\right) + \left(\frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2 \Delta t^2} + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2 \Delta t^2}\right) P^{n+1} \\ = \left(\frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2 \Delta t^2} + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2 \Delta t^2}\right)\left(P^n - \Delta t \vec{u}\cdot\vec{\nabla}P^n\right) - \frac{\vec{\nabla}\cdot\vec{u}^*}{\Delta t} + \frac{\alpha_T}{\rho c_P}\vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right) \end{aligned} \tag{3.108}$$

Le terme $-\frac{1}{\rho c^2}\left(\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}P\right)$ est le même que celui utilisé en compressible sans équation pour l'énergie et est donc résolu de la même manière. Le terme supplémentaire $\frac{\alpha_T}{\rho c_P}\vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right)$, quant à lui, est résolu en reprenant le terme $\vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right)$ calculé dans l'équation pour la température.

Le nouveau terme dans l'équation de la masse volumique Eq.3.96 sert pour le calcul du terme D présent dans l'équation de la fraction volumique de liquide. En effet, en supprimant les termes négligeables, Eq.3.96 peut se réécrire comme suit :

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{1}{c^2}\frac{DP}{Dt} - \frac{\alpha_T}{c_P}\vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right) \tag{3.109}$$

En présence de transferts thermiques, le terme D s'écrit donc (à partir de la relation page 62) :

$$D = \left(\frac{1}{\rho_g c_g^2} - \frac{1}{\rho_l c_l^2}\right)\frac{DP}{Dt} - \left(\frac{\alpha_{T_g}}{\rho_g c_{P_g}} - \frac{\alpha_{T_l}}{\rho_l c_{P_l}}\right)\vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right) \tag{3.110}$$

De même que pour la pression, le terme $\vec{\nabla}\cdot\left(\lambda\vec{\nabla}T\right)$ est celui calculé dans l'équation pour la température et le terme en $\frac{DP}{Dt}$ est le même que celui résolu en compressible sans transferts thermiques.

Pour prendre en compte les modifications de masse volumique pour le gaz lors d'un changement de pression et de température, une nouvelle équation d'état est utilisée. Il s'agit de l'équation pour les gaz parfaits suivante :

$$\rho_g = \frac{P}{rT} \tag{3.111}$$

avec $r = \frac{R}{M}$, la constante spécifique des gaz parfaits en $[J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}]$. Pour l'air, elle vaut $r = 287.058\ J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$.
Pour le liquide, l'équation de Tait est conservée. Dans ce nouvel algorithme, les masses volumiques sont mises à jour à trois reprises : après le calcul de T^*, après le calcul de P et après le calcul de la température finale T.

Ensuite, la résolution de l'équation pour la fraction massique de vapeur Eq.3.97 se fait de manière habituelle. Le terme de diffusion est calculé à l'aide d'un schéma centré d'ordre 2 en faisant attention de résoudre $\vec{\nabla} Y_{vap}$ sur les faces des mailles afin d'avoir la divergence au centre. Le terme de convection est, quant à lui, résolu à l'aide d'un schéma WENO d'ordre 5. La particularité tient du fait que la résolution ne s'effectue que dans le gaz. Une condition limite supplémentaire est donc nécessaire au niveau de l'interface liquide/gaz. La valeur $Y_{vap_{liq}}^{Ghost}$ que prennent les mailles proches de l'interface côté liquide est :

$$Y_{vap_{liq}}^{Ghost} = 2Y_{vs} - Y_{vap} - 2\phi \frac{\partial Y_{vap}}{\partial n} \tag{3.112}$$

avec ϕ, la fonction distance à l'interface ; n, la normale à l'interface et Y_{vs}, la fraction massique de vapeur saturante obtenue à l'aide des équations Eq.3.99 et Eq.3.100. Cette relation est une extrapolation d'ordre 1 et est démontrée dans Duret [143]. Dans l'algorithme, la résolution de Y_{vap} se situe juste après la résolution de la température intermédiaire T^*.

Enfin, le taux d'évaporation $\dot{\omega}_{vap}$ est calculé à l'aide de Eq.3.98 afin d'avoir un taux réaliste dépendant des conditions de température et de pression du système, contrairement au taux constant imposé dans la section précédente. Il est résolu une fois avant le suivi de l'interface afin d'utiliser cette valeur dans l'équation de la fraction volumique de liquide α_l. Puis, il est résolu une seconde fois juste avant le calcul

de la température intermédiaire T^* pour l'utiliser dans le saut de $\lambda\vec{\nabla}T$ et prendre en compte le déplacement de l'interface qui a eu lieu entre-temps. Cependant, le terme source de masse $\dot{m}$ utilisé dans l'équation pour α_l n'est pas équivalent au taux d'évaporation $\dot{\omega}_{vap}$. En effet, $\dot{m}$ est en $[kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}]$ alors que $\dot{\omega}_{vap}$ est en $[kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}]$. Pour la conversion, on utilise la relation suivante :

$$\dot{m} = -\dot{\omega}_{vap}\Sigma \tag{3.113}$$

avec $\Sigma = \frac{S_{int}}{V_{maille}}$, la densité de surface en $[m^{-1}]$; S_{int}, la surface de l'interface dans la maille considérée et V_{maille}, le volume de la maille considérée. Le signe négatif dans l'équation est dû au fait que $\dot{\omega}_{vap}$ est positif alors $\dot{m}$ est négatif lors d'une perte de liquide.

Un récapitulatif de l'ensemble de l'algorithme compressible, avec la résolution de la température et de la fraction massique de vapeur, est montré sur la figure 3.21.

3.5.4 Résultats

Diffusion de la température

Ce cas test permet de vérifier la bonne implémentation du terme de diffusion de la température en compressible. Le domaine de calcul est divisé en trois parties : une colonne d'air à $T_1 = 373.15\ K$ et $L_1 = 34.1146 \times 10^{-6}\ m$, une colonne d'eau à $T_2 = 333.15\ K$ et $L_2 = 33.3339 \times 10^{-6}\ m$ et une autre colonne d'air à $T_3 = 293.15\ K$ et $L_3 = 34.1146 \times 10^{-6}\ m$ (Figure 3.22). La vitesse dans le domaine est forcée à $0\ m \cdot s^{-1}$ afin de ne pas avoir d'oscillation de l'interface en raison des gradients de température ni d'apparition de gradient de pression. Ces simplifications permettent de calculer une solution théorique donnant les températures au niveau des deux interfaces à l'état stationnaire. Ainsi, une fois cet état atteint, on a :

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\lambda\vec{\nabla}T\right) = 0 \tag{3.114}$$

et donc :

$$\lambda\vec{\nabla}T = cste \tag{3.115}$$

Au niveau des trois colonnes, on doit donc avoir les égalités suivantes :

$$\frac{\lambda_1}{L_1}\left(T_{int1} - T_1\right) = \frac{\lambda_2}{L_2}\left(T_{int2} - T_{int1}\right) = \frac{\lambda_3}{L_3}\left(T_3 - T_{int2}\right) \tag{3.116}$$

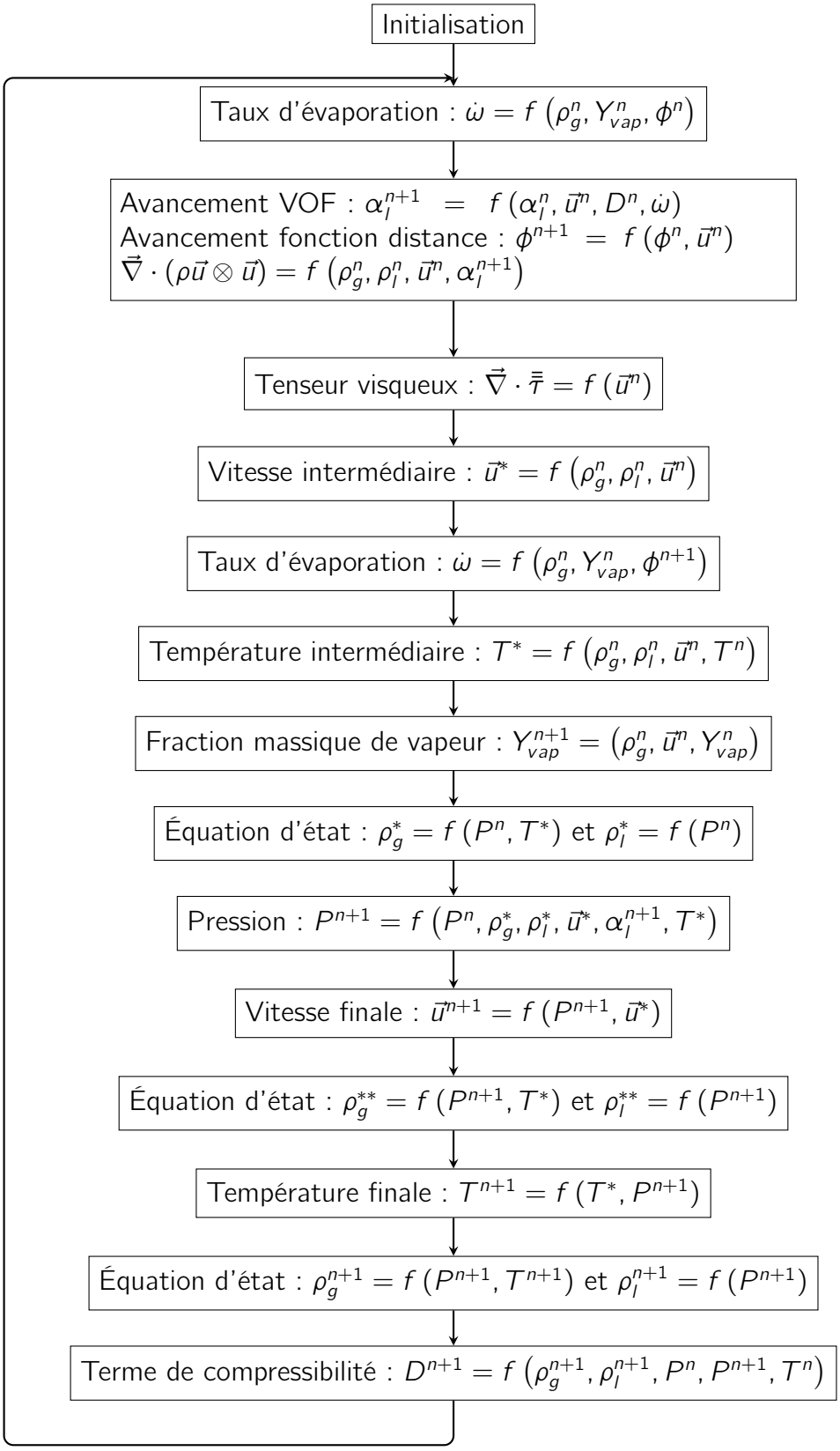


Figure 3.21 – Pas d'Euler de l'algorithme compressible avec résolution de l'évaporation.

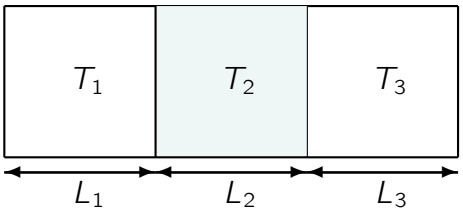


Figure 3.22 – Cas de validation pour la diffusion de la température.

avec $\lambda_1 = \lambda_3 = \lambda_g$, la conductivité thermique du gaz et $\lambda_2 = \lambda_l$, la conductivité thermique du liquide. En isolant T_{int1} et T_{int2}, on obtient :

$$\begin{cases} T_{int1} = \frac{1+\frac{\lambda_g}{\lambda_l}\frac{L_2}{L_3}}{1+\frac{L_1}{L_3}+\frac{\lambda_g}{\lambda_l}\frac{L_2}{L_3}} T_1 + \frac{\frac{L_1}{L_3}}{1+\frac{L_1}{L_3}+\frac{\lambda_g}{\lambda_l}\frac{L_2}{L_3}} T_2 \\ T_{int2} = \frac{\frac{L_3}{L_1}}{1+\frac{L_3}{L_1}+\frac{\lambda_g}{\lambda_l}\frac{L_2}{L_1}} T_1 + \frac{1+\frac{\lambda_g}{\lambda_l}\frac{L_2}{L_1}}{1+\frac{L_3}{L_1}+\frac{\lambda_g}{\lambda_l}\frac{L_2}{L_1}} T_2 \end{cases} \tag{3.117}$$

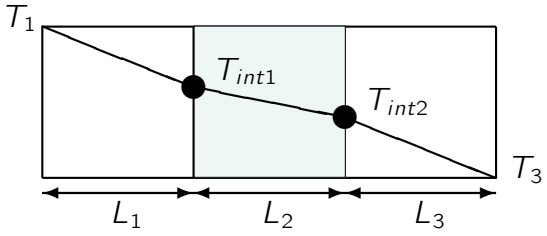


Figure 3.23 – Solution attendue pour le cas de validation pour la diffusion de la température.

Le gradient de température étant constant à l'équilibre, le résultat attendu concernant le profil de température dans le domaine, est un profil linéaire par morceau (Figure 3.23). En effet, la pente de la droite est différente dans le liquide et dans le gaz car la conductivité thermique est différente dans les deux phases. Le calcul a été réalisé avec $\lambda_g = 0.0256\ W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ et $\lambda_l = 0.05\ W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ et un maillage avec 64 mailles. Ces valeurs ont été choisies afin d'avoir une différence prononcée dans les pentes des profils de température mais elles ne correspondent pas aux valeurs réelles. Cela n'est pas gênant vu que ce cas sert uniquement à vérifier la bonne implémentation de l'équation de l'énergie dans le code et qu'une solution théorique est développée. Les températures attendues avec ces valeurs de

conductivités thermiques sont $T_{int1-th} = 341.15\ K$ et $T_{int2-th} = 325.15\ K$. Sur la figure 3.24, on observe que les résultats de la simulation suivent bien la solution théorique. Les températures obtenues sont $T_{int1} = 340.91\ K$ et $T_{int2} = 325.30\ K$ soit un écart de 0.07% et 0.05% respectivement par rapport à la théorie. Ces très faibles écarts montrent une bonne implémentation du terme de diffusion de la température. De plus, ces valeurs peuvent être revues à la baisse car le temps de convergence de la solution est assez long et l'état stationnaire est difficilement atteignable.

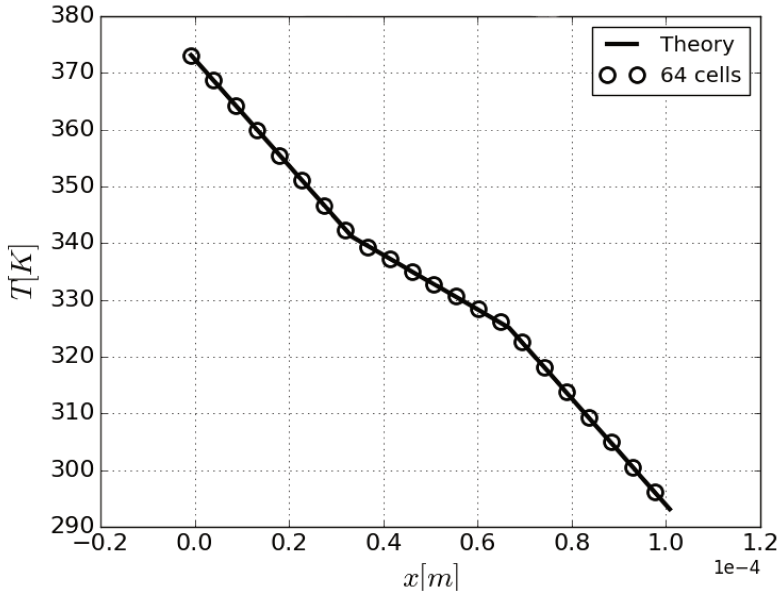


Figure 3.24 – Profil de température pour le cas de diffusion de température avec 64 mailles.

Convection d'une poche d'air en monophasique

Il s'agit maintenant de valider l'implémentation de l'équation de l'énergie sur un cas monophasique avec convection et diffusion de la température. Pour cela, un cas 2D représentant la convection d'une poche d'air froid à 293.15 K et de rayon $R = 10\ \mu m$ dans de l'air chaud à 373.15 K (Figure 3.25). Le domaine mesure $100\ \mu m \times 100\ \mu m$ sur un maillage 128×128 et les conditions aux limites sont périodiques. La pression dans ce domaine est la pression atmosphérique. La vitesse initiale de la poche d'air froid est de $10\ m \cdot s^{-1}$. Afin de pouvoir observer la convection de la poche, la conductivité thermique de l'air a été divisée par 10 ($\lambda_g = 0.00256\ W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$).

Sur la figure 3.26, le profil de température dans le domaine est représenté à différents instants. On peut voir que la poche d'air est bien convectée avec,

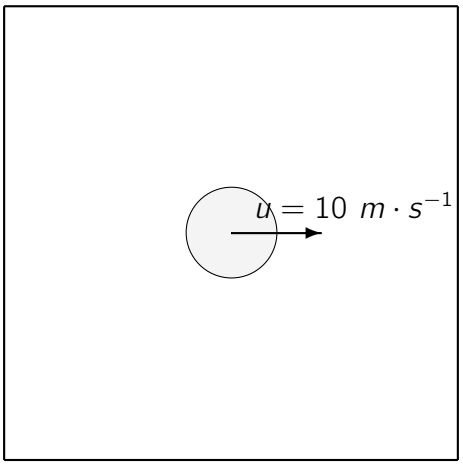


Figure 3.25 – Configuration de la poche d'air froid convectée en 2D.

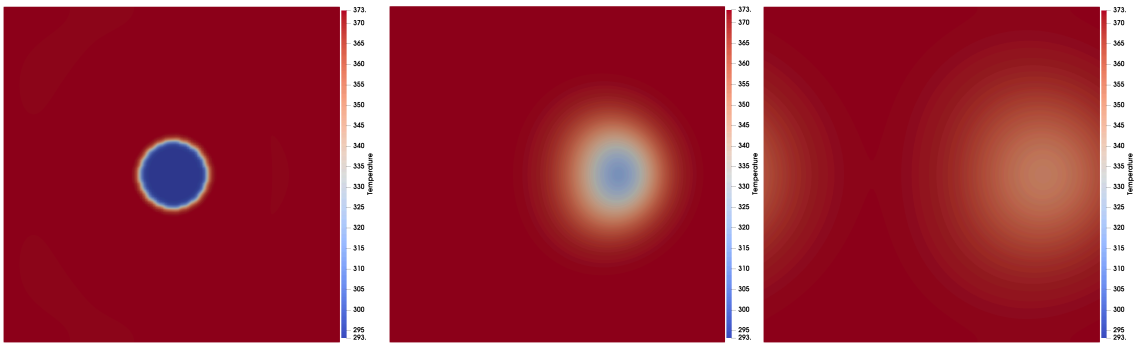


Figure 3.26 – Champ de température (en K) pour le cas de la poche d'air froid convectée à différents instants. À gauche, le champ à $t = 1.2 \times 10^{-7}\ s$; au centre, le champ à $t = 1.0 \times 10^{-5}\ s$ et à droite, le champ à $t = 3.9 \times 10^{-5}\ s$.

simultanément, une diffusion de la température cohérente. Ensuite, la masse et l'énergie doivent être conservées dans le domaine. Dans le cas d'une grandeur scalaire ξ, l'équation de conservation dans tout le domaine peut s'écrire :

$$\iiint_V \left(\frac{\partial \rho \xi}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} \xi - \vec{\nabla} \cdot \left(D \vec{\nabla} \xi \right) \right) dV = 0 \tag{3.118}$$

avec D, le coefficient de diffusion de la grandeur ξ.En utilisant le théorème de Green-Ostrogradski, on a :

$$\iiint_V \frac{\partial \rho \xi}{\partial t} dV + \oiint \left(\rho \xi \vec{u} - D \vec{\nabla} \xi \right) \cdot \vec{n} dS = 0 \tag{3.119}$$

Dans le cas d'un domaine périodique, on a $\oiint (\bullet) \cdot \vec{n} dS = 0$. Ainsi, il reste :

$$\iiint_V \frac{\partial \rho \xi}{\partial t} dV = 0 \tag{3.120}$$

Cette relation étant vérifiée pour n'importe quel dV, on obtient :

$$\frac{\partial \rho \xi}{\partial t} = 0 \tag{3.121}$$

La quantité $\rho\xi$ doit donc être constante. Dans le cas de la masse $\xi = 1$ et dans le cas de l'énergie $\xi = c_p T$. Le capacité thermique isobare étant considérée constante, on peut prendre $\xi = T$.

En regardant la moyenne sur tout le domaine de la masse volumique ρ et de l'énergie ρT, on remarque une perte de ces deux grandeurs d'environ 0.1%. Ainsi, une bonne conservation de la masse et de l'énergie est observée dans cette configuration monophasique avec convection et diffusion de la température.

Évaporation d'une goutte

L'implémentation de l'équation de l'énergie étant vérifiée, l'étape suivante consiste à simuler l'évaporation d'une goutte statique avec un taux d'évaporation non imposé et dépendant des conditions de température et de pression du milieu. La majorité des configurations présentées dans la littérature utilisent des conditions aux limites de sorties libres. Ces conditions n'étant pas développées, pour le moment, dans le cas d'écoulements compressibles, ce type de configuration est donc difficilement réalisable. De plus, d'autres configurations, n'employant pas ce type de conditions aux limites, utilisent des géométries complexes particulières adaptées aux besoins des auteurs et semblent donc inappropriées dans le cas d'une validation. Ainsi, le cas présenté ici sert uniquement à montrer le potentiel de la méthode ainsi que ses limites.

Il s'agit de l'évaporation d'une goutte d'eau à 293.15 K dans de l'air à 373.15 K. La configuration est en 2D avec des conditions aux limites symétriques où la température est imposée à 373.15 K. La pression est initialement à la pression atmosphérique. La goutte a un rayon initial $R_{init} = 10\ \mu m$ et le domaine mesure $100\ \mu m \times 100\ \mu m$ pour un maillage 128×128. Les différents paramètres physiques ont les valeurs habituelles pour l'eau et l'air dans ces conditions de température et de pression.

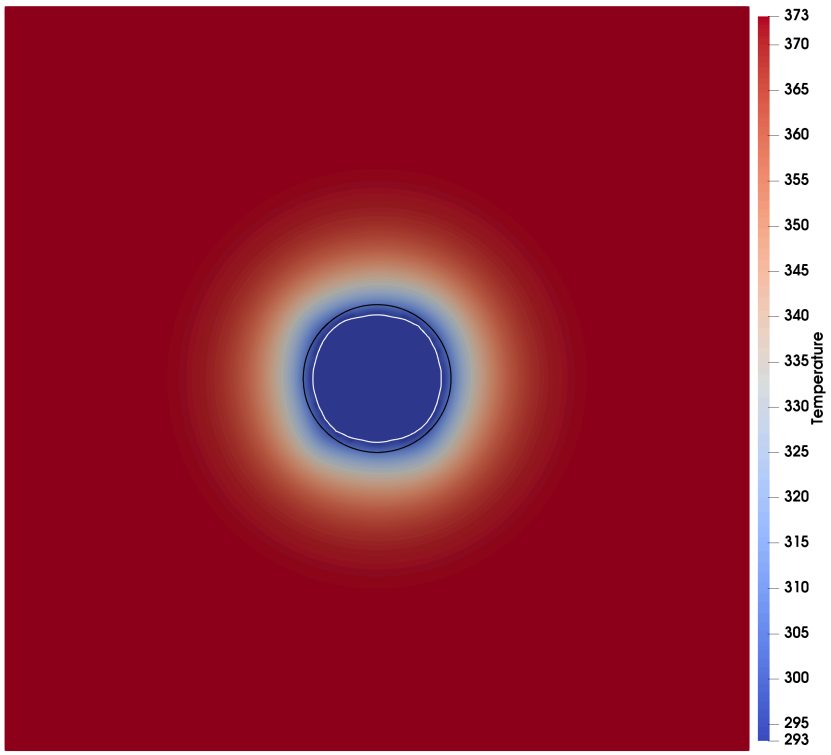


Figure 3.27 – Champ de température (en K) pour le cas de la goutte qui s'évapore. Le cercle noir correspond au contour $\phi = 0$ de la fonction distance à l'interface au temps initial. Le cercle blanc correspond à ce même contour au temps final $t = 8.9 \times 10^{-7}$ s.

Sur la figure 3.27, l'évaporation de la goutte est bien visible avec une régression de l'interface (cercle blanc) par rapport au temps initial (cercle noir). De plus, la diffusion de la température est conforme aux attentes : en s'évaporant, la goutte prélève de l'énergie à l'air environnant d'où la diminution de la température autour de l'interface. Cependant, en s'évaporant, la goutte a tendance à se déformer en devenant légèrement "carrée". Une des raisons possibles à cette déformation est l'utilisation de conditions aux limites symétriques associées à un maillage cartésien. En effet, sur les champs de vitesse et de pression (Figure 3.28), des ondes se réfléchissant sur les bords du domaine ainsi que sur la goutte sont observées. Les pas de temps ont été choisis afin de mettre en évidence ces ondes et l'échelle des pression a été adaptée afin de les accentuer.

Une importante perte de masse est également visible sur la figure 3.29 (gauche). Après un temps de 9.0×10^{-7} s, la perte de masse est d'environ 22%. En traçant la masse de liquide et de gaz en fonction du temps (Figure 3.29 droite), on s'aperçoit

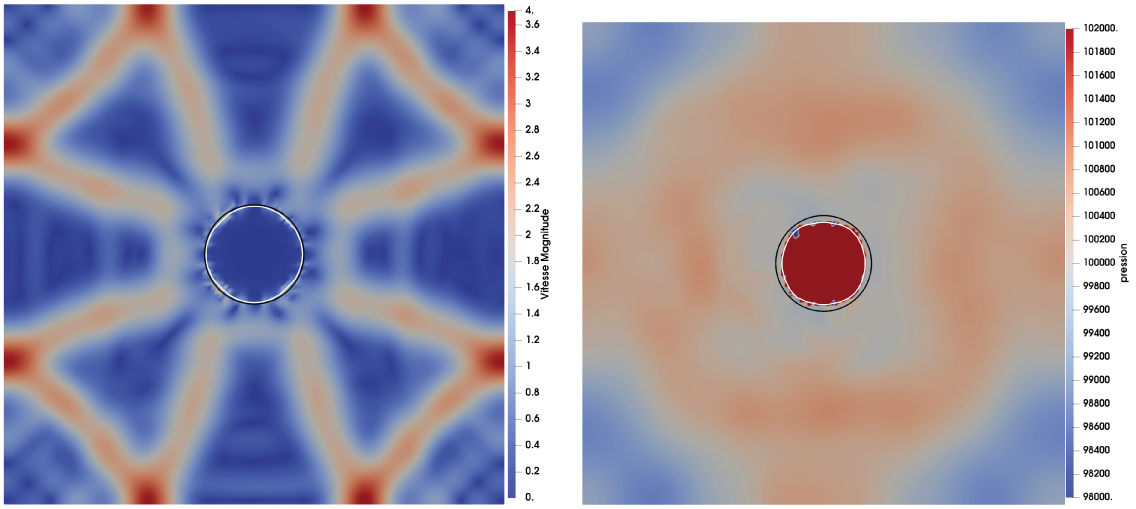


Figure 3.28 – Champ de vitesse (en $m \cdot s^{-1}$ à gauche) et de pression (en Pa à droite) pour le cas de la goutte qui s'évapore. Le cercle noir correspond au contour $\phi = 0$ de la fonction distance à l'interface au temps initial. Le cercle blanc correspond à ce même contour aux temps $t = 2.2 \times 10^{-7}$ s (gauche) et $t = 8.9 \times 10^{-7}$ s (droite).

que la masse de liquide diminue comme prévue en raison de l'évaporation mais que la masse de gaz reste constante. Cette perte de masse provient donc d'une anomalie au niveau du transfert de masse entre le liquide et le gaz au moment de la régression de l'interface.

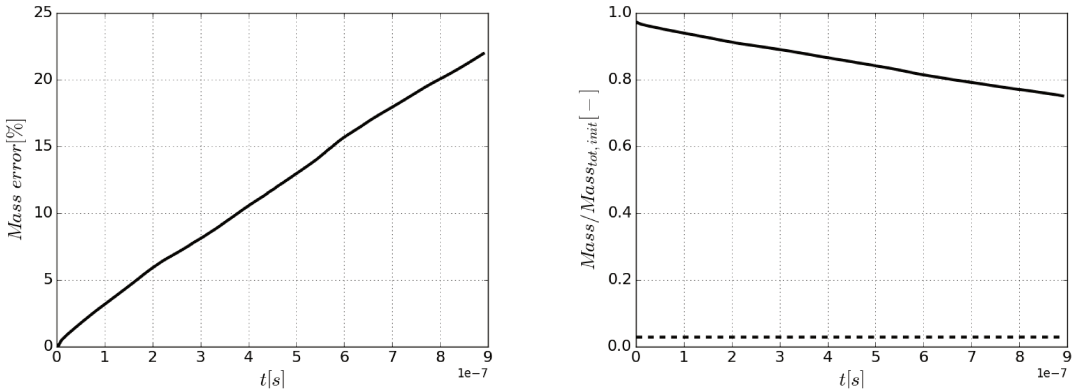


Figure 3.29 – À gauche : évolution du pourcentage de perte de masse totale en fonction du temps. À droite : évolution de la masse de liquide (ligne continue) et de la masse de gaz (ligne pointillée) adimensionnées par la masse totale initiale en fonction de temps.

Un cas en trois dimensions a également été réalisé montrant les mêmes défauts que celui en deux dimensions.

3.6 Conclusion

Une méthode basée sur la pression a été développée dans le cadre d'applications à des écoulements diphasiques à faible nombre de Mach. L'utilisation d'une méthode de projection pour découpler la pression et la vitesse permet le recours à un pas de temps plus élevé que celui imposé par la condition CFL acoustique ; les termes acoustiques étant implicités dans l'équation pour la pression. Ce formalisme permet également la prise en compte des variations locales de masse volumique. De plus, les équations de Navier-Stokes sont couplées à une méthode CLSVOF pour assurer une bonne conservation de la masse et une représentation précise de l'interface. La précision de la méthode est démontrée sur des cas de validation comme la colonne d'eau oscillante ou le tube à choc diphasique mais également sur des configurations plus complexes comme la THI. Dans cette dernière configuration, une simulation d'évaporation avec un taux constant a été réalisée. Celle-ci a montré de bons résultats avec une conservation de la masse totale et une évaporation conforme aux attentes.

Les premiers résultats concernant l'évaporation dans un formalisme compressible avec un taux basé sur la thermique, bien que présentant un défaut de conservation, sont plutôt encourageants. Une régression de l'interface est observée avec une diffusion de la température cohérente. Une étude sur les origines des pertes de masse constatées lors du transfert de masse pendant l'évaporation est en cours ; plusieurs pistes sont envisagées notamment au niveau du couplage entre l'énergie et la masse volumique.

Chap. 4 | Vers une description complète de l'atomisation basée sur les courbures

4.1 Introduction

L'atomisation de diesel liquide et sa combustion représentent, encore de nos jours, une source majeure pour la production d'énergie dans les domaines de l'automobile et de l'aéronautique. Considérant les difficultés et le coût important des mesures expérimentales pour les écoulements diphasiques et plus particulièrement dans la zone dense du spray, des simulations numériques ont été utilisées ces dernières années afin de mieux comprendre l'évolution du liquide. Plusieurs méthodes numériques, associées à différents coûts de calcul, ont été développées dans ce but ([164], [165]) et sont normalement capables de fournir des outils prédictifs pour comprendre les différents mécanismes physiques impliqués dans l'atomisation. Une sortie standard normalement attendue dans chaque modèle ou théorie, que ce soit dans les études DNS ou les corrélations expérimentales, est la distribution de taille de gouttes (DSD pour Drop Size Distribution). D'un point de vue théorique, plusieurs définitions de cette fonction peuvent être introduites. Généralement, il s'agit de $F_N(D)$ de telle sorte que $F_N(D')dD$ est le nombre de gouttes par unité de volume avec un diamètre appartenant à l'intervalle $[D', D' + dD[$. Dans ce cas, il s'agit de la distribution du diamètre en nombre (NDD pour Number Diameter Distribution) et elle peut être normalisée une fonction de densité de probabilité $P_N(D)$. La fonction $F_N(D)$ requière la possibilité de calculer le nombre de gouttes. Ainsi, il est nécessaire de séparer la phase liquide en un ensemble d'éléments discrets. Cependant, le processus usuel d'atomisation commence avec un écoulement continu de liquide (par exemple, un jet liquide) et se poursuit avec une séparation de la phase continue de liquide. Une fois

cette séparation achevée, en considérant le spray en entier et des conditions externes fixes, la NDD évolue vers un état asymptotique, pour lequel beaucoup de travaux théoriques et expérimentaux sont reportés dans la littérature [166]. Pour aborder des situations plus complexes ou déterminer sa fonction en espace et en temps, une équation de transport pour la DSD, comme l'équation de Williams-Boltzmann [167], est requise.

Bien que l'écoulement interne à l'injecteur, de même que les instabilités de surface et les méthodes de résolution de l'équation de Williams-Boltzmann, ait fait l'objet de plusieurs travaux de recherche ([168, 169, 170, 171, 172, 173, 174]), peu d'études traitent de l'étape de génération de gouttes pour estimer la DSD. Une raison est le manque de données pour vérifier une quelconque proposition ou encore l'absence de définition de la NDD pendant le processus d'atomisation primaire. En effet, en considérant le jet liquide avant le détachement de parcelles de liquide, la notion de diamètre ne peut pas être raisonnablement introduite. Néanmoins, en considérant une instabilité initiale sur la surface du liquide, ce déséquilibre évolue dans le temps et crée des structures à une certaine échelle de longueur. Cette échelle de longueur est en quelque sorte reliée, d'un point de vue théorique, au diamètre de gouttes qui seront ensuite générées. Il est clair que le lien entre ces deux étapes est manquant. Concernant les données dans la zone de transition, de récentes avancées, que ce soit dans les techniques expérimentales ([175], [176]) ou dans les simulations numériques ([177], [178], [179]), ont été réalisées. Cependant, une définition étendue de la DSD doit d'abord être introduite afin de pouvoir traiter la zone dense du spray et l'atomisation primaire. Le même problème peut être remarqué concernant la définition du diamètre moyen : il s'agit d'un moment de la NDD et il ne peut donc être défini qu'une fois la rupture du jet liquide en un ensemble de gouttes atteinte.

Le principal objectif de cette partie est donc de proposer une définition étendue de la distribution de taille de gouttes afin qu'elle puisse être utilisée tout au long du processus d'atomisation, menant ainsi à une distribution surfacique de la courbure (SCD pour Surface Curvature Distribution). Par la suite, la définition de la SCD sera d'abord introduite avec quelques propriétés géométriques de l'interface liquide/gaz comme la courbure moyenne H ou la courbure de Gauss G. Ensuite, des simulations numériques seront utilisées pour extraire l'évolution des propriétés géométriques sur

des cas fondamentaux. Pour cela, le code ARCHER ([180], [95]) est utilisé où une méthode CLSVOF est implémentée pour la représentation de l'interface ainsi qu'une méthode Ghost Fluid pour représenter correctement le saut des variables à travers l'interface liquide/gaz. Les résultats DNS focalisés sur les propriétés géométriques de l'interface seront présentés afin de fournir des informations pour améliorer les modèles d'atomisation ; en particulier le modèle ELSA (Eulerian Lagrangian Spray Atomization) [181], [182] dans la région où la transition vers la description lagrangienne est réalisée.

Ce chapitre est structuré de la manière suivante : la prochaine partie décrira la SCD et l'introduction d'une relation entre la SCD et la NDD pour une goutte sphérique basée sur les courbures de surface. Une seconde partie présentera un cas Rayleigh-Plateau et une collision de gouttes afin de caractériser les deux courbures principales et de montrer comment le processus de rupture/coalescence d'un jet liquide peut être décrit en utilisant les propriétés topologiques de la surface. Enfin, un cas simulant une Turbulence Homogène et Isotrope (THI) avec plusieurs valeurs de fraction volumique de liquide sera considéré dans le but d'imiter le processus d'atomisation. Ce travail a fait l'objet d'une publication dans l'International Journal of Multiphase Flow [183].

4.2 Une définition étendue de la distribution de taille de gouttes

Le but de cette partie est de proposer une définition étendue de la distribution de taille de gouttes qui puisse être applicable tout au long du processus d'atomisation, y compris dans la zone d'atomisation primaire. Depuis les premiers travaux de Vallet ([184], [185]), il est connu que la définition du diamètre moyen peut être remplacée par la densité moyenne de surface Σ qui correspond à l'aire de la surface par unité de volume. Cette quantité est définie partout quelque soit la topologie de la phase liquide. Quand cette variable est combinée à la fraction volumique de liquide α, on obtient une expression du diamètre moyen de Sauter une fois le spray formé : $D_{32} = \frac{6\alpha}{\Sigma}$. Récemment, Essadki et al. [173] ont utilisé des méthodes de moments d'ordre élevé pour la DSD dans la zone dispersée, où la taille est donnée par l'aire de surface de la goutte, afin de retrouver les variables géométriques de l'interface utilisées pour décrire l'interface liquide/gaz dans leur précédents travaux [186]. Ces variables sont la fraction volumique, la densité moyenne de surface, la courbure de Gauss $G = \kappa_1\kappa_2$ et la courbure moyenne $H = \frac{\kappa_1+\kappa_2}{2}$, avec κ_1 et κ_2, les deux courbures principales

de la surface. Les courbures principales d'un point sur une surface correspondent à l'inverse des rayons de courbure calculés dans deux plans perpendiculaires l'un à l'autre se croisant au niveau du point considéré (Figure 4.1). Ainsi, pour une ligne droite par exemple, la courbure est nulle étant donné que le rayon de courbure est infini. La courbure de Gauss, elle, étant le produit des deux courbures principales, permet de différencier les structures. En effet, une sphère ou un ellipsoïde a une courbure de Gauss positive car les courbures ont la même orientation dans les deux directions principales ; une structure hyperbolique a une courbure de Gauss négative car les courbures principales ont des orientations opposées, et les structures planes ou cylindriques ont une courbure de Gauss nulle car au moins une des deux directions a une courbure nulle (Figure 4.2).

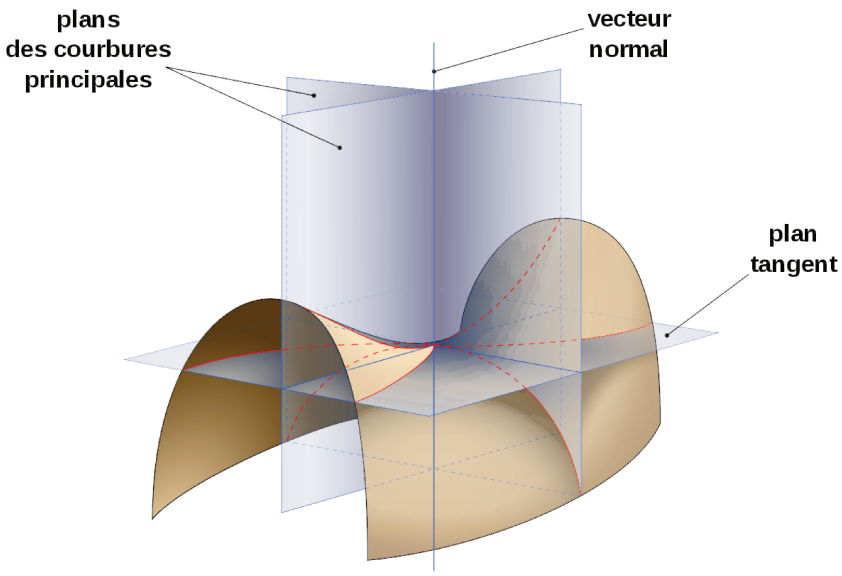


Figure 4.1 – Représentation des plans principaux perpendiculaires sur lesquels sont calculées les courbures principales [187].

Pour se soustraire des limites de la DSD dans la modélisation de l'interface liquide/gaz pendant le processus d'atomisation, la première idée est d'exploiter des caractéristiques de surface pour regarder la DSD car elles portent des informations sur la distribution de taille de gouttes qui est cachée dans la processus de déstabilisation. L'idée est de regarder la distribution de courbure κ. Dans ce cas, la distribution de courbure est $F_S(\kappa)$ et $F_S(\kappa')\,d\kappa$ est l'aire de la surface ayant une courbure κ appartenant à l'intervalle $[\kappa', \kappa' + d\kappa[$. Cela conduit à la définition de la distribution surfacique de la courbure. Cependant, une description précise de l'interface ne peut

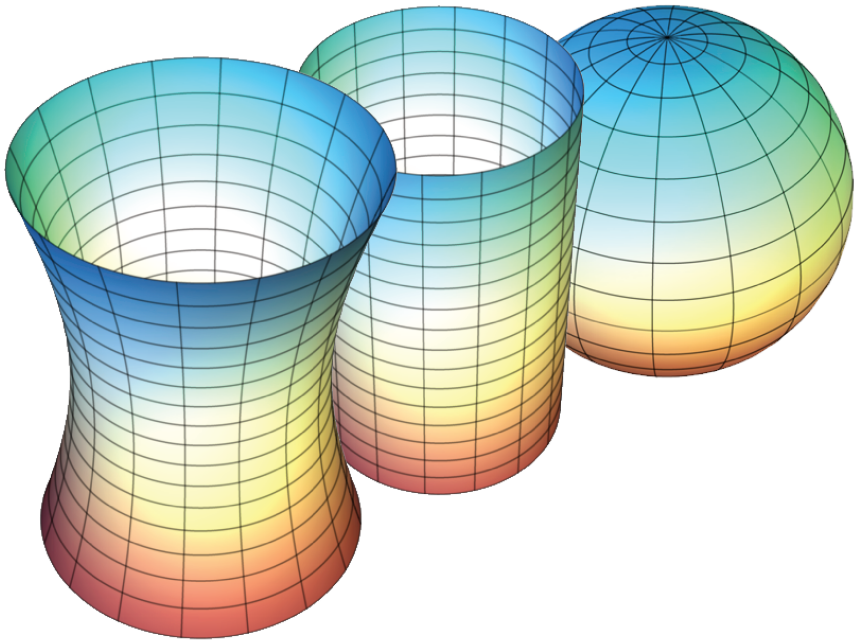


Figure 4.2 – Différentes topologies avec des courbures de Gauss différentes. Une hyperboloïde avec $G < 0$ à gauche, un cylindre avec $G = 0$ au milieu et une sphère avec $G > 0$ à droite [187].

se limiter à une seule variable géométrique comme c'est le souvent le cas dans la DSD pour la zone dispersée. Ainsi, la courbure moyenne et la courbure de Gauss ont été choisies comme variables de l'espace des phases, menant à la définition d'une nouvelle SCD bidimensionnelle : $F_S(H, G)$. H et G sont préférables dans ce contexte contrairement à κ_1 et κ_2. En effet, les courbures κ_1 et κ_2 doivent être distinguées en considérant une relation d'ordre $\kappa_2 \leq \kappa_1$, alors que les courbures H et G sont mathématiquement bien définies et fournissent des propriétés topologiques intéressantes [188].

La définition de $F_S(H, G)$ et son lien avec la fonction de densité en nombre standard sont basés sur le théorème de Gauss-Bonnet (voir [188] pour plus de détails). En considérant M comme un objet 3D, délimité par une surface $\Sigma(M)$, on a :

$$\int_{x \in \Sigma(M)} G(x) dS(x) = 2\pi\chi(M) \tag{4.1}$$

avec $\chi(M)$, la caractéristique d'Euler qui est la même pour chaque objet homéomorphe à M. Elle est égale à 2 pour des objets homéomorphes à une sphère. Ainsi, en considérant un ensemble de gouttes homéomorphes à une sphère, cette grandeur peut être utilisée pour compter le nombre de particules. Dans le cas d'une sphère,

$\kappa_1 = \kappa_2 = \frac{2}{D}$ et la courbure de Gauss peut s'exprimer par $G = \frac{4\pi}{S}$ avec $S = \pi D^2$, l'aire d'une sphère. Les deux fonctions $\frac{GF_S\left(H=\sqrt{G},G\right)}{4\pi}$ et $F_N(D)$ sont donc équivalentes car elles permettent de compter le nombre de gouttes par unité de volume et par rayon ou courbure de Gauss. La démonstration de cette équivalence dans un cas plus général peut être trouvée dans Essadki et al. [188].

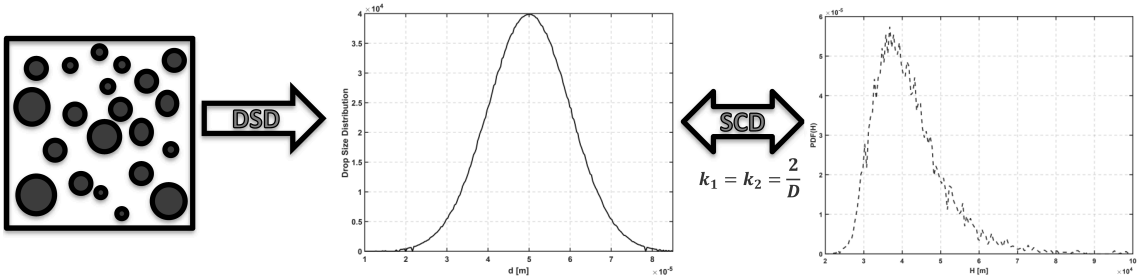


Figure 4.3 – Lien entre la DSD et la SCD pour une distribution connue de gouttes sphériques.

Dans la figure 4.3, le lien entre la DSD et, par exemple, la distribution de H, est montré pour un nuage de gouttes avec une distribution normale connue ($D_{mean} = 5 \cdot 10^{-5}\ m\ et\ \sigma = 10^{-5}$). Un lien continu entre les deux distributions peut être introduit et la DSD peut être reformulée à partir des valeurs correspondantes de courbure. Néanmoins, la SCD est définie tout au long du processus d'atomisation et donc, une fois le spray formé, la DSD est un cas particulier de $F_S(H, G)$.

Par contre, la SCD est une distribution qui mesure l'aire probable de surface pour une propriété donnée de l'interface. Elle ne peut pas gérer le volume occupé par la phase liquide ou la phase gazeuse. Une autre approche pour caractériser le spray consiste à utiliser une distribution volumique. Pour un spray, la DSD devient $F_V(D)$ de telle sorte que $F_V(D')\,dD$ est la fraction volumique de liquide des gouttes ayant un diamètre appartenant à l'intervalle $[D', D' + dD[$. Cette distribution volumique peut être étendue à n'importe quelle topologie de liquide, menant ainsi à la distribution volumique de la fonction distance $V_\phi D$, qui peut être une seconde idée pour décrire le transport de la courbure. Elle est définie par $F_V(\phi)$ de sorte que $F_V(\phi')\,d\phi$ est la fraction volumique de l'écoulement qui se trouve à une distance ϕ de l'interface avec ϕ appartenant à l'intervalle $[\phi', \phi' + d\phi[$. ϕ est positive dans la phase liquide et négative dans la phase gazeuse. Cela permet donc de déduire la fraction volumique de gaz $\alpha_g = \int_{-\infty}^{0} F_V(\phi)d\phi$, la fraction volumique de liquide $\alpha_l = \int_{0}^{+\infty} F_V(\phi)d\phi$, et la densité moyenne de surface $\Sigma = F_V(0)$. $V_\phi D$ donne la distribution de l'écoulement par

rapport à la distance à l'interface. Le lien avec la DSD n'est pas évident. Cependant, cette distribution peut être caractérisée sur un objet géométrique donné comme une goutte sphérique.

Une idée similaire a été explorée par Dumouchel et al. ([189],[178]) avec le concept d'échelle de distribution $E_3(d)$. La définition de cette fonction pour un objet donnée (par exemple une goutte) est basée sur le volume total V_0 de l'objet et le volume $V(d)$ occupé par tous les points situés à une distance d ou supérieure de l'interface de l'objet. L'échelle de distribution est donnée par $E_3(d) = \frac{V_0 - V(d)}{V_0}$. Le lien entre l'échelle de distribution et $V_\phi D$ peut s'exprimer de la manière suivante : $E_3(d) = \frac{F_V(\phi=d)}{\alpha_l}$. Dumouchel et al. [189] ont travaillé sur des données expérimentales en 2D et plus récemment, des simulations numériques ont été utilisées pour extraire des résultats 3D [178]. De plus, le lien entre la distribution d'échelle et la distribution des courbures est abordé récemment dans l'article de Thiesset et al. [190]. Selon l'idée de Essadki et al. [188], l'important est d'analyser la distribution surfacique de courbure et le comportement des courbures principales, moyennes et de Gauss sur différentes configurations diphasiques ; ces grandeurs permettant une description géométrique précise du comportement de l'interface.

4.3 Équations fondamentales et méthodes numériques

4.3.1 Équations de Navier-Stokes et méthode de capture d'interface

Ici, une méthode CLSVOF est couplée avec une méthode de projection pour effectuer les simulations numériques directes des équations de Navier-Stokes incompressibles :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \vec{u} = -\frac{\nabla P}{\rho} + \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \cdot (2\mu \bar{\bar{\epsilon}}) + \vec{f} + \frac{1}{\rho} \sigma H \delta(\phi) \vec{n} \tag{4.2}$$

avec P, la pression ; $\vec{u}$, le vecteur vitesse et $\bar{\bar{\epsilon}}$, le tenseur des taux de déformation. À l'interface, la force de tension de surface peut être basée sur la distribution de Dirac $\delta(\phi)$. La formulation incompressible est similaire à celle de la section 3.2 et les équations sont donc résolues de la même manière.

4.3.2 Estimation des courbures principales

Deux méthodes ont été utilisées pour extraire la distribution des courbures.
La première est basée sur la fonction distance ϕ. La normale à l'interface est d'abord

calculée :

$$\vec{n} = -\frac{\vec{\nabla}\phi}{|\vec{\nabla}\phi|} \tag{4.3}$$

Les courbures recherchées sont contenues dans la matrice $\vec{\nabla}\vec{n}^t$. En développant cette matrice, elle peut s'écrire de la manière suivante :

$$\vec{\nabla}\vec{n}^t = -\frac{1}{|\vec{\nabla}\phi|}\left(\bar{\bar{I}} - \vec{n}\vec{n}^t\right)\vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}\phi\right)^t \tag{4.4}$$

ou encore :

$$\vec{\nabla}\vec{n}^t = -\frac{1}{|\vec{\nabla}\phi|}\bar{\bar{P}}\bar{\bar{H}} \tag{4.5}$$

avec $\bar{\bar{P}} = \bar{\bar{I}} - \vec{n}\vec{n}^t$ et $\bar{\bar{H}} = \vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}\phi\right)^t$, la matrice hessienne de ϕ. En choisissant la base orthonormée appropriée $\{\vec{p_1}, \vec{p_2}, \vec{n}\}$, avec $\vec{p_1}$ et $\vec{p_2}$ les directions des courbures principales dans le plan tangent de la surface, la matrice $\vec{\nabla}\vec{n}^t$ se simplifie comme suit :

$$\vec{\nabla}\vec{n}^t = \begin{pmatrix} \kappa_1 & 0 & \sigma_1 \\ 0 & \kappa_2 & \sigma_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.6}$$

avec κ_1 et κ_2, les deux courbures principales et σ_1 et σ_2, des termes liés à la façon dont la normale varie en fonction de la distance à l'interface. Dans la nouvelle base $\{\vec{p_1}, \vec{p_2}, \vec{n}\}$, la matrice $\bar{\bar{P}}$ devient :

$$\bar{\bar{P}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.7}$$

Ainsi, la construction d'une nouvelle matrice $\bar{\bar{G}} = \vec{\nabla}\vec{n}^t\bar{\bar{P}}$ permet d'isoler les courbures principales :

$$\bar{\bar{G}} = \vec{\nabla}\vec{n}^t\bar{\bar{P}} = \begin{pmatrix} \kappa_1 & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.8}$$

En pratique, les calculs ne se font pas dans la base $\{\vec{p_1}, \vec{p_2}, \vec{n}\}$ mais dans une base classique $\{\vec{e_x}, \vec{e_y}, \vec{e_z}\}$. Ainsi, la matrice $\bar{\bar{G}}$ a une forme plus complexe. Cependant, les deux formes de la matrice exprimée dans deux bases différentes étant semblables au sens matriciel du terme, l'utilisation d'invariants comme la trace T ou la norme de Frobenius F permet d'obtenir les courbures principales. En effet, dans les différentes

bases, la trace de $\bar{\bar{G}}$ est $T = \kappa_1 + \kappa_2$ et la norme de Frobenius est $F = \sqrt{T(\bar{\bar{G}}\bar{\bar{G}}^t)} = \sqrt{\kappa_1^2 + \kappa_2^2}$. Enfin, pour calculer les deux courbures principales, il suffit de résoudre un polynôme du second degré. On obtient ainsi :

$$\kappa_1 = \frac{T + \sqrt{2F^2 - T^2}}{2} \quad \kappa_2 = \frac{T - \sqrt{2F^2 - T^2}}{2} \tag{4.9}$$

Pour plus de détails concernant l'explication de la méthode, voir les travaux de Kindlmann et al. [191].

La seconde méthode a été développée dans Essadki et al. [188], où l'interface liquide/gaz est discrétisée à l'aide d'un maillage 2D triangulaire utilisant l'algorithme Marching Cube. La courbure est calculée à chaque sommet du maillage à travers un processus de moyenne spatiale qui préserve des propriétés topologiques de l'interface liquide/gaz comme la relation de Gauss-Bonnet [192]. D'autre part, les résultats pour la $V_\phi D$ ont été obtenus directement à l'aide de la fonction distance.

4.4 Définitions des espaces de représentation des courbures principales

Afin d'être exhaustif, cinq représentations différentes sont présentées afin d'analyser l'évolution de la courbure pendant le processus de rupture :

- un graphe montrant la courbure moyenne H en fonction de la courbure de Gauss G (Figure 4.4 en haut à gauche),
- un graphe montrant les courbures principales κ_1 en fonction de κ_2 (Figure 4.4 en haut à droite),
- un graphe représentant H en fonction de $\sqrt{|G|}$ (Figure 4.4 au centre à gauche) dans le but d'avoir des variables avec les mêmes dimensions physiques,
- un graphe représentant S en fonction de P (Figure 4.4 au centre à droite) montrant l'espace dual du graphe (H, G). S représente $\frac{R_1+R_2}{2}$ et P représente R_1R_2 avec $R_1 = \frac{1}{\kappa_1}$ et $R_2 = \frac{1}{\kappa_2}$, les deux rayons de courbure. Cet espace est proposé ici puisque l'information sur la dimension de l'objet étudié est directement visible,
- Le dernier graphe représente l'espace $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$ qui correspond au graphe (κ_1, κ_2) avec une rotation de 45° rendant ce dernier plus lisible.

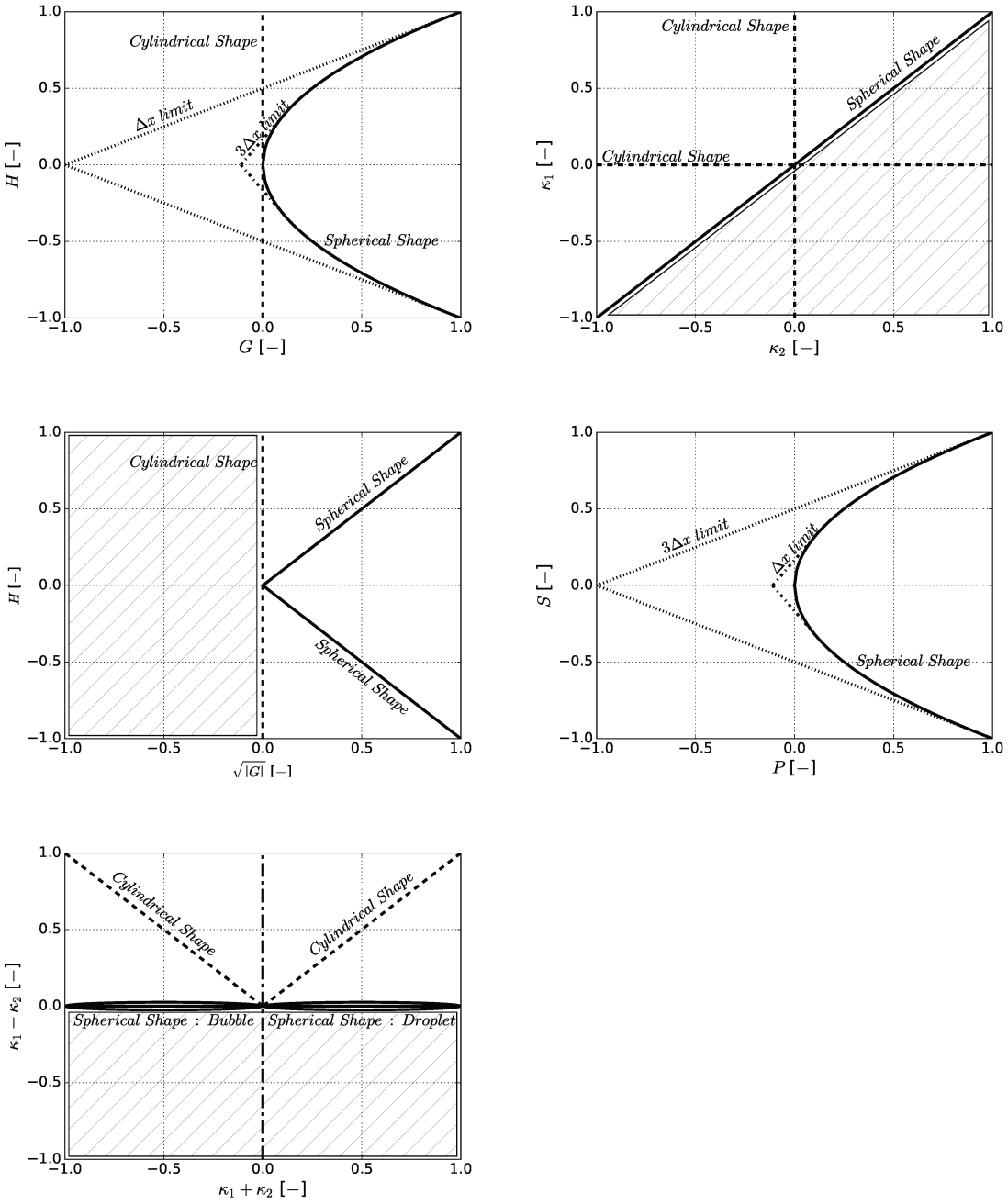


Figure 4.4 – Différents espaces pour la représentation de la courbure.

Les lignes pointillées correspondent aux topologies cylindriques ; c'est-à-dire que l'une des deux courbures principales est égale à zéro de même que la courbure de Gauss G. Les lignes continues correspondent, elles, à des topologies sphériques donc à $\kappa_1 = \kappa_2$. Sur les graphes (H, G) et (S, P), elles forment une parabole et aucun point ne peut se situer à l'intérieur de cette parabole. En effet, $\kappa_1 = \kappa_2$ conduit à $G = H^2$ et l'existence de ce point mènerait au raisonnement suivant :

$$\begin{aligned} H^2 &< G \\ \left(\tfrac{\kappa_1+\kappa_2}{2}\right)^2 &< \kappa_1\kappa_2 \\ \tfrac{\kappa_1^2+\kappa_2^2+2\kappa_1\kappa_2}{4} &< \kappa_1\kappa_2 \\ \kappa_1^2+\kappa_2^2+2\kappa_1\kappa_2 &< 4\kappa_1\kappa_2 \\ \kappa_1^2+\kappa_2^2-2\kappa_1\kappa_2 &< 0 \\ (\kappa_1-\kappa_2)^2 &< 0 \end{aligned} \tag{4.10}$$

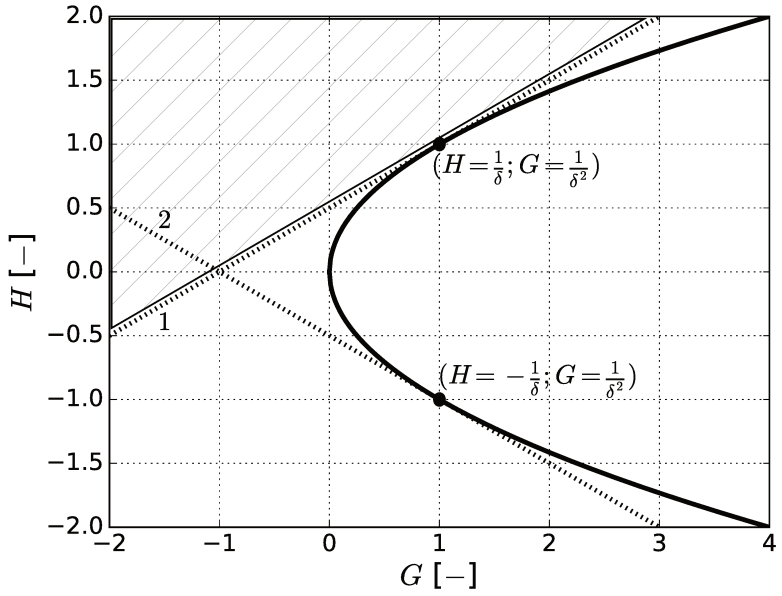
Un carré étant toujours positif ou nul dans le cas des nombres réels, cette contradiction montre l'impossibilité de l'existence d'un tel point.

En raison de la manière dont elles sont calculées, κ_1 est toujours plus grande que κ_2 et donc $\kappa_1 - \kappa_2$ est toujours positif. Sur le graphe $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$, la ligne tiret-point sépare les bulles $(\kappa_1 = \kappa_2 < 0)$ à gauche des gouttes $(\kappa_1 = \kappa_2 > 0)$ à droite. De plus, sur les graphes (H, G) et (S, P), les limites de résolution du maillage sont également représentées par des lignes pointillées. Afin d'obtenir ces limites, il faut considérer le fait que, pour être bien résolu, les deux courbures principales doivent vérifier les relations $|\kappa_1| < \frac{1}{\delta}$ et $|\kappa_2| < \frac{1}{\delta}$ avec δ la résolution du maillage. Si au moins une des deux courbures ne respecte pas ces relations, alors le point de la surface considéré n'est pas résolu. En écrivant κ_2 sous la forme $\kappa_2 = 2H - \kappa_1$, on a $G = 2\kappa_1 H - \kappa_1^2$. κ_1 devant vérifier $|\kappa_1| < \frac{1}{\delta}$, les valeurs limites sont pour $\kappa_1 = \frac{1}{\delta}$ et $\kappa_1 = -\frac{1}{\delta}$. Ces valeurs correspondent à deux droites sur le graphe (H, G) : $G = \frac{2}{\delta}H - \frac{1}{\delta^2}$ (droite 1 sur les prochains graphes explicatifs) et $G = -\frac{2}{\delta}H - \frac{1}{\delta^2}$ (droite 2). Pour

savoir quelles zones, délimitées par ces droites, sont bien résolues, plusieurs cas sont à différencier.

$$\boxed{\text{Cas } G < \tfrac{2}{\delta}H - \tfrac{1}{\delta^2}}$$

(zone hachurée sur le schéma)



En remplaçant G et H par leur expression en terme de courbures principales κ_1 et κ_2, on obtient les inégalités suivantes :

$$\begin{aligned} \kappa_1\kappa_2 &< \tfrac{\kappa_1+\kappa_2}{\delta} - \tfrac{1}{\delta^2} \\ \delta^2\kappa_1\kappa_2 &< \delta\left(\kappa_1+\kappa_2\right) - 1 \\ \left(\delta^2\kappa_1 - \delta\right)\kappa_2 &< \delta\kappa_1 - 1 \end{aligned} \tag{4.11}$$

Deux cas sont ensuite possibles :

- $(\delta^2\kappa_1 - \delta) > 0$ donc $\kappa_1 > \frac{1}{\delta}$:

$$\begin{aligned} \kappa_2 &< \tfrac{\delta\kappa_1 - 1}{\delta^2\kappa_1 - \delta} \\ \kappa_1 > \tfrac{1}{\delta} \quad et \quad \kappa_2 &< \tfrac{1}{\delta} \end{aligned} \tag{4.12}$$

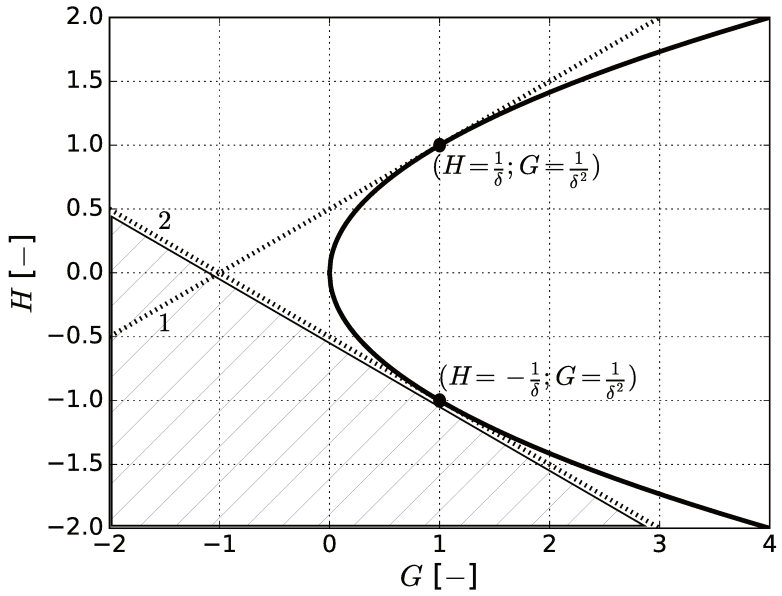
- $(\delta^2\kappa_1 - \delta) < 0$ donc $\kappa_1 < \frac{1}{\delta}$:

$$\begin{aligned} \kappa_2 &> \tfrac{\delta\kappa_1 - 1}{\delta^2\kappa_1 - \delta} \\ \kappa_1 < \tfrac{1}{\delta} \quad et \quad \kappa_2 &> \tfrac{1}{\delta} \end{aligned} \tag{4.13}$$

Ainsi, dans les deux cas, une des deux courbures principales ($\kappa > \frac{1}{\delta}$) n'est pas résolue et donc toute la zone hachurée n'est pas résolue.

$$\boxed{\text{Cas } G < -\tfrac{2}{\delta}H - \tfrac{1}{\delta^2}}$$

(zone hachurée sur le schéma)



En effectuant la même procédure que pour le cas précédent, on obtient :

$$(\delta^2\kappa_1 + \delta)\,\kappa_2 < -\delta\kappa_1 - 1 \tag{4.14}$$

Une nouvelle fois deux cas sont possibles :

- $(\delta^2\kappa_1 + \delta) > 0$ donc $\kappa_1 > -\frac{1}{\delta}$:

$$\kappa_2 < \tfrac{-\delta\kappa_1 - 1}{\delta^2\kappa_1 + \delta}$$

$$\kappa_1 > -\tfrac{1}{\delta} \quad et \quad \kappa_2 < -\tfrac{1}{\delta} \tag{4.15}$$

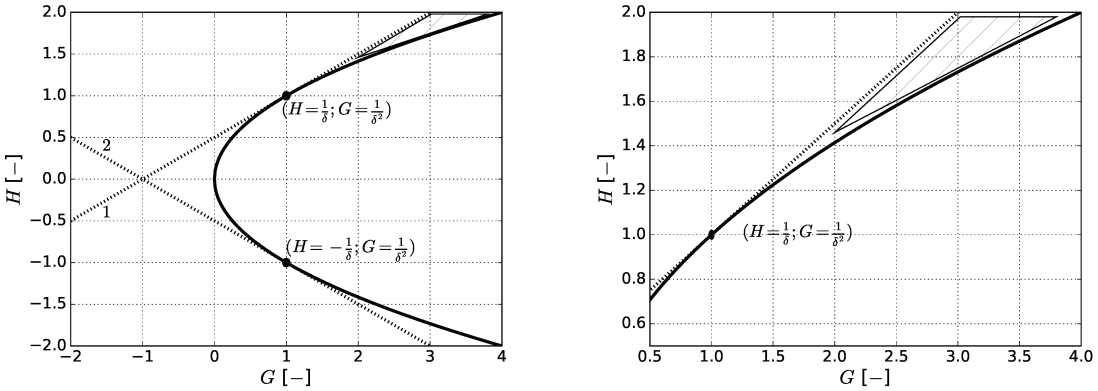
- $(\delta^2\kappa_1 + \delta) < 0$ donc $\kappa_1 < -\frac{1}{\delta}$:

$$\kappa_2 > \tfrac{-\delta\kappa_1 - 1}{\delta^2\kappa_1 + \delta}$$

$$\kappa_1 < -\tfrac{1}{\delta} \quad et \quad \kappa_2 > -\tfrac{1}{\delta} \tag{4.16}$$

Ainsi, dans les deux cas, une des deux courbures principales ($\kappa < -\frac{1}{\delta}$) n'est pas résolue et donc toute la zone hachurée n'est pas résolue.

Cas $G > \frac{2}{\delta}H - \frac{1}{\delta^2}$



En effectuant la même procédure que pour les cas précédents, on obtient :

$$(\delta^2\kappa_1 - \delta)\,\kappa_2 > \delta\kappa_1 - 1 \tag{4.17}$$

Une nouvelle fois deux cas sont possibles :

- $(\delta^2\kappa_1 - \delta) > 0$ donc $\kappa_1 > \frac{1}{\delta}$:

$$\kappa_2 > \frac{\delta\kappa_1 - 1}{\delta^2\kappa_1 - \delta}$$

$$\kappa_1 > \frac{1}{\delta} \quad et \quad \kappa_2 > \frac{1}{\delta} \tag{4.18}$$

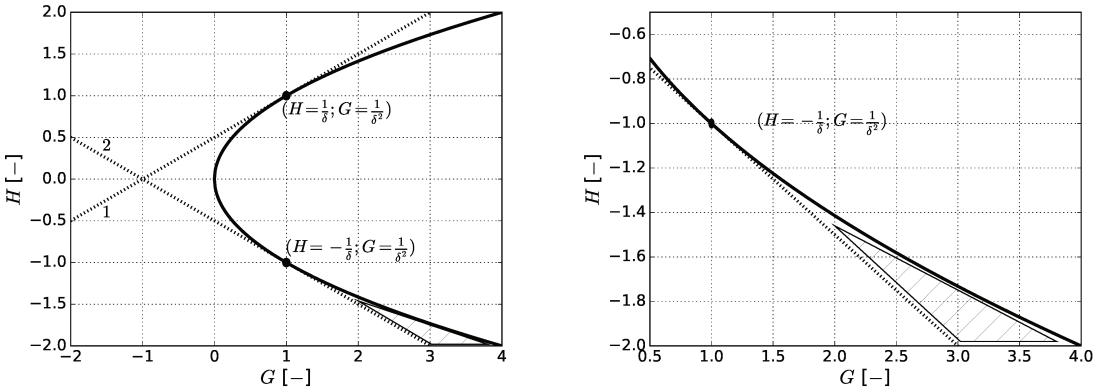
- $(\delta^2\kappa_1 - \delta) < 0$ donc $\kappa_1 < \frac{1}{\delta}$:

$$\kappa_2 < \frac{\delta\kappa_1 - 1}{\delta^2\kappa_1 - \delta}$$

$$\kappa_1 < \frac{1}{\delta} \quad et \quad \kappa_2 < \frac{1}{\delta} \tag{4.19}$$

Dans le premier cas Eq.4.18, les deux courbures principales ne sont pas résolues (il s'agit de la zone hachurée sur le schéma car dans ce cas $H > \frac{1}{\delta}$). Concernant le second cas Eq.4.19, il est impossible de conclure vu qu'il contient à la fois des zones résolues et non résolues.

Cas $G > -\frac{2}{\delta}H - \frac{1}{\delta^2}$



En effectuant la même procédure que pour les cas précédents, on obtient :

$$(\delta^2\kappa_1 + \delta)\,\kappa_2 > -\delta\kappa_1 - 1 \tag{4.20}$$

Une nouvelle fois deux cas sont possibles :

- $(\delta^2\kappa_1 + \delta) > 0$ donc $\kappa_1 > -\frac{1}{\delta}$:

$$\kappa_2 > \frac{-\delta\kappa_1 - 1}{\delta^2\kappa_1 + \delta}$$

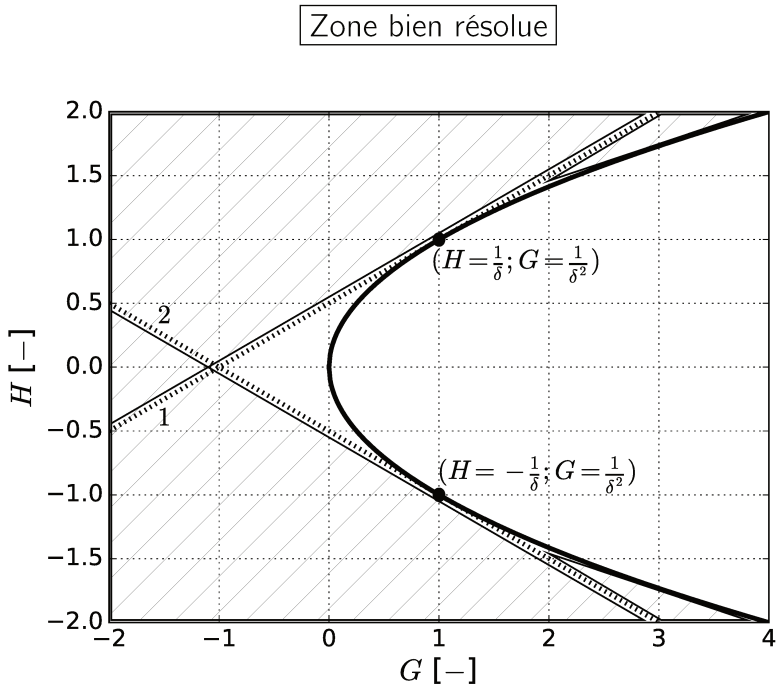
$$\kappa_1 > -\frac{1}{\delta} \quad et \quad \kappa_2 > -\frac{1}{\delta} \tag{4.21}$$

- $(\delta^2\kappa_1 + \delta) < 0$ donc $\kappa_1 < -\frac{1}{\delta}$:

$$\kappa_2 < \frac{-\delta\kappa_1 - 1}{\delta^2\kappa_1 + \delta}$$

$$\kappa_1 < -\frac{1}{\delta} \quad et \quad \kappa_2 < -\frac{1}{\delta} \tag{4.22}$$

Dans le deuxième cas Eq.4.22, les deux courbures principales ne sont pas résolues (il s'agit de la zone hachurée sur le schéma car dans ce cas $H < -\frac{1}{\delta}$). Concernant le second cas Eq.4.21, il est impossible de conclure vu qu'il contient à la fois des zones résolues et non résolues.



En regroupant les cas non concluants des deux derniers cas, on remarque que si $\kappa_1 \in \left[-\frac{1}{\delta};\frac{1}{\delta}\right]$ alors $\kappa_2 \in \left[-\frac{1}{\delta};\frac{1}{\delta}\right]$. Cette zone est la seule bien résolue du graphe et correspond à la partie non hachurée du graphe qui ne se situe pas à l'intérieur de la parabole.

Par la suite, seulement les graphes (H, G) et $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$ sont conservés en raison de leurs propriétés mathématiques (voir section 4.2). De plus, sur le graphe $\left(H, \sqrt{|G|}\right)$, la valeur absolue est utilisée sur G afin de permettre le calcul de la racine, perdant ainsi l'information sur le signe de G et donc sur le type de structure observé. Le graphe (S, P) n'a pas non plus été retenu car les points divergent. Les points mal résolus se retrouvent ainsi au centre du graphe alors que ceux bien résolus s'en écartent. De plus, dans le cas de structures à courbure nulle (structures planes ou cylindriques), les points se situent à l'infini en raison de rayons de courbure infinis.

4.5 Résultats

Cette partie est dédiée à l'analyse du comportement de la courbure sur différentes configurations. D'abord, une instabilité de Rayleigh-Plateau et une collision de gouttes sont étudiées pour illustrer notre analyse sur des cas simples. Ensuite, une configuration plus complexe et plus proche du régime d'atomisation (hauts nombres de Weber et de Reynolds) est étudiée. Il s'agit d'une configuration Turbulente Homogène Isotrope.

4.5.1 Instabilité de Rayleigh-Plateau

Configuration numérique

La première configuration est une instabilité de Rayleigh-Plateau où un ensemble de gouttes est créé à partir d'une colonne de liquide initiale. Un quart du cylindre est simulé et des conditions aux limites symétriques sont appliquées. Le domaine mesure $(1.5 \times 10^{-4}) \times (1.0 \times 10^{-4}) \times (1.0 \times 10^{-4})$ m et un maillage $96 \times 64 \times 64$ est choisi comme dans Ménard et al. [95]. Il s'agit d'un cas de validation standard du code ARCHER qui est capable de correctement reproduire le diagramme de dispersion de cette configuration [95]. Les propriétés du liquide et du gaz sont reportées dans la Table 4.1.

ρ_l $\mathrm{kg \cdot m^{-3}}$	μ_l $\mathrm{kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}}$	ρ_g $\mathrm{kg \cdot m^{-3}}$	μ_g $\mathrm{kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}}$	σ $\mathrm{N \cdot m^{-1}}$
1000	1.0×10^{-3}	1.0	1.879×10^{-5}	0.072

Table 4.1 – Propriétés physiques de l'instabilité de Rayleigh-Plateau

Le cylindre a un rayon initial $R = 3.34 \times 10^{-5}$ m et la perturbation initiale, qui est essentielle pour pouvoir observer l'instabilité, a une amplitude équivalente à 10% du rayon du cylindre et une longueur d'onde $\lambda = 3.0 \times 10^{-4}$ m (deux fois la longueur du domaine). Les conditions initiales sont choisies dans le but d'avoir le nombre d'onde k satisfaisant $kR = 0.7$ ce qui correspond au taux de croissance le plus rapide.

Comparaison entre les deux méthodes d'évaluation de la courbure

Les deux méthodes mentionnées précédemment pour extraire la distribution de la courbure, sont testées sur un pas de temps du cas Rayleigh-Plateau. Le but est de comparer la première méthode d'ARCHER avec la seconde méthode déjà validée [188]. Malgré quelques différences visibles sur la figure 4.5, les deux approches donnent des résultats similaires. La courbure moyenne et la courbure de Gauss sont adimensionnées en utilisant le rayon initial du cylindre comme longueur de référence. La courbure de Gauss étant similaire à l'inverse du carré d'une longueur, le carré du rayon est utilisé dans ce cas. En considérant que les deux approches donnent des résultats similaires, seule la première méthode est utilisée par la suite. L'extraction des courbures se fait également en pondérant par la surface locale du point considéré. Cela permet de diminuer l'impact de certaines valeurs trop approximatives dues à la présence dans la maille d'une très faible quantité d'interface. Sur la courbe, la parabole représente

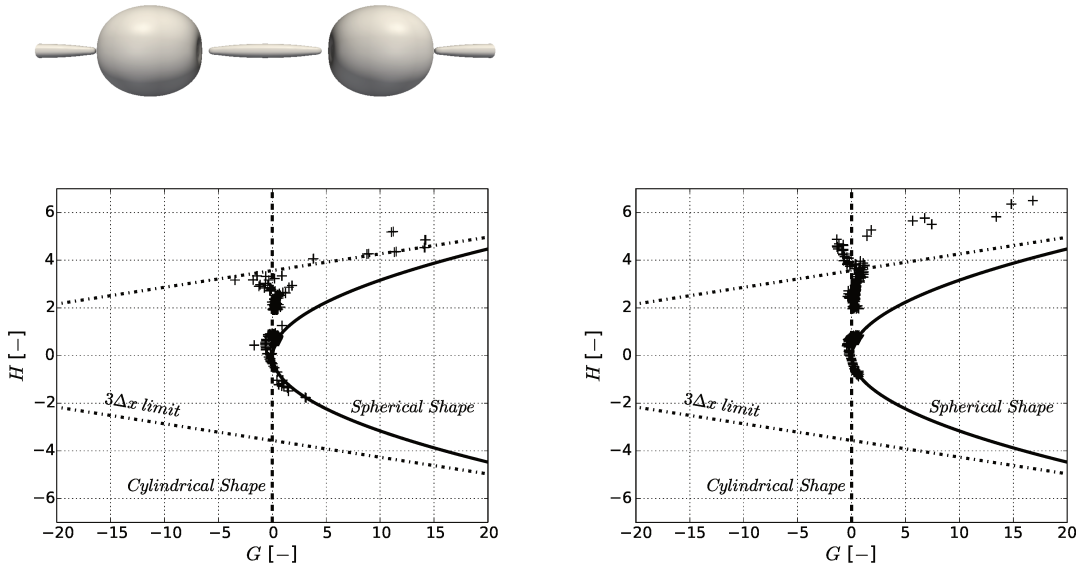


Figure 4.5 – Instabilité de Rayleigh-Plateau à $t = 1.88 \times 10^{-4}$ (en haut) et diagramme représentant la courbure moyenne en fonction de la courbure de Gauss avec la première méthode (à gauche) et la seconde méthode (à droite).

les objets de forme sphérique ($\kappa_1 = \kappa_2$) et la ligne pointillée représente les objets de forme cylindrique ($G = 0$).

Évolution et statistiques de la courbure

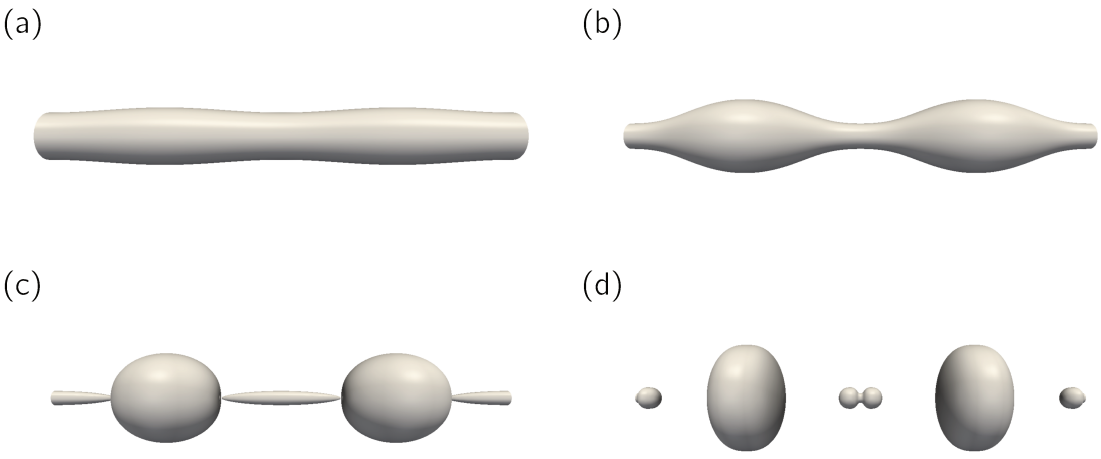


Figure 4.6 – Instabilité de Rayleigh-Plateau à $t_a = 3.92 \times 10^{-7}s$ (en haut à gauche) ; $t_b = 1.49 \times 10^{-4}s$ (en haut à droite) ; $t_c = 1.86 \times 10^{-4}s$ (en bas à gauche) ; $t_d = 2.03 \times 10^{-4}s$ (en bas à droite)

Afin d'avoir un aperçu de l'évolution du phénomène de rupture, quatre pas de

temps sont sélectionnés et sont montrés sur la figure 4.6. Il est possible de voir la configuration initiale (t_a), la déformation du cylindre avec la formation d'une "selle de cheval" (t_b), le moment de la rupture (t_c) et la formation finale de gouttes (t_d).

Sur les figures 4.12 et 4.13, la fonction distance ϕ est également reportée afin de mieux comprendre les résultats obtenus. Elle est adimensionnée par la taille de maille dx et les courbes sont montrées entre $-l_x$ et l_x, avec l_x la longueur du domaine. Le profil des PDF et des cumulatives de ϕ peut se retrouver théoriquement dans le cas de volumes basiques comme un cylindre ou une sphère.

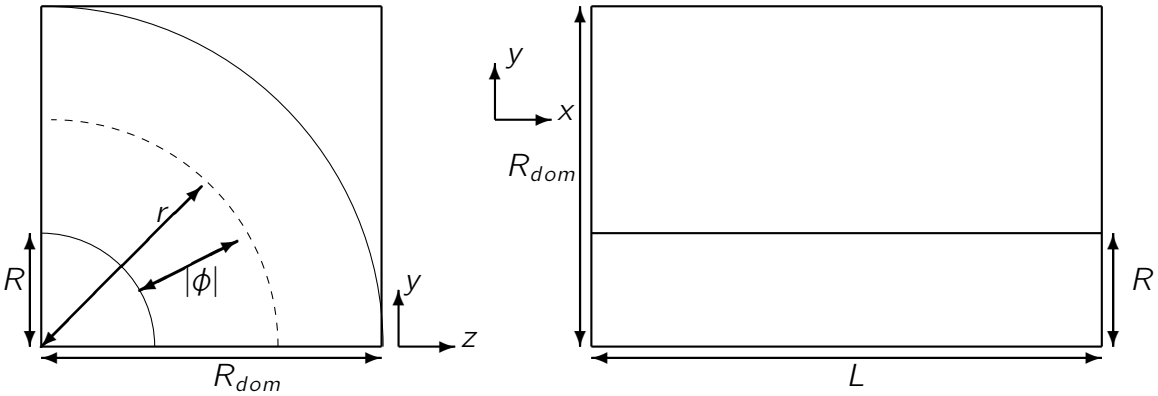


Figure 4.7 – Domaine de calcul pour l'instabilité de Rayleigh-Plateau avec R, le rayon du cylindre initial ; R_{dom}, la taille du domaine dans les directions y et z ; L, la longueur du domaine dans la direction x ; r, la distance par rapport à l'arête du domaine et ϕ, la fonction distance à l'interface

Pour l'explication sur les profils théoriques de PDF et de cumulative, se référer à la figure 4.7. La cumulative de la fonction distance à une distance r de l'arête du domaine est :

$$F(r) = \frac{V(r)}{V_{tot}} \tag{4.23}$$

avec $V(r)$, le volume compris entre l'arête du domaine et la distance r et V_{tot}, le volume total du domaine. On a donc : $V_{tot} = LR_{dom}^2$ avec L et R_{dom}, les dimensions du domaine, et $V(r) = L\frac{\pi r^2}{4}$ entre $r = 0$ et $r = R_{dom}$ car seulement un quart du cylindre est simulé. La fonction cumulative se réécrit donc :

$$F(r) = \frac{\pi r^2}{4R_{dom}^2} \tag{4.24}$$

En remplaçant r par la fonction distance ϕ à l'aide de la relation $r = R - \phi$, on

obtient :

$$F(\phi) = \frac{\pi R^2}{4R_{dom}^2} + \frac{\pi \phi^2}{4R_{dom}^2} - \frac{\pi R \phi}{2R_{dom}^2} \tag{4.25}$$

Selon cette formulation, F est maximal en $r = R_{tot} = \sqrt{2}R_{dom}$ (c'est-à-dire quand ϕ est minimal) et est minimal en $r = 0$ (c'est-à-dire quand ϕ est maximal). Or, on souhaite que F soit maximal quand ϕ est maximal, alors :

$$F(\phi) = 1 - \left(\frac{\pi R^2}{4R_{dom}^2} + \frac{\pi \phi^2}{4R_{dom}^2} - \frac{\pi R \phi}{2R_{dom}^2} \right) \tag{4.26}$$

$$F(\phi) = -\frac{\pi}{4R_{dom}^2}\phi^2 + \frac{\pi R}{2R_{dom}^2}\phi + \left(1 - \frac{\pi R^2}{4R_{dom}^2}\right) \tag{4.27}$$

Afin d'obtenir la PDF de la fonction distance ϕ, il suffit de dériver la fonction cumulative :

$$P(\phi) = -\frac{\pi}{2R_{dom}^2}\phi + \frac{\pi R}{2R_{dom}^2} \tag{4.28}$$

C'est de la forme $P(\phi) = a\phi + b$; ainsi, dans le cas d'un cylindre, la PDF de la fonction distance est une droite. Le profil de la PDF et de la cumulative entre $r = R_{dom}$ et $r = R_{tot}$ peut également se démontrer en utilisant le même procédé ; cependant, sa démonstration ne présente aucun intérêt majeur et n'est pas présentée ici par souci de clarté.

Dans le cas d'une sphère de rayon R, la cumulative entre $r = 0$ et $r = R_{dom}$ s'écrit :

$$F(r) = \frac{V(r)}{V_{tot}} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \frac{1}{8}}{LR_{dom}^2} = \frac{\pi r^3}{6LR_{dom}^2} \tag{4.29}$$

car, en raison des symétries, seulement un huitième de la sphère est simulé. Afin d'avoir la cumulative de la fonction distance, on remplace une nouvelle fois r par $r = R - \phi$:

$$F(\phi) = \frac{\pi}{6LR_{dom}^2}\left(R^3 - 3R^2\phi + 3R\phi^2 - \phi^3\right) \tag{4.30}$$

On souhaite avoir F maximal quand ϕ est maximal ; la forme finale de F est donc :

$$F(\phi) = \frac{\pi}{6LR_{dom}^2}\phi^3 - \frac{\pi R}{2LR_{dom}^2}\phi^2 + \frac{\pi R^2}{2LR_{dom}^2}\phi + \left(1 - \frac{\pi R^3}{6LR_{dom}^2}\right) \tag{4.31}$$

En dérivant F pour avoir la PDF de ϕ, on obtient :

$$P(\phi) = \frac{\pi}{2LR_{dom}^2}\phi^2 - \frac{\pi R}{LR_{dom}^2}\phi + \frac{\pi R^2}{2LR_{dom}^2} \tag{4.32}$$

C'est de la forme $a\phi^2 + b\phi + c$; la PDF de ϕ est donc une parabole dans le cas d'une sphère.

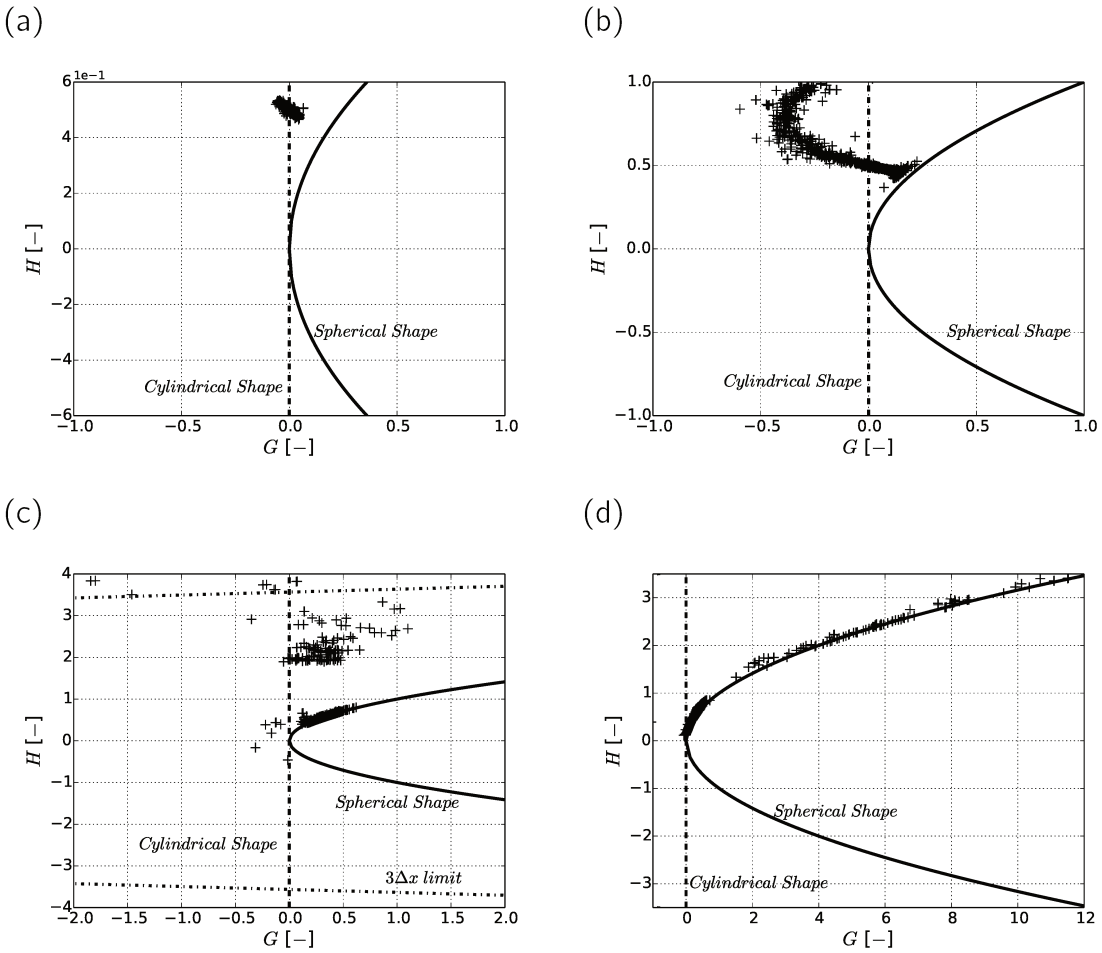


Figure 4.8 – Courbure moyenne en fonction de la courbure de Gauss (t_a à t_d à partir d'en haut à gauche jusqu'en bas à droite). La ligne continue représente les topologies sphériques ($\kappa_1 = \kappa_2$) et les lignes pointillées représente les topologies cylindriques ($G = 0$). La ligne tiret-point à t_c représente la limite de résolution $3\Delta x$.

Tant que le cylindre est faiblement déformé, concernant le profil de la PDF de ϕ (Figure 4.12), les points sont très proches du profil théorique d'un cylindre avec un profil linéaire à l'intérieur de la partie liquide. Sur la figure, les lignes sans symbole représentent le profil initial de la PDF ou de la cumulative pour un cylindre et les lignes pointillées séparent le liquide (valeurs positives de ϕ) du gaz (valeurs négatives de ϕ). Pour la cumulative de la courbure totale ($2H$) sur la figure 4.11 à gauche et celle de la courbure de Gauss sur la figure 4.10 à gauche, un profil de type "marche" est observé aux valeurs attendues ($G = 0$ et $2H = R$). La "marche" est cependant

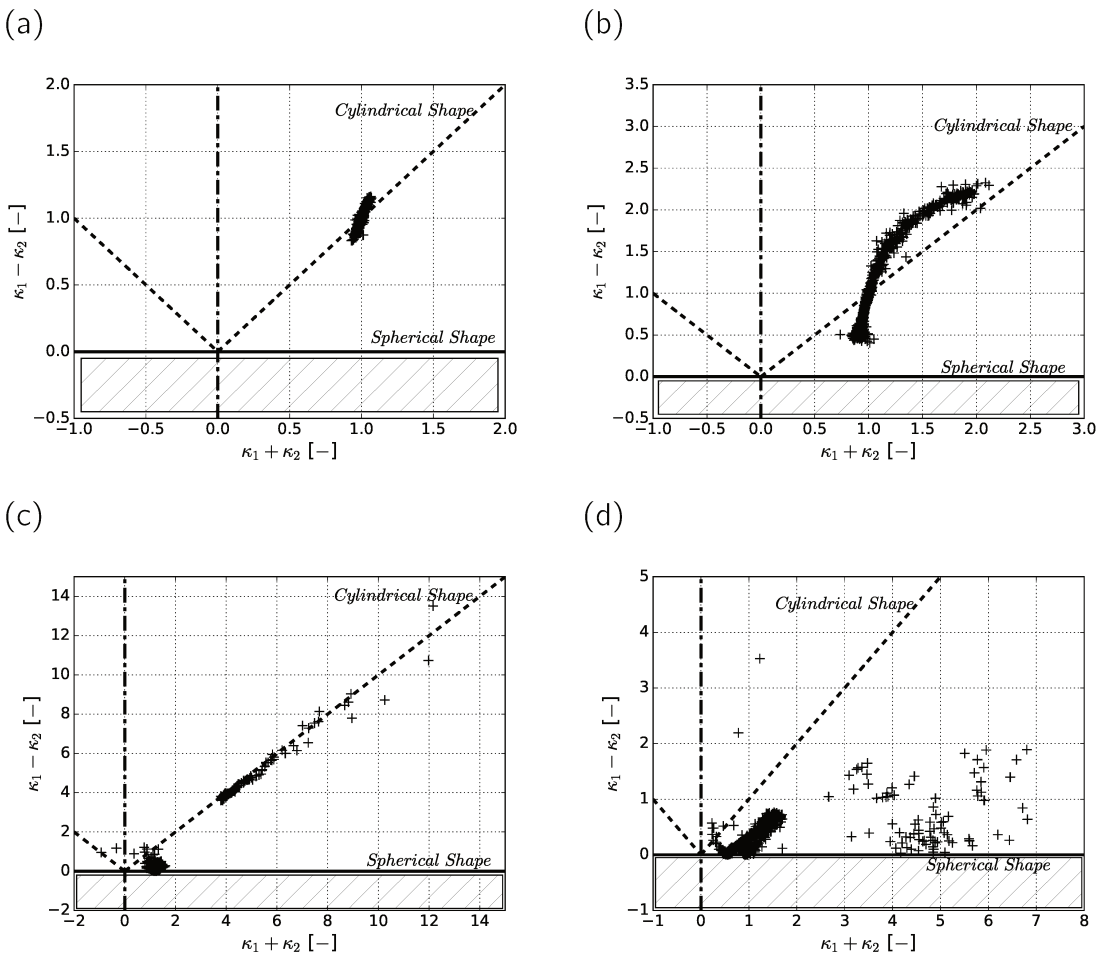


Figure 4.9 – $\kappa_1 - \kappa_2$ en fonction de $\kappa_1 + \kappa_2$ (t_a à t_d à partir d'en haut à gauche jusqu'en bas à droite). La ligne tiret-point représente la séparation entre les bulles et les gouttes et la ligne pointillée représente les topologies cylindriques ($\kappa_1 = 0$ ou $\kappa_2 = 0$). La ligne continue représente les topologies sphériques ($\kappa_1 = \kappa_2$).

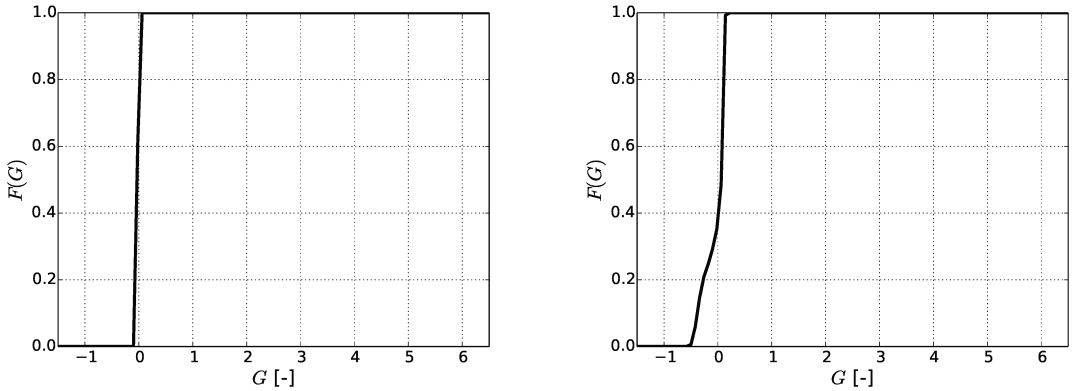


Figure 4.10 – Cumulative de la courbure de Gauss (Gauche : à t_a ; droite : à t_b)

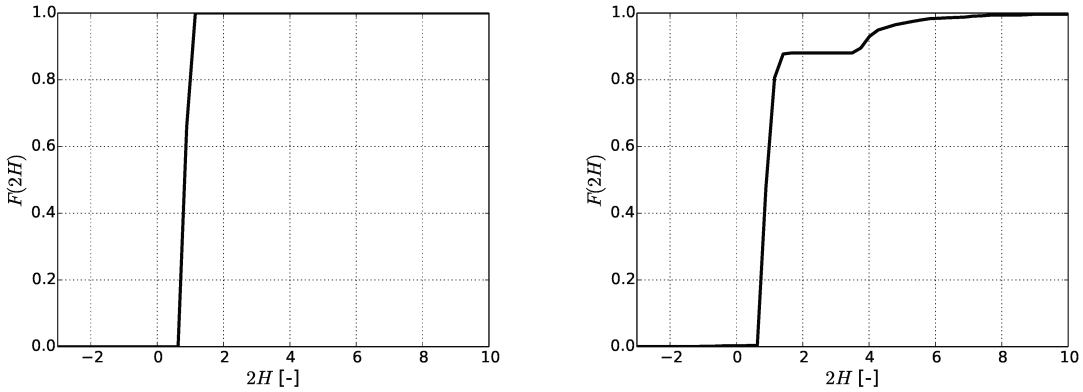


Figure 4.11 – Cumulative de la courbure totale (Gauche : à t_a ; droite : à t_c)

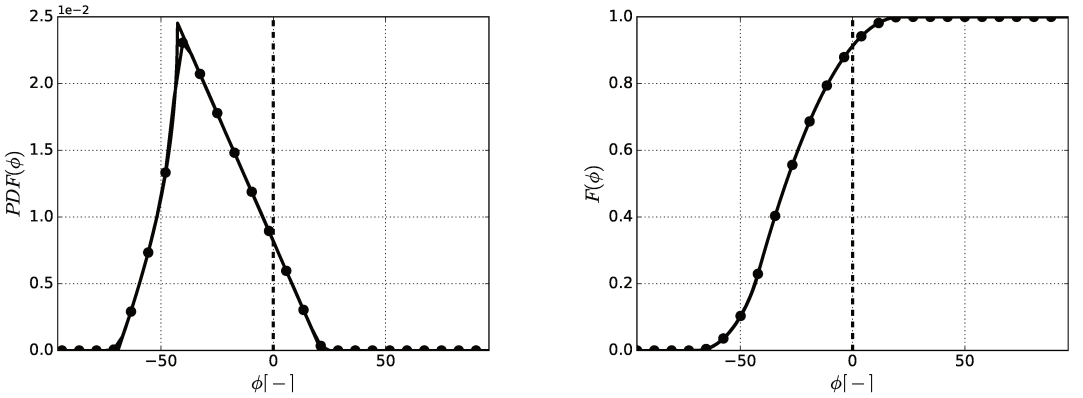


Figure 4.12 – Gauche : PDF de la fonction distance à t_a ; droite : cumulative de la fonction distance à t_a. Les lignes avec le symbole • représentent les résultats numériques, la ligne continue représente le profil théorique pour un cylindre et la ligne pointillée sépare le gaz (à gauche) du liquide (à droite)

légèrement inclinée car, initialement, une perturbation est imposée et le cylindre est donc légèrement déformé. Sur le graphe montrant la courbure moyenne en fonction de la courbure de Gauss (Figure 4.8 en haut à gauche), tous les points sont rassemblés autour de la ligne verticale correspondant à $G = 0$. De même que précédemment, les points ne sont pas parfaitement sur la ligne verticale mais légèrement décalés de part et d'autre en raison de la perturbation initiale.

Ensuite, quand le cylindre est bien déformé (t_b), des valeurs négatives de la courbure de Gauss apparaissent (Figure 4.10 à droite) correspondant à tous les points selles au milieu du cylindre. Cette portion du cylindre est visible sur le graphe (H, G)

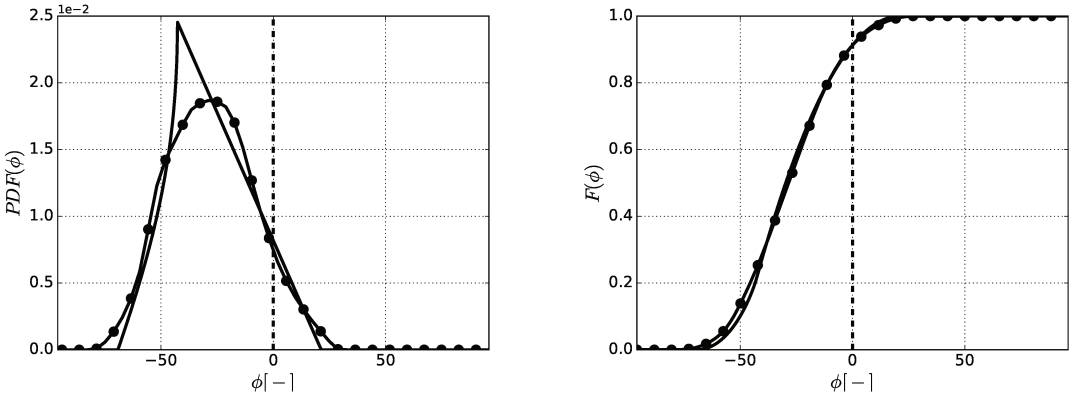


Figure 4.13 – Gauche : PDF de la fonction distance à t_d ; droite : cumulative de la fonction distance à t_d. Les lignes avec le symbole • représentent les résultats numériques, la ligne continue représente le profil théorique pour un cylindre et la ligne pointillée sépare le gaz (à gauche) du liquide (à droite)

(Figure 4.8 en haut à droite) avec les points correspondants qui créent un arc. Cet arc s'étire vers les fortes valeurs de G négatif car les points selles au milieu du cylindre ont des courbures principales très élevées en raison de l'amincissement du cylindre à cet endroit. De plus, sur ce graphe, les points qui représentent la plus grosse partie du cylindre se rapprochent de la parabole représentant les objets sphériques. En effet, cette partie du cylindre formera la goutte sphérique des temps t_c et t_d.

Quand la rupture du cylindre a lieu (t_c), l'arc se rompt en deux ensembles de points dont un se situe sur la parabole (Figure 4.8 en bas à gauche). Ces points correspondent à la grosse goutte créée. En effet, la courbure moyenne est d'environ 0.5 et la courbure de Gauss d'environ 0.25, ce qui correspond à un rayon deux fois plus grand que celui du cylindre initial. Les autres points, situés au dessus de la parabole, sont ceux de l'ellipsoïde. Ici, la courbure moyenne est assez élevée en raison de la faible épaisseur et la courbure de Gauss est un peu plus faible car la courbure est quasiment nulle dans le sens de la longueur. Quelques points apparaissent en dehors de la limite de résolution ; ceux-ci sont inévitables dans le cas d'une rupture car l'interface devient infiniment fine à ce moment là. Ainsi, ces points subsisteraient même avec un maillage plus fin. La grosse goutte apparaît également sur la cumulative de la courbure totale sous la forme d'une marche (Figure 4.11 à droite) et l'ellipsoïde apparaît au niveau des valeurs élevées de courbure. Le processus de rupture est évident sur les graphes de courbure car de légères variations au niveau de la géométrie de l'interface induisent

de fortes variations sur la valeur des courbures.

Enfin, quand les deux gouttes sont générées (t_d), la majorité des points du graphe (H, G) (Figure 4.8 en bas à droite) se retrouvent sur la courbe des objets sphériques. Les points correspondant à la grosse goutte sont localisés approximativement au même endroit qu'au temps précédent. Inversement, les points de la petite goutte ont une courbure plus élevée. Sur la figure 4.13, le profil de la PDF devient parabolique dans la partie liquide, comme attendu dans le cas de sphères, avec de plus grandes valeurs de la fonction distance car la goutte a un plus grand rayon que le cylindre initial. Sur le graphe $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$ (Figure 4.9), les mêmes commentaires que pour le graphe (H, G) peuvent être énoncés : l'arc quand le cylindre se déforme, les deux ensembles de points quand la rupture apparaît et la localisation des points par rapport aux topologies cylindrique et sphérique. Quelques précisions peuvent néanmoins être apportées ; sur ces graphes, l'arc est moins prononcé que sur le graphe (H, G) et est plus étiré sur la ligne des structures cylindriques. De plus, même si une partie des points se rapproche de la ligne des structures sphériques, elle en reste relativement éloignée. On retrouve ainsi une structure cylindrique globale plus prononcé que sur le graphe (H, G). Au temps t_d, une partie des points se situe bien au niveau de la ligne des structures sphériques, cependant, un nombre non négligeable des points s'en éloigne. Cela montre que les gouttes formées ne sont pas parfaitement sphériques au temps t_d. Les graphes (H, G) et $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$ apportent donc des informations complémentaires et cohérentes entre elles. Ainsi, l'analyse de l'évolution de la courbure moyenne et de la courbure de Gauss peut être utilisée pour décrire le processus de rupture du jet liquide initial à la formation finale des gouttes.

4.5.2 Collision de gouttes

Configuration numérique

Les capacités de ces propriétés géométriques de surface ont également été testées sur un cas de collision de gouttes qui représente une autre étape fondamentale de la déformation de la surface liquide. Le code ARCHER a déjà été validé sur ce type de configuration [180], [193]. Ici, on a considéré le cas d'une collision entre deux gouttes d'eau sphériques, avec des rayons de 200 μm et 130 μm, caractérisée par un facteur d'impact $I = 0.35$, une vitesse relative $V_{col} = 4.11\ m \cdot s^{-1}$, un nombre de Weber liquide $We_l = \frac{\rho_l V^2 D_g}{\sigma} = 23.5$ et un nombre d'Ohnesorge $Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma D_g}} = 0.011$.

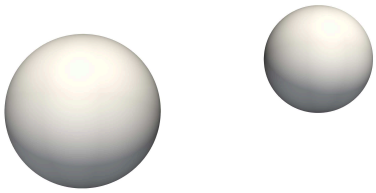
Les propriétés des fluides sont reportés dans la Table 4.2. Le domaine mesure $(1.0 \times 10^{-3}) \times (1.0 \times 10^{-3}) \times (2.0 \times 10^{-3})$ m et un maillage $128 \times 128 \times 256$ est utilisé.

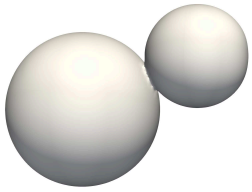
ρ_l $kg \cdot m^{-3}$	μ_l $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$	ρ_g $kg \cdot m^{-3}$	μ_g $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$	σ $N \cdot m^{-1}$
1000	1.79×10^{-3}	1.0	1.94×10^{-5}	0.07

Table 4.2 – Propriétés physiques du cas collision de gouttes.

Évolution et statistiques de la courbure

(a) (b)





(c) (d)

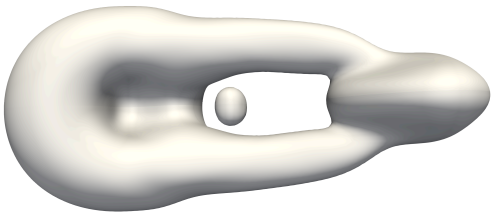


Figure 4.14 – Évolution de la surface pour le cas d'une collision de gouttes à $t_a = 0.0\ s$ (en haut à gauche) ; $t_b = 7.4632 \times 10^{-5}\ s$ (en haut à droite) ; $t_c = 1.5264 \times 10^{-4}\ s$ (en bas à gauche) ; $t_d = 4.3608 \times 10^{-4} s$ (en bas à droite)

Sur la figure 4.14, l'évolution de la surface liquide est montrée sur quatre pas de temps : la configuration initiale (t_a), le moment de la coalescence (t_b), la formation d'une goutte déformée (t_c) et la rupture avec création d'une structure torique (t_d). Sur la figure 4.15, l'évolution dans le plan (H, G) est reportée, où, à l'instar du cas

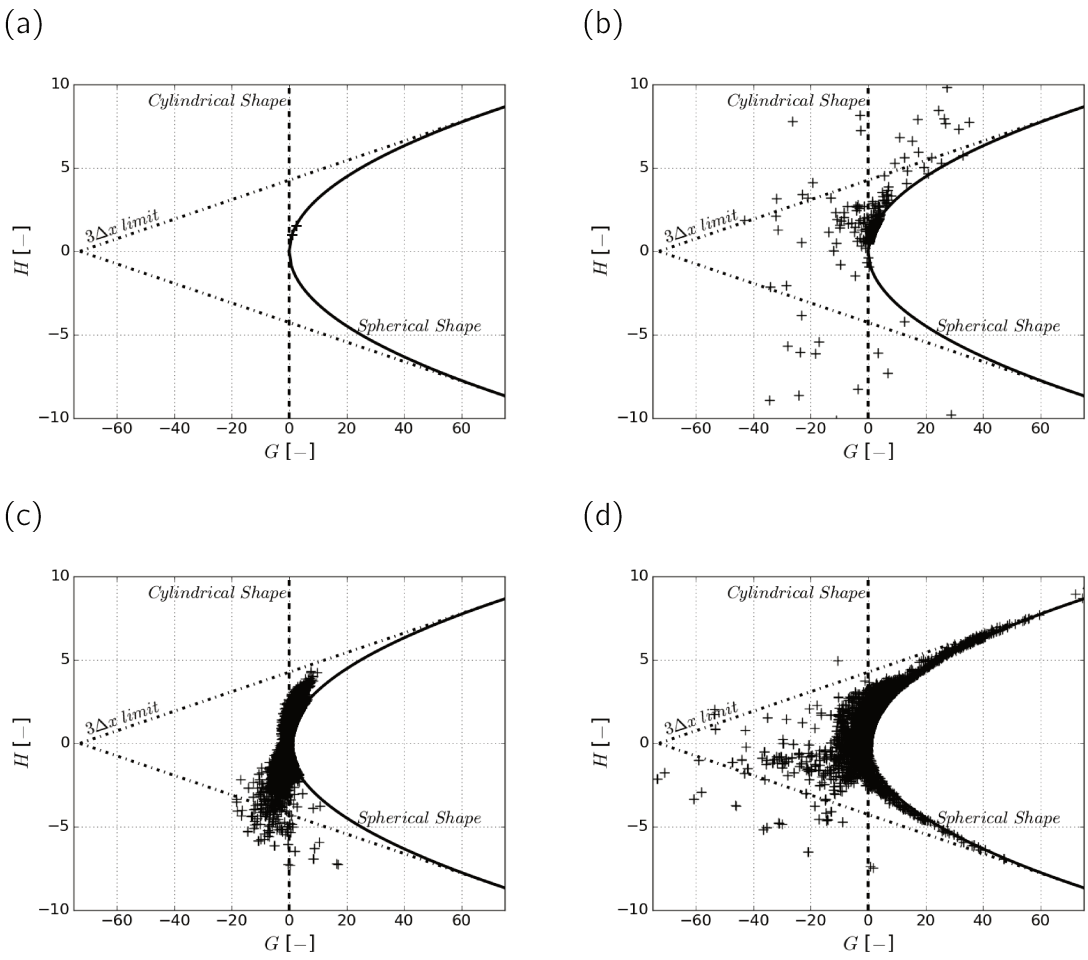


Figure 4.15 – Courbure moyenne en fonction de la courbure de Gauss à t_a (en haut à gauche) ; t_b (en haut à droite) ; t_c (en bas à gauche) ; t_d (en bas à droite). La ligne continue représente $\kappa_1 = \kappa_2$ (sphère) et la ligne pointillée représente $G = 0$ (cylindre).

Rayleigh-Plateau, les courbures évoluent de manière cohérente au processus étudié. Les variables des graphes sont adimensionnées par le rayon de la goutte le plus élevé $R_g = 200\ \mu m$.

Au temps t_a, les deux gouttes initiales sont clairement visibles sur le graphe (H, G) ; elles sont représentées par deux points situés sur la parabole correspondant aux structures sphériques. Sur le graphe, elles sont en $H = 1$ et en $H = 1.5$ ce qui correspond bien aux rayons des deux gouttes initiales compte tenu de l'adimensionnement effectué.

Au moment du contact entre les deux gouttes (t_b), les deux gouttes sont

toujours visibles au niveau de la parabole, mais cette fois les points sont plus étalés, sûrement en raison de la déformation des gouttes due à leur vitesse. De plus, un groupe de points apparaît dans la zone des $G < 0$ représentant des structures hyperboliques correspondant à l'endroit où a lieu le contact entre les deux gouttes. Naturellement, des points sont présents en dehors de la zone de résolution de $3\Delta x$ puisque le moment de la coalescence lors d'une collision de gouttes ne peut être résolu, similairement au moment de la rupture vu précédemment dans le cas de l'instabilité de Rayleigh-Plateau.

Ensuite, une fois que les deux gouttes se sont percutées (t_c), les points sont de nouveau rassemblés et tous les types de structures sont présents. Les reliquats des deux gouttes sont visibles sur la parabole dans la zone des $H > 0$. Des structures paraboloïdes ($G > 0$) et hyperboloïdes ($G < 0$) sont également présentes correspondant au tore en formation ainsi que des structures sphériques caractérisées par $H < 0$ représentant le renfoncement à l'intérieur du tore.

Enfin, pour le temps t_d, les mêmes commentaires que ceux du temps t_c peuvent être émis, avec un étalement plus important des points en raison d'une structure beaucoup plus complexe possédant diverses valeurs de courbures.

Dans la prochaine partie, les mêmes propriétés géométriques sont utilisées pour analyser une boîte Turbulente, Homogène et Isotrope (THI) où des phénomènes de rupture et de coalescence surviennent en raison du forçage de la turbulence.

4.5.3 Configuration Turbulente Homogène Isotrope

Configuration numérique

L'extraction des courbures est également réalisée sur un cas 3D cubique avec des conditions aux limites périodiques similaire à celui de Duret et al. ([135], [194]). Cette configuration a déjà été analysée pour améliorer la compréhension de l'atomisation primaire. La résolution du maillage utilisée est basée sur les études précédentes de la même configuration afin de capturer l'échelle de Kolmogorov et compte $256\times256\times256$ mailles. Dans le but de réaliser une configuration avec des interactions réalistes entre la surface liquide et le champ turbulent gazeux, les paramètres suivant sont choisis (voir [194]) : nombre de Weber gazeux $We_g = \frac{\rho_g \bar{k}_{cin} L}{\sigma} = 1$, nombre de Weber liquide $We_g = \frac{\rho_l \bar{k}_{cin} L}{\sigma} = 30$, nombre de Reynolds $Re = \frac{\sqrt{\bar{k}_{cin}} L}{\nu_l} = 310$ et un nombre

d'Ohnesorge liquide $Oh_l = \frac{\sqrt{We_l}}{Re} = 1.77 \times 10^{-2}$ avec $\bar{k}_{cin}$, l'énergie cinétique turbulente moyenne ($\bar{*}$ désigne la moyenne en volume) ; σ, la tension de surface ; ν, la viscosité cinématique ; ρ, la masse volumique et L, la longueur de la boîte. Les propriétés physiques correspondantes sont reportées dans la Table 4.3.

ρ_l/ρ_g	σ	μ_g	μ_l	$\bar{k}_{cin}$	L
30	0.0135	1.879×10^{-05}	5.65×10^{-04}	3.6	1.5×10^{-04}

Table 4.3 – Propriétés physiques du cas THI (unités S.I.).

Plusieurs valeurs de fraction volumique de liquide α_l à l'intérieur de la boîte (1%, 5%, 10%, 50%, 90%), sont étudiées pour l'extraction des courbures afin d'imiter tout le processus d'atomisation. La figure 4.16 illustre cette idée bien que les pourcentages ne soit pas en accord avec la représentation du jet ; cette figure étant présente uniquement à but indicatif. En effet, la boîte avec $\alpha_l = 1\%$ se situerait davantage dans la zone diluée. Le principal objectif est d'extraire l'évolution des courbures tout au long de l'évolution du jet afin de voir le lien entre la DSD et la $F_S(H, G)$ mais aussi comment évolue les courbures de la région dense à la phase dispersée du spray (en réduisant α_l).

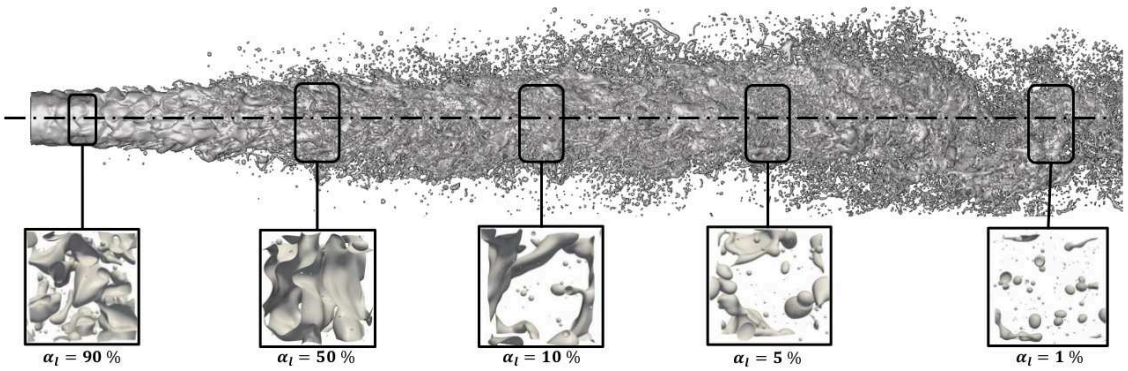


Figure 4.16 – Régions considérées pour l'extraction de la distribution des courbures tout au long du processus d'atomisation.

Évolution et statistiques de la courbure

Les résultats obtenus pour les THI en faisant varier α_l sont, ici, présentés en commençant avec le cas 1% qui est représentatif de la zone diluée. Une visualisation de l'interface liquide/gaz ainsi que l'évolution temporelle de la densité moyenne de

surface $\bar{\Sigma}$ et de la courbure moyenne $\bar{H}$, sont reportées sur la figure 4.17. Les graphes représentent à la fois le signal instantané (valeur instantanée de la moyenne sur tout le domaine de H et Σ) et le signal moyenné en temps (moyenne temporelle du signal instantané). Par la suite, τ_t désignera le temps turbulent de la boîte $\tau_t = \frac{\bar{k}_{cin}}{\epsilon}$. Il est possible de repérer les augmentations et diminutions de $\bar{\Sigma}$ dans le temps sur les visualisations instantanées de l'interface liquide/gaz ; en effet, celles-ci sont liées aux processus de rupture et de coalescence se produisant dans le domaine. La taille des structures liquides générées couvre une large gamme de diamètre : les grosses gouttes, qui portent la majeure partie de la masse totale, peuvent clairement être identifiées et leurs collisions en raison de la turbulence entraîne la formation de gouttes plus petites. En comparaison avec le cas Rayleigh-Plateau, le processus de rupture est, ici, bien plus complexe à cause de l'apparition locale de différentes valeurs de courbures. Plusieurs gouttes quasi sphériques sont formées en même temps que des structures plus complexes caractérisées par des courbures de Gauss négatives ne facilitant donc pas la discussion des phénomènes physiques sur le graphe (H, G) vu précédemment.

Ainsi, afin d'avoir un meilleur aperçu de l'évolution des caractéristiques de surface pour ce cas, une analyse des propriétés statistiques de H et G est choisie. En particulier, la PDF moyennée en temps de la courbure moyenne est montrée sur la figure 4.18. Pour obtenir une telle distribution, l'espace des valeurs de H est divisé en un nombre prédéfini de classes, puis les valeurs locales de H calculées sont collectées à l'intérieur de ces classes. Enfin, les valeurs sont accumulées sur une période d'environ 15 τ_t dans le but de réduire le bruit statistique et d'obtenir une distribution moyennée en temps. Les lignes pointillées représentent les limites du maillage (Δx) qui peuvent considérées comme la limite numérique du calcul de la courbure.

Le pic de la PDF de H est situé dans les valeurs positives de H car la zone diluée est considérée ici. En effet, la probabilité d'avoir des bulles de gaz ($H < 0$) est négligeable. À partir de cette distribution, plus d'informations concernant l'évolution de l'interface liquide/gaz peuvent maintenant être extraites. Par exemple, la distribution du nombre de gouttes par diamètre (NDD) du spray peut maintenant être dérivée. En effet, en connaissant la surface totale A_i associée à chaque classe de courbure H_i, on peut retrouver le nombre équivalent de gouttes possédant un diamètre $d_i = 2H_i$ à

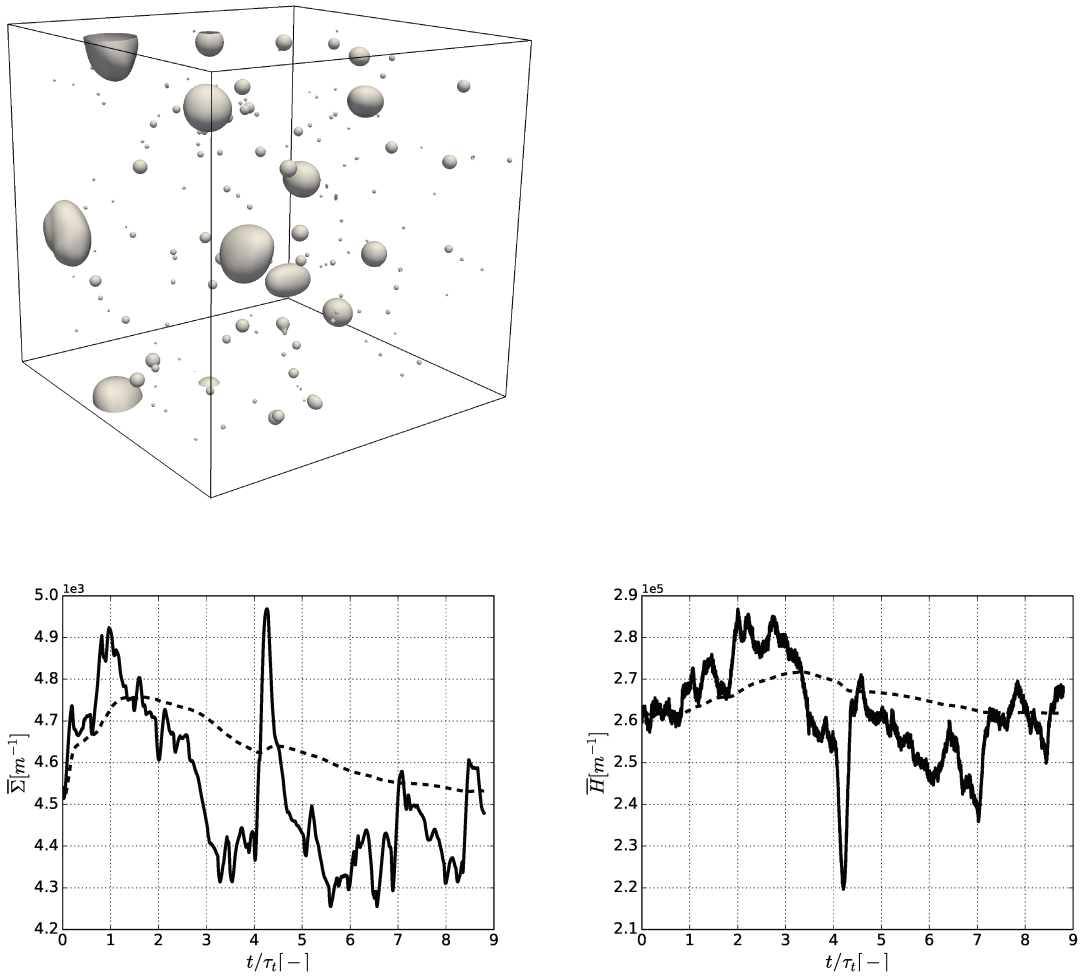


Figure 4.17 – Visualisation de l'interface liquide/gaz pour le cas THI avec $\alpha_l = 1\%$, avec les évolutions temporelles de $\bar{\Sigma}$ and $\bar{H}$. Les lignes continues représentent les signaux instantanés des valeurs moyennes de H et $\bar{\Sigma}$. Les lignes pointillées représentent les valeurs moyennes moyennées en temps de H et $\bar{\Sigma}$.

l'aide de la relation suivante :

$$N_{d,i} = \frac{A_i}{4\pi H_i^{-2}} \tag{4.33}$$

Cette relation est seulement une approximation puisque chaque courbure est, ici, associée à la forme sphérique correspondante, ce qui n'est pas obligatoirement le cas. Cependant, cela montre le lien direct entre la distribution des courbures et la NDD. En utilisant cette formulation, il est possible d'extraire la NDD mais aussi la distribution de taille de gouttes basée sur le volume (VDD pour Volume Drop size Distribution) (Figure 4.19). Plus de détails concernant le lien théorique entre la NDD

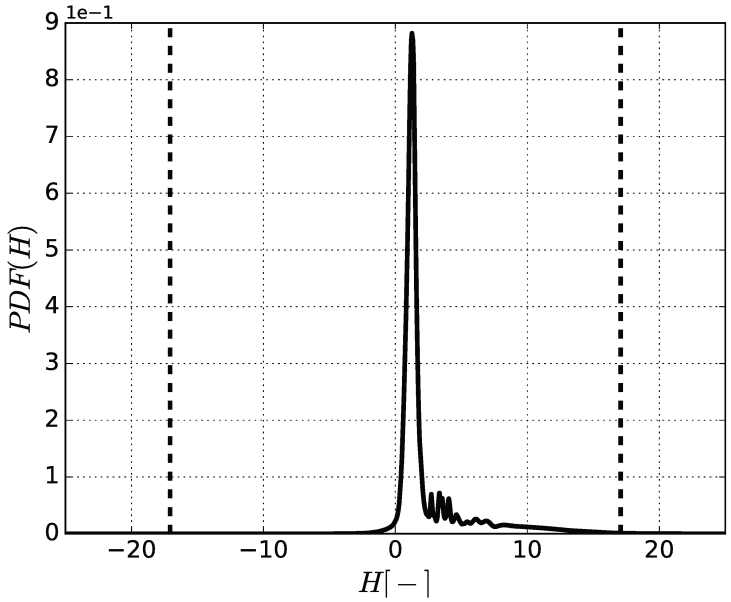


Figure 4.18 – PDF moyennée en temps de la courbure moyenne pour $\alpha_l = 1\%$.

et la VDD sont disponibles dans la littérature ([195], [166] et [196]).

Une NDD avec un double pic est obtenue à partir des résultats numériques (Figure 4.19). Ces pics se situent respectivement à $d = 2\mu m$ et $d = 14\mu m$. Elle est représentative de la formation d'un grand nombre de petites gouttes à partir des collisions de gouttes plus grosses et moins nombreuses accentuées par les interactions liquide/gaz turbulentes. La turbulence agit sur la surface liquide, augmente la probabilité de collisions et détermine ainsi la distribution finale des tailles de gouttes. Des distributions log-normales sont calculées afin de reproduire les résultats DNS. D'abord, deux PDF séparées sont dérivées (PDF_1 pour les diamètres appartenant à la classe $10^{-8} < d < 10^{-5}$ et PDF_2 pour les diamètres appartenant à la classe $10^{-5} < d < 1.5 \times 10^{-4}$) puis la distribution totale est calculée par $PDF_{tot} = V_1 PDF_1 + V_2 PDF_2$ avec V_1 et V_2, les volumes de liquide associées à chaque classe de diamètre (Figure 4.19). La PDF log-normale résultante reproduit bien les résultats DNS, à la fois pour la NDD et la VDD. Il est important de noter que V_1 représente environ 5 % du volume total de liquide, montrant que, même pour une faible valeur de la fraction volumique de liquide ($\alpha_l = 1\%$), la contribution des collisions n'est pas négligeable. Ainsi, à partir de la PDF de H, il est possible de dériver une NDD consistante avec une distribution de tailles de gouttes de la zone diluée de type log-normal. De plus, la valeur de la taille de gouttes au niveau du pic

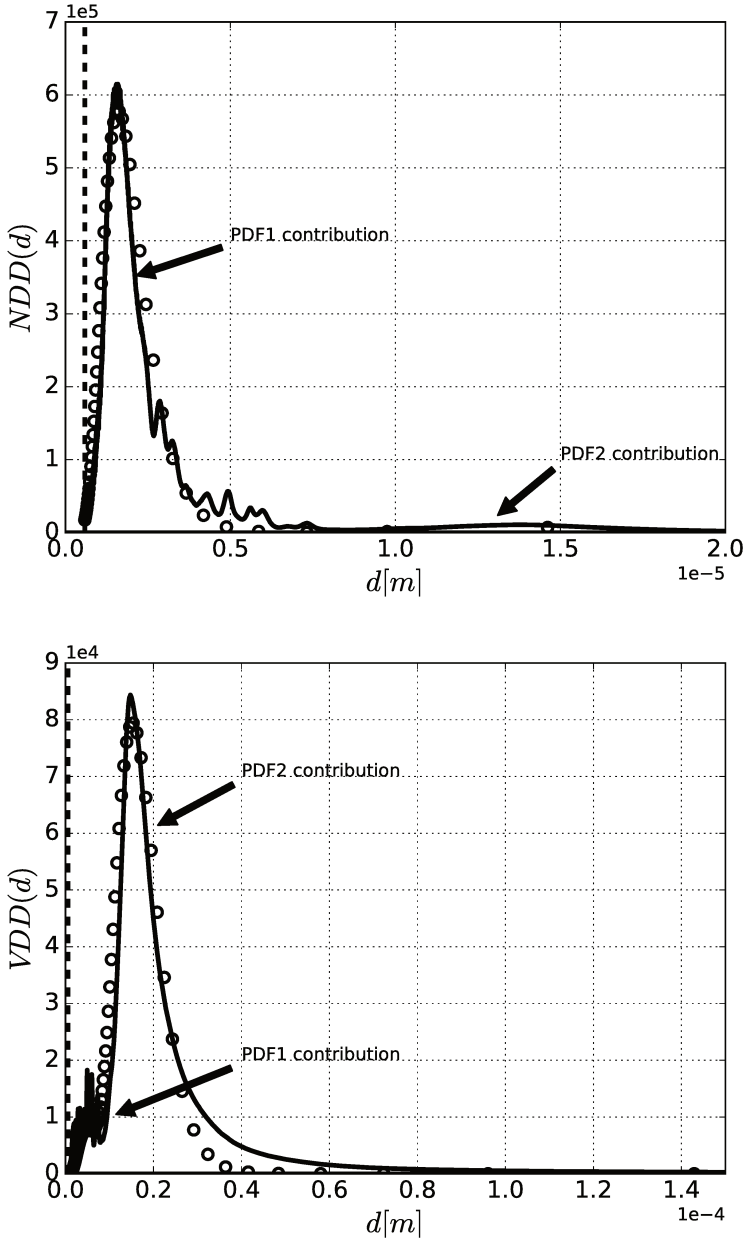


Figure 4.19 – Extraction de la NDD et de la VDD à partir de PDF(H). Lignes continues : résultats DNS, lignes pointillées : représentation de la taille de maille dx, ∘ : proposition d'une distribution log-normale.

de PDF_{tot} est cohérente avec celle du diamètre moyen de Sauter (SMD pour Sauter Mean Diameter) calculée avec la relation $SMD = \frac{6\alpha_l}{\Sigma}$. Cela renforce l'idée que la PDF des courbures peut être utilisée pour caractériser la distribution d'un spray que ce soit en terme de valeur moyenne ou de dispersion.

Cette comparaison montre clairement, dans le cas de la zone diluée ($\alpha_l = 1\%$),

qu'un lien direct entre la NDD d'un spray et l'évolution de la courbure peut être déterminé. Cependant, au-delà de la caractérisation de la distribution d'un spray, l'analyse des résultats DNS peut apporter plus d'informations sur l'évolution de la courbure ce qui peut être utile pour mieux comprendre la topologie de l'interface liquide/gaz et donner des indications sur la modélisation de la courbure. En particulier, sur la figure 4.20, la double PDF de (H, G) moyennée en temps est montrée avec celle de $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$. Sur la PDF de (H, G), la parabole représente les objets de topologie sphérique (c'est-à-dire $H^2 = G$ ou encore $\kappa_1 = \kappa_2$) alors que la ligne pointillée représente les objets de topologie cylindrique (c'est-à-dire $G = 0$). Sur la PDF de $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$, les lignes pointillées représentent les objets de topologie cylindrique et ceux de topologie sphérique sont situés sur la ligne continue horizontale. La ligne tiret-point verticale sépare les bulles des gouttes. Il est possible d'extraire plusieurs informations intéressantes sur l'évolution de l'interface liquide/gaz en regardant les PDF de distributions de courbures en surface :

- la PDF de (H, G) montre qu'en terme de distribution moyennée en temps, la topologie de la surface liquide est principalement étirée selon deux directions. La plupart des points sont situés sur la parabole représentative des objets sphériques mais une limite asymptotique apparaît également sur la ligne des topologies cylindriques. Cette distribution provient de la présence de ligaments cylindriques qui, en raison de l'action du champ turbulent, se collisionnent et génèrent un nuage de gouttes sphériques.

- La PDF de $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$ donne des informations similaires à la PDF de (H, G). En regardant les isocontours, on s'aperçoit que la valeur la plus probable (contour le plus foncé) tend vers la ligne horizontale des objets sphériques et que la PDF est étirée vers la ligne des objets cylindriques dans une moindre mesure (contours plus clairs). Cette représentation est un peu plus lisible que la précédente car les valeurs sont moins écrasées. En effet, dans la PDF de (H, G), G correspond au carré d'une courbure, ce qui compresse les valeurs.

Les doubles PDF, qui peuvent être extraites des courbures de surface, donnent une idée sur l'évolution topologique des écoulements diphasiques ainsi que sur la population de gouttes générée dans le spray. En considérant ces résultats et ceux

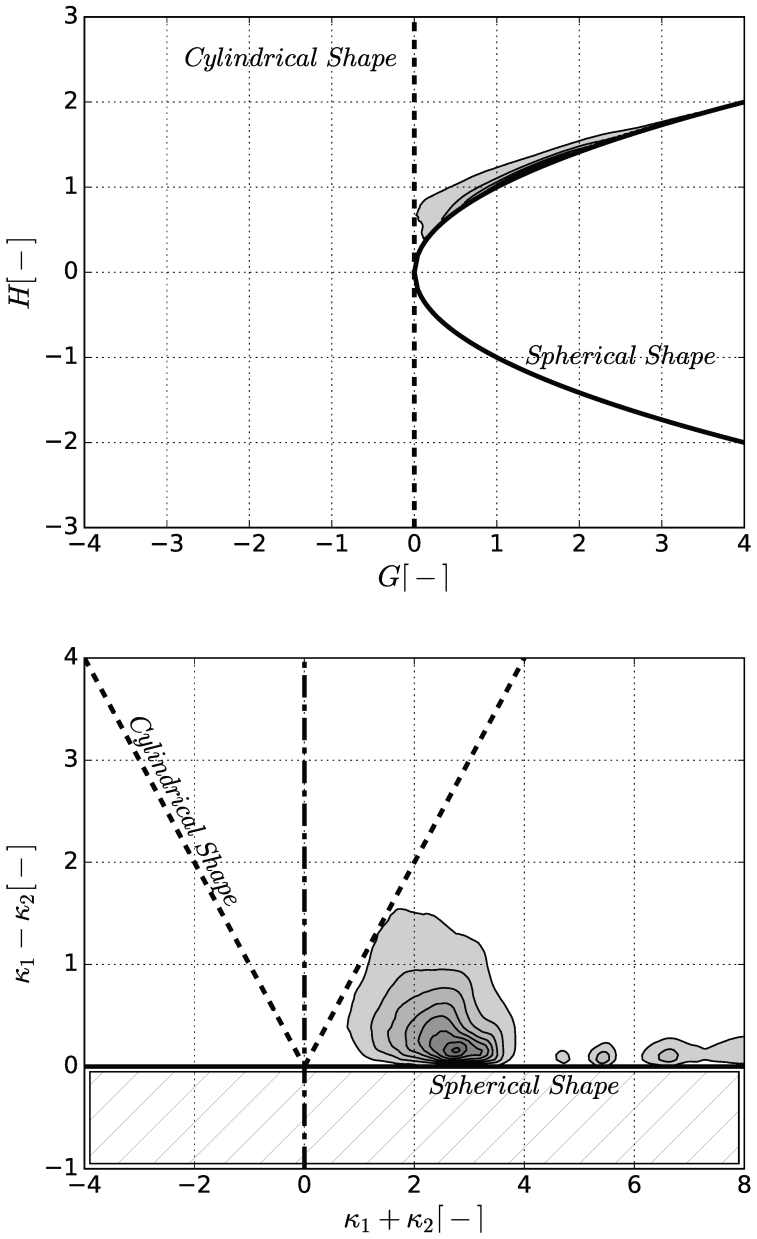


Figure 4.20 – Double PDF des courbures de surface pour $\alpha_l = 1\%$. Haut : double PDF(H,G), bas : double PDF($\kappa_1 - \kappa_2$,$\kappa_1 + \kappa_2$).

présentés lors du cas Rayleigh-Plateau, la capacité des courbures principales à décrire la rupture du liquide ainsi que leur lien direct avec la NDD sont clarifiés. Ainsi, des cas avec une plus forte valeur de la fraction volumique de liquide, sont étudiés également afin de comprendre comment les courbures évoluent et s'il est possible de déterminer un comportement général sur les PDF de courbures tout le long du processus d'atomisation.

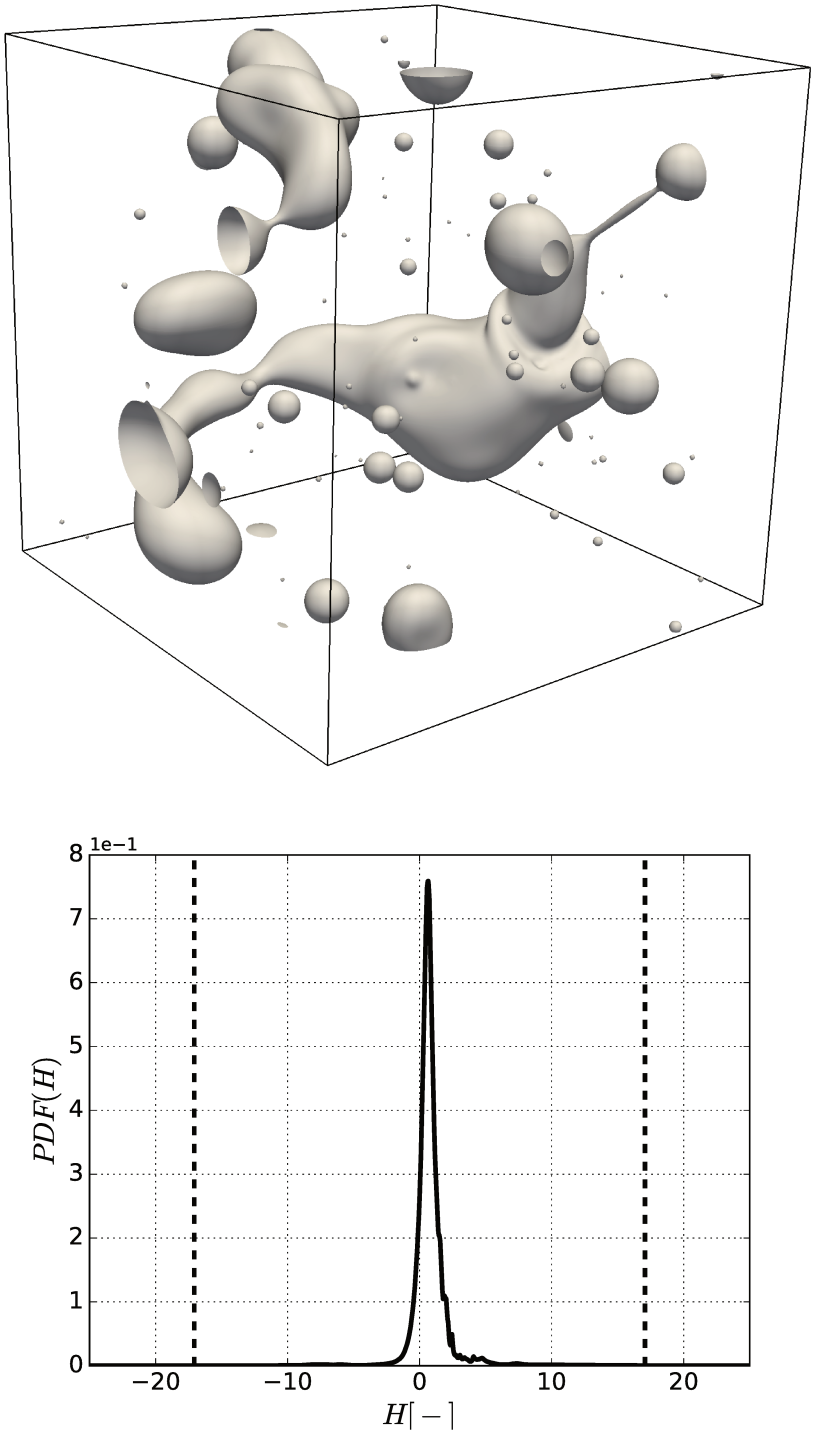


Figure 4.21 – Haut : Visualisation de l'interface liquide/gaz pour $\alpha_l = 5\%$. Bas : PDF de H moyennée en temps.

Sur la figure 4.21, l'interface liquide/gaz et la PDF de H moyennée en temps sont montrées pour $\alpha_l = 5\%$. Bien plus de ligaments sont générés par rapport au cas précédent en raison de l'augmentation de la fraction volumique de liquide dans

la boîte. Des éléments cylindriques allongés et étirés apparaissent et des gouttes sphériques sont formées à partir de leurs ruptures turbulentes. La PDF de H montre, ici, une évolution en accord avec la figure 4.18, avec un pic décalé vers les valeurs négatives de H. La probabilité de trouver des valeurs de H inférieures à 0 n'est plus nulle ; cela est dû à la présence de bulles (où les deux courbures principales sont négatives) de gaz dans la phase liquide ou à des structures hyperboloïdes (structures possédant des courbures principales de signes opposés) pouvant apparaître dans les déformations de l'interface. A partir des visualisations de l'interface, ce sont ces structures hyperboloïdes qui semblent majoritaires.

Sur la figure 4.22, les PDF de (H, G) et $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$ sont reportées pour le cas $\alpha_l = 5\%$. En comparant la PDF de (H, G) avec celle de la figure 4.20, on observe moins de structures sphériques (sur la parabole) et le pic est plus proche de la ligne $G = 0$. Cela est représentatif de la variation topologique du liquide ; on passe de structures sphériques à des structures cylindriques en augmentant la fraction volumique de liquide. De plus, en regardant la PDF de $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$, la distribution n'est plus principalement sur la ligne horizontale représentant les structures sphériques, mais est fortement étirée le long de la ligne correspondant aux structures cylindriques ($\kappa_2 = 0$). Le pic de la PDF s'est également éloigné de la ligne horizontale par rapport au cas $\alpha_l = 1\%$. Cela montre que pour le cas $\alpha_l = 5\%$, l'interface possède une gamme plus variée de courbures en comparaison du cas précédent, et est sujette à plus de déformations.

En augmentant de plus en plus la fraction volumique de liquide ($\alpha_l = 10\%$ jusqu'à $\alpha_l = 90\%$ Figure 4.23), un nombre important de structures liquides continues apparaissent et des ensembles de bulles sont générés pour les cas les plus denses. Les PDF moyennées en temps de H, ainsi que celles de (H, G) et $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$, sont montrées sur les figures 4.24 et 4.25 respectivement. Plusieurs informations peuvent être dérivées à partir de ces graphes. Pour le cas $\alpha_l = 10\%$, plusieurs poches de gaz sont enfermées à l'intérieur du liquide et, comme pour le cas $\alpha_l = 5\%$, la probabilité d'avoir $H < 0$ n'est plus négligeable.

La PDF de H a un profil similaire à celui de la figure 4.18 avec le pic décalé vers des valeurs plus faibles de H. La topologie de l'interface est maintenant fortement modifiée et la PDF de (H, G) montre un pic au niveau des structures cylindriques

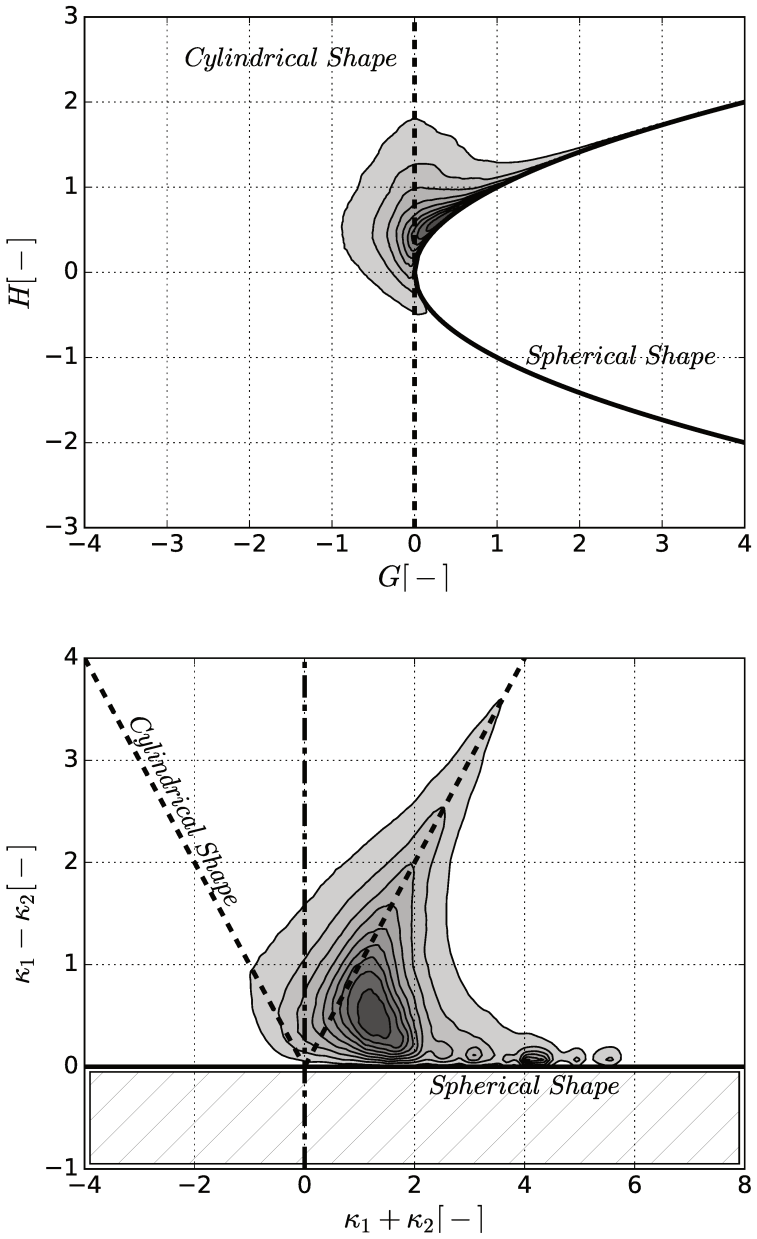


Figure 4.22 – Double PDF des courbures de surface pour $\alpha_l = 5\%$. Haut : double PDF(H, G), bas : double PDF($\kappa_1 - \kappa_2$, $\kappa_1 + \kappa_2$).

et un profil étiré sur la parabole. Ce profil indique la génération d'un ensemble de bulles et de gouttes quasiment sphériques. En terme de courbures principales, le pic n'est plus au niveau de la limite $\kappa_1 = \kappa_2$ même si l'affaissement du profil de la PDF au niveau de cette limite est toujours présent. En augmentant la fraction volumique de liquide, les points caractérisés par une courbure positive disparaissent car la probabilité d'avoir des gouttes isolées est dorénavant négligeable. L'énergie cinétique turbulente n'est pas assez élevée pour rompre les ligaments et l'interface

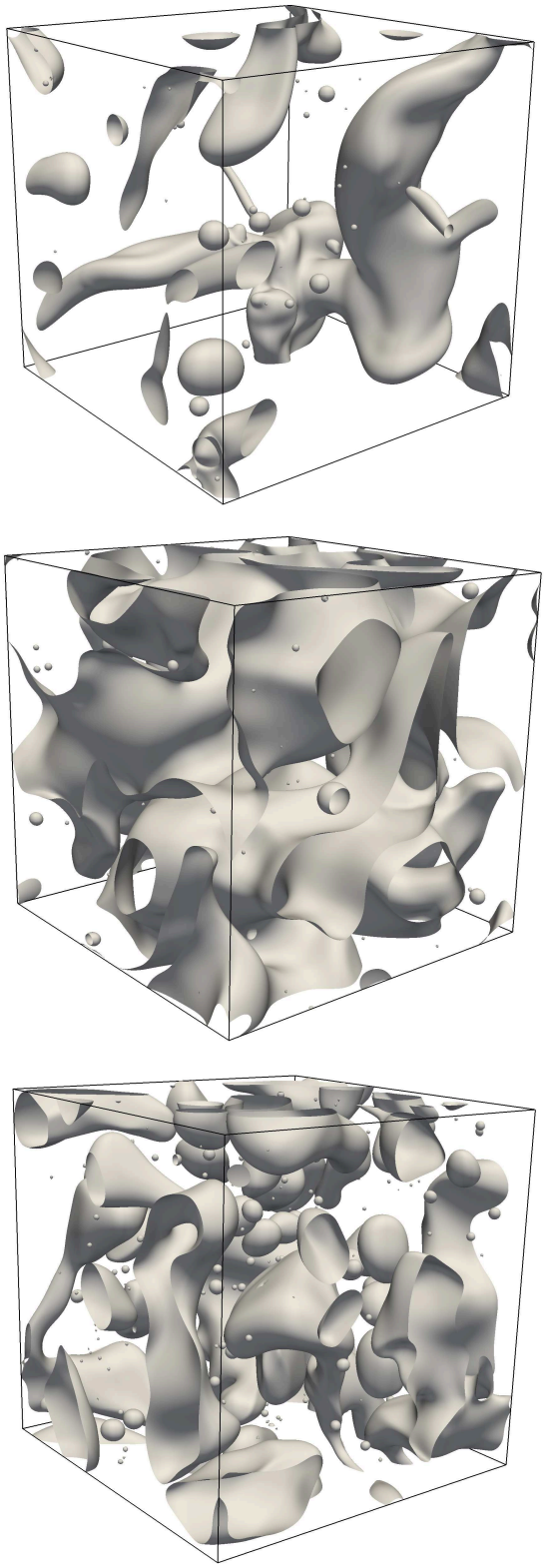


Figure 4.23 – Visualisation de l'interface liquide/gaz pour $\alpha_l = 10\%$ (haut), $\alpha_l = 50\%$ (centre) et $\alpha_l = 90\%$ (bas).

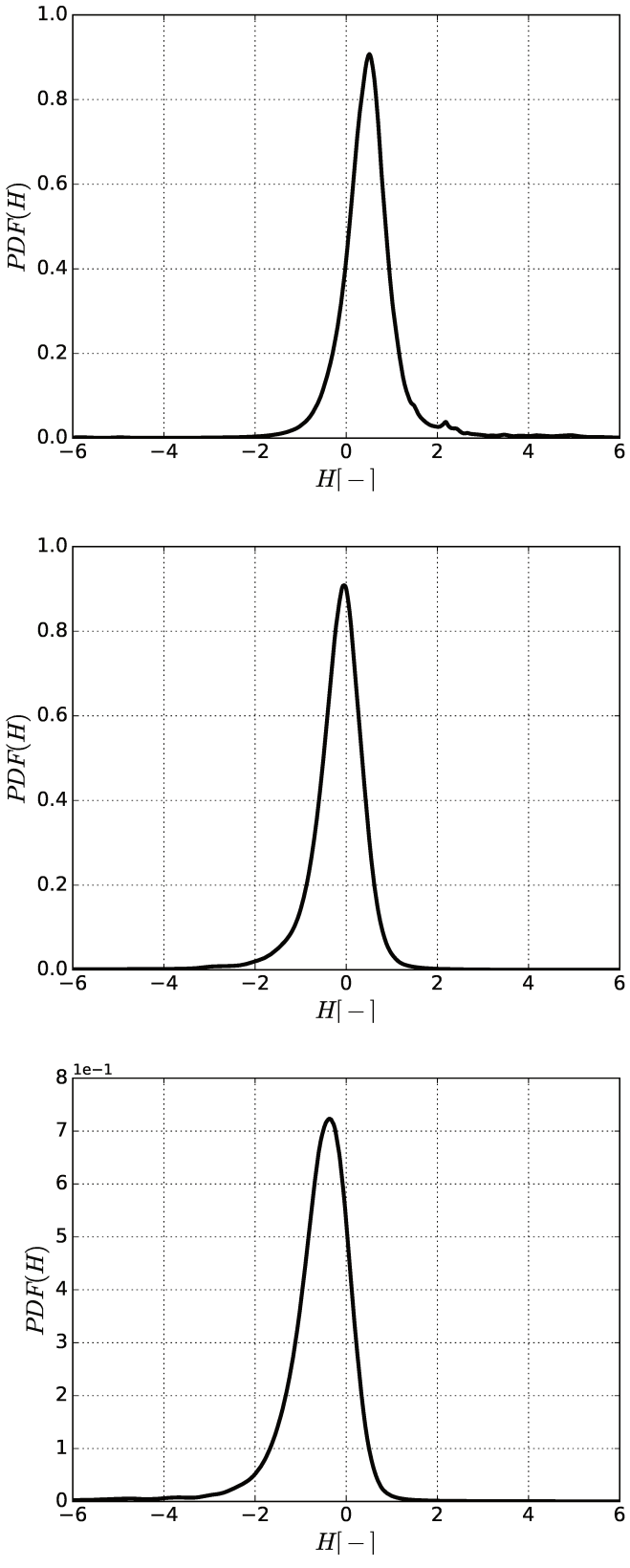


Figure 4.24 – PDF moyennée en temps de H. Haut : $\alpha_l = 10\%$, centre : $\alpha_l = 50\%$, bas : $\alpha_l = 90\%$.

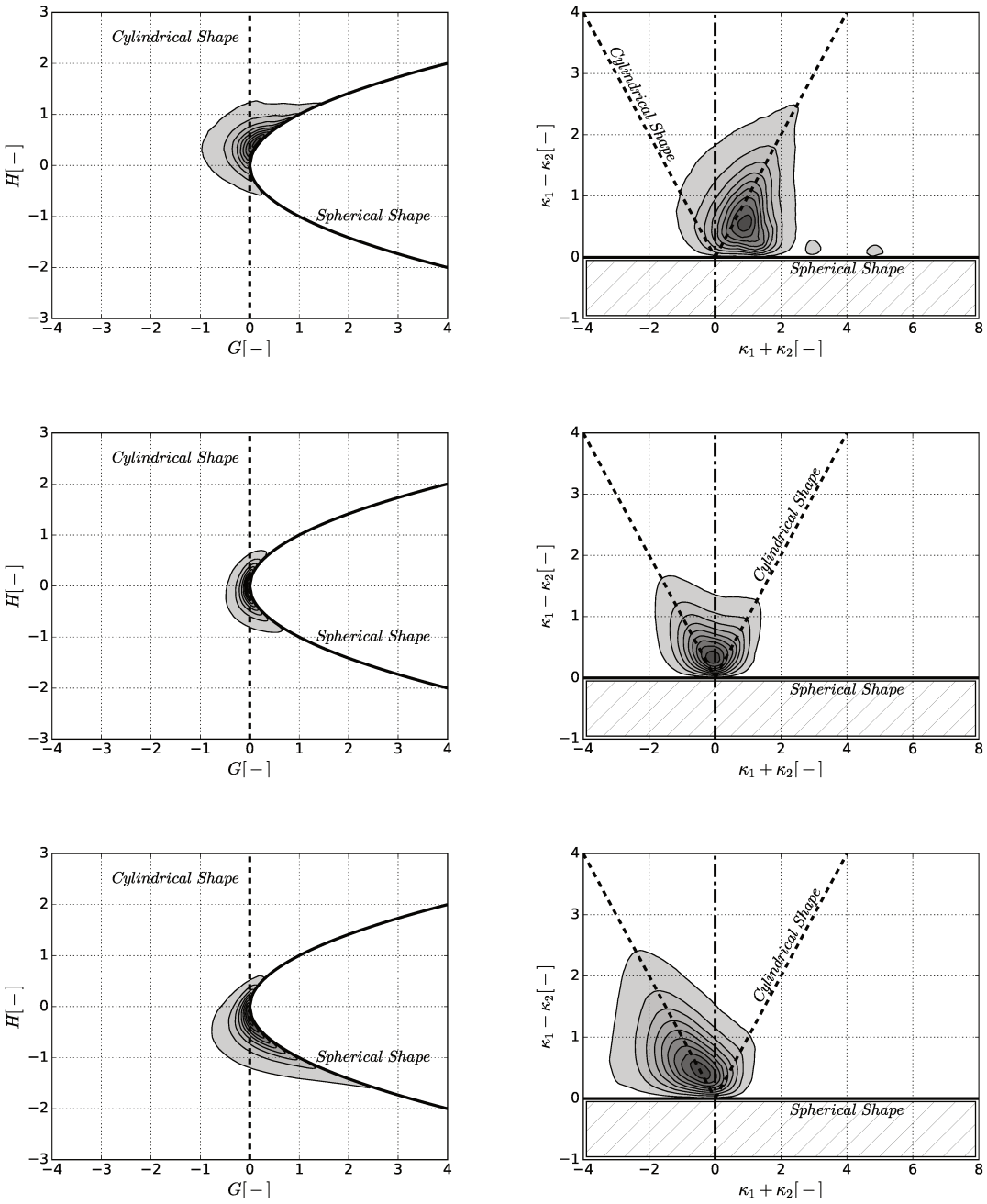


Figure 4.25 – Double PDF moyennée en temps de (H, G) (gauche) et de ($\kappa_1 - \kappa_2$, $\kappa_1 + \kappa_2$) (droite) pour $\alpha_l = 10\%$ (haut), $\alpha_l = 50\%$ (centre) et $\alpha_l = 90\%$ (bas).

liquide/gaz préserve sa continuité. La phase gazeuse est piégée à l'intérieur de ces structures et, sur le graphe (H, G), un nombre important de bulles apparaissent au niveau de la parabole des topologies sphériques. De manière cohérente, les courbures principales changent leur signe. Finalement, pour le cas $\alpha_l = 90\%$, les valeurs absolues de H et G sont plus élevées (c'est-à-dire que les bulles ont un rayon plus petit) et la PDF de $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$ change complètement d'orientation. Le système est étiré dans la partie des courbures principales négatives. La THI avec $\alpha_l = 90\%$ se comporte de manière complémentaire au cas $\alpha_l = 10\%$ en terme de topologie. La PDF moyennée en temps de H est décalée vers les valeurs négatives en raison des bulles formées.

En comparant tous les résultats montrés jusqu'à présent, il est intéressant de montrer que l'évolution de la courbure est consistante avec l'observation des phénomènes physiques. Les PDF de H ainsi que les PDF doubles évoluent, tout au long du processus d'atomisation, en gardant le même profil mais en se déplaçant vers les valeurs négatives au fur et à mesure que la fraction volumique de liquide augmente. Ainsi, l'atomisation provoque le décalage des courbures vers les valeurs positives. De plus, dans la zone diluée du spray, un lien direct entre l'évolution de la courbure et la DSD est observé.

4.6 Conclusion

Cette étude montre comment la DNS peut être employé pour améliorer la compréhension et la modélisation de l'atomisation primaire qui peut ensuite être utilisé en RANS ou LES. En particulier, elle a pour but d'améliorer les informations disponibles dans le modèle ELSA à travers l'introduction des courbures de l'interface liquide/gaz. Tout d'abord, d'un point de vue mathématique, une définition étendue de la distribution de tailles de gouttes qui peut être utilisée tout au long du processus d'atomisation est proposée menant à la distribution des courbures en surface. Pour cela, l'extraction des courbures est montrée pour des configurations simples comme l'instabilité de Rayleigh-Plateau ou une collision de gouttes. Deux méthodes différentes pour extraire les courbures ont été testées et validées. L'évolution de la courbure moyenne et de la courbure de Gauss est analysée en détail dans le but de montrer comment le processus de rupture d'un jet liquide en gouttes peut être décrit en terme de propriétés de surface. Ensuite, la même procédure est effectuée sur des THI, où plusieurs cas avec

des fractions volumiques de liquide différentes ont été étudiés. L'analyse a d'abord été focalisée sur la zone diluée ($\alpha_l = 1\%$) où le lien entre la DSD et la SCD a été clarifié. En effet, à partir de la PDF de H, il a été possible d'extraire une NDD et une VDD qui suivent une distribution log-normal standard. En étudiant des cas avec une fraction volumique de liquide plus élevée, il a été montré que la SCD est définie même si de larges structures sont présentes. Les doubles PDF de (H, G) et de $(\kappa_1 - \kappa_2, \kappa_1 + \kappa_2)$ ont été étudiées pour cette configuration et donnent un bon aperçu de l'évolution des structures liquides dans des écoulements diphasiques. Il a également été montré que la distribution des courbures est capable décrire la transition de la zone diluée à une zone remplie de bulles avec une PDF de H ayant le même profil dans tous les cas. Une perspective intéressante à ce travail serait d'implémenter une équation de transport pour la courbure moyenne H et la courbure de Gauss G comme celles proposées par Essadki et al. [188]. Ces équations nécessitent la connaissance de la vitesse de l'interface. Un moyen de l'obtenir serait d'utiliser l'évolution du niveau 0 de la fonction distance en prêtant attention à l'étape de redistance qui peut modifier légèrement cette vitesse.

Chap. 5 | Critère de Qualité de Résolution de l'Interface

5.1 Introduction

Les écoulements liquide/gaz apparaissent dans plusieurs domaines comme l'injection liquide de carburant, les vagues déferlantes, la cavitation, le ballottement, les sprays pharmaceutiques, la peinture, les transferts de chaleur lors de changements de phase, etc. Par exemple, les écoulements diphasiques ont un impact direct sur les émissions de gaz (atomisation dans les moteurs à combustion), les efficacités des processus industriels (échangeurs de chaleur) et l'ingénierie côtière (vagues déferlantes). Plusieurs études sont dédiées à ce genre d'écoulements que ce soit au niveau expérimental ou numérique. Malgré d'importantes avancées récemment, des résultats expérimentaux sont particulièrement difficiles à obtenir dans un environnement diphasique turbulent. Concernant les développements numériques, de nombreux développements ont été réalisés, dans la dernière décennie, pour améliorer la description de l'interface dans différents formalismes numériques comme les simulations aux grandes échelles (LES) ou les simulations numériques directes (DNS). L'utilisation de la DNS permet l'accès à presque toutes les échelles des écoulements diphasiques turbulents et permet une description précise du comportement de l'interface. Le terme "presque", utilisé dans la dernière phrase, est important. En effet, jusqu'à maintenant, la plus petite échelle présente dans un écoulement diphasique turbulent ne peut pas être clairement déterminée.

Depuis les premières études DNS de l'atomisation (Desjardins et al. [81], Herrmann [197], Ménard et al. [95]), la question de la résolution nécessaire pour affirmer qu'une simulation est bien résolue est toujours sans réponse. Comme mentionné dans Gorokhovski et Herrmann [164], peu d'études DNS illustrent la dépendance au

maillage par une analyse de la convergence. Une discussion sur la plus petite échelle observable dans les écoulements diphasiques y est également présente. Elle montre que pour atteindre une bonne résolution, il faut un coût plus élevé qu'en monophasique en raison des phénomènes de rupture entraînant la formation de structures liquides de plus en plus petites. Plus tard, Shinjo et Umemura [104] ont réalisé une simulation avec 6 milliards de points de maillage et, malgré cet effort important sur la résolution du maillage, il n'est pas évident que la plus petite échelle ait été capturée avec le maillage le plus fin. Néanmoins, de nombreuses études ont montré l'intérêt d'utiliser la DNS pour capturer la dynamique de l'écoulement avec une méthode de suivi d'interface. Il ne fait aucun doute que ces études sont très pertinentes, par exemple pour avoir un aperçu sur des écoulements diphasiques turbulents complexes comme le phénomène d'atomisation afin de compléter les données pouvant être mesurées expérimentalement. Cependant, il serait bénéfique d'aller plus loin dans le processus de validation en évaluant la qualité de la résolution de l'interface d'une telle simulation numérique avec un critère objectif. Ce chapitre présente une tentative pour établir ce type de critère via une analyse des caractéristiques de l'interface telle qu'elle a été résolue.

D'un point de vue physique, la taille minimum des structures rencontrées dans un écoulement diphasique devrait être gouvernée par un équilibre entre les forces d'inertie et les forces de tension de surface. Dans un sens, il doit être possible de définir un critère décrivant les interactions turbulence/interface et la plus petite échelle résultant de ces interactions. L'évaluation de cette échelle est de la plus grande importance, mais il n'y a toujours pas d'étude dans la littérature qui détermine théoriquement la plus petite échelle d'un écoulement diphasique turbulent, comme c'est le cas pour l'échelle de Kolmogorov dans les écoulements monophasiques. Concernant les sprays, les échelles minimales de tailles de gouttes sont basées sur le nombre de Weber qui représente la stabilité d'une goutte soumise à un cisaillement de la part du gaz environnant. Cette approche est restreinte aux sprays composés de gouttes sphériques n'étant pas soumises à d'autres contraintes internes. Les écoulements diphasiques denses, qui sont au cœur du processus d'atomisation, incluent d'autres effets comme les collisions ou les interactions de surface entre le liquide et le gaz. L'interface est bien plus complexe que dans le cas d'une sphère, avec de nombreuses autres formes possibles comme des ligaments ou des nappes liquides. Conséquemment, chaque

plissement de l'interface devrait être considéré.

À partir du travail précurseur de Vallet et Borghi [184], la description des écoulements diphasiques denses a été réalisée à travers le modèle ELSA (Eulerian Lagrangian Spray Atomisation) [184, 185, 181, 198]. Dans cette approche, aucune hypothèse n'est faite sur la forme de l'interface liquide/gaz, mais la quantité de surface totale par unité de volume est déterminée. Il a été montré que pour une certaine quantité de liquide sous l'influence d'une turbulence avec une intensité fixée, le ratio entre l'énergie cinétique turbulente et l'énergie de surface atteint statistiquement une valeur d'équilibre. Ce rapport correspond donc à un nombre de Weber turbulent à l'équilibre, associé à l'échelle de longueur caractéristique des plissements de l'interface. Depuis, aucun développement théorique n'a été réalisé pour déterminer cette valeur. Pour y remédier, une estimation de cette valeur a été déterminée à l'aide de DNS d'écoulements diphasiques turbulents [199, 135]. En raison du manque de théorie pour paramétrer la résolution du maillage, ces études DNS ont été établies grâce à une étude de convergence de maillage sur la quantité totale d'interface liquide/gaz. L'écoulement diphasique turbulent considéré est une Turbulence Homogène Isotrope (THI) dans une boîte périodique. Cette configuration relativement simple (comparée à une configuration réaliste d'injection) a permis d'affiner le maillage jusqu'à atteindre une convergence pour les caractéristiques étudiées comme la masse et la quantité de surface. Mais cet effort est difficilement réalisable dans la plupart des configurations, illustrant la nécessité de recourir à un critère efficace qui peut être calculé directement pour évaluer la qualité de la résolution.

Récemment, Anez et al. [198] ont utilisé l'approche ELSA dans le contexte de l'atomisation en LES. Dans ce travail, un couplage entre une méthode numérique dédiée à la résolution de l'interface et une interface de sous-maille a été réalisé. Pour déterminer quelle méthode est la plus adaptée pendant la simulation, la notion de Qualité de Résolution d'Interface (IRQ pour Interface Resolution Quality) a été proposée. Le premier critère IRQ proposé est basé sur le modèle de densité de surface qui détermine si la quantité de surface totale estimée par le modèle peut être résolue par la grille locale. Ce critère IRQ s'appuie sur un modèle qui inclut une estimation de la quantité de surface de sous-maille et n'est donc pas applicable aux simulations DNS. Mais d'autres critères IRQ, se focalisant sur la résolution de la géométrie de

l'interface, sont plus adéquats pour les DNS avec interface résolue.

Les méthodes de résolution d'interface appartiennent à trois catégories : les méthodes avec une interface diffuse [19] où l'épaisseur de l'interface est plus grande que la résolution du maillage ; les méthodes de capture d'interface où l'interface est supposée être infiniment mince comparativement à la résolution du maillage mais où la reconstruction de l'interface n'est pas réalisée de manière explicite. La dernière catégorie concerne les méthodes avec reconstruction de l'interface où l'intersection de la surface avec le maillage est explicitement réalisée par une méthode géométrique (méthodes Level Set, VOF). Cette dernière catégorie est reconnue comme étant la plus précise car la reconstruction explicite de l'interface permet d'appliquer les conditions de saut à travers celle-ci de manière rigoureuse.

Wardle et Weller [200] ont proposé un indicateur associé à l'IRQ basé sur le gradient de la fraction volumique de liquide. Dans leur approche de type capture d'interface, la transition entre les phases liquide et gazeuse doit être réalisée en moins d'une maille. Ainsi, le gradient de la fraction volumique de liquide dans cette maille doit être plus grand que $\frac{1}{\Delta x}$. Quand le gradient est inférieur à cette valeur, la diffusion numérique amortit la transition entre les phases. Cet indicateur ($\Delta x|\vec{\nabla}\alpha|$) surligne un éventuel échec de ces méthodes à représenter une interface nette dans les cas faiblement résolus (quand cet $IRQ_\alpha << 1$). De plus, un tel critère est utile pour détecter la diffusion numérique si la méthode de capture d'interface inclut une échelle de longueur définie pour la transition entre les phases, ce qui est le cas pour certaines méthodes avec une interface diffuse et de capture d'interface. Cependant, la catégorie des méthodes de capture d'interface avec reconstruction explicite n'a pas de diffusion numérique de l'indicateur de phase car, par définition, le profil est supposé être une "marche" à travers l'interface. Pour ces approches, la résolution de la géométrie de l'interface doit être évaluée différemment. L'indicateur proposé [198] compare simplement la courbure totale de la résolution du maillage. La courbure est une sortie standard attendue de la part de chaque simulation avec une interface résolue car elle est nécessaire pour le calcul des forces de tension de surface. Ainsi, un IRQ basé sur la courbure peut être utilisé pour évaluer le niveau de précision de la résolution de l'interface pour tout type de simulation numérique. Une définition de ce critère, ainsi qu'un rappel sur les définitions des précédents IRQ, est présentée dans une section

ultérieure.

Pour illustrer le potentiel de ce critère, le code ARCHER [95, 194, 146, 183, 144] est d'abord utilisé sur une configuration THI diphasique où une étude de convergence peut être réalisée. Cette configuration permet de reproduire des écoulements diphasiques turbulents pouvant apparaître dans des applications comme l'injection et l'atomisation pour des coûts de calcul réduits. Dans une première partie, la configuration THI est présentée ainsi que les principales caractéristiques de la méthode de reconstruction d'interface utilisé dans ce travail. Ensuite, une étude de convergence en maillage est réalisée pour comprendre l'effet de la faible résolution sur un paramètre de calcul. Le critère IRQ_κ basé sur la courbure est ensuite défini et analysé. Finalement, une tentative est réalisée pour résumer l'information pouvant être extraite de l'IRQ_κ afin de proposer un critère global aidant à définir le niveau de résolution requis pour les simulations d'écoulements diphasiques.

5.2 Équations fondamentales et méthodes numériques

5.2.1 Équations de Navier-Stokes et méthode de capture d'interface

On reprend ici le code ARCHER décrit dans la section 3.2 qui utilise une méthode CLSVOF couplée avec une méthode de projection pour effectuer les simulations numériques directes des équations de Navier-Stokes incompressibles :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{u}\cdot\vec{\nabla}\vec{u} = -\frac{\nabla P}{\rho} + \frac{1}{\rho}\vec{\nabla}\cdot(2\mu\bar{\bar{\epsilon}}) + \vec{f} + \frac{1}{\rho}\sigma H\delta(\phi)\vec{n} \tag{5.1}$$

avec P, la pression ; $\vec{u}$, le vecteur vitesse et $\bar{\bar{\epsilon}}$, le tenseur des taux de déformation. À l'interface, la force de tension de surface peut être basée sur la distribution de Dirac $\delta(\phi)$. Les équations sont résolues de la même manière que dans la section 3.2 et le calcul de la courbure s'effectue de la même manière que dans le chapitre précédent.

5.2.2 Configuration numérique

Dans le but d'étudier les effets de la résolution du maillage sur un écoulement diphasique turbulent, la configuration numérique développée par Duret et al. [135] est retenue. Elle correspond à une Turbulence Homogène Isotrope (THI) incluant un écoulement liquide/gaz avec une intensité de turbulence constante induite par un forçage linéaire sur les deux phases. L'avantage de cette configuration est la

possibilité d'étudier l'évolution de l'écoulement et en particulier sa statistique en accumulant des données à la fois en temps et en espace. Le domaine de calcul est une boîte cubique avec des conditions aux limites périodiques. Cette configuration est supposée être représentative de l'écoulement diphasique pouvant être rencontré dans des applications comme l'injection ou l'atomisation. Elle a été utilisée avec succès pour déterminer les caractéristiques de tels écoulements [135, 201, 194, 136]. Avant de voir le problème de la résolution de l'interface, la configuration numérique est testée et validée en suivant la procédure décrite dans Duret et al. [194].

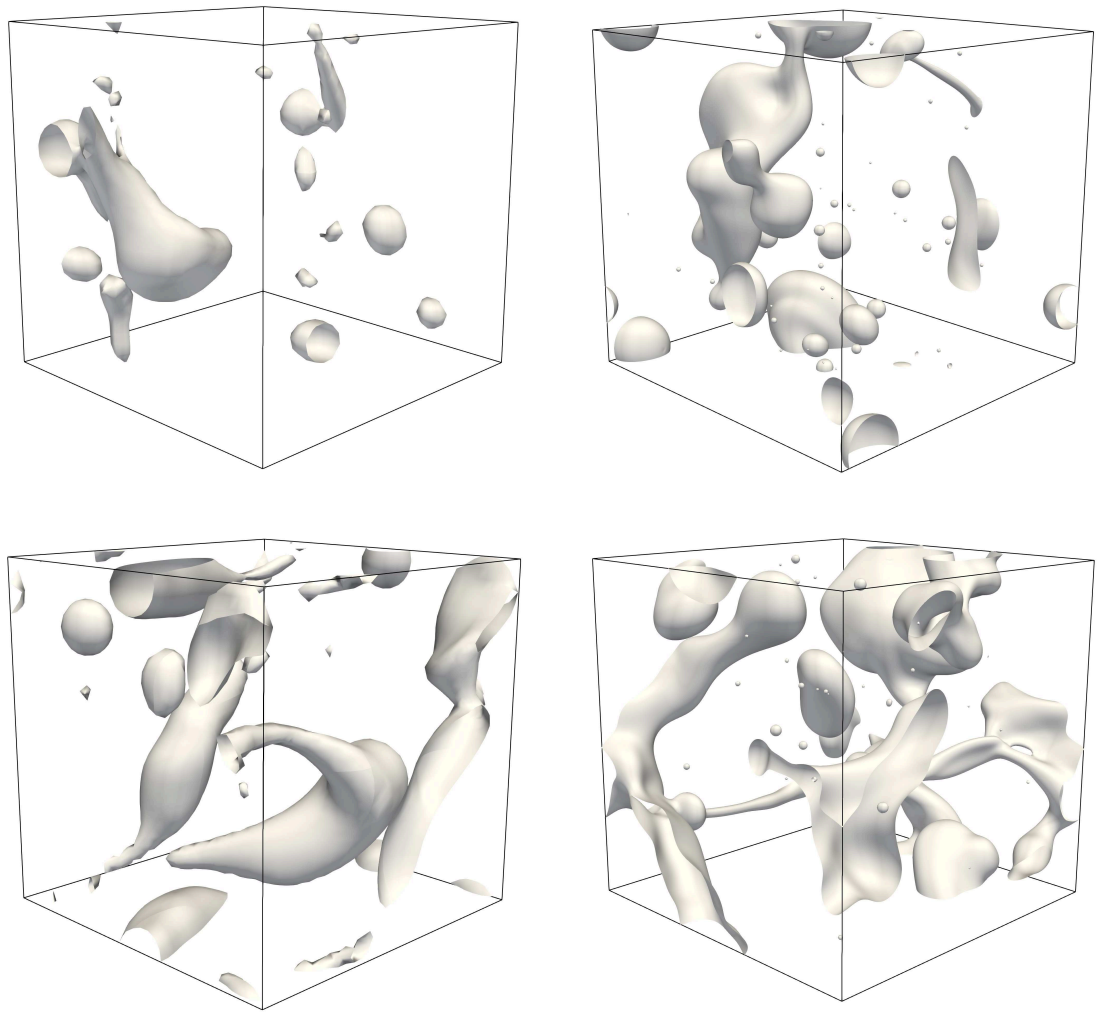


Figure 5.1 – Représentation de la surface pour une configuration THI avec $\phi = 5\%$ (haut) et $\phi = 10\%$ (bas) pour un maillage $32 \times 32 \times 32$ (gauche) et $256 \times 256 \times 256$ (droite).

La figure 5.1 représente un instantané typique de la surface pour deux valeurs différentes de fraction volumique de liquide et pour différents maillages. Cette figure

illustre l'effet sur l'écoulement de la fraction volumique moyenne de liquide ; des gouttes sont présentes en majorité seulement pour des cas très dilués. Des fractions volumiques de liquide plus importantes ont été étudiées précédemment où aucune goutte n'est présente. En suivant l'écoulement temporellement, les collisions jouent un rôle très important sur l'évolution de caractéristiques de surface. Concernant la résolution du maillage, il apparaît que l'augmentation du nombre de mailles permet l'apparition de plus petites structures au niveau de l'interface. La question est donc maintenant de savoir jusqu'à quel point le maillage doit être affiné.

5.3 Niveau de résolution de l'interface dans les écoulements diphasiques turbulents

5.3.1 Échelles de l'interface pouvant être résolues

Dans les écoulements diphasiques turbulents, il n'y a pas de définition de la plus petite échelle de longueur théorique équivalente à l'échelle de Kolmogorov pour les écoulements monophasiques. L'échelle de Batchelor pour un scalaire (que l'on aurait pu identifier à la fraction volumique de liquide) n'est pas applicable car le liquide et le gaz sont non-miscibles et donc le nombre de Schmidt est infini. Quelques tentatives ont été effectuées pour définir le diamètre stable d'une goutte soumise à une force particulière : le cisaillement moyen pour une goutte avec une vitesse de glissement fixée par rapport à la phase gazeuse, ou une goutte contrainte par une turbulence homogène du gaz environnant [202]. Cependant, ces approches ne sont valides que pour un cas particulier et la taille caractéristique de l'interface basée sur une théorie générale de la turbulence dans des écoulements diphasiques reste à développer.

Ainsi, pour l'instant, concernant la simulation numérique d'une interface résolue, seulement une étude de convergence en maillage peut être réalisée afin de s'assurer que l'écoulement est complètement résolu. À ce niveau, il est important de préciser que l'étude de convergence doit être basée sur des paramètres que l'on souhaite préserver. En effet, la plus petite échelle de longueur des plissements de l'interface produite par l'écoulement tend vers zéro même pour un événement simple comme la rupture d'un ligament cylindrique. Au niveau de la rupture, le cylindre est "pincé" jusqu'à une taille associée à l'épaisseur de l'interface. Par construction, la méthode de résolution d'interface considère cette échelle comme étant petite devant la taille

de maille. Cette échelle ne peut donc pas être entièrement capturée et des ruptures se produisent numériquement à une échelle associée à la taille de maille. Malgré cet inconvénient, de nombreuses simulations ont été réalisées avec succès montrant que les simulations numériques sont capables de déterminer, par exemple, la taille de la goutte produite lors de la rupture d'un ligament cylindrique. C'est pourquoi, bien que les simulations numériques ne soient pas capables de capturer toutes les échelles de l'interface, elles peuvent être affiner suffisamment pour déterminer certaines propriétés de l'écoulement. La préservation de ces quantités définit ainsi une interface bien résolue.

5.3.2 Résolution d'interface pour préserver la masse et la quantité de surface

La première quantité qui doit être préservée dans un écoulement diphasique turbulent est la masse, et plus particulièrement la masse de chaque phase liquide et gazeuse. L'erreur sur la masse totale est présentée Figure 5.2. Une convergence à l'ordre 1 est observée sur la figure de droite avec des erreurs allant de 1.2% pour un maillage $32 \times 32 \times 32$ à 0.2% pour le maillage le plus fin $256 \times 256 \times 256$ et ce pour des simulations s'étendant sur plus d'une dizaine de temps de retournement turbulents.

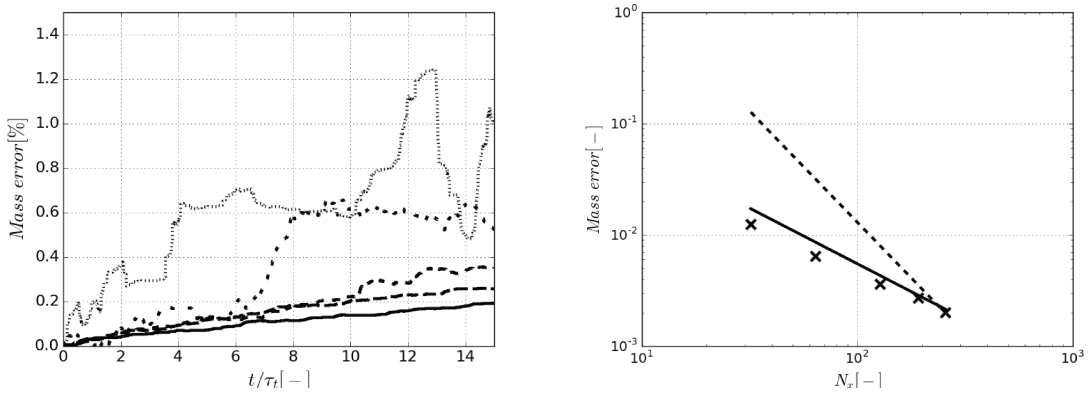


Figure 5.2 – Erreur relative de la masse en fonction du temps (gauche) pour une configuration THI avec $\phi = 10\%$ pour différents maillages. ·····, $32 \times 32 \times 32$; - - - , $64 \times 64 \times 64$; – – , $128 \times 128 \times 128$; ——-, $192 \times 192 \times 192$; ——, $256 \times 256 \times 256$. L'ordre de convergence est montré à droite (ordre 1 en ligne continue et ordre 2 en ligne traitillée).

Ensuite, en raison de l'intérêt porté à l'atomisation pour les transferts de masse et de chaleur à travers l'interface, le second paramètre à étudier est la quantité de surface totale. Cette quantité n'est pas constante durant la simulation ; en effet, les

coalescences, les ruptures et les collisions font varier la quantité de surface. Cependant, en moyenne, pour une certaine intensité de turbulence et pour une proportion de liquide et de gaz donnée, la quantité de surface doit converger statistiquement vers une valeur limite. En observant la figure 5.1, il apparaît qu'augmenter le nombre de mailles amène à une croissance de la quantité de surface calculée. La figure 5.3 montre la variation de la quantité de surface moyenne en fonction de la résolution du maillage. Dans cette configuration THI d'un écoulement diphasique, il est possible de réaliser cette convergence en maillage puisque la quantité de surface totale devient indépendante de la résolution du maillage pour un nombre de mailles dans chaque direction supérieur à 128. Cela signifie qu'à un certain niveau de résolution, les événements comme les ruptures sont suffisamment rares pour que les échelles de rupture d'interface, qui sont intrinsèquement non résolues, aient une contribution négligeable devant la quantité de surface totale.

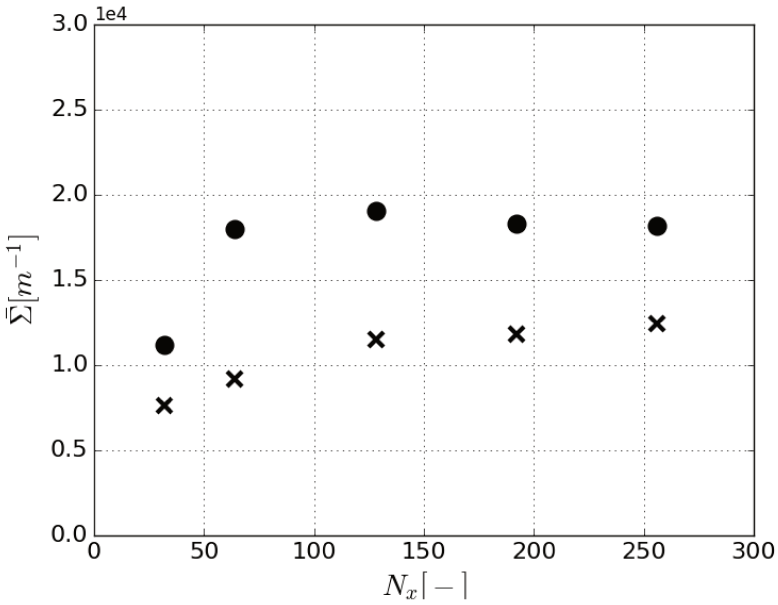


Figure 5.3 – Convergence en maillage de la densité de surface moyenne Σ pour une configuration THI avec $\phi = 5\%$ (croix) et $\phi = 10\%$ (cercle).

5.3.3 Impact sur la distribution du spray et la courbure

Enfin, pour explorer les petites échelles créées pendant le processus d'atomisation, la distribution de taille du spray doit être considérée. Cette quantité ne peut pas être déterminée directement dans un écoulement liquide/gaz turbulent dense car la phase liquide n'est pas composée uniquement de gouttes auxquelles on pourrait associer un

diamètre. Comme proposé dans Canu et al. [183], la distribution de taille de gouttes peut être généralisée notamment par la distribution surfacique de courbures. Dans le cas de l'atomisation, cette fonction tend vers la distribution de taille de gouttes mais peut être utilisée pour décrire la distribution des échelles de surface même en zone dense. La cumulative de cette fonction et sa PDF sont représentées sur les figures 5.4 et 5.5. Il apparaît, sur la figure 5.4, qu'il est possible d'affiner suffisamment le maillage de telle sorte que toutes les courbes convergent pour les maillages possédant un nombre de mailles supérieur à $128 \times 128 \times 128$. Cela correspond également au maillage à partir duquel la quantité de surface converge (Figure 5.3), montrant qu'en effet, la distribution des courbures est un paramètre clé pour capturer la quantité de surface totale.

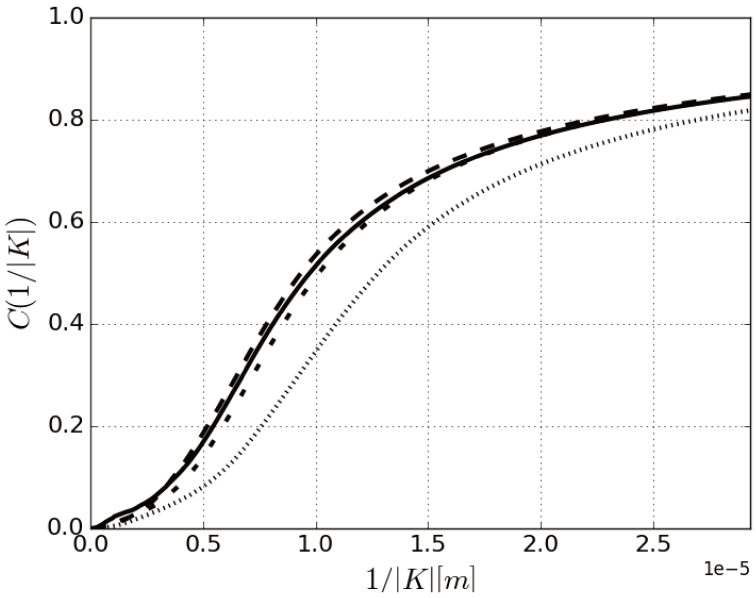


Figure 5.4 – Cumulative moyennée en temps de $1/|\kappa_1 + \kappa_2|$ pour une configuration THI avec $\phi = 10\%$ pour différents maillages. ·····, $32 \times 32 \times 32$; - - - , $64 \times 64 \times 64$; – – , $128 \times 128 \times 128$; ——, $256 \times 256 \times 256$.

La figure 5.5 montre la probabilité en fonction de chaque niveau de courbure. Puisque l'abscisse est l'inverse d'une courbure, son maximum est lié au rayon de courbure moyen. Sur la partie gauche de la courbe, représentant les petits rayons de courbure, il est clair que la convergence n'est pas totalement accomplie dans cette zone. Une partie du problème est la convergence statistique ; un temps plus long est requis pour établir une convergence statistique quand la quantité de surface est

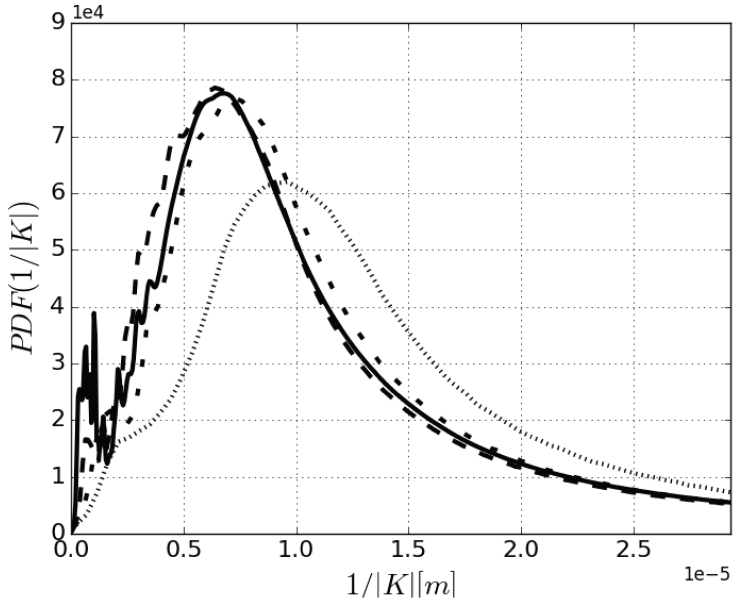


Figure 5.5 – PDF moyennée en temps de $1/|\kappa_1 + \kappa_2|$ pour une configuration THI avec $\phi = 10\%$ pour différents maillages. ·····, $32 \times 32 \times 32$; - - - , $64 \times 64 \times 64$; – – , $128 \times 128 \times 128$; ——, $256 \times 256 \times 256$.

faible. Mais cette observation correspond aussi au problème précédemment décrit sur la résolution du maillage qui ne peut pas être entièrement réalisée lors de ruptures car les plus petites échelles tendent vers l'épaisseur de l'interface. Cependant, puisque la convergence est établie sur la quantité totale de surface, il apparaît que pour cette quantité globale, la caractéristique la plus importante concernant la distribution des courbures est la cumulative. Aussi, une convergence globale de la surface totale apparaît lorsque le pic de la distribution des courbures est bien capturé. Pour la configuration THI, il a été possible de réaliser une étude de convergence en maillage mais cela n'est pas toujours abordable dans des simulations plus réalistes comme la simulation d'injection turbulente. La prochaine section explore donc la possibilité de développer un critère qui peut être utilisé dans des calculs réalistes pour déterminer le degré de résolution de l'interface.

5.4 Qualité de Résolution de l'Interface : IRQ local

5.4.1 Définitions précédentes de l'IRQ

À partir des travaux précédents en LES, il a été suggéré de comparer la densité de surface d'interface résolue à la densité totale de surface, qui est la somme des interfaces résolues et des plissements de surface non-résolus apparaissant en sous-

maille [198]. Cet IRQ local n'est pas applicable ici car, d'une part, une interface complètement résolue est recherchée et, d'autre part, aucune équation n'est disponible dans la présente simulation pour estimer la densité d'interface non-résolue. Un autre IRQ, basé sur le gradient de la fraction volumique de liquide, a été proposé par Wardle et Weller [200] dans le contexte du solveur interFoam du logiciel OpenFOAM [203]. Ce solveur contient une procédure numérique pour préserver le gradient de la fraction volumique de liquide et maintenir un profil "marche" au niveau de l'interface. Cette procédure revient à limiter les effets de diffusion numérique. Cependant, pour les maillages trop faiblement résolus, on peut observer une diminution du gradient de fraction volumique à travers l'interface. Puisque la transition est supposée se produire sur une seule maille d'épaisseur Δx, le gradient attendu doit être de l'ordre de $\frac{1}{\Delta x}$. Ainsi, un critère IRQ du genre $IRQ_\alpha = |\vec{\nabla}\alpha|\Delta x$ est sûrement pertinent pour cette approche. Ce critère peut être généralisé à n'importe quelle approche d'interface diffuse, même quand la longueur de transition λ est prescrite (épaisseur artificielle de l'interface). Celle-ci doit alors être utilisée à la place de Δx menant à : $IRQ_\alpha = \lambda|\vec{\nabla}\alpha|$. Cependant, pour les méthodes de capture d'interface avec reconstruction, l'épaisseur est, par définition, infiniment petite. Pendant l'étape de reconstruction, un profil "marche" est imposé pour la fraction volumique de liquide à travers l'interface. Ce critère IRQ_α n'est donc pas applicable pour cette méthode.

5.4.2 IRQ_κ basé sur la courbure

On peut voir que l'échelle des plissements de l'interface est directement reliée à la courbure de l'interface. Quand la courbure est trop importante, la méthode de reconstruction d'interface échoue à représenter les changements topologiques et cet échec peut avoir un impact local ou global sur le mécanisme d'atomisation (Figure 5.1). Pour identifier ce genre de problèmes, une définition d'un critère IRQ_κ basé sur la courbure est proposée ici. Le critère IRQ_κ est directement dépendant des courbures principales κ_1 et κ_2 et de la taille de maille Δx : $IRQ_\kappa = \frac{1}{\Delta x|\kappa_1+\kappa_2|}$. Une autre définition, plus adéquate, de ce critère serait $IRQ_\kappa = \frac{1}{2\Delta x\ max(|\kappa_1|,|\kappa_2|)}$; le facteur 2 devant Δx permettant une comparaison avec la première définition. En effet, cette définition est plus restrictive et permet d'assurer la résolution dans les deux directions principales. Une comparaison entre ces deux définitions est montrée sur la figure 5.6. Sur cette dernière, un ligament est considéré mal résolu dans le second cas car seulement une des deux direction principales est bien résolue. Dans le premier cas,

la forte courbure dans la première direction est compensée par la faible courbure dans la seconde direction conduisant à une "bonne" résolution du ligament. Par la suite, la première définition $IRQ_\kappa = \frac{1}{\Delta x|\kappa_1+\kappa_2|}$ est néanmoins conservée afin d'avoir une définition applicable sur une majorité des codes de calcul. En effet, la courbure totale $\kappa_1 + \kappa_2$ est généralement accessible mais pas chaque courbure principale prise séparément.

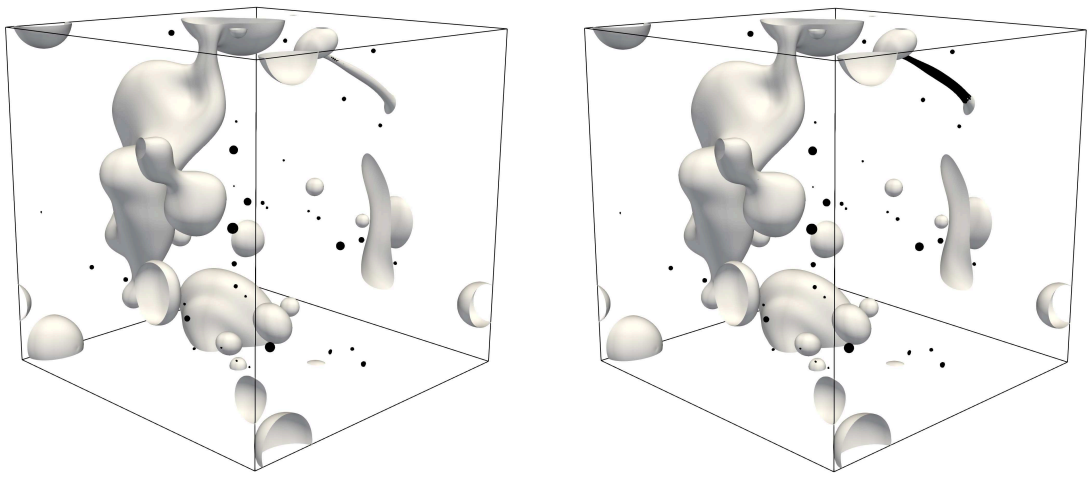


Figure 5.6 – Représentation de la surface pour une configuration THI avec $\phi = 5\%$ pour $IRQ = \frac{1}{\Delta x|\kappa_1+\kappa_2|}$ (gauche) et $IRQ = \frac{1}{2\Delta x\ max(|\kappa_1|,|\kappa_2|)}$ (droite). Les surfaces en noir ont un IRQ inférieur à 2.

Ce critère met en avant les régions sous-résolues de l'interface et, quand il est moyenné, donne une indication sur la qualité globale de la simulation. Par exemple, comme illustré sur la figure 5.7, $IRQ_\kappa = 1$ est équivalent à une sphère avec 2 mailles dans le rayon et correspond donc à une zone faiblement résolue alors que $IRQ_\kappa = 2$ représente 4 mailles dans le rayon et donc une interface résolue.

Pour la configuration THI, les surfaces présentées précédemment (Figure 5.1) sont maintenant analysées à l'aide du critère IRQ_κ(Figure 5.8). En utilisant une valeur seuil égale à 2, les surfaces sous-résolues ($IRQ_\kappa < 2$) sont coloriées en noir. Pour le cas avec un maillage faiblement résolu ($32 \times 32 \times 32$), beaucoup d'échelles non-résolues ne sont pas capturées et il apparaît que le critère IRQ_κ est bien adapté pour identifier localement les zones de l'interface qui ne sont pas complètement résolues. Aussi, pour le cas faiblement résolu, une grande partie de la surface totale est identifiée comme étant non-résolue (55% de la surface est concerné pour le cas THI avec 5% de liquide, et 30% de la surface pour le cas THI avec 10% de liquide qui possède de plus grosses structures). Au contraire, pour le maillage très

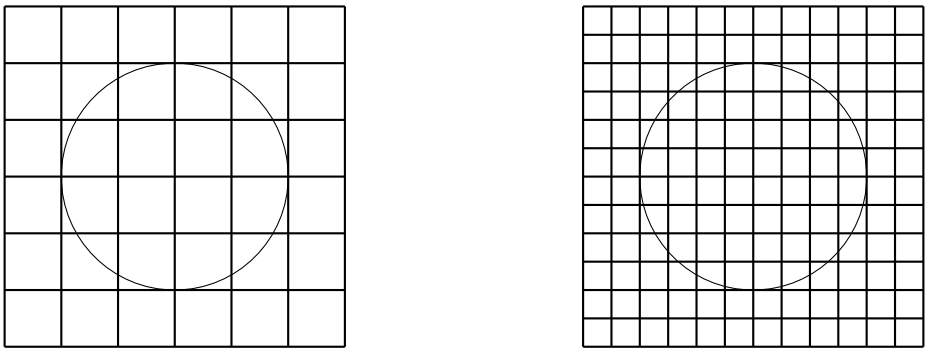


Figure 5.7 – Exemples de valeurs d'IRQ pour une sphère (plan de coupe 2D) pour différents maillages.

fin ($256 \times 256 \times 256$), la majorité de la surface est bien résolue et seulement 3% de la surface est sous-résolu pour le cas THI avec 5% de liquide (2.5% de la surface pour le cas avec 10% de liquide). Les pourcentages donnés précédemment sont des valeurs moyennes ; la valeur étant fluctuante en raison des différents événements se déroulant dans la configuration turbulente (coalescences, ruptures, ...). Puisque le schéma numérique du code ARCHER utilisé ici combine les méthodes VOF et Level Set dans le but d'assurer la conservation de la masse, la masse de liquide est préservée même dans les zones faiblement résolue. Conséquemment, l'échelle de plissement de l'interface est en quelque sorte capturée à une échelle juste supérieur à la résolution du maillage. Le comportement numérique de ce schéma limite ainsi les déformations de l'interface de manière similaire à l'ajout d'une force de tension de surface numérique. D'autres schémas auraient certainement agi différemment selon le type de traitement de l'interface. Mais, tant que le schéma préserve la transition de type marche au travers de l'interface, le critère IRQ_κ sera capable de détecter les zones de l'interface non-résolues et semble donc bien adapté pour caractériser le niveau de résolution de l'interface.

5.4.3 PDF de l'IRQ et analyse globale

Comme pour la distribution des courbures analysée précédemment, la statistique de IRQ_κ peut être scrutée afin de déterminer globalement le niveau de résolution de l'interface. Sur les cumulatives de l'IRQ (Figure 5.9), on retrouve les pourcentages de surfaces non-résolues annoncés précédemment. La faible précision du cas $32 \times 32 \times 32$ est visible avec une pente très raide pour les faibles valeurs d'IRQ. Ce profil s'étale de plus en plus au fur et à mesure que le maillage est affiné et un pourcentage très

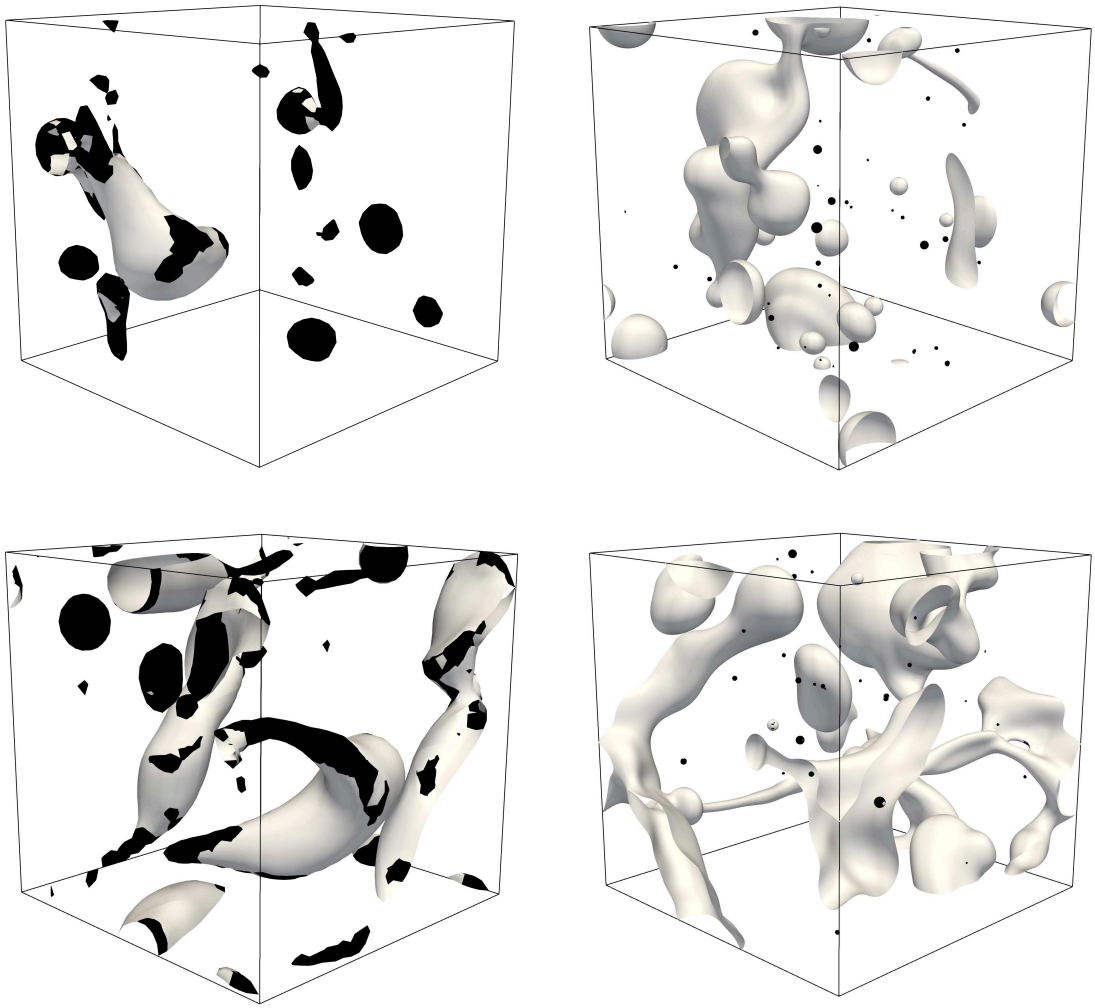


Figure 5.8 – Représentation de la surface pour une configuration THI avec $\phi = 5\%$ (haut) et $\phi = 10\%$ (bas) pour un maillage $32 \times 32 \times 32$ (gauche) et $256 \times 256 \times 256$ (droite). Les surfaces en noir ont un IRQ inférieur à 2.

faible de surfaces non-résolues est observé pour le cas le plus fin $256 \times 256 \times 256$.

La PDF de l'IRQ (Figure 5.10) permet de voir instantanément si la simulation est bien résolue ou non avec la position du pic de probabilité. Ainsi, pour le cas $32 \times 32 \times 32$, ce pic est situé dans la zone faiblement résolue. De même que pour l'étude de convergence de la densité de surface (Figure 5.3), ce n'est qu'à partir d'un maillage $128 \times 128 \times 128$ que la simulation peut être considérée comme étant bien résolue. Pour le cas $64 \times 64 \times 64$, bien que le pic soit en dehors de la zone hachurée, une part non négligeable de la courbe se situe à l'intérieur montrant que ce cas est encore faiblement résolu. Une nouvelle fois, la convergence statistique n'est pas établie dans la zone des faibles valeurs d'IRQ pour les mêmes raisons que pour

les PDF de courbure.

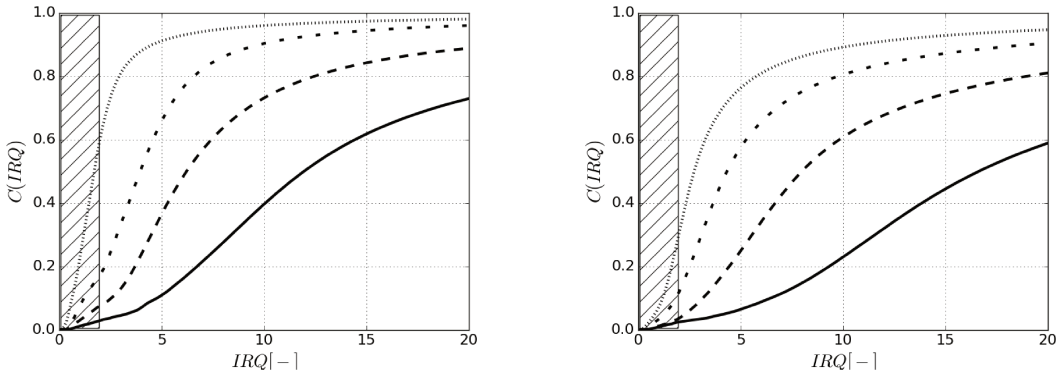


Figure 5.9 – Cumulative moyennée en temps de l'IRQ pour une configuration THI avec $\phi = 5\%$ (gauche) et $\phi = 10\%$ (droite) pour différents maillages. ·····, $32 \times 32 \times 32$; - - - , $64 \times 64 \times 64$; – – , $128 \times 128 \times 128$; ——, $256 \times 256 \times 256$. La zone hachurée correspond à un IRQ inférieur à 2.

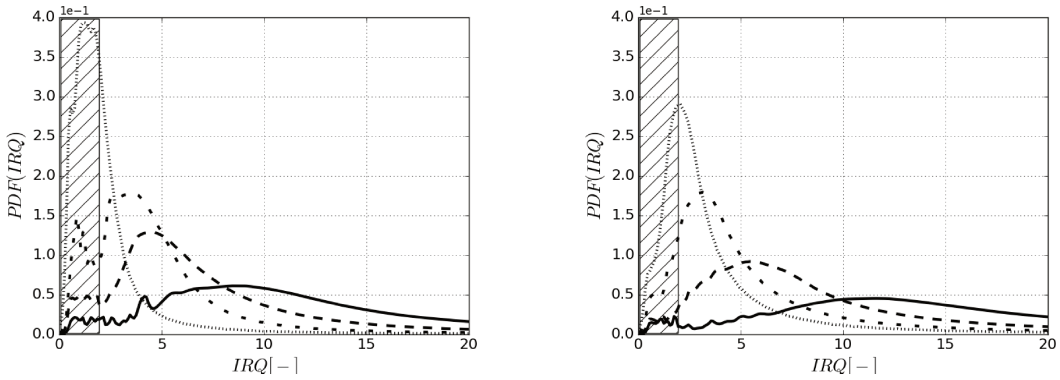


Figure 5.10 – PDF moyennée en temps de l'IRQ pour une configuration THI avec $\phi = 5\%$ (gauche) et $\phi = 10\%$ (droite) pour différents maillages. ·····, $32 \times 32 \times 32$; - - - , $64 \times 64 \times 64$; – – , $128 \times 128 \times 128$; ——, $256 \times 256 \times 256$. La zone hachurée correspond à un IRQ inférieur à 2.

5.5 Application à l'injection d'un jet liquide

Le second cas à être étudié est un jet de carburant basé sur la configuration ECN (Engine Combustion Network) Spray A [204]. Le domaine d'étude mesure $445 \times 445 \times 1780$ μm^3 et la simulation est réalisée sur un maillage $256 \times 256 \times 1024$. L'injecteur a un diamètre $D_{inj} = 89.4$ μm. Pour la condition limite d'injection, les vitesses sont obtenues à partir du plan de sortie d'une simulation LES résolue aux parois pour capturer les couches limites turbulentes qui vont interagir avec la surface. Elle

est basée sur l'étude de Anez et al. [198].Toutes les autres conditions aux limites sont des conditions de sortie libre. Les paramètres physiques sont reportés dans la Table 5.1.

Table 5.1 – Paramètres physiques du cas ECN Spray A original avec $We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$.

ρ_g $(kg \cdot m^{-3})$	ρ_l $(kg \cdot m^{-3})$	μ_g $(kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1})$	μ_l $(kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1})$	σ $N \cdot m^{-1}$
22.8	713	1.8343×10^{-5}	7.248×10^{-4}	0.0243

Ces paramètres correspondent au cas Spray A original c'est-à-dire avec des nombres de Weber et de Reynolds élevés ($We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$). Les relations utilisées pour ces nombres sont :

$$We = \frac{\rho_g U_{max}^2 D_g}{\sigma} \tag{5.2}$$

$$Re = \frac{\rho_l U_{max} D_{inj}}{\mu_l} \tag{5.3}$$

avec $D_g = \Delta x$ comme dans Ménard et al. [95]. Ce cas ne peut pas être décrit précisément en DNS en raison de ces nombres trop élevés, mais il peut être intéressant de voir le degré de précision en utilisant les paramètres originaux ainsi que le comportement de nos critères de résolution.

Sur la figure 5.11 à gauche, l'impossibilité de représenter ce cas avec ce niveau de résolution de maillage via une approche de type DNS est montrée. La majorité des gouttes présentent un faible IRQ et sont donc faiblement résolues. De plus, la surface du jet central est très plissée, présentant des zones avec de fortes courbures qui ne sont pas bien résolues. Les régions sous-résolues représentent, pour ce cas, 33.5% de la surface totale ($IRQ < 1$ sur la figure 5.12-gauche) et 26% de la surface est moyennement résolue ($1 < IRQ < 2$ sur la figure 5.12-droite). La PDF de l'IRQ moyennée en temps (Figure 5.13-haut-gauche) confirme l'observation précédente avec un pic autour de $IRQ = 0.6$ et un faible écart-type. En effet, la probabilité tend rapidement vers 0 pour des valeurs d'IRQ dans la partie résolue qui ne sont pas très élevées. De plus, la probabilité tend également vers 0 quand l'IRQ tend vers 0, ce qui montre bien le comportement du schéma numérique CLSVOF qui prévient les courbures très élevées afin de limiter les situations susceptibles d'engendrer des

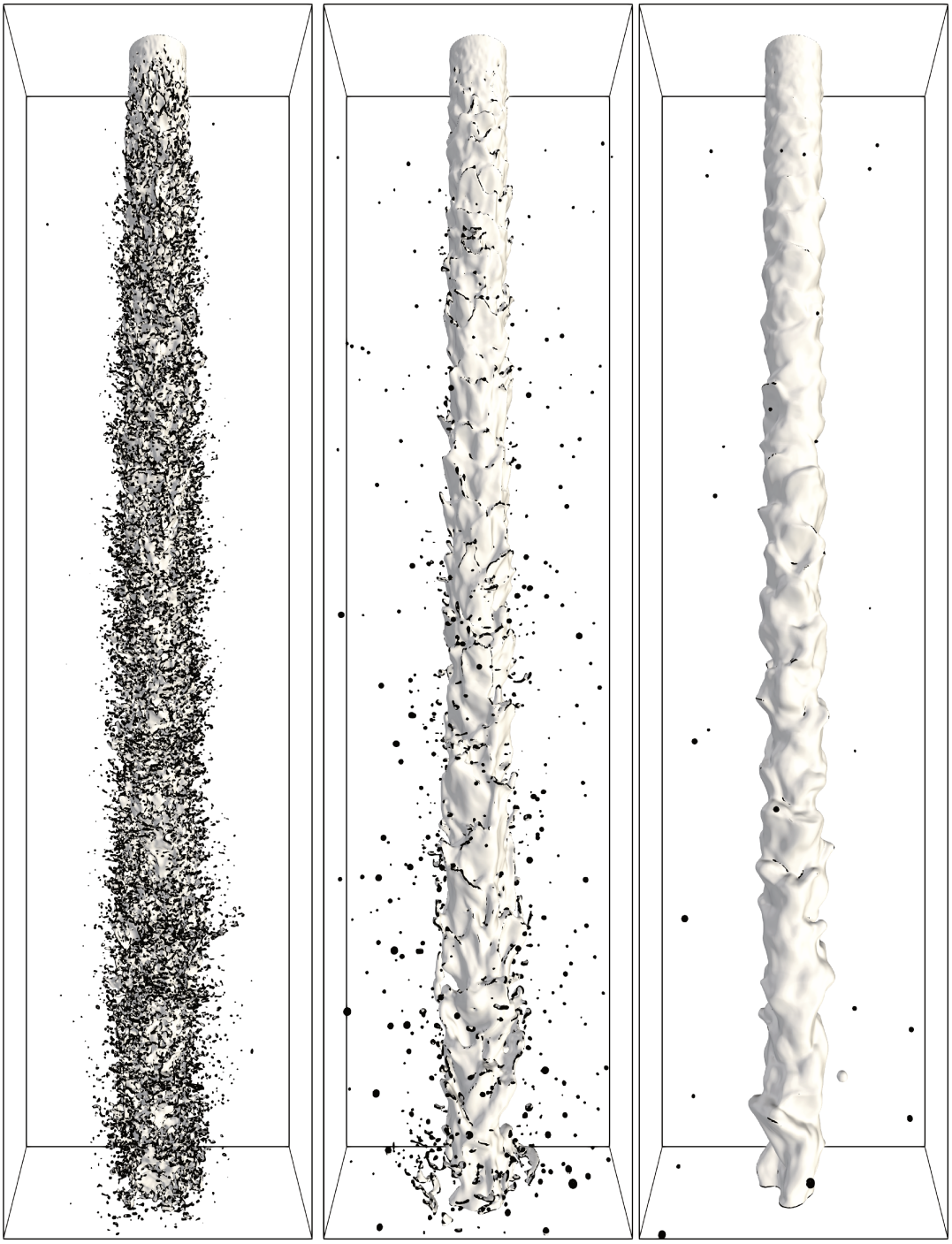


Figure 5.11 – Représentation de la surface du cas Spray A à $t = 1.6 \times 10^{-5}$ s. Les surfaces en noir ont un IRQ inférieur à 2. Gauche : cas Spray A original ($We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$) ; centre : bas Weber et bas Reynolds ($We \simeq 10$ et $Re \simeq 5795$) ; droite : cas le mieux résolu ($We \simeq 2.5$ et $Re \simeq 5795$).

pertes de masse. Comme attendu, réaliser une simulation précise pour cette gamme de hauts nombres de Weber et de Reynolds est une tâche difficile demandant une résolution du maillage bien plus grande.

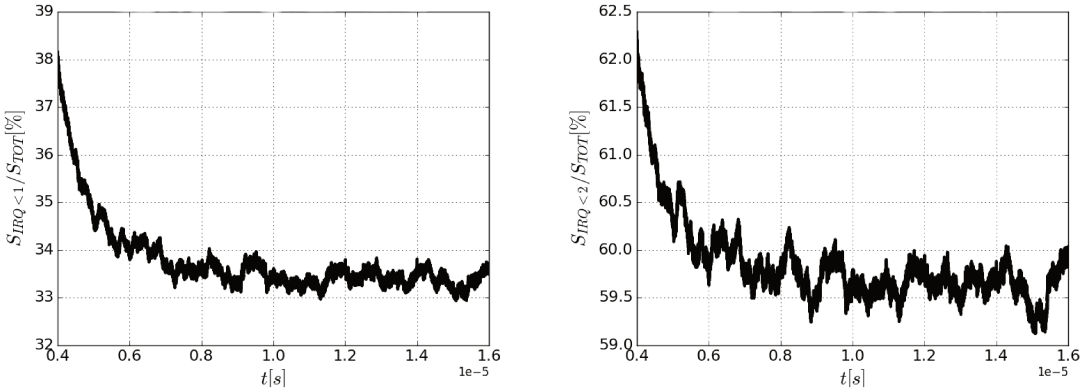


Figure 5.12 – Évolution temporelle du pourcentage de surface avec un IRQ inférieur à 1 (gauche) et inférieur à 2 (droite) pour le cas Spray A original ($We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$).

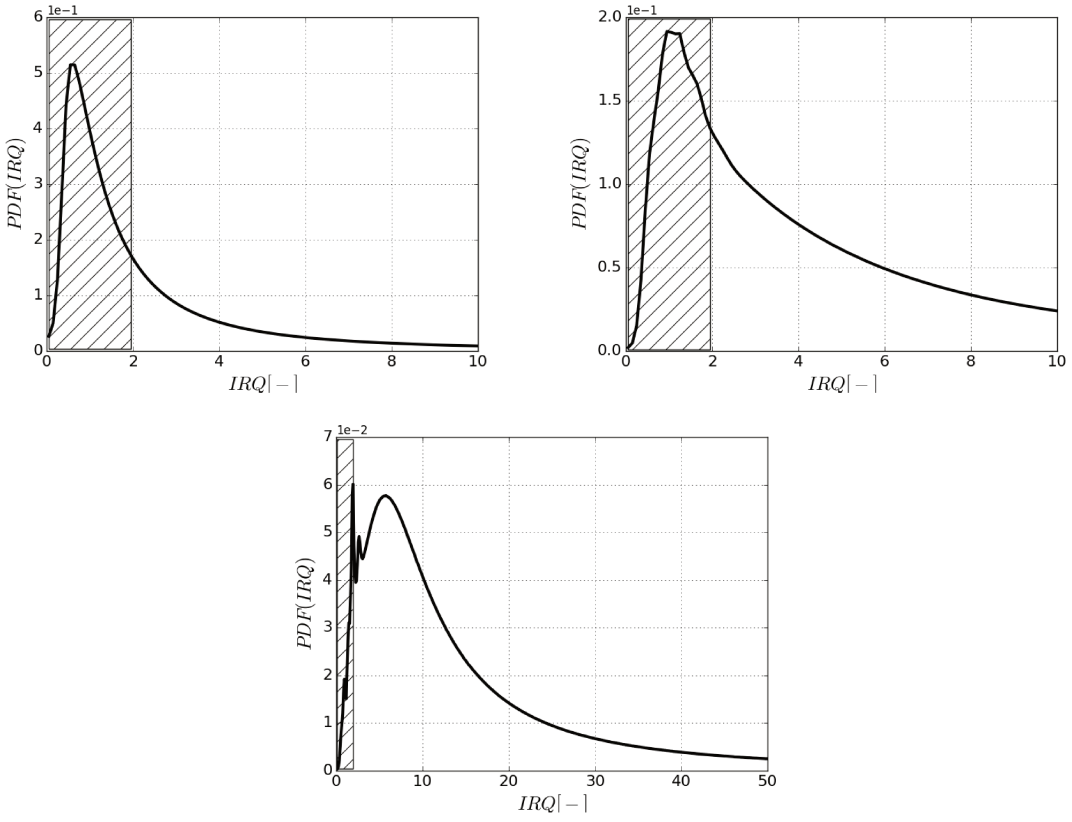


Figure 5.13 – PDF de l'IRQ moyennée en temps pour le cas Spray A original ($We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$) (en haut à gauche), le bas Weber et bas Reynolds ($We \simeq 10$ et $Re \simeq 5795$) (en haut à droite) et le cas le mieux résolu ($We \simeq 2.5$ et $Re \simeq 5795$) (bas). La partie hachurée correspond à la zone sous-résolue ($IRQ < 2$).

La plupart des simulations directes de jet sont effectuées avec des nombres de Weber et de Reynolds plus faibles. Un autre cas a donc été réalisé avec les nombres $We \simeq 10$ et $Re \simeq 5795$ similaires à ceux utilisés dans Ménard et al. [95] afin d'avoir une meilleure résolution. Les nouveaux paramètres sont reportés dans la Table 5.2. Les conditions d'injection restent cependant les mêmes pour capturer principalement l'effet sur l'interface des paramètres physiques des fluides qui sont supposés limiter sa déformation.

Table 5.2 – Paramètres physiques du cas ECN Spray A avec $We \simeq 10$ et $Re \simeq 5795$.

ρ_g $(kg \cdot m^{-3})$	ρ_l $(kg \cdot m^{-3})$	μ_g $(kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1})$	μ_l $(kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1})$	σ $N \cdot m^{-1}$
22.8	713	1.8343×10^{-5}	$\mathbf{8.8 \times 10^{-3}}$	**2.54**

Ce type de simulation est représenté sur la figure 5.11 au centre. Dans ce cas, la majorité des surfaces sous-résolues viennent des petites gouttes à la périphérie du jet central. Cependant, ici, beaucoup moins de régions non résolues (coloriées en noir pour $IRQ_\kappa < 2$) sont visibles. En raison du faible niveau de turbulence (faible nombre de Reynolds) et d'une force de tension de surface élevée (faible nombre de Weber), les instabilités avec une haute fréquence spatiale sont amorties et les structures développées ont une courbure plus faible permettant une meilleure résolution. Le pourcentage de surfaces moyennement résolues est un peu plus faible que celui du cas original mais les surfaces sous-résolues sont fortement réduites (Figure 5.14). Elles correspondent à seulement 8% de la surface totale. La PDF de l'IRQ (Figure 5.13-haut-droite) est décalée vers des valeurs plus grandes d'IRQ et le pic est autour de 1.1. Des valeurs plus élevées d'IRQ (et donc des valeurs plus faibles de courbures) sont davantage représentées et le profil de la PDF est plus étalé que dans le cas précédent. Même si ce cas, avec des nombres de Weber et de Reynolds plus faibles, est évidemment mieux résolu que le cas original, il y a toujours 23% de la surface totale qui a un IRQ inférieur à 2, illustrant une simulation peu précise. Cependant, il est plus difficile d'être bien résolu dans ce type de simulation où la turbulence injectée a une gamme plus large d'échelles, et donc atomise davantage le jet, que d'autres études avec des paramètres similaires mais où la turbulence injectée artificiellement est principalement composée de grandes échelles (voir Ménard et al. [95] par exemple). En effet, ici, l'injection de turbulence provient d'une simulation LES réalisée à l'intérieur d'un injecteur où de larges tourbillons sont présents au centre et où de petits tourbil-

lons sont générés proche paroi au niveau de la couche limite perturbant ainsi l'interface.

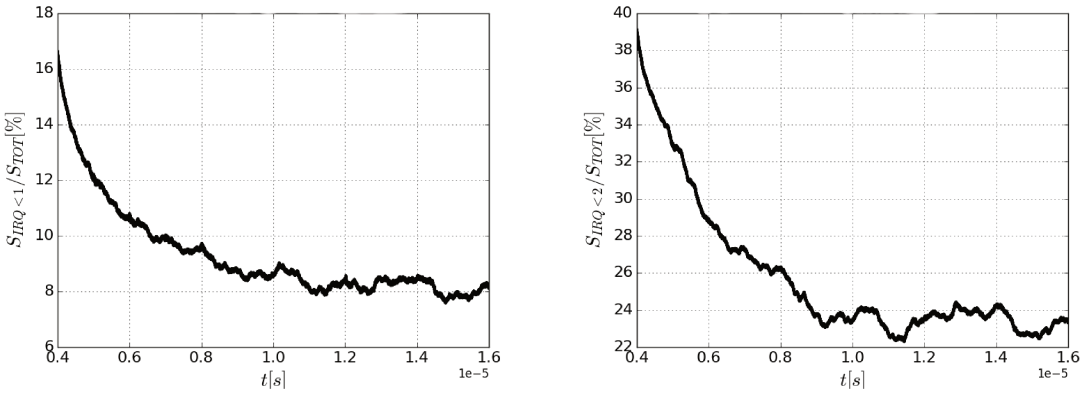


Figure 5.14 – Évolution temporelle du pourcentage de surface avec un IRQ inférieur à 1 (gauche) et inférieur à 2 (droite) pour le cas Spray A avec un bas Weber et un bas Reynolds ($We \simeq 10$ et $Re \simeq 5795$).

Enfin, dans le but de voir quels paramètres doivent être choisis pour avoir une simulation précise du jet, un troisième cas a été réalisé avec cette fois-ci $We \simeq 2.5$ et $Re \simeq 5795$. Les paramètres sont reportés dans la Table 5.3.

Table 5.3 – Paramètres physiques du cas ECN Spray A idéal avec $We \simeq 2.5$ et $Re \simeq 5795$.

ρ_g $(kg \cdot m^{-3})$	ρ_l $(kg \cdot m^{-3})$	μ_g $(kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1})$	μ_l $(kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1})$	σ $N \cdot m^{-1}$
22.8	713	1.8343×10^{-5}	$\mathbf{8.8 \times 10^{-3}}$	**10.16**

Seulement une petite fraction de la surface totale est maintenant sous-résolue (Figure 5.11-droite). Même si la simulation met plus de temps pour atteindre l'état stationnaire (Figure 5.15), les résultats obtenus montrent que le pourcentage moyen de surfaces ayant un IRQ inférieur à 2 est autour de 2% et seulement 0.4% de la surface est vraiment sous-résolue. Aussi, le pic de la PDF de l'IRQ est maintenant dans la partie résolue du graphe et se situe à une valeur $IRQ = 6$ (Figure 5.13-bas). Ce troisième cas est donc bien résolu. Cependant, pour atteindre ce niveau de précision, des paramètres éloignés des conditions expérimentales initiales doivent être choisis et le jet ne produit que peu de gouttes lors de son atomisation pour la zone simulée.

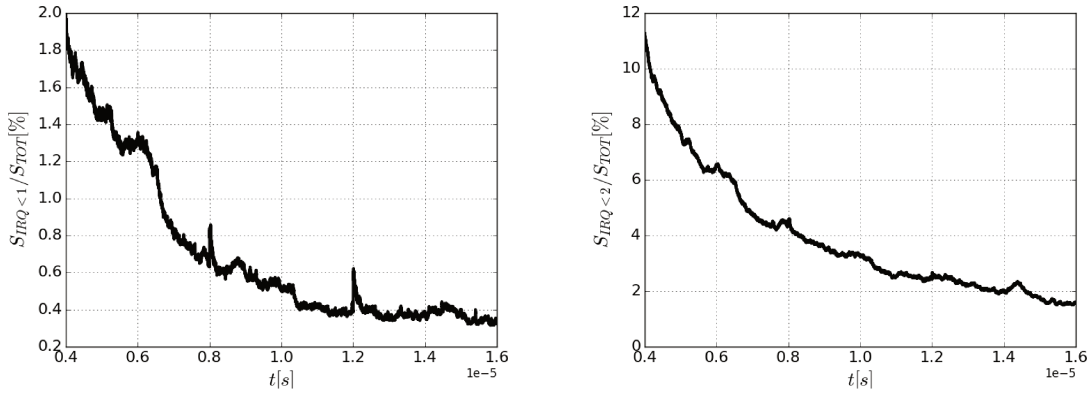


Figure 5.15 – Évolution temporelle du pourcentage de surface avec un IRQ inférieur à 1 (gauche) et inférieur à 2 (droite) pour le cas Spray A le mieux résolu ($We \simeq 2.5$ et $Re \simeq 5795$).

5.6 Conclusion

Une estimation d'un nouveau critère de résolution d'interface appelé IRQ est effectuée et est utilisée dans deux configurations : une THI et une injection de jet liquide. La configuration THI sert de référence pour voir quel degré de précision peut être attendu sur un cas bien résolu. Sur ce cas, il est montré que, même pour un cas résolu, il y a toujours des régions sous-résolues en raison d'événements comme les ruptures qui ne peuvent pas être capturés. Ensuite, la configuration Spray A met en avant le fait qu'une bonne résolution est difficilement atteignable avec des paramètres réalistes et que de faibles nombres de Weber et de Reynolds sont requis pour capturer les principales caractéristiques de l'écoulement.

Pour la configuration Spray A originale, même si le niveau de précision est bas, des résultats satisfaisant peuvent néanmoins être obtenus comparativement à l'expérience [204]. Le code de calcul utilisé permet une bonne conservation de la masse et une distribution de la masse adéquate est visible sur le plan 2D de la PMD (Projected Mass Density Figure 5.16) qui représente l'intégrale de la masse dans une direction radiale au jet. Cependant, la distribution des surfaces et des courbures n'est pas bien résolue. Cela est visible sur le profil de la fraction volumique moyenne (Figure 5.17) où le profil au centre est bien capturé mais où le profil à la périphérie est sous-estimé. La dispersion du spray vers l'extérieur étant limité dans notre cas,les extrémités du profil ne sont pas capturées. Cela confirme le fait que les grosses échelles sont bien représentées alors que les petites sont moins bien capturées. À

l'intérieur du jet, il y a moins d'effet car la dispersion est limité en zone dense par les collisions.

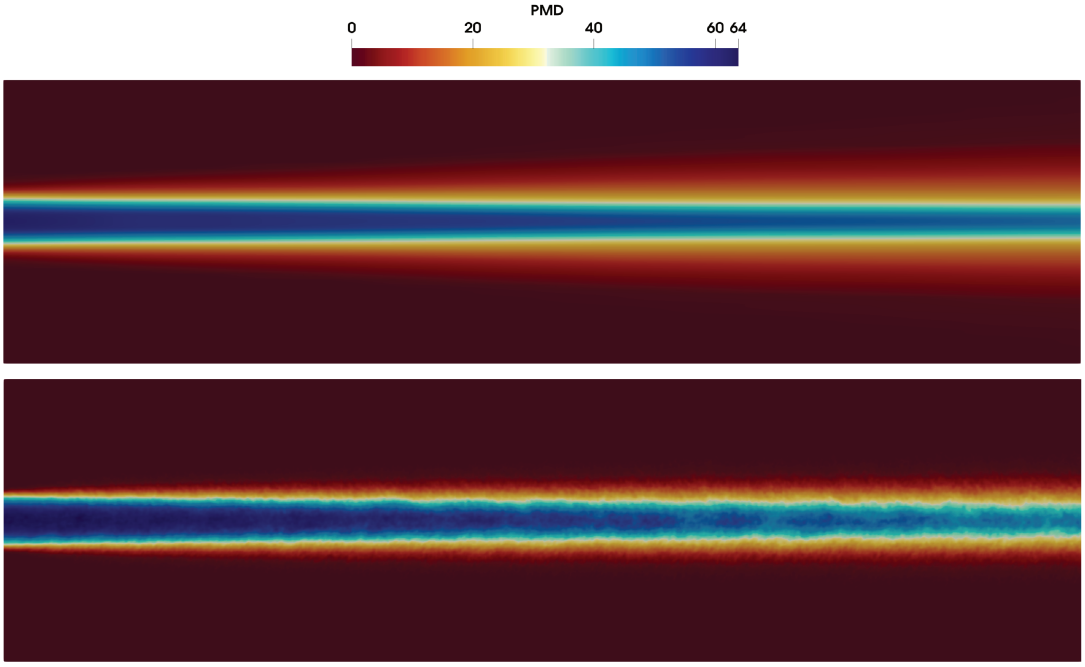


Figure 5.16 – Projected Mass Density (PMD en $\mu g \cdot mm^{-2}$) moyennée en temps pour le cas Spray A original ($We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$). En haut : résultats expérimentaux ; en bas : résultats DNS. Les résultats sont présentés entre 1.1 D_{inj} et 19.9 D_{inj}.

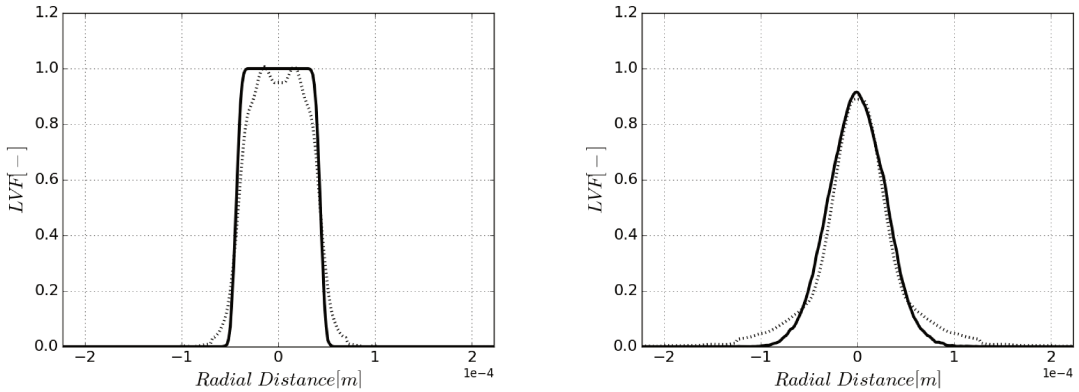


Figure 5.17 – Profils radiaux de la fraction volumique de liquide moyenne à 1.1 D_{inj} (gauche) et 19 D_{inj} (droite) pour le cas Spray A original ($We \simeq 1044$ et $Re \simeq 70356$). ——, résultats DNS; ·····, résultats expérimentaux.

Chap. 6 | Conclusion et perspectives

Conclusion générale

Le but de cette thèse est de développer un code pour simuler des écoulements compressibles avec changement de phase et étudier les phénomènes d'atomisation à partir de l'analyse des courbures locales de l'interface liquide-gaz. Cette analyse permet d'étendre le concept de distribution de tailles de gouttes à une distribution ds courbures, et de définir un critère de résolution pour les simulations numériques directes d'atomisation.

Tout d'abord, un état de l'art des différentes méthodes existantes pour le suivi d'interface, pour les écoulements compressibles et pour le changement de phase a été réalisé.

Dans un premier temps, les avantages et les inconvénients des méthodes de suivi d'interface ont été présentés ainsi que leurs évolutions par rapport à leur formulation d'origine. Deux groupes ont émergé : les méthodes lagrangiennes et les méthodes eulériennes. Pour le premier groupe, des particules sont employées pour repérer l'interface. Ces particules peuvent se répartir en surface ou en volume représentant ainsi, soit directement l'interface, soit les différentes phases présentes dans le domaine. Différentes améliorations ont été réalisées notamment au niveau de la conservation de la quantité de mouvement et du moment cinétique ainsi qu'au niveau du traitement des conditions aux limites. Celles-ci nécessitent une implémentation particulière en raison des particules qui ne sont pas fixes. Cependant, malgré certaines tentatives pour y remédier, la répartition des particules reste un problème ; celles-ci peuvent s'accumuler dans certaines zones. De plus, la prise en compte des changements de topologie de l'interface ainsi que l'obtention de ses propriétés géométriques comme la courbure et la normale ne sont pas directes.

Ensuite, concernant le second groupe (les méthodes eulériennes), deux méthodes sont souvent utilisées : les méthodes VOF et Level Set. Les méthodes VOF permettent une bonne conservation de la masse mais la représentation de l'interface, que ce soit par des méthodes SLIC ou PLIC, n'est pas aussi satisfaisante qu'en Level Set. Pour les méthodes Level Set, c'est l'opposé : l'interface est représentée précisément mais la méthode souffre d'une mauvaise conservation de la masse. En effet, les réinitialisations effectuées, afin de conserver la propriété de fonction distance à l'interface, peuvent déformer l'interface et la déplacer ne garantissant pas une masse conservée.

Par conséquent, des couplages ont été développés pour tirer avantage des différentes méthodes. Un couplage entre la méthode Level Set et une méthode lagrangienne permet ainsi une représentation précise de l'interface avec une bonne conservation de la masse. Mais le coût de calcul peut devenir un problème lors de configurations complexes avec d'importantes déformations de l'interface. Le couplage qui nous a, alors, semblé le plus adapté est celui entre les méthodes VOF et Level Set.

Dans un deuxième temps, une liste des différents solveurs utilisés pour la résolution des écoulements compressibles et du changement de phase a été effectuée. Pour la simulation d'écoulements compressibles, des solveurs de Riemann sont fréquemment utilisés ; essentiellement dans le contexte des ondes de choc (écoulements à fort nombre de Mach). Cependant ces solveurs ne tendent pas vers la limite incompressible et présente une dissipation numérique importante quand les écoulements ont un faible nombre de Mach. Cependant, de récents travaux ont permis d'améliorer la description des écoulements à bas Mach, étendant ainsi la gamme des nombres de Mach pouvant être simulée avec ce formalisme. Un inconvénient majeur de ce type de solveurs est la résolution explicite des équations ayant un fort impact sur le temps de calcul, à cause d'un pas de temps fixé sur la vitesse du son.

D'autres formalismes, permettant la résolution des écoulements compressibles, ont également été étudiés : il s'agit des solveurs implicites ou semi-implicites. Certains auteurs emploient des méthodes Low-Mach pour les écoulements faiblement

compressibles, en considérant le liquide comme étant incompressible et faisant varier la masse volumique dans le milieu gazeux. On remarque que ces méthodes peuvent rapidement devenir coûteuse en temps de calcul dans les cas où le nombre d'inclusions gazeuses dans le liquide s'avère être important. D'autres emploient des méthodes basées sur la pression avec une méthode de projection pour découpler la vitesse et la pression. Ces méthodes résolvent une équation pour la pression et utilisent une équation d'état pour le calcul de la masse volumique.

Concernant le calcul de l'évaporation, la majorité des codes utilisent un formalisme incompressible dans la littérature. Ceux utilisant un formalisme compressible sont soit des solveurs de Riemann soit des méthodes à densité variable. Cependant, à notre connaissance, aucun code n'emploie de méthode basée sur la pression avec un couplage de méthodes de suivi d'interface comme la méthode CLSVOF. Cette dernière approche a été choisie dans cette thèse.

Le troisième chapitre se focalise sur le développement d'un code compressible avec changement de phase. Après une présentation du code de calcul utilisé et de ses spécificités, l'extension du code dans un formalisme compressible a été abordée. Elle s'est déroulé en plusieurs phases. Tout d'abord, pour le suivi d'interface, une méthode CLSVOF a été choisie et a consisté à ajouter un terme supplémentaire dans l'équation de la fraction volumique de liquide pour prendre en compte la compressibilité. Un autre terme est également apparu en présence de changement de phase. Ensuite, chaque terme a été explicité dans le développement de la méthode de projection. La conversion de l'algorithme de Rudman en compressible a été réalisé en prenant des masses volumiques locales dans le calcul des flux de masse et de quantité de mouvement. De plus, les masses volumiques de chaque phase n'étant plus constantes, une attention particulière a dû être portée sur le sens des flux afin de prendre en compte les masses volumiques adéquates. Concernant le tenseur visqueux, des termes supplémentaires sont également apparus en raison de la divergence non nulle de la vitesse. Enfin, le solveur de Poisson a également dû être adapté en compressible notamment au niveau des conditions limites.

Les résultats sur les différents cas de validation abordés ont démontré la bonne implémentation de la méthode ainsi que sa précision et sa robustesse. En effet, le

cas du choc diphasique a permis de mettre en avant la capacité du code à gérer de forts ratios de pression et de masse volumique. Celui de la colonne d'eau oscillante a, quant à lui, montré la précision de la méthode avec une bonne conservation de la masse ainsi qu'une excellente convergence en maillage. Enfin, le code a également été validé sur une configuration plus complexe de type THI où une première tentative de représentation de l'évaporation a été effectuée avec succès bien qu'utilisant un taux d'évaporation constant. Néanmoins, ces premiers résultats satisfaisants ont permis de poursuivre en testant l'évaporation avec un taux plus réaliste basé sur la thermique.

La seconde partie de ce chapitre a été dédiée à l'implémentation des équations de l'énergie et de la fraction massique afin de permettre une évaporation plus réaliste. Les différentes équations ont été développées dans leur formalisme compressible et les modifications qu'elles apportent ont été ajoutées au code. L'implémentation de l'équation de l'énergie a ensuite été validée sur une configuration théorique simple considérant uniquement le phénomène de diffusion. Enfin, une configuration simulant une évaporation d'une goutte a été réalisée. Elle a montré des résultats satisfaisant concernant la régression de l'interface et la diffusion de la température. Cependant, un problème de conservation de la masse a été observé montrant une anomalie au niveau du transfert de masse au moment de l'évaporation.

Puis, le quatrième volet de cette thèse s'est orienté sur l'étude de l'atomisation d'un jet liquide par l'intermédiaire des courbures locales de l'interface liquide-gaz. Une définition étendue de la distribution de tailles de gouttes, basée sur ces courbures, a d'abord été introduite permettant d'avoir une définition valide tout au long du processus d'atomisation et ne dépendant pas de la présence effective de gouttes. Puis, la méthode de calcul des courbures principales au sein du code ARCHER incompressible a été présentée. Deux configurations simples ont été réalisées pour analyser comment la rupture d'un jet liquide et une collision de gouttes peuvent être décrit en terme de distribution des courbures. Plusieurs représentations ont été étudiées afin de déterminer la plus adaptée à la description des phénomènes d'atomisation. Les différentes zones des diagrammes ont été également analysées pour pouvoir repérer la topologie des structures pouvant apparaître lors de la simulation.

Ensuite, afin de représenter tout le processus d'atomisation, plusieurs configura-

tions de type THI ont été effectuées à différents pourcentages de fraction volumique de liquide ; allant de 90%, pour la représentation de la zone dense, à 1%, pour la représentation de la phase dispersée. Le cas 1% a ainsi permis de mieux voir le lien entre la distribution des courbures et la distribution de tailles de gouttes. En effet, retrouver une distribution en nombre et en volume des gouttes est possible à travers la distribution de la courbure moyenne H. Les cas ayant une fraction volumique de liquide plus élevée ont montré la validité de cette distribution des courbures en présence de structures non sphériques. De plus, une étude statistique sur toute la durée de la simulation et pour différentes fractions volumiques de liquide a permis d'observer l'évolution des structures liquides ainsi que la transition entre la phase dense et la phase dispersée d'un spray. Cette dernière étant visible sur les PDF moyennée en temps de la courbure moyenne H.

L'exploitation des données de courbure s'est poursuivie avec le développement d'un critère pour la qualité de résolution de l'interface. Le code ARCHER incompressible a également été utilisé pour cette étude. Tout d'abord, les concepts de résolution d'interface et de plus petite échelle d'un écoulement diphasique turbulent sont évoqués montrant qu'aucune définition rigoureuse n'existe sur l'estimation de cette échelle. De plus, toutes les échelles des plissements de l'interface ne peuvent pas être capturées. Ainsi, il a été indiqué que pour juger de la qualité d'une simulation, la conservation de quantités prédéfinies comme la masse ou la quantité de surface doit être vérifiée. Le moyen généralement employé pour évaluer la conservation de ces grandeurs est une étude de convergence en maillage. Cette étude a été réalisée, pour les paramètres précédents, sur une configuration THI montrant une convergence à partir d'un maillage 128^3. Une étude de convergence a aussi été effectuée sur la distribution des courbures confirmant ce résultat. Cependant, une convergence en maillage est difficilement réalisable sur des configurations plus complexes que la THI telles que l'injection d'un jet liquide. Ainsi, un autre critère a dû être développé pour juger de la qualité d'une simulation.

Les critères déjà existants ont été rappelés. Il a ensuite été montré que les critères basés sur la quantité de surfaces résolues et sur le gradient de fraction volumique de liquide n'étaient pas pertinents dans notre formalisme. En effet, pour le premier, une estimation de la densité d'interface non-résolue est nécessaire et, pour le

second, l'interface est supposée avoir une certaine épaisseur, ce qui est incompatible avec le profil "marche" imposé par la méthode de reconstruction d'interface. L'échelle des plissements de l'interface étant directement reliée aux courbures locales, un critère basé sur les courbures a été choisi. Ce critère a été appliqué sur la configuration THI précédente afin de confirmer l'étude de convergence en maillage réalisée. Il a ensuite été appliqué sur différentes configurations d'injection d'un jet liquide soulignant le fait que, dans des conditions réalistes, une bonne résolution est difficilement atteignable pour ce cas. De faibles nombres de Weber et de Reynolds sont donc requis pour ces configurations. Néanmoins, il a été reporté que certaines informations, comme le profil de fraction volumique moyenne ou la PMD, restent accessibles même pour les cas les plus contraignants.

Perspectives

Les premiers résultats concernant l'évaporation dans un formalisme compressible, bien qu'étant encourageants sur certains points, requièrent d'être améliorés notamment sur la conservation de la masse. Une étude plus approfondie sur les origines de la perte de masse, et plus particulièrement sur le transfert de masse au moment de l'évaporation, devra être effectuée. De plus, une possible amélioration du couplage entre les équations de l'énergie et de la fraction massique de vapeur avec le reste du code pourra être envisagée ; notamment celui entre la température et la masse volumique.

Une fois l'évaporation fonctionnelle, il sera possible d'étudier les phénomènes de vaporisation dans une configuration simplifiée d'atomisation turbulente telle que la configuration THI diphasique. Des propositions de nouveaux modèles d'évaporation ainsi qu'une comparaison entre les résultats DNS et les modèles existants pourront donc être menées.

Ensuite, au niveau des conditions aux limites, des conditions de sorties libres pour les écoulements compressibles devront être implémentées. Une des difficultés majeures pour ce type de conditions aux limites est le traitement des ondes acoustiques. En effet, ces dernières peuvent se réfléchir sur les bords du domaine de calcul. Une des solutions possibles est l'implémentation des conditions NSCBC (Navier Stokes Characteristic Boundary Conditions) qui consistent à effectuer une approximation de

l'avancement des variables sur les bords du domaine à partir des équations d'évolution.

Concernant la distribution des courbures, cette étude contribue à améliorer les informations disponibles pour les modèles d'atomisation. Par exemple, dans le modèle ELSA, au niveau de la transition entre les descriptions eulérienne et lagrangienne, la distribution des courbures pourra permettre d'injecter des particules avec une certaine distribution des diamètres au lieu d'avoir un pic de Dirac au niveau d'un seul diamètre. De plus, la distribution des courbures permet d'étendre la définition de la distribution de tailles de gouttes d'un spray et ainsi d'avoir une description continue du phénomène d'atomisation. Des équations de transport pour les courbures moyenne H et de Gauss G pourront être développées et modélisées, en se basant par exemple sur les travaux de Essadki et al. [188]. Ces équations nécessitant la connaissance des vitesses au niveau de l'interface, une solution pour implémenter ces vitesses serait d'utiliser le transport de la fonction distance et notamment l'iso-surface 0.

Enfin, le critère développé pour évaluer la résolution d'une interface complexe pourra être utilisé afin de déterminer le degré de précision d'une simulation sans nécessairement passer par une étude de convergence en maillage. De plus, l'identification des zones sous-résolues pourrait permettre d'utiliser des schémas numériques adaptés de manière locale, au niveau de ces zones, qui seraient trop coûteux pour une utilisation globale. Un article sur ce critère est en cours de rédaction.

Références

[1] Serdilab.

[2] J. C. Lasheras and E. J. Hopfinger. Liquid Jet Instability and Atomization in a Coaxial Gas Stream. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 32(1):275–308, January 2000.

[3] P. Marmottant and E. Villermaux. On spray formation. *Journal of Fluid Mechanics*, 498:73–111, January 2004.

[4] Jean-Philippe Matas, Antoine Delon, and Alain Cartellier. Shear instability of an axisymmetric air–water coaxial jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 843:575–600, May 2018.

[5] Wyoming Analytical Laboratories, Inc.

[6] HELICES et PROPULSION.

[7] H. Bredmose, G. N. Bullock, and A. J. Hogg. Violent breaking wave impacts. Part 3. Effects of scale and aeration. *Journal of Fluid Mechanics*, 765:82–113, February 2015.

[8] Richard Saurel and Rémi Abgrall. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2):425–467, April 1999.

[9] Nele Moelans' website :: Research :: Phase Field Method.

[10] Rémi Abgrall. How to Prevent Pressure Oscillations in Multicomponent Flow Calculations: A Quasi Conservative Approach. *Journal of Computational Physics*, 125(1):150–160, April 1996.

[11] Smadar Karni. Multicomponent Flow Calculations by a Consistent Primitive Algorithm. *Journal of Computational Physics*, 112(1):31–43, May 1994.

[12] Keh-Ming Shyue. An Efficient Shock-Capturing Algorithm for Compressible Multicomponent Problems. *Journal of Computational Physics*, 142(1):208–242, May 1998.

[13] Grégoire Allaire, Sébastien Clerc, and Samuel Kokh. A Five-Equation Model for the Simulation of Interfaces between Compressible Fluids. *Journal of Computational Physics*, 181(2):577–616, September 2002.

[14] Angelo Murrone and Hervé Guillard. A five equation reduced model for compressible two phase flow problems. *Journal of Computational Physics*, 202(2):664–698, January 2005.

[15] Ratnesh K. Shukla, Carlos Pantano, and Jonathan B. Freund. An interface capturing method for the simulation of multi-phase compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 229(19):7411–7439, September 2010.

[16] Arpit Tiwari, Jonathan B. Freund, and Carlos Pantano. A diffuse interface model with immiscibility preservation. *Journal of Computational Physics*, 252:290–309, November 2013.

[17] Keh-Ming Shyue and Feng Xiao. An Eulerian interface sharpening algorithm for compressible two-phase flow: The algebraic THINC approach. *Journal of Computational Physics*, 268:326–354, July 2014.

[18] Florence Drui, Adam Larat, Samuel Kokh, and Marc Massot. A hierarchy of simple hyperbolic two-fluid models for bubbly flows. July 2016.

[19] Richard Saurel and Carlos Pantano. Diffuse-Interface Capturing Methods for Compressible Two-Phase Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 50(1):105–130, January 2018.

[20] Guillaume Perigaud and Richard Saurel. A compressible flow model with capillary effects. *Journal of Computational Physics*, 209(1):139–178, October 2005.

[21] Alexandre Chiapolino, Richard Saurel, and Boniface Nkonga. Sharpening diffuse interfaces with compressible fluids on unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 340:389–417, July 2017.

[22] N. Favrie, S. L. Gavrilyuk, and R. Saurel. Solid–fluid diffuse interface model in cases of extreme deformations. *Journal of Computational Physics*, 228(16):6037–6077, September 2009.

[23] Fabien Petitpas, Jacques Massoni, Richard Saurel, Emmanuel Lapebie, and Laurent Munier. Diffuse interface model for high speed cavitating underwater systems. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(8):747–759, August 2009.

[24] Richard Saurel, Pierre Boivin, and Olivier Le Métayer. A general formulation for cavitating, boiling and evaporating flows. *Computers & Fluids*, 128:53–64, April 2016.

[25] R. A. Gingold and J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Mon Not R Astron Soc*, 181(3):375–389, December 1977.

[26] L. B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *The Astronomical Journal*, 82:1013–1024, December 1977.

[27] Research Projects.

[28] Kannan Suresh Kumar, Todd E Sparks, and Frank Liou. PARAMETER DETERMINATION AND EXPERIMENTAL VALIDATION OF A WIRE FEED ADDITIVE MANUFACTURING MODEL. page 25.

[29] R. A Gingold and J. J Monaghan. Kernel estimates as a basis for general particle methods in hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 46(3):429–453, June 1982.

[30] J. J. Monaghan. Simulating Free Surface Flows with SPH. *Journal of Computational Physics*, 110(2):399–406, February 1994.

[31] Sharen J Cummins and Murray Rudman. An SPH Projection Method. *Journal of Computational Physics*, 152(2):584–607, July 1999.

[32] X. Y. Hu and N. A. Adams. An incompressible multi-phase SPH method. *Journal of Computational Physics*, 227(1):264–278, November 2007.

[33] Prapanch Nair and Gaurav Tomar. Volume conservation issues in incompressible smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 297:689–699, September 2015.

[34] Damien Violeau and Agnès Leroy. On the maximum time step in weakly compressible SPH. *Journal of Computational Physics*, 256:388–415, January 2014.

[35] Prapanch Nair and Gaurav Tomar. Simulations of gas-liquid compressible-incompressible systems using SPH. *Computers & Fluids*, 179:301–308, January 2019.

[36] Jonathan R. Clausen. Entropically damped form of artificial compressibility for explicit simulation of incompressible flow. *Physical Review E*, 87(1), January 2013.

[37] Prabhu Ramachandran and Kunal Puri. Entropically damped artificial compressibility for SPH. *Computers & Fluids*, 179:579–594, January 2019.

[38] Andrea Colagrossi and Maurizio Landrini. Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 191(2):448–475, November 2003.

[39] M. Landrini, A. Colagrossi, M. Greco, and M. P. Tulin. The fluid mechanics of splashing bow waves on ships: A hybrid BEM–SPH analysis. *Ocean Engineering*, 53:111–127, October 2012.

[40] L. Chiron, M. de Leffe, G. Oger, and D. Le Touzé. Fast and accurate SPH modelling of 3d complex wall boundaries in viscous and non viscous flows. *Computer Physics Communications*, 234:93–111, January 2019.

[41] S. Adami, X. Y. Hu, and N. A. Adams. A transport-velocity formulation for smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 241:292–307, May 2013.

[42] Chi Zhang, Xiangyu Y. Hu, and Nikolaus A. Adams. A generalized transport-velocity formulation for smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 337:216–232, May 2017.

[43] 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(23):8844–8867, November 2010.

[44] Salih Ozen Unverdi and Grétar Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100(1):25–37, May 1992.

[45] 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 Multiphase Flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2):708–759, May 2001.

[46] Damir Juric and Grétar Tryggvason. Computations of boiling flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 24(3):387–410, April 1998.

[47] Grétar Tryggvason and Jiacai Lu. Direct Numerical Simulations of Flows with Phase Change. *Procedia IUTAM*, 15:2–13, January 2015.

[48] Ruben Scardovelli and Stéphane Zaleski. DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF FREE-SURFACE AND INTERFACIAL FLOW. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31(1):567–603, January 1999.

[49] Yixin Lin, G. R. Liu, and Guangyu Wang. A particle-based free surface detection method and its application to the surface tension effects simulation in smoothed particle hydrodynamics (SPH). *Journal of Computational Physics*, 383:196–206, April 2019.

[50] C. W Hirt and B. D Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39(1):201–225, January 1981.

[51] Volume-of-Fluid-Methode – Wikipedia.

[52] W. F. Noh and Paul Woodward. SLIC (Simple Line Interface Calculation). In Adriaan I. van de Vooren and Pieter J. Zandbergen, editors, *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics June 28 – July 2, 1976 Twente University, Enschede*, Lecture Notes in Physics, pages 330–340. Springer Berlin Heidelberg, 1976.

[53] Alexandre Joel Chorin. Flame advection and propagation algorithms. *Journal of Computational Physics*, 35(1):1–11, March 1980.

[54] James Glimm. Solutions in the large for nonlinear hyperbolic systems of equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 18(4):697–715, November 1965.

[55] William Rider and Douglas Kothe. Stretching and tearing interface tracking methods. In *12th Computational Fluid Dynamics Conference*, San Diego,CA,U.S.A., June 1995. American Institute of Aeronautics and Astronautics.

[56] R.B. DeBar. Fundamentals of the KRAKEN code. [Eulerian hydrodynamics code for compressible nonviscous flow of several fluids in two-dimensional (axially symmetric) region]. Technical Report UCID-17366, 7227630, March 1974.

[57] David L Youngs. An interface tracking method for a 3d Eulerian hydrodynamics code. *Atomic Weapons Research Establishment (AWRE) Technical Report*, 44(92):35, 1984.

[58] N Ashgriz and J. Y Poo. FLAIR: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction. *Journal of Computational Physics*, 93(2):449–468, April 1991.

[59] William J. Rider and Douglas B. Kothe. Reconstructing Volume Tracking. *Journal of Computational Physics*, 141(2):112–152, April 1998.

[60] James Edward Pilliod and Elbridge Gerry Puckett. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *Journal of Computational Physics*, 199(2):465–502, September 2004.

[61] Elbridge Gerry Puckett, Ann S. Almgren, John B. Bell, Daniel L. Marcus, and William J. Rider. A High-Order Projection Method for Tracking Fluid Interfaces in Variable Density Incompressible Flows. *Journal of Computational Physics*, 130(2):269–282, January 1997.

[62] E. Aulisa, S. Manservisi, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional Cartesian geometry. *Journal of Computational Physics*, 225(2):2301–2319, August 2007.

[63] Bruno Lafaurie, Carlo Nardone, Ruben Scardovelli, Stéphane Zaleski, and Gianluigi Zanetti. Modelling Merging and Fragmentation in Multiphase Flows with SURFER. *Journal of Computational Physics*, 113(1):134–147, July 1994.

[64] Denis Gueyffier, Jie Li, Ali Nadim, Ruben Scardovelli, and Stéphane Zaleski. Volume-of-Fluid Interface Tracking with Smoothed Surface Stress Methods for Three-Dimensional Flows. *Journal of Computational Physics*, 152(2):423–456, July 1999.

[65] Kensuke Yokoi. Efficient implementation of THINC scheme: A simple and practical smoothed VOF algorithm. *Journal of Computational Physics*, 226(2):1985–2002, October 2007.

[66] Stéphane Vincent, Jean-Paul Caltagirone, Pierre Lubin, and Tseheno Nirina Randrianarivelo. An adaptative augmented Lagrangian method for three-dimensional multimaterial flows. *Computers & Fluids*, 33(10):1273–1289, December 2004.

[67] Stéphane Vincent, Arthur Sarthou, Jean-Paul Caltagirone, Fabien Sonilhac, Pierre Février, Christian Mignot, and Grégoire Pianet. Augmented Lagrangian and penalty methods for the simulation of two-phase flows interacting with moving solids. Application to hydroplaning flows interacting with real tire tread patterns. *Journal of Computational Physics*, 230(4):956–983, February 2011.

[68] G. Pianet, S. Vincent, J. Leboi, J. P. Caltagirone, and M. Anderhuber. Simulating compressible gas bubbles with a smooth volume tracking 1-Fluid method. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(4):273–283, April 2010.

[69] G. Bornia, A. Cervone, S. Manservisi, R. Scardovelli, and S. Zaleski. On the properties and limitations of the height function method in two-dimensional Cartesian geometry. *Journal of Computational Physics*, 230(4):851–862, February 2011.

[70] J-M. Martinez, X. Chesneau, and B. Zeghmati. A new curvature technique calculation for surface tension contribution in PLIC-VOF method. *Computational Mechanics*, 37(2):182–193, January 2006.

[71] Méthode du volume de fluide, December 2017. Page Version ID: 143291995.

[72] Stanley Osher and James A Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1):12–49, November 1988.

[73] Mark Sussman, Peter Smereka, and Stanley Osher. A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. *Journal of Computational Physics*, 114(1):146–159, September 1994.

[74] La méthode Level-Set.

[75] David Adalsteinsson and James A. Sethian. A Fast Level Set Method for Propagating Interfaces. *Journal of Computational Physics*, 118(2):269–277, May 1995.

[76] J. A. Sethian. Fast Marching Methods. *SIAM Review*, 41(2):199–235, January 1999.

[77] D Adalsteinsson and J. A Sethian. The Fast Construction of Extension Velocities in Level Set Methods. *Journal of Computational Physics*, 148(1):2–22, January 1999.

[78] Fernando Mut, Gustavo C. Buscaglia, and Enzo A. Dari. New Mass-Conserving Algorithm for Level Set Redistancing on Unstructured Meshes. *Journal of Applied Mechanics*, 73(6):1011, 2006.

[79] Elin Olsson and Gunilla Kreiss. A conservative level set method for two phase flow. *Journal of Computational Physics*, 210(1):225–246, November 2005.

[80] Elin Olsson, Gunilla Kreiss, and Sara Zahedi. A conservative level set method for two phase flow II. *Journal of Computational Physics*, 225(1):785–807, July 2007.

[81] Olivier Desjardins, Vincent Moureau, and Heinz Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics*, 227(18):8395–8416, September 2008.

[82] Mark Owkes and Olivier Desjardins. A discontinuous Galerkin conservative level set scheme for interface capturing in multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 249:275–302, September 2013.

[83] Jeremy O. McCaslin and Olivier Desjardins. A localized re-initialization equation for the conservative level set method. *Journal of Computational Physics*, 262:408–426, April 2014.

[84] Olivier Desjardins, Jeremy McCaslin, Mark Owkes, and Peter Brady. DIRECT NUMERICAL AND LARGE-EDDY SIMULATION OF PRIMARY ATOMIZATION IN COMPLEX GEOMETRIES. *Atomization and Sprays*, 23(11):1001–1048, 2013.

[85] Douglas Enright, Ronald Fedkiw, Joel Ferziger, and Ian Mitchell. A Hybrid Particle Level Set Method for Improved Interface Capturing. *Journal of Computational Physics*, 183(1):83–116, November 2002.

[86] Thibault Ménard. *Développement d'une méthode Level Set pour le suivi d'interface. Application de la rupture de jet liquide*. Rouen, January 2007.

[87] Douglas Enright, Frank Losasso, and Ronald Fedkiw. A fast and accurate semi-Lagrangian particle level set method. *Computers & Structures*, 83(6):479–490, February 2005.

[88] Daniel Gaudlitz and Nikolaus A. Adams. On improving mass-conservation properties of the hybrid particle-level-set method. *Computers & Fluids*, 37(10):1320–1331, December 2008.

[89] Zhaoyuan Wang, Jianming Yang, and Frederick Stern. An improved particle correction procedure for the particle level set method. *Journal of Computational Physics*, 228(16):5819–5837, September 2009.

[90] Philip J. Archer and Wei Bai. A new non-overlapping concept to improve the Hybrid Particle Level Set method in multi-phase fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 282:317–333, February 2015.

[91] S. Ianniello and A. Di Mascio. A self-adaptive oriented particles Level-Set method for tracking interfaces. *Journal of Computational Physics*, 229(4):1353–1380, February 2010.

[92] Magnus Vartdal and Arne Bøckmann. An oriented particle level set method based on surface coordinates. *Journal of Computational Physics*, 251:237–250, October 2013.

[93] P. Trontin, S. Vincent, J. L. Estivalezes, and J. P. Caltagirone. A subgrid computation of the curvature by a particle/level-set method. Application to a front-tracking/ghost-fluid method for incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 231(20):6990–7010, August 2012.

[94] Mark Sussman and Elbridge Gerry Puckett. A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid Method for Computing 3d and Axisymmetric Incompressible Two-Phase Flows. *Journal of Computational Physics*, 162(2):301–337, August 2000.

[95] 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 a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(5):510–524, May 2007.

[96] Xiaofeng Yang, Ashley J. James, John Lowengrub, Xiaoming Zheng, and Vittorio Cristini. An adaptive coupled level-set/volume-of-fluid interface capturing method for unstructured triangular grids. *Journal of Computational Physics*, 217(2):364–394, September 2006.

[97] B. M. Ningegowda and B. Premachandran. A Coupled Level Set and Volume of Fluid method with multi-directional advection algorithms for two-phase flows with and without phase change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 79:532–550, December 2014.

[98] Nikhil Kumar Singh and B. Premachandran. A coupled level set and volume of fluid method on unstructured grids for the direct numerical simulations of two-phase flows including phase change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 122:182–203, July 2018.

[99] Yucheng Zhao and Hamn-Ching Chen. A new coupled level set and volume-of-fluid method to capture free surface on an overset grid system. *International Journal of Multiphase Flow*, 90:144–155, April 2017.

[100] D. L. Sun and W. Q. Tao. A coupled volume-of-fluid and level set (VOSET) method for computing incompressible two-phase flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(4):645–655, January 2010.

[101] Yikai Li and Akira Umemura. Two-dimensional numerical investigation on the dynamics of ligament formation by Faraday instability. *International Journal of Multiphase Flow*, 60:64–75, April 2014.

[102] Dongxi Liu, Wenyong Tang, Jin Wang, Hongxiang Xue, and Kunpeng Wang. Modelling of liquid sloshing using CLSVOF method and very large eddy simulation. *Ocean Engineering*, 129:160–176, January 2017.

[103] Yali Guo, Lan Wei, Gangtao Liang, and Shengqiang Shen. Simulation of droplet impact on liquid film with CLSVOF. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 53:26–33, April 2014.

[104] J. Shinjo and A. Umemura. Simulation of liquid jet primary breakup: Dynamics of ligament and droplet formation. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(7):513–532, July 2010.

[105] P. L. Roe. Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes. *Journal of Computational Physics*, 135(2):250–258, August 1997.

[106] E. F. Toro, M. Spruce, and W. Speares. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver. *Shock Waves*, 4(1):25–34, July 1994.

[107] Eli Turkel. Preconditioned methods for solving the incompressible and low speed compressible equations. *Journal of Computational Physics*, 72(2):277–298, October 1987.

[108] An Advanced Simulation and Computing (ASC) Academic Strategic Alliances Program (ASAP) Center at The University of Chicago The Center for Astrophysical. - ppt download.

[109] Wurigen Bo and John W. Grove. A volume of fluid method based ghost fluid method for compressible multi-fluid flows. *Computers & Fluids*, 90(Supplement C):113–122, February 2014.

[110] Chi-Wang Shu and Stanley Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II. *Journal of Computational Physics*, 83(1):32–78, July 1989.

[111] Meng-Sing Liou and Christopher J. Steffen. A New Flux Splitting Scheme. *Journal of Computational Physics*, 107(1):23–39, July 1993.

[112] Meng-Sing Liou. A sequel to AUSM, Part II: AUSM+-up for all speeds. *Journal of Computational Physics*, 214(1):137–170, May 2006.

[113] Eiji Shima and Keiichi Kitamura. New approaches for computation of low Mach number flows. *Computers & Fluids*, 85(Supplement C):143–152, October 2013.

[114] Shingo Matsuyama. Performance of all-speed AUSM-family schemes for DNS of low Mach number turbulent channel flow. *Computers & Fluids*, 91(Supplement C):130–143, March 2014.

[115] Chung-Gang Li, Makoto Tsubokura, Wu-Shung Fu, Niclas Jansson, and Wei-Hsiang Wang. Compressible direct numerical simulation with a hybrid boundary condition of transitional phenomena in natural convection. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 90(Supplement C):654–664, November 2015.

[116] Jonathan M. Weiss and Wayne A. Smith. Preconditioning applied to variable and constant density flows. *AIAA Journal*, 33(11):2050–2057, November 1995.

[117] Stanley Osher and Fred Solomon. Upwind Difference Schemes for Hyperbolic Systems of Conservation Laws. *Mathematics of Computation*, 38(158):339–374, 1982.

[118] B. Koren, M. R. Lewis, E. H. van Brummelen, and B. van Leer. Riemann-Problem and Level-Set Approaches for Homentropic Two-Fluid Flow Computations. *Journal of Computational Physics*, 181(2):654–674, September 2002.

[119] Samet Y. Kadioglu, Mark Sussman, Stanley Osher, Joseph P. Wright, and Myungjoo Kang. A second order primitive preconditioner for solving all speed multi-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 209(2):477–503, November 2005.

[120] Francis H Harlow and Anthony A Amsden. A numerical fluid dynamics calculation method for all flow speeds. *Journal of Computational Physics*, 8(2):197–213, October 1971.

[121] S. T. Miller, H. Jasak, D. A. Boger, E. G. Paterson, and A. Nedungadi. A pressure-based, compressible, two-phase flow finite volume method for underwater explosions. *Computers & Fluids*, 87:132–143, October 2013.

[122] M. Boger, F. Jaegle, B. Weigand, and C. D. Munz. A pressure-based treatment for the direct numerical simulation of compressible multi-phase flow using multiple pressure variables. *Computers & Fluids*, 96(Supplement C):338–349, June 2014.

[123] Grégory Huber, Sébastien Tanguy, Jean-Christophe Béra, and Bruno Gilles. A time splitting projection scheme for compressible two-phase flows. Application to the interaction of bubbles with ultrasound waves. *Journal of Computational Physics*, 302:439–468, December 2015.

[124] Yucheng Hou and Krishnan Mahesh. A robust, colocated, implicit algorithm for direct numerical simulation of compressible, turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 205(1):205–221, May 2005.

[125] Ilyas Yilmaz, Firat Oguz Edis, and Hasan Saygin. Application of an all-speed implicit non-dissipative DNS algorithm to hydrodynamic instabilities. *Computers & Fluids*, 100(Supplement C):237–254, September 2014.

[126] Floraine Cordier, Pierre Degond, and Anela Kumbaro. An Asymptotic-Preserving all-speed scheme for the Euler and Navier–Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 231(17):5685–5704, July 2012.

[127] Christophe Chalons, Mathieu Girardin, and Samuel Kokh. An all-regime Lagrange-Projection like scheme for 2d homogeneous models for two-phase flows on unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 335:885–904, April 2017.

[128] Charles S Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of Computational Physics*, 25(3):220–252, November 1977.

[129] Jan Schlottke and Bernhard Weigand. Direct numerical simulation of evaporating droplets. *Journal of Computational Physics*, 227(10):5215–5237, May 2008.

[130] J. U Brackbill, D. B Kothe, and C Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2):335–354, June 1992.

[131] Sébastien Tanguy, Thibaut Ménard, and Alain Berlemont. A Level Set Method for vaporizing two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 221(2):837–853, February 2007.

[132] Frédéric Gibou, Liguo Chen, Duc Nguyen, and Sanjoy Banerjee. A level set based sharp interface method for the multiphase incompressible Navier–Stokes equations with phase change. *Journal of Computational Physics*, 222(2):536–555, March 2007.

[133] Lucia Rueda Villegas, Romain Alis, Mathieu Lepilliez, and Sébastien Tanguy. A Ghost Fluid/Level Set Method for boiling flows and liquid evaporation: Application to the Leidenfrost effect. *Journal of Computational Physics*, 316:789–813, July 2016.

[134] Min Chai, Kun Luo, Changxiao Shao, Haiou Wang, and Jianren Fan. A coupled vaporization model based on temperature/species gradients for detailed numerical simulations using conservative level set method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 127:743–760, December 2018.

[135] B. Duret, G. Luret, J. Reveillon, T. Menard, A. Berlemont, and F. X. Demoulin. DNS analysis of turbulent mixing in two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 40:93–105, April 2012.

[136] Zakaria Bouali, Benjamin Duret, François-Xavier Demoulin, and Arnaud Mura. DNS analysis of small-scale turbulence-scalar interactions in evaporating two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 85:326–335, October 2016.

[137] J López, J Hernández, P Gómez, and F Faura. A volume of fluid method based on multidimensional advection and spline interface reconstruction. *Journal of Computational Physics*, 195(2):718–742, April 2004.

[138] Yunliang Wang and Christopher J. Rutland. Direct numerical simulation of turbulent flow with evaporating droplets at high temperature. *Heat and Mass Transfer*, 42(12):1103–1110, October 2006.

[139] A. Bukhvostova, E. Russo, J. G. M. Kuerten, and B. J. Geurts. Comparison of DNS of compressible and incompressible turbulent droplet-laden heated channel flow with phase transition. *International Journal of Multiphase Flow*, 63:68–81, July 2014.

[140] Changxiao Shao, Kun Luo, Min Chai, Haiou Wang, and Jianren Fan. A computational framework for interface-resolved DNS of simultaneous atomization, evaporation and combustion. *Journal of Computational Physics*, 371:751–778, October 2018.

[141] Ryan W. Houim and Kenneth K. Kuo. A ghost fluid method for compressible reacting flows with phase change. *Journal of Computational Physics*, 235:865–900, February 2013.

[142] Jaewon Lee and Gihun Son. A sharp-interface level-set method for compressible bubble growth with phase change. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 86:1–11, August 2017.

[143] Benjamin Duret. *Simulation numérique directe des écoulements liquide-gaz avec évaporation : application à l'atomisation*. thesis, Rouen, INSA, October 2013.

[144] B. Duret, R. Canu, J. Reveillon, and F. X. Demoulin. A pressure based method for vaporizing compressible two-phase flows with interface capturing approach. *International Journal of Multiphase Flow*, 108:42–50, November 2018.

[145] Alexandre Joel Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics*, 2(1):12–26, August 1967.

[146] G. Vaudor, T. Ménard, W. Aniszewski, M. Doring, and A. Berlemont. A consistent mass and momentum flux computation method for two phase flows. Application to atomization process. *Computers & Fluids*, 152:204–216, July 2017.

[147] M. Sussman, K. M. Smith, M. Y. Hussaini, M. Ohta, and R. Zhi-Wei. A sharp interface method for incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 221(2):469–505, February 2007.

[148] Benjamin Lalanne, Lucia Rueda Villegas, Sébastien Tanguy, and Frédéric Risso. On the computation of viscous terms for incompressible two-phase flows with Level Set/Ghost Fluid Method. *Journal of Computational Physics*, 301:289–307, November 2015.

[149] Ronald P Fedkiw, Tariq Aslam, Barry Merriman, and Stanley Osher. A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method). *Journal of Computational Physics*, 152(2):457–492, July 1999.

[150] Francis H. Harlow and J. Eddie Welch. Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface. *Physics of Fluids*, 8(12):2182, 1965.

[151] Xu-Dong Liu, Stanley Osher, and Tony Chan. Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes. *Journal of Computational Physics*, 115(1):200–212, November 1994.

[152] Guang-Shan Jiang and Chi-Wang Shu. Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes. *Journal of Computational Physics*, 126(1):202–228, June 1996.

[153] Murray Rudman. A volume-tracking method for incompressible multifluid flows with large density variations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 28(2):357–378, August 1998.

[154] Geoffroy Vaudor. *Atomisation assistée par un cisaillement de l'écoulement gazeux. Développement et validation*. thesis, Rouen, January 2015.

[155] Chi-Wang Shu. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. Technical Report NASA CR-97-206253 ICASE Report No. 97-65, Institute for Computer Applications in Science and Engineering, November 1997.

[156] Osamu Tatebe. *The Multigrid Preconditioned Conjugate Gradient Method*. 1993.

[157] Jun Zhang. Acceleration of five-point red-black Gauss-Seidel in multigrid for Poisson equation. *Applied Mathematics and Computation*, 80(1):73–93, November 1996.

[158] Myungjoo Kang, Ronald P. Fedkiw, and Xu-Dong Liu. A Boundary Condition Capturing Method for Multiphase Incompressible Flow. *Journal of Scientific Computing*, 15(3):323–360, September 2000.

[159] X. Y. Hu and B. C. Khoo. An interface interaction method for compressible multifluids. *Journal of Computational Physics*, 198(1):35–64, July 2004.

[160] Nipun Kwatra, Jonathan Su, Jón T. Grétarsson, and Ronald Fedkiw. A method for avoiding the acoustic time step restriction in compressible flow. *Journal of Computational Physics*, 228(11):4146–4161, June 2009.

[161] Thierry Poinsot and Denis Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards Inc., 2005.

[162] Xavier Calimez. *Simulation a petite échelle par une méthode VOF d'écoulements diphasiques réactifs*. PhD Thesis, 1998.

[163] Tariq D. Aslam. A partial differential equation approach to multidimensional extrapolation. *Journal of Computational Physics*, 193(1):349–355, January 2004.

[164] Mikhael Gorokhovski and Marcus Herrmann. Modeling Primary Atomization. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 40(1):343–366, 2008.

[165] Francois-Xavier Demoulin, Julien Reveillon, B. Duret, Zakaria Bouali, P. Desjonqueres, and Thibaut Menard. Toward using direct numerical simulation to improve primary break-up modeling. *Atomization and Sprays*, 23(11):957–980, 2013.

[166] E. Babinsky and P. E. Sojka. Modeling drop size distributions. *Progress in energy and combustion science*, 28(4):303–329, 2002.

[167] F. A. Williams. Spray Combustion and Atomization. *Physics of Fluids*, 1(6):541, 1958.

[168] S. de Chaisemartin, L. Fréret, D. Kah, F. Laurent, R. O. Fox, J. Reveillon, and M. Massot. Eulerian models for turbulent spray combustion with polydispersity and droplet crossing. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(6):438–448, June 2009.

[169] S. Rigopoulos. Population balance modelling of polydispersed particles in reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 36(4):412–443, August 2010.

[170] D. Kah, O. Emre, Q. H. Tran, S. de Chaisemartin, S. Jay, F. Laurent, and M. Massot. High order moment method for polydisperse evaporating sprays with mesh movement: Application to internal combustion engines. *International Journal of Multiphase Flow*, 71:38–65, May 2015.

[171] François Doisneau, Marco Arienti, and Joseph C. Oefelein. A semi-Lagrangian transport method for kinetic problems with application to dense-to-dilute polydisperse reacting spray flows. *Journal of Computational Physics*, 329:48–72, January 2017.

[172] A. Sibra, J. Dupays, A. Murrone, F. Laurent, and M. Massot. Simulation of reactive polydisperse sprays strongly coupled to unsteady flows in solid rocket motors: Efficient strategy using Eulerian Multi-Fluid methods. *Journal of Computational Physics*, 339:210–246, June 2017.

[173] Mohamed Essadki, Stephane de Chaisemartin, Frédérique Laurent, and Marc Massot. High Order Moment Model for Polydisperse Evaporating Sprays towards Interfacial Geometry Description. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 78(4):2003–2027, January 2018.

[174] Macole Sabat, Aymeric Vié, Adam Larat, and Marc Massot. Statistical description of turbulent particle-laden flows in the very dilute regime using the anisotropic Gaussian moment method. *International Journal of Multiphase Flow*, 112:243–257, March 2019.

[175] Baptiste Déjean, Pierre Berthoumieu, and Pierre Gajan. Experimental study on the influence of liquid and air boundary conditions on a planar air-blasted liquid sheet, Part I: Liquid and air thicknesses. *International Journal of Multiphase Flow*, 79:202–213, March 2016.

[176] K. Warncke, S. Gepperth, B. Sauer, A. Sadiki, J. Janicka, R. Koch, and H. J. Bauer. Experimental and numerical investigation of the primary breakup of an airblasted liquid sheet. *International Journal of Multiphase Flow*, 91:208–224, May 2017.

[177] S. Navarro-Martinez. Large eddy simulation of spray atomization with a probability density function method. *International Journal of Multiphase Flow*, 63:11–22, July 2014.

[178] Christophe Dumouchel, Wojciech Aniszewski, Trung-Thanh Vu, and Thibaut Ménard. Multi-scale analysis of simulated capillary instability. *International Journal of Multiphase Flow*, 92:181–192, June 2017.

[179] Rodney O. Fox. Large-Eddy-Simulation Tools for Multiphase Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 44(1):47–76, 2012.

[180] S?bastien Tanguy and Alain Berlemont. Application of a level set method for simulation of droplet collisions. *International Journal of Multiphase Flow*, 31(9):1015–1035, September 2005.

[181] R. Lebas, T. Menard, P. A. Beau, A. Berlemont, and F. X. Demoulin. Numerical simulation of primary break-up and atomization: DNS and modelling study. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(3):247–260, March 2009.

[182] J. Chesnel, Julien Reveillon, Thibaut Menard, and Francois-Xavier Demoulin. Large eddy simulation of liquid jet atomization. *Atomization and Sprays*, 21(9):711–736, 2011.

[183] Romain Canu, Stefano Puggelli, Mohamed Essadki, Benjamin Duret, Thibaut Menard, Marc Massot, Julien Reveillon, and F. X. Demoulin. Where does the droplet size distribution come from? *International Journal of Multiphase Flow*, 107:230–245, October 2018.

[184] Ariane Vallet and Roland Borghi. Modélisation eulerienne de l'atomisation d'un jet liquide. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series IIB-Mechanics-Physics-Astronomy*, 327(10):1015–1020, 1999.

[185] A. Vallet, A. A. Burluka, and R. Borghi. Development of a Eulerian model for the "Atomization" of a liquid jet. *Atomization and Sprays*, 11(6):619–642, 2001.

[186] Mohamed Essadki, St?phane de Chaisemartin, Marc Massot, Fr?d?rique Laurent, Adam Larat, and St?phane Jay. Adaptive Mesh Refinement and High Order Geometrical Moment Method for the Simulation of Polydisperse Evaporating Sprays. *Oil & Gas Science and Technology ? Revue d?IFP Energies nouvelles*, 71(5):61, September 2016.

[187] Gaussian curvature, June 2019. Page Version ID: 902438714.

[188] Mohamed Essadki, Florence Drui, Stéphane Chaisemartin, Adam Larat, Thibault Ménard, and Marc Massot. Statistical modeling of the gas-liquid interface using geometrical variables: toward a unified description of the disperse and separated phase flows. October 2017.

[189] Christophe Dumouchel, Thibaut Ménard, and Wojciech Aniszewski. Towards an interpretation of the scale diffusivity in liquid atomization process: An experimental approach. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 438:612–624, November 2015.

[190] F Thiesset, C Dumouchel, T Ménard, W Aniszewski, G Vaudor, A Berlemont, and Coria Umr. Probing liquid atomization using probability density functions, the volume-based scale distribution and differential geometry. page 9, 2019.

[191] Gordon Kindlmann, Ross Whitaker, Tolga Tasdizen, and Torsten Moller. Curvature-based transfer functions for direct volume rendering: Methods and applications. In *Visualization, 2003. VIS 2003. IEEE*, pages 513–520. IEEE, 2003.

[192] Mark Meyer, Mathieu Desbrun, Peter Schröder, Alan H. Barr, and others. Discrete differential-geometry operators for triangulated 2-manifolds. *Visualization and mathematics*, 3(2):52–58, 2002.

[193] G. Luret, T. Menard, G. Blokkeel, A. Berlemont, J. Réveillon, and F.X. Demoulin. Modeling collision outcome in moderately dense spray. *Journal of Atomization and Spray*, 2010.

[194] B. Duret, J. Reveillon, T. Menard, and F. X. Demoulin. Improving primary atomization modeling through DNS of two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 55:130–137, October 2013.

[195] Christophe Dumouchel. A New Formulation of the Maximum Entropy Formalism to Model Liquid Spray Drop-Size Distribution. *Particle & Particle Systems Characterization*, 23(6):468–479, December 2006.

[196] A. Déchelette, E. Babinsky, and P. E. Sojka. Drop Size Distributions. In *Handbook of Atomization and Sprays*, pages 479–495. Springer, Boston, MA, 2011.

[197] M. Herrmann. A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *Journal of Computational Physics*, 227(4):2674–2706, February 2008.

[198] J. Anez, A. Ahmed, N. Hecht, B. Duret, J. Reveillon, and F. X. Demoulin. Eulerian–Lagrangian spray atomization model coupled with interface capturing method for diesel injectors. *International Journal of Multiphase Flow*, October 2018.

[199] G. Luret, T. Ménard, A. Berlemont, J. Réveillon, and F. X. Demoulin. A DNS study ranging from dense to dilute turbulent two-phase flows. May 2010.

[200] Kent E. Wardle and Henry G. Weller. Hybrid Multiphase CFD Solver for Coupled Dispersed/Segregated Flows in Liquid-Liquid Extraction. *International Journal of Chemical Engineering*, 2013:1–13, 2013.

[201] B Duret, T Menard, J Reveillon, and F X Demoulin. A DNS database to improve atomization modeling. page 7, 2012.

[202] J. O. Hinze. Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersion processes. *AIChE Journal*, 1(3):289–295, September 1955.

[203] Henry G Weller, G Tabor, Hrvoje Jasak, and C Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in physics*, 12(6):620–631, 1998.

[204] Engine Combustion Network | Near-nozzle mixture derived from x-ray radiography.