



HAL
open science

Simulation et modélisation multi-échelle d'écoulements diphasiques

Mathilde Tavares

► **To cite this version:**

Mathilde Tavares. Simulation et modélisation multi-échelle d'écoulements diphasiques. Génie mécanique [physics.class-ph]. Université Paris-Est, 2019. Français. NNT: 2019PESC2021 . tel-02482419v1

HAL Id: tel-02482419

<https://theses.hal.science/tel-02482419v1>

Submitted on 18 Feb 2020 (v1), last revised 18 Feb 2020 (v2)

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.



ÉCOLE DOCTORALE : SCIENCE, INGÉNIERIE ET ENVIRONNEMENT

THÈSE

Pour obtenir le grade de
Docteur de l'**Université Paris-Est**

SPÉCIALITÉ : MÉCANIQUE

par **Mathilde Tavares**

**Simulation et modélisation multi-échelle d'écoulements
diphasiques**

Présentée et soutenue le *06 juin 2019*

Devant le jury composé de :

Alain Berlemont	Directeur de recherche CNRS	CORIA - Univ. Rouen	Président du jury
Eric Chénier	Maître de conférences	MSME - UPEM	Co-directeur de thèse
Olivier Desjardins	Associate professor	CTFLab - Univ. Cornell	Rapporteur
Jean-Luc Estivalèzes	Ingénieur de recherche	ONERA	Examineur
Dominique Legendre	Professeur d'université	IMFT - INPT Toulouse	Rapporteur
Taraneh Sayadi	Chargée de recherche CNRS	D'Alembert - Sorbonne Univ.	Examinatrice
Stéphane Vincent	Professeur d'université	MSME - UPEM	Directeur de thèse

Remerciements

Je voudrais remercier tout d'abord mes rapporteurs, Dominique Legendre et Olivier Desjardins, d'avoir pris le soin de lire attentivement mon manuscrit de thèse. Toutes leurs remarques m'ont permis de mettre en lumière certains points faibles et de donner plus de perspectives à ces travaux de thèse. Je remercie également Taraneh Sayadi, Jean-Luc Estivalèzes et Alain Berlemont d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Je tiens à remercier également mes directeurs de thèse Eric Chénier et Stéphane Vincent qui ont eu suffisamment confiance en moi pour se lancer dans cette aventure et diriger cette thèse. Leur apport dans tous les domaines a été considérable pour moi et m'a permis de progresser et d'acquérir une culture des écoulements polyphasiques mais aussi du numérique de manière générale. Je n'oublie pas les grandes qualités humaines de mes deux responsables de thèse qui m'ont permis de mener ces travaux de recherche jusqu'au bout dans une bonne ambiance de travail.

Je remercie également tous les membres de l'équipe TCM du laboratoire MSME qui m'ont vu arpenter les couloirs du plateau durant ces années. Je tiens à adresser une spéciale dédicace à mes collègues de "souffrance", les doctorants, Samy, Désir-André, Georges, Syphax et Mohamed, arrivés un peu plus tard, mais sans qui cette thèse n'aurait certainement pas eu la même saveur.

J'ai également une pensée pour les belles rencontres de l'association Danses à l'UPEM. Toutes nos sorties salsa et nos nombreuses activités m'ont permis de décompresser tout au long des ces années de thèse et d'avoir tous les jours un souffle nouveau pour affronter les soucis quotidiens de la programmation.

Enfin un grand merci à ma famille, en particulier mes grands-parents, restés au Sénégal, mais sans qui je n'aurai même pas foulé le sol de l'université un jour et ma tante qui m'a soutenue dès mon arrivée en France. J'ai une petite pensée pour mes sœurs de cœur, Gogo, Nora, Khady... de Dakar à Paris, toujours là pour moi et toute la "team de Dakar (DEM)" que je ne pourrai citer au risque d'épuiser

des dizaines de pages mais à qui je pense très fort.

Résumé

Plusieurs problèmes qui nous entourent peuvent être associés à des écoulements diphasiques à phases séparées. A grande échelle, c'est le cas des problèmes environnementaux comme le déferlement des vagues. A plus petite échelle, on retrouve ces écoulements dans le domaine des transports terrestres, maritimes, aéronautiques et spatiaux avec l'injection de carburant dans les moteurs. Avec une grande gamme de taille d'interfaces pouvant aller du mètre au nanomètre, ces problèmes sont clairement multi-échelles. La compréhension et la caractérisation de ces écoulements sont d'une importance capitale mais sont rendues difficiles car les expériences restent limitées pour ces problèmes et il en est de même pour les études théoriques. La modélisation et la simulation de ces écoulements constituent des approches d'investigation alternatives intéressantes pour décrire les champs hydrodynamiques et les topologies des interfaces. Bien que d'importants progrès sur la simulation des écoulements diphasiques multi-échelles aient été réalisés, capturer simultanément les petites et grandes échelles de l'interface tout en représentant avec précision les modifications topologiques demeure une difficulté majeure. Ce travail s'articule autour de l'élaboration d'une modélisation unifiée prenant en compte toutes les échelles interfaciales, de la phase séparée à l'échelle des petites interfaces dispersées, afin de répondre aux besoins des problèmes réels. Dans ce contexte, une méthode de front-tracking a été développée pour un suivi précis des interfaces. Cette méthode a été validée à l'aide de plusieurs configurations analytiques et des comparaisons effectuées avec plusieurs méthodes de suivi d'interfaces de la littérature. Ces tests ont permis de montrer que la méthode de front-tracking développée dans ce travail était l'une des plus précises. Une méthode originale d'interpolation des vitesses basée sur le saut des propriétés physiques à l'interface a été construite et validée. La méthode de suivi d'interface front-tracking a été intégrée au modèle à 1-fluide, développée dans le code maison FUGU, résolvant les écoulements de Navier-Stokes incompressibles diphasiques. Un choix différent d'implémentation du terme capillaire, basé sur le calcul direct de la contribution capillaire dans une cellule coupée par l'interface, a montré des résultats intéressants avec la réduction des courants parasites dans le cas de la bulle statique. Nous présentons également dans ce travail un modèle à 2-fluides discontinu couplé à la méthode

de front-tracking développée, discrétisé sur une grille cartésienne structurée afin d'augmenter la précision de résolution des écoulements diphasiques à phases séparées.

Abstract

Several problems surrounding us can be associated with immiscible two-phase flows. On large scales, this is the case of environmental problems such as wave breaking. On smaller scales, we find these flows in the field of land transport, maritime, aeronautical and space such as fuel injection in engines. With a wide range of interface sizes ranging from meter to nanometer, these problems are clearly multi-scale. The understanding and the characterization of these flows are of paramount importance but are made difficult because the experiments remain limited for these problems and it is the same for the theoretical studies. Modeling and simulation of these flows is then an interesting alternative. Although important progresses have been made on the simulation of multiscale two-phase flows, simultaneously capturing small and large scales of the interface while accurately representing topological changes remains a major difficulty. This work is based on the development of a unified modeling taking into account all the interfacial scales, from the separated phase to the scale of the small dispersed interfaces in order to answer the needs of the real problems. In this context, a front-tracking method has been developed for precise monitoring of interfaces. This method has been validated using several analytical configurations and comparisons made with several interface tracking methods of the literature. These tests have shown that the front-tracking method developed in this work was one of the most precise. A method of interpolation of velocities, based on the jump of the physical properties at the interface, has been constructed and validated. The interface tracking method has been integrated into the 1-fluid model, developed in the FUGU house code, solving incompressible two-phase Navier-Stokes flows. A different choice of implementation of the capillary term, based on the direct calculation of the capillary contribution in a cell cut by the interface, has shown interesting results with the reduction of parasitic currents in the case of the static bubble. We also present in this work a discontinuous 2-fluid model coupled to the developed front-tracking method, discretized on a structured Cartesian grid in order to increase the resolution accuracy of two-phase separated flows.

Table des matières

Introduction générale	1
1 Etat de l'art sur la simulation d'écoulements diphasiques	5
1.1 Quels écoulements diphasiques?	5
1.2 Quel modèle physique initial pour les écoulements?	10
1.2.1 Équations de conservation de la masse et du mouvement	10
1.2.2 Hypothèses sur les fluides et les écoulements	12
1.3 Quels modèles pour les écoulements diphasiques?	12
1.3.1 Modèle à 2-fluides discontinu pour les interfaces résolues	14
1.3.2 Modèle à 1-fluide continu pour les interfaces résolues	16
1.3.3 Modèle à 2-fluides dispersé	20
1.3.4 Modèle mixte Euler/Lagrange dispersé	21
1.4 Quelles méthodes numériques pour le suivi d'interface?	23
1.4.1 Méthode VOF(volume of fluid)	25
1.4.2 Méthode Level-Set	29
1.4.3 Méthode couplée VOF/Level-Set (CLSVOF)	30
1.4.4 Méthode de Front-tracking	30
1.5 Bilan et objectifs	31
2 La méthode Front-Tracking	36
2.1 Structure générale de la surface front-tracking 2D	39
2.2 Transport de la surface front-tracking	40
2.2.1 Discrétisation temporelle	41
2.2.2 Interpolation des vitesses des marqueurs lagrangiens	42
2.2.3 Validation : marqueur dans un écoulement rotationnel	45
2.3 Restructuration de la surface front-tracking (reseeding)	49
2.3.1 Procédure d'ajout d'éléments	51
2.3.2 Procédure de suppression d'éléments	52
2.4 Cas test : Déformation d'une interface circulaire par un tourbillon (Serpentin)	53
2.5 Conservation du volume	56

2.5.1	Méthode homothétique (HR) – FTR-PERM-HR	57
2.5.2	Méthode de correction basée sur la vitesse (VBC) – FTR- PERM-VBC	58
2.5.3	Commentaires sur les méthodes de conservation du volume .	60
2.6	Calcul des propriétés géométriques de l’interface	62
2.6.1	Méthode de Frenet	63
2.6.2	Méthode du cercle circonscrit	64
2.6.3	Validation : courbe statique	65
2.6.4	Validation : déformation d’un disque par un écoulement po- tentiel impactant une plaque plane	67
2.7	Rupture et coalescence de l’interface	69
2.7.1	Procédure générale	70
2.7.2	Procédure de Coalescence	71
2.7.3	Procédure de rupture	73
2.8	Fraction volumique et indicatrice de phase : fonction couleur C . . .	74
2.8.1	Méthode de ray-casting : calcul de la fonction couleur binaire	75
2.8.2	Calcul de la fraction volumique exacte C	76
2.9	Comparaison avec des méthodes de suivi d’interfaces de la littérature	77
2.10	Conclusions	86
3	Reconstruction de la vitesse de l’interface pour des écoulements diphases	88
3.1	Algorithme de reconstruction	89
3.1.1	Relations de saut	89
3.1.2	Fonction d’approximation linéaire pour les composantes de vitesse	90
3.1.3	Approximation de la pression sur les marqueurs	92
3.1.4	Reconstruction de la vitesse du marqueur m de l’interface .	92
3.2	Validation : écoulement axisymétrique autour d’une sphère fluide, solution de Hadamard-Rybczynski	94
3.3	Conclusions	96
4	Résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles dipha- siques avec le modèle à 1-fluide et la méthode FTR-JUMP pour le suivi d’interface	99
4.1	Résolution numérique des équations de Navier-Stokes	100
4.1.1	Modèle d’écoulement diphasique utilisé pour la résolution des équations de Navier-Stokes	100
4.1.2	Intégration temporelle	101
4.1.3	Maillage et volume de contrôle	104
4.1.4	Traitement des conditions aux limites	106

4.1.5	Approximation spatiale des termes de l'équation de quantité de mouvement	107
4.1.6	Résolution du système linéaire	111
4.2	Expression du terme capillaire de l'équation de quantité de mouvement	111
4.2.1	Présentation des méthodes	112
4.2.2	Courants parasites	115
4.2.3	Discretisation du terme capillaire	116
4.3	Tests de validation d'écoulements diphasiques	118
4.3.1	Goutte statique (test de Laplace)	118
4.3.2	Bulle ascendante	121
4.4	Conclusions	133
5	Mise en œuvre d'un modèle à 2 fluide sur une grille eulérienne fixe avec la méthode de suivi d'interface FTR-JUMP	136
5.1	Résolution numérique des équations de Navier-Stokes par une approche de type 2-fluide	137
5.1.1	Présentation du modèle	137
5.1.2	Discretisation sur un volume de contrôle composite	138
5.1.3	Intégration temporelle	140
5.1.4	Approximation spatiale des autres termes de l'équation de quantité de mouvement	141
5.2	Test de validation	149
5.2.1	Écoulement de Couette diphasique instationnaire	149
5.2.2	Écoulement de Poiseuille diphasique stationnaire	155
5.2.3	Goutte statique (test de Laplace)	157
5.3	Conclusions	158
	Conclusions générales et perspectives	160
A	Solution analytique de l'écoulement de couette diphasique instationnaire	165
B	Solution analytique de l'écoulement de Poiseuille diphasique	170
C	Article soumis à Communications in Computational Physics	173
D	Article publié dans Computers and Fluids	208
	Bibliographie	225

Table des figures

1	Jet d'eau dans un écoulement d'air avec sa cascade d'échelles d'interfaces [90].	2
1.1	Exemples d'écoulements à caractère diphasique à phase séparée, présentant des interfaces à des échelles spatiales variées	7
1.2	Représentation d'un écoulement diphasique, le comportement de l'écoulement est prédit à l'aide d'une l'approche directe avec une grille adaptative non structurée	16
1.3	Représentation d'un écoulement diphasique, le comportement de l'écoulement est prédit à l'aide d'une approche sur grille fixe structurée, χ est la fonction indicatrice de phase	17
1.4	Méthode VOF : interface réelle et fonction couleur associée	27
1.5	Méthode VOF : (a) classe de méthodes SLIC pour la reconstruction l'interface; (b) classe de méthodes PLIC	28
1.6	Principe de la méthode Level-Set : les iso-surfaces $\Phi = -0,9$, $\Phi = 0$ et $\Phi = 0,8$ sont représentées. L'interface correspond à $\Phi = 0$	29
1.7	Principe de la méthode Front-tracking : des marqueurs sans masse sont utilisés pour représenter l'interface.	31
1.8	Représentation de notre approche de modélisation d'écoulements diphasiques, le comportement de l'écoulement est prédit à l'aide d'une approche sur grille fixe structurée et la méthode front-tracking est utilisée pour suivre explicitement l'interface	33
2.1	Représentation d'un élément front-tracking ainsi que ses sommets et ses éléments voisins associés	40
2.2	Poids surfaciques utilisés dans la méthode bilinéaire pour interpoler la vitesse au niveau du marqueur m	43
2.3	Représentation de la position du marqueur dans un écoulement rotationnel (Eq. 2.11a-2.11b) : comparaison des méthodes bilinéaire, Peskin et PERM pour le calcul de la vitesse à la solution de référence.	50
2.4	Subdivision de l'élément e , Γ_{old} représente la surface front-tracking avant l'opération de reseeding et Γ_{new} la surface après le reseeding.	51

2.5	Suppression de l'élément e , Γ_{old} représente la surface front-tracking avant l'opération de reseeding et Γ_{new} la surface après le reseeding.	52
2.6	Déformation de l'interface circulaire dans un champ de vitesse tourbillonnaire (2.17a-2.17b). Solution initiale en noir, $t = 4 s$ en rouge avec le champ des vecteurs vitesses.	53
2.7	Évolution de l'erreur sur le volume au cours du temps pour la déformation de l'interface circulaire dans un champ de vitesse tourbillonnaire (Eqs. 2.17a-2.17b) pour la méthode front-tracking : (a) Erreur sur le volume en fonction du pas d'espace h quand la méthode PERM est utilisée pour le calcul de la vitesse des marqueurs ; (b) Erreur sur le volume pour le pas d'espace $h = 1/16 m$ quand les méthodes PERM, bilinéaire ou Peskin sont utilisées.	57
2.8	Homothétie barycentrique de la surface front-tracking (en noir configuration initiale, en bleu configuration après homothétie)	59
2.9	Temps de calcul CPU ($t = 4 s$) pour le cas de la déformation d'un cercle dans un tourbillon (Eq. 2.17a-2.17b) quand la conservation du volume est activée. Comparaison des méthodes FTR-PERM-HR et FTR-PERM-VBC	61
2.10	Notations pour l'estimation de la courbure locale et de la normale à l'aide de la méthode de Frenet	63
2.11	Points de l'interface lagrangienne utilisés pour l'estimation de la courbure en chaque marqueur avec la méthode du cercle circonscrit	64
2.12	Convergence de la courbure et de la normale pour l'approximation discrète de la courbe $f(x) = -x \sin(3\pi x^2/2)$, $x \in [0, 1]$, en fonction de la taille de grille constante $h = 1/N_{\mathcal{E}}$. La taille des éléments projetés sur l'axe x est égale à h	66
2.13	Convergence de la courbure et du vecteur normal pour une approximation discrète de la courbe $f(x) = -x \sin(3\pi x^2/2)$, $x \in [0, 1]$, en fonction de la taille de grille moyenne $h = 1/N_{\mathcal{E}}$. Les tailles des éléments projetés sur l'axe x sont successivement $h/2$ et $3h/2$	67
2.14	Déformation d'une interface initialement circulaire soumise à un écoulement potentiel (Eq. 2.31) : Interface initiale circulaire (bleu) et solutions à $t = 0.1 s$ (vert), $t = 0.3 s$ (noir) and $t = 0.75 s$ (rouge).	69
2.15	Variation des erreurs relatives sur la courbure pour différentes tailles d'éléments adimensionnée par la courbure locale κ pour différentes ellipses définies par leur aplatissement à différents instants de simulation ($t = 0.1 s$, $t = 0.3 s$ et $t = 0.75 s$) sur deux points particuliers : le nœud 1 situé à l'extrémité du grand axe et le nœud 2 situé à l'extrémité du petit axe, avec la méthode du cercle circonscrit.	70

2.16	Calcul de la distance critique avant d'entamer la procédure de rupture (le procédé est le même lorsqu'il y a coalescence)	72
2.17	Dédoublément des sommets : les sommets critiques (en rouges) sont dédoublés et reliés par des éléments additionnels superposés	73
2.18	Surface front-tracking obtenue après procédure complète de coalescence	73
2.19	Dédoublément des sommets : les sommets critiques sont dédoublés et reliés par des éléments additionnels superposés	74
2.20	Surface front-tracking obtenue après rupture, au bout de quelques itérations temporelles	74
2.21	Cellule eulérienne intersectée par trois surfaces lagrangiennes (bulle \mathcal{D}) distinctes	77
2.22	Calcul de la fraction volumique $C_{i,j}$: (a) Le calcul de la fraction volumique temporaire C_{temp} se fait dans le même sens que l'orientation de la surface, le volume est donc positif, $C_{i,j} = C_{i,j} + C_{temp}$. (b) Le calcul de C_{temp} se fait dans le sens contraire de l'orientation de la bulle considérée, le volume est négatif et $C_{i,j} = C_{i,j} + (1 - C_{temp})$. (c) Le calcul de C_{temp} se fait encore dans le sens contraire de l'orientation de la bulle, $C_{i,j} = C_{i,j} + (1 - C_{temp})$	79
2.23	Déformation d'un cercle par un champ de vitesse tourbillonnaire instationnaire (Eqs. 2.33a-2.33b) pour le pas d'espace $h = 1/32$ et la période $T = 8 s$, au temps $t = T/2$ (figure principale), $t = 0$ et $t = T$ (figure en haut à droite). Un zoom de l'interface à $t = 0$ et $t = T$ est représenté sur la figure 2.24a.	80
2.24	Comparaison de l'interface aux temps initial et final pour le cas de la déformation d'une interface circulaire par un tourbillon instationnaire avec la méthode FTR-PERM-VBC et différentes méthodes de suivi d'interfaces de la littérature, $h = 1/32$ et $T = 8 s$. Méthodes : (a) FTR-PERM-VBC, (b) Méthode couplée THINC et level set (THINC/LS) [75], (c) Mass and momentum conserving unsplit semi-Lagrangian (MMCUSL) [61], (d) Local Front Reconstruction(LFRM) avec facteur de résolution $nc = 2$ <i>i.e</i> le rapport entre la grille de reconstruction et la grille eulérienne [83].	82
2.25	Déformation d'une interface circulaire dans un champ tourbillonnaire instationnaire (Eqs. 2.33a-2.33b) sur une période $T = 8 s$ pour les méthodes FTR-PERM-VBC, Stream/Youngs (VOF-PLIC) et DS-CLSVOF (LSET-WENO).	83

2.26	Déformation d'une interface circulaire par un champ de vitesse tourbillonnaire stationnaire (Eqs. 2.17a-2.17b) à $t = 4 s$, $h = 1/32$. L'interface rouge (resp. noir) est obtenue avec (resp. sans) l'algorithme de la conservation du volume.	85
2.27	Évolution de l'erreur sur le volume pour le cas de la déformation du disque dans un tourbillon Eqs. 2.17a-2.17b pour différentes méthodes de front-tracking et front-capturing - $h = 1/64$	85
3.1	Interface Γ séparant les fluides 1 et 2 dans un système de coordonnées cartésiennes (x,y) . Les vecteurs \vec{t} et \vec{n} sont respectivement les vecteurs tangent et normal à l'interface, le vecteur normal pointant vers le fluide 1.	89
3.2	Calcul de la vitesse de chaque marqueur $m \in \mathcal{M}$: en rouge (resp. noir) les symboles triangulaires représentent les positions des vitesses horizontales des nœuds de la grille Eulérienne appartenant au fluide 2 (resp. 1). Le triangle pointillé rouge (resp. noir) est le support utilisé pour construire la fonction d'approximation linéaire pour la vitesse horizontale dans le domaine fluide 2 (resp. 1).	91
3.3	Calcul de la pression en chaque marqueur $m \in \mathcal{M}$: les symboles circulaires rouges (resp. noirs) sont les nœuds de pression de la grille eulérienne appartenant au fluide 2 (resp. 1). Les symboles connectés par le segment rouge en pointillés (resp. noir) sont utilisés pour obtenir la pression interpolée au niveau de la croix (\times), puis au niveau de la position du marqueur m , pour le fluide 2 (resp. 1).	93
3.4	Lignes de courant (a) et pressions (b) pour l'écoulement d'Hadamard-Rybczynski (plan $\mathbf{x-y}$) - Couple Eau/Air (Tab. 3.1) tel que $\mu_2/\mu_1 = 100$	96
4.1	Représentation de la grille décalée 2D utilisée : la pression $p_{i,j}$ est localisée sur les nœuds de la grille eulérienne, la vitesse horizontale $u_{i,j}$ est définie sur la face gauche du volume de contrôle $\Omega_{i,j}$ (en gris) associé à $p_{i,j}$ et la vitesse verticale $v_{i,j}$ est définie sur la face inférieure du volume de contrôle associé à $p_{i,j}$	105
4.2	Grille décalée de vitesse et pression : représentation des nœuds supplémentaires de vitesse en dehors de la frontière physique	106
4.3	Disposition des nœuds de vitesse sur le volume de contrôle selon la composante u : f_{uo} , f_{us} , f_{ue} et f_{un} sont les faces ouest, sud, est et nord du volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$ sur lesquelles sont estimés les flux de convection.	109

4.4	Disposition des nœuds de pression sur le volume de contrôle selon la composante u : f_{uo} , f_{us} , f_{ue} et f_{un} sont les faces ouest, sud, est et nord du volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$ sur lesquelles est estimé le gradient de pression.	110
4.5	Principe de la méthode de Frenet pour le calcul de la tension de surface à partir des tangentes \bar{t}_A et \bar{t}_B	113
4.6	Courants parasites au voisinage de l'interface [102].	115
4.7	Calcul de la contribution moyenne capillaire via la méthode DCC en considérant la composante u de vitesse : (a) $p_{i,j} - p_{i-1,j} \neq 0$, la contribution capillaire est calculée de manière à équilibrer ce terme (b) $p_{i,j} - p_{i-1,j} = 0$, la contribution capillaire n'est pas prise en compte.	117
4.8	Cas de la goutte statique	118
4.9	Evolution du nombre capillaire en fonction du temps adimensionné τ pour différents nombre de Laplace et $h = 1/50$: (a) méthode FTR-PERM-VBC/CSF. (b) méthode FTR-JUMP-VBC/CSF.	120
4.10	(a) Évolution du nombre capillaire en fonction du temps adimensionné τ pour différents nombre de Laplace et $h = 1/50$, méthode FTR-JUMP-VBC/DCC. (b) Erreur sur le saut de pression dans la bulle $\ E_{\Delta P_{max}}\ $ en fonction du nombre de Laplace.	121
4.11	Profil du champ de pression de la bulle statique normalisé par σ/R pour $R/h = 62,5$ et $La = 12000$	122
4.12	Cas de la bulle statique, effet du rapport R/h à nombre de Laplace fixé ($La = 12000$) sur : (a) le nombre capillaire (b) l'erreur sur le saut de pression dans la bulle $\ E_{\Delta P_{max}}\ $	123
4.13	Configuration initiale et conditions limites de la bulle ascendante	124
4.14	Solutions de la bulle ascendante à $t = 3s$: (a) Solutions obtenues avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/40$, comparaison à la solution de référence $h = 1/320$. (b) Solutions obtenues avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/80$, comparaison à la solution de référence $h = 1/320$	126
4.15	Solutions de la bulle ascendante à $t = 3s$: (a) Solutions obtenues avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC pour les grilles eulériennes $h = 1/40, 1/80, 1/160, 1/320$. (b) Solutions obtenues avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/320$, comparaison avec les solutions de référence des trois groupes du benchmark [35] (Ref group 1, ref group 2 et Ref group 3)	128

4.16	Solutions de la bulle ascendante obtenues à $t = 3 s$: (a) Circularités C_b calculées avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC pour les grilles eulériennes $h = 1/40, 1/80, 1/160, 1/320$. (b) Circularités calculées avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/320$ et comparaison avec les références des trois groupes du benchmark [35] (Ref group 1, Ref group 2 et Ref group 3)	129
4.17	Solutions de la bulles ascendante obtenues à $t = 3 s$: (a) Position du centre de masse y_c calculée avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC pour les grilles eulériennes $h = 1/40, 1/80, 1/160, 1/320$. (b) Position du centre de masse calculée avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/320$ et comparaison avec les positions de référence du centre de masse des trois groupes du benchmark [35] (Ref group 1, Ref group 2 et Ref group 3)	130
4.18	Solutions de la bulles ascendante obtenues à $t = 3 s$: (a) Vitesse de montée de la bulle v_c calculée avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC pour les grilles eulériennes $h = 1/40, 1/80, 1/160, 1/320$. (b) Vitesse de montée de la bulle v_c calculée avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/320$ et comparaison avec les vitesses de montée de référence des trois groupes du benchmark [35] (Ref group 1, Ref group 2 et Ref group 3)	131
4.19	Solutions de la bulle ascendante obtenues à $t = 3 s$ avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/320$, comparaison avec les solutions de référence des trois groupes du benchmark [35] (Ref group 1, Ref group 2 et Ref group 3)	133
4.20	Solutions de la bulle ascendante obtenues à $t = 3 s$, pour $h = 1/320$ avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF, comparaison avec les solutions de référence des trois groupes du benchmark [35] (Ref group 1, Ref group 2 et Ref group 3) : (a) Circularités, (b) Position du centre de masse, (c) Vitesse de montée de bulle.	134
5.1	Volume de contrôle \mathcal{V} associé à une vitesse u coupé par une interface Γ . Nous obtenons ainsi un volume de contrôle composite divisé en deux sous-domaine Ω_1 et Ω_2	139
5.2	Volume de contrôle composite associé à la composante u de vitesse ; les flux sont calculés par morceau sur une face intersectée : exemple de la face ouest f_{uo} coupée par une surface front-tracking Γ	142

5.3	Volume de contrôle composite associé à la composante u de vitesse. Les faces est f_{ue} et ouest f_{uo} sont coupées par une surface front-tracking Γ ; les flux sont calculés par morceau sur une face intersectée. Les faces nord f_{un} et sud f_{us} ne sont pas coupées; les flux calculés sur ces faces sont inchangés par rapport au modèle 1-fluide	143
5.4	Volume de contrôle composite associé à la composante $u_{i,j}$ de vitesse. Aucune des faces du volume de contrôle associé à u n'est coupée par une interface. La face nord f_{vn} de la composante $v_{i,j}$ étant coupée, la vitesse et les gradients horizontaux localisés sur l'intersection entre Γ et f_{vn} les plus proches de f_{ue} lui sont attribués.	145
5.5	Configuration initiale de l'écoulement de Couette diphasique	150
5.6	Variation verticale de la composante horizontale de vitesse u pour un écoulement de Couette instationnaire à $t = 5.10^{-3} s$, $\mu_2/\mu_1 = 0.001$.	151
5.7	(a) Évolution du nombre capillaire en fonction du temps adimensionné τ pour différents nombres de Laplace, méthode FTR-JUMP-VBC/Modèle à 2-fluides. (b) Erreur sur le saut de pression dans la bulle $\ E_{\Delta P_{max}}\ $ en fonction du nombre de Laplace.	157
5.8	Profil du champ de pression de la bulle statique normalisé par σ/R pour $R/h = 62,5$ et $La = 12000$	158
A.1	Configuration initiale de l'écoulement de Couette diphasique	165

Liste des tableaux

2.1	Fonctions de poids utilisées dans la méthode Peskin pour interpoler la vitesse au niveau du marqueur m	44
2.2	Erreur temporelle sur un temps d'intégration de 4 s et les ordres de convergence associés, obtenus en utilisant les schémas d'intégration temporelle RK1, RK2, RK3 et la vitesse analytique directement imposée à la position du marqueur	46
2.3	Erreur temporelle sur un temps d'intégration de 4 s et les ordres de convergence associés, obtenus en utilisant les schémas d'intégration temporelle RK2, RK3 et l'interpolation bilinéaire pour le calcul de vitesse du marqueur pour un pas d'espace donné $h = 2\pi/512 m$	47
2.4	Erreur temporelle sur un temps d'intégration de 4 s maillage $h = 2\pi/512 m$ avec la combinaison RK2 - Adams-Bashforth pour le schéma temporel et l'interpolation bilinéaire pour la vitesse.	48
2.5	Erreur spatiale relative sur un temps d'intégration de 4 s pour une condition CFL de 0,5.	49
2.6	Erreur $\ E_{h_e}\ _1$ et $\ E_{h_e}\ _\infty$ (Eq. 2.18a et Eq. 2.18b) et ordre local de convergence (Eq. 2.19) pour différentes tailles de grille ou de maillage et différentes méthodes d'interpolation.	55
2.7	Influence de la taille initiale des éléments h_e sur la précision de la méthode front-tracking - l'ordre de convergence local est présenté pour différentes tailles d'éléments h_e	56
2.8	Erreur $\ E_{h_e}\ _1$ et $\ E_{h_e}\ _\infty$ (Eq. 2.18a et Eq. 2.18b) et ordre de convergence local (Eq. 2.19) en fonction de la taille de la grille h sans (FTR-PERM) ou avec activation de la conservation du volume (FTR-PERM-HR et FTR-PERM-VBC).	61
2.9	Convergence des courbures (Eq. 2.29) et des normales (Eq. 2.30) avec l'ordre de convergence (voir Eq. 2.19) pour la déformation d'un disque soumis à un écoulement potentiel sur une plaque plane aux temps $t = 0.3 s$ et $t = 0.75 s$	68
2.10	Calcul de la distance entre les marqueurs $m \in \mathcal{D}$	72

2.11	Détermination de la fonction couleur binaire par la méthode Ray-casting	76
2.12	Détermination de la fonction couleur exacte	78
2.13	Erreurs moyennes sur la fraction volumique (Eq. 2.34) et ordre de convergence associé (Eq. 2.18a) pour différentes techniques de suivi d'interfaces de la littérature – Déformation d'une interface circulaire par un champ de vitesse tourbillonnaire instationnaire (2.33a-2.33b) à $T = 2 s$	80
2.14	Erreurs moyennes sur la fraction volumique (Eq. 2.34) et ordre de convergence associé (Eq. 2.18a) pour différentes techniques de suivi d'interfaces de la littérature – Déformation d'une interface circulaire par un champ de vitesse tourbillonnaire instationnaire (Eqs. 2.33a-2.33b) à $T = 8 s$	81
2.15	Méthodes utilisées pour les comparaisons	83
2.16	Erreur moyenne sur les positions (Eq. 2.18a) et ordre de convergence (Eq. 2.19) pour les méthodes FTR-PERM(-VBC) ou FTR-LCRM(-VC) (Tab. 2.15) - Déformation d'une interface circulaire par un tourbillon Eqs. 2.17a-2.17b	84
3.1	Caractéristiques physiques de l'écoulement d'Hadamard-Rybczynski	95
3.2	Erreur relative sur les vitesses des marqueurs de l'interface (Eq. 3.6) et ordre de convergence (Eq. 2.19) en fonction de la taille de la grille eulérienne h pour la solution d'Hadamard-Rybczynski. Plusieurs rapports de viscosité (μ_2/μ_1) ont été considérés (Tab. 3.1). . .	97
4.1	Paramètres physiques et adimensionnels définissant les deux cas test	125
4.2	Erreur relative $\ E_{q_t}\ _1$ (4.36) et ordre de convergence pour le cas 1 de la bulle ascendante	132
5.1	Paramètres physiques utilisés pour simuler les deux configurations pour un écoulement de Couette instationnaire	150
5.2	Évolution des normes d'erreurs en fonction du maillage utilisé pour différents modèles dans le cas d'un écoulement de Couette diphasique instationnaire à $t = 5 \cdot 10^{-3} s$: l'approche FTR-JUMP-VBC/Modèle à 2-fluides, la méthode VOF-PLIC/CSF(modèle à 1-fluide) avec la viscosité μ calculée avec une moyenne arithmétique et la méthode VOF-PLIC/CSF(modèle à 1-fluide) avec la viscosité μ calculée avec une moyenne harmonique ont été utilisées. (a) $\mu_2/\mu_1 = 0,1$ (b) $\mu_2/\mu_1 = 0,001$	153

5.3	Évolution des normes d'erreurs en fonction du maillage utilisé pour différents modèles dans le cas d'un écoulement de Couette diphasique instationnaire à $t = 5.10^{-3} s$: l'approche FTR-JUMP-VBC/Modèle à 2-fluides, la méthode VOF-PLIC/CSF(modèle à 1-fluide) avec la viscosité μ calculée avec une moyenne arithmétique et la méthode VOF-PLIC/CSF(modèle à 1-fluide) avec la viscosité μ calculée avec une moyenne harmonique ont été utilisées, $\mu_2/\mu_1 = 0,001$	154
5.4	Paramètres physiques utilisés pour simuler le cas de Poiseuille diphasique	155
5.5	Erreurs en fonction du maillage utilisé pour différents modèles dans le cas d'un écoulement de Poiseuille diphasique : l'approche FTR-JUMP-VBC/Modèle à 2-fluides, la méthode VOF-PLIC/CSF(modèle à 1-fluide) avec la viscosité μ calculée avec une moyenne arithmétique et la méthode VOF-PLIC/CSF (modèle à 1-fluide) avec la viscosité μ calculée avec une moyenne harmonique	156

Liste des abréviations

CLSVOF	Coupled Level-Set Volume Of Fluid
CSF	Continuum Surface Force
DCC	Direct Capillary Contribution
DNS	Direct Numerical Simulation
ELVIRA	Efficient Least Squares Volume-of-fluid Interface Reconstruction Algorithm
FTR	Front-Tracking
HR	Homothetic Rescaling (Méthode homothétique)
JUMP	Méthode de calcul des vitesses basée sur les relations de saut à l'interface
LCRM	Level Contour Reconstruction Method
LES	Large Eddy Simulation
LFRM	Local Front Reconstruction Method
LS/LSET	Level-Set
LSET-PART	Level-Set/Particle
LVIRA	Least squares Volume of fluid Interface Reconstruction Algorithm
MMUSCL	Mass and Momentum Conserving Unsplit Semi-Lagrangian method
MOF	Moment Of Fluid
PERM	Parabolic Edge Reconstruction Method
PLIC	Piecewise Linear Interface Calculation
SLIC	Simple Linear Interface Calculation
SSF	Sharp Surface Force
THINC	Tangent of Hyperbola Interface Capturing
VBC	Velocity Based Correction (Méthode basée sur la correction des vitesses)
VOF	Volume Of Fluid

Introduction générale

De nombreux écoulements qui nous entourent sont des écoulements complexes diphasiques à phases séparées. En effet, ces écoulements interviennent dans des domaines aussi variés que la physique fondamentale, l'environnement ou encore dans de nombreuses applications industrielles. Face à un sujet aussi vaste, l'étude, la description et la compréhension physique de ces écoulements sont devenus au fil des années un objet de recherche essentiel en mécanique des fluides.

Une des caractéristiques majeures de ces écoulements est qu'elle met en jeu des phénomènes physiques à des échelles très différentes. En effet, ces écoulements peuvent regrouper une large gamme de tailles interfaciales pouvant aller du mètre au nanomètre et ce pour un même problème. Il s'agit d'interactions multi-échelles, généralement capitales pour la compréhension et la caractérisation des problèmes physiques où les écoulements diphasiques jouent un rôle déterminant.

La figure 1 illustre ce phénomène multi-échelles à travers la fragmentation d'un jet liquide par écoulement d'air latéral dit "cross-flow" avec sa cascade d'échelles interfaciales allant du jet d'eau continu aux fines gouttelettes, en passant par les gouttes de taille intermédiaire.

En plus de la disparité des échelles, la complexité de ces écoulements, à savoir la présence d'une interface, la rhéologie du milieu, la turbulence ou encore la non-linéarité des problèmes considérés rendent la mise en œuvre des approches expérimentales et théoriques souvent difficiles. Les approches numériques, c'est-à-dire la modélisation et la simulation de ces écoulements, constituent ainsi une alternative intéressante car elles permettent d'étudier les problèmes considérés sur des calculateurs massivement parallèles disponibles aujourd'hui, en proposant des moyens de prédiction, de caractérisation ou parfois de contrôle de ces écoulements. Ce travail de modélisation nécessite généralement l'utilisation de techniques de suivi d'interfaces appropriées et le développement d'un solveur pour le calcul du champ de vitesse requis pour le mouvement des interfaces. Dans ce contexte, des progrès importants sur la simulation des écoulements diphasiques multi-échelles ont été réalisés ces deux dernières décennies, en particulier pour les écoulements avec une gamme d'échelles interfaciales pouvant varier du mètre aux dizaines de nanomètres dans des applications industrielles ou environnementales.

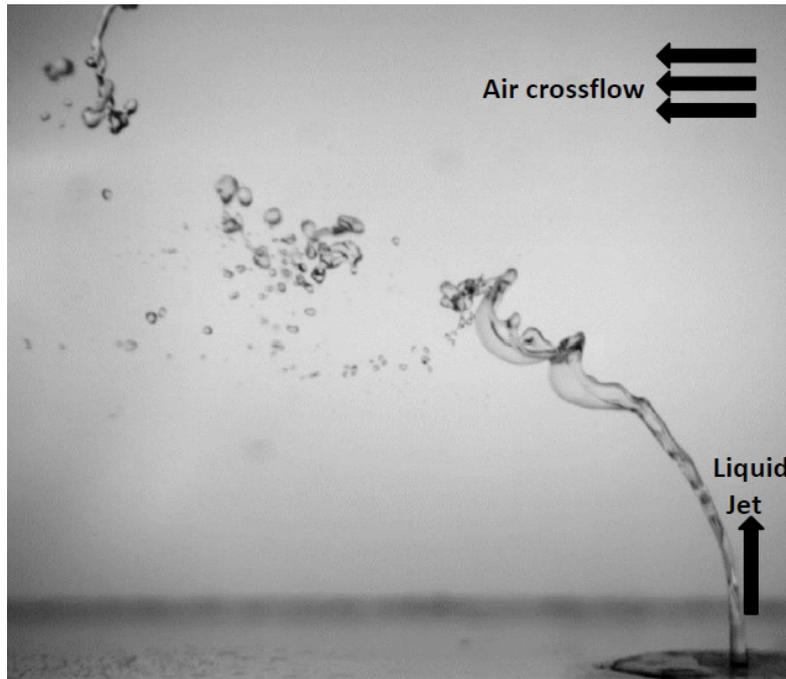


FIGURE 1 – Jet d'eau dans un écoulement d'air avec sa cascade d'échelles d'interfaces [90].

Cependant, la prise en compte de tous les phénomènes physiques associés à cette large gamme d'échelles requiert l'utilisation de modèles extrêmement détaillés, entraînant des coûts de calcul élevés. La simulation multi-échelle, en réponse à ce problème, consiste ainsi à simuler chaque phénomène à l'échelle la plus pertinente (macroscopique, microscopique ou moléculaire), avec plusieurs modèles s'appuyant sur des représentations et des hypothèses pouvant être très variés (eulérien, lagrangien, déterministe, statistique, moyennés, ...) et associés à des tailles et des finesses de modélisation différentes. Cette approche, nécessite de différencier les différentes échelles de la modélisation mais également de connaître et de modéliser les relations existantes entre ces différentes échelles.

Ce travail s'articule autour de la proposition d'une modélisation unifiée des écoulements diphasiques à phases séparées prenant en compte toutes les échelles interfaciales, de la phase séparée à l'échelle des petites interfaces dispersées, en passant par les échelles intermédiaires, afin de répondre aux besoins des problèmes réels.

Nous avons concentré une grande partie de ce travail sur l'étude des grandes interfaces et des échelles intermédiaires en développant une méthode de suivi d'interface 2D à savoir une méthode de front-tracking pour simuler le déplacement des écoulements diphasiques à phases séparées. L'objectif est de fournir une analyse détaillée

des performances de la méthode front-tracking afin d'améliorer la précision de la méthode avec de bons ordres de convergence. Il s'agit d'un aspect à ne pas négliger car les structures interfaciales grossièrement résolues dans un écoulement multi-échelle sont d'autant plus affectées par le niveau de précision de la méthode de suivi d'interface. Nous avons étudié différentes solutions existantes afin d'obtenir l'advection la plus précise de l'interface et nous avons mis au point des algorithmes pour maintenir le volume constant après chaque phase de transport de l'interface. Nous avons également confronté notre méthode à d'autres approches de suivi d'interface de la littérature pour en évaluer les performances.

Une partie de ce travail a été consacrée à l'amélioration du calcul des caractéristiques spécifiques de l'interface telles que la courbure locale et la normale pour le calcul de la force capillaire jouant un rôle déterminant dans les interactions interfaciales.

Afin de pallier la perte de précision du calcul du déplacement de l'interface lorsque le saut des propriétés physiques entre les différentes phases est grand, une méthode de transport originale prenant en compte les relations de saut de vitesse et des efforts au niveau de l'interface a été développée.

Nous avons intégré cette méthode de front-tracking dans un modèle à 1-fluide principalement dédié à la simulation des grandes échelles des écoulements diphasiques. L'intégration de la méthode de front-tracking a ainsi permis d'améliorer le calcul des termes capillaires dans ce modèle.

La dernière partie a été consacrée à l'élaboration d'un modèle Navier-Stokes à 2-fluides sur une grille structurée pour les écoulements diphasiques à phases séparées à l'images des méthodes Cut-cell pour les obstacles solides dans des écoulements. L'idée de cette modélisation est de proposer une représentation plus précise des écoulements diphasiques multi-échelles tirant avantage de la représentation explicite de l'interface par la méthode de front-tracking.

Ce manuscrit est structuré comme suit :

- Dans le premier chapitre, nous présentons le contexte général de la simulation des écoulements diphasiques ainsi que les modèles généralement utilisés pour représenter ces écoulements.
- Le second chapitre est dévolu à la description détaillée de la méthode front-tracking développée dans ce travail. Des cas test de validation et des comparaisons aux autres méthodes de la littérature y sont également proposés afin de montrer l'aptitude de la méthode front-tracking à représenter les interfaces et leurs déformations tout en conservant le volume (champ de vitesse correspondant à des écoulements incompressibles) dans des problèmes cinématiques.
- Nous présentons dans le chapitre trois une méthode originale d'advection

de l'interface prenant en compte le saut des propriétés physiques telles que la pression, la vitesse et la contrainte au niveau de l'interface. Nous avons étudié le cas de l'écoulement autour d'une goutte ou d'une bulle en régime de Stokes (solution d'Hadamard-Rybczynski) pour valider cette méthode. Cette nouvelle estimation de la vitesse interfaciale évite l'utilisation de procédures d'interpolation artificielles purement cinématiques pour déterminer les vitesses des marqueurs de l'interface, ce qui améliore grandement les solutions obtenues.

- Le chapitre quatre concerne le couplage entre la méthode de front-tracking et les équations de Navier-Stokes basées sur l'approximation du modèle à 1-fluide sur une grille cartésienne fixe. Les équations du modèle discrétisées ainsi que le domaine d'étude et les conditions aux limites sont présentés dans ce chapitre. Une attention particulière est portée au traitement du terme capillaire dans le cadre du modèle 1-fluide avec la méthode front-tracking. Des cas de validation classiques de la littérature (Laplace, bulle ascendante) y sont étudiés afin de vérifier l'implémentation du modèle complet.
- Le dernier chapitre est dédié à la proposition d'un modèle à 2-fluides discontinu sur une grille eulérienne fixe pour la représentation des écoulements diphasiques à phases séparées. Le traitement numérique associé à ce modèle est décrit dans son intégralité et des cas de validation sont également étudiés afin de s'assurer de la bonne implémentation du modèle

Chapitre 1

Etat de l'art sur la simulation d'écoulements diphasiques

Sommaire

1.1	Quels écoulements diphasiques ?	5
1.2	Quel modèle physique initial pour les écoulements ? .	10
1.2.1	Équations de conservation de la masse et du mouvement	10
1.2.2	Hypothèses sur les fluides et les écoulements	12
1.3	Quels modèles pour les écoulements diphasiques ? . . .	12
1.3.1	Modèle à 2-fluides discontinu pour les interfaces résolues	14
1.3.2	Modèle à 1-fluide continu pour les interfaces résolues . .	16
1.3.3	Modèle à 2-fluides dispersé	20
1.3.4	Modèle mixte Euler/Lagrange dispersé	21
1.4	Quelles méthodes numériques pour le suivi d'interface ?	23
1.4.1	Méthode VOF(volume of fluid)	25
1.4.2	Méthode Level-Set	29
1.4.3	Méthode couplée VOF/Level-Set (CLSVOF)	30
1.4.4	Méthode de Front-tracking	30
1.5	Bilan et objectifs	31

1.1 Quels écoulements diphasiques ?

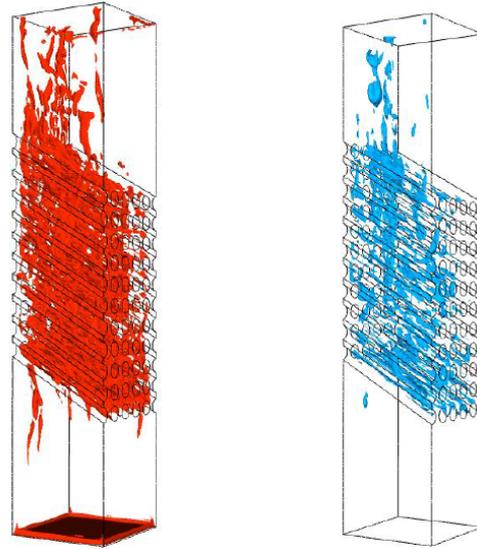
Le terme "écoulements diphasiques" que nous considérerons dans ce travail se réfère aux écoulements dans lesquels au moins deux phases (liquide/liquide ou liquide/gaz) sont en présence, séparées par une interface. De nombreux problèmes

qui nous entourent peuvent être associés à des écoulements diphasiques à phases séparées. A très grande échelle, on peut citer les problèmes environnementaux (érosion des plages par le déferlement des vagues, catastrophe naturelle suite à l'échouage d'un pétrolier, infiltration de polluants dans les sols, dispersion de traitements phytosanitaires ou problèmes d'arrosage en agronomie, ...), la météorologie (échanges océan-atmosphère, pluie, nuages) ou l'océanographie (hydraulique fluviale ou maritime, impact des vagues sur des structures portuaires ou des bateaux, ...), tandis qu'à plus petite échelle, les domaines ou problèmes que l'on peut relier aux écoulements diphasiques concernent les secteurs de l'automobile et des transports terrestres, aéronautiques et spatiaux (injection de carburant dans les moteurs ou chambres de combustion, cavitation sur les coques ou hélices de bateaux, injection de propergol dans les boosters de la fusée Ariane, hydroplanage, ...), l'énergie (hydroliennes, crise d'ébullition dans les conduites de refroidissement de centrales nucléaires, givrage dans les échangeurs de pompes à chaleur, ...), les matériaux (nettoyage ou composition des aciers dans les procédés de coulée continue et de lingotière, mise en forme de polymères ou de métaux/alliages liquides par injection ou extrusion, conception de matériaux composites carbone silicium par imprégnation et montée capillaire, projection plasma pour la fabrication de dépôts métalliques ou céramiques, peintures, vernis, solvants, ...), la cosmétique et la pharmacie (fabrication de crèmes, d'émulsions, de poudres par injection supercritique, ...), l'agroalimentaire (injection de pâtes à gâteaux, fabrication de yaourts, de jus, ...). Comme nous pouvons donc le comprendre, ces écoulements sont au cœur de notre quotidien.

Au-delà des intérêts applicatifs, il y a également tout un ensemble de problèmes fondamentaux de mécanique des fluides non encore compris ou résolus qui restent intéressants à étudier. Nous pouvons citer l'interaction turbulence/interface, les instabilités interfaciales (Kelvin-Helmoltz, Rayleigh-Taylor, Rayleigh-Plateau, Marangoni...), les transferts de masse et le changement de phase, la rupture/coalescence et fragmentation des interfaces, qui sont des processus non-linéaires majeurs pilotant les échanges de masse et d'énergie dans les applications citées précédemment. Leur compréhension et leur caractérisation sont donc d'une importance très grande mais elles sont rendues difficiles car les expériences restent limitées lorsque nous nous intéressons aux systèmes diphasiques à phases séparées pour des raisons de variation d'indice optique, d'hétérogénéité du milieu, d'instationnarité, ... Les études théoriques sont elles aussi souvent impossibles ou limitées à cause du caractère non-linéaire des interfaces et de leur couplage avec la turbulence dans les fluides. De toutes les configurations d'écoulements évoquées précédemment, nous pouvons en retenir que deux ou trois qui sont illustrées sur les figures 1.1a, 1.1b et 1.1c. La première concerne le déferlement d'une vague, phénomène naturel que nous pouvons facilement observer. Ce problème est clairement multi-échelle. En



(a) Déferlement d'une vague (source google image) avec le retournement de la lame d'eau et la création d'un nuage de fines gouttelettes (embruns)



(b) Crise d'ébullition dans des échangeurs de centrale nucléaire [52] avec le taux de vapeur dispersée à gauche (orange) et le taux de vapeur continue à droite (bleu).



(c) Simulation DNS de l'atomisation d'un jet d'eau dans l'air [12] - L'injection se fait de gauche à droite

FIGURE 1.1 – Exemples d'écoulements à caractère diphasique à phase séparée, présentant des interfaces à des échelles spatiales variées

plus de la turbulence, les grandes échelles d'interface sont de l'ordre du mètre au minimum, les échelles intermédiaires des poches de gaz piégées après déferlement entre le millimètre et le centimètre, tandis que les embruns sont une collection dispersée de gouttes d'eau de taille micrométrique. La description complète du déferlement, couplée au vent, à la pluie, ... n'est pas encore atteinte et revêt un caractère important pour les échanges océan-atmosphère et la météorologie [103]. Si nous nous intéressons maintenant aux transferts diphasiques eau liquide/vapeur dans les échangeurs de centrale nucléaire (figure 1.1b) et à la "crise d'ébullition", il a été clairement montré, mesuré et expliqué par divers auteurs [9] que les écou-

lements diphasiques dans les conduites ou autour des faisceaux de tube mettaient en évidence des bulles de vapeur isolées d'échelle de taille autour de quelques microns à centaine de microns, des poches de vapeur de grande dimension (jusqu'à plusieurs dizaines de centimètres), des films liquide ou vapeur en paroi, d'épaisseur parfois plus faible que le micron, et des gouttes de taille variée entre le micron et le millimètre. Là encore, ce problème de transfert diphasique à phases séparées est clairement multi-échelle en terme d'interface et en même temps turbulent. La compréhension des mécanismes de génération des bulles de vapeur ou des films en paroi est critique pour le bon fonctionnement du refroidissement du cœur d'une centrale nucléaire. Pour terminer avec la description des exemples, on peut également mentionner l'injection d'un liquide dans un moteur ou une chambre de combustion. Comme nous pouvons le remarquer sur la figure 1.1c, ce problème d'atomisation consiste à créer un brouillard ou spray afin d'obtenir une aire interfaciale la plus grande possible entre le liquide et le gaz environnant, favorisant une évaporation, un mélange et une combustion optimale. La compréhension des mécanismes permettant de passer d'un jet liquide continu de diamètre centimétrique à un spray de gouttes de taille micronique ou inférieure, reste de l'ordre de la recherche. Des mécanismes d'instabilité complexes (Rayleigh-Plateau, Kelvin-Helmholtz) sont couplés à des créations locales de vitesses de rétraction (Taylor-Culick) et de percement de film pilotées par des courbures à l'échelle de la centaine de nanomètres, le tout dans un environnement anisotherme et turbulent avec une chimie complexe. La description de la forme et de l'extension des interfaces est un problème de premier plan pour contrôler le rendement et la pollution des moteurs. Comme nous venons de le voir, certains écoulements diphasiques sont associés à divers phénomènes de turbulence ou de changement d'état par exemple, rendant leur étude complexe. Comprendre leur dynamique revêt un intérêt scientifique et appliqué certain mais reste problématique en raison de leur caractère multi-échelle dû aux nombreux changements topologiques liés à la présence d'une interface. Les illustrations et explications précédentes en témoignent. Dans tous ces exemples, il est possible de noter la coexistence de différentes structures interfaciales de tailles variant de l'échelle de la centaine de nanomètre à l'échelle du mètre. La recherche sur ces écoulements complexes est donc nécessaire à leur compréhension afin d'assurer la sécurité au niveau des réacteurs nucléaires, le bon fonctionnement des moteurs ou une meilleure prédiction des échanges océan-atmosphère. Comme nous l'avons déjà évoqué, il faut garder en mémoire que la caractérisation expérimentale d'un moteur, d'une centrale nucléaire voir même du déferlement d'une vague est très difficile, même souvent impossible, pour des raisons de sécurité, de coût de mise en œuvre ou de complexité. Par ailleurs, le caractère intrinsèquement non-linéaire et couplé des mécanismes rendent les approches théoriques très limitées. Nous nous concentrerons donc dans ce mémoire sur les approches numériques,

la modélisation et la simulation des écoulements diphasiques à phases séparées. Nous tenons à rappeler cependant que même si l'approche numérique paraît la plus prometteuse et viable pour décrire certains problèmes, il reste fondamental de se confronter à des analyses/descriptions expérimentales ou théoriques, pour la validation et la qualification des modèles et des méthodes numériques.

Au cours des deux dernières décennies, des progrès majeurs ont été réalisés dans l'étude numérique des écoulements diphasiques, en particulier pour les écoulements avec une gamme d'échelles interfaciales pouvant varier de l'unité aux dizaines de nanomètre. De tels problèmes physiques, avec une large gamme de structures interfaciales, ont fait l'objet d'études dans de nombreux problèmes académiques et applications industrielles ou environnementales. Nous pouvons citer l'exemple des interactions interface/turbulence [26, 41, 89, 100, 2, 101], l'interaction entre des gaz ou liquide et des interfaces [46, 43] ou encore les problèmes d'atomisation et de formation de spray [32, 19, 44, 106, 88, 11]. Dans un contexte purement industriel, on peut donner l'exemple du refroidissement de pistons de moteurs [60], le procédé de revêtement de surface par solidification de gouttes métalliques [97] ou encore les problèmes de crise d'ébullition et de refroidissement des conduites dans les échangeurs de chaleur des centrales nucléaires [24, 53].

Dans tous ces exemples, une difficulté majeure de la simulation numérique consiste à capturer simultanément les échelles les plus petites et les plus grandes de l'interface tout en représentant avec précision les modifications de la topologie et les caractéristiques interfaciales telles que les forces capillaires lorsque des gouttelettes, bulles, ligaments et interfaces déformables interagissent dans des écoulements instationnaires, voire turbulents. En effet, la prise en compte de tous ces phénomènes physiques requiert l'utilisation de modèles extrêmement détaillés, entraînant des coûts de calcul élevés. Cette remarque reste vraie même lorsque le nombre de Reynolds est modéré et l'écoulement laminaire. Une alternative à cette difficulté est la simulation multi-échelle consistant à simuler chaque phénomène à l'échelle la plus pertinente, en utilisant plusieurs modèles couplés, chacun adapté à une échelle particulière. Par cette approche, certaines simulations, à l'origine inaccessibles, ont été rendues réalisables avec l'utilisation de solveurs appropriés. Ces travaux restent très récents et peu nombreux. Nous pouvons citer les couplages de modèles d'interface à grande échelle résolues avec des représentations lagrangiennes ponctuelles des phases dispersées [88, 106] et également les approches de couplages de modèles d'interface à grande échelle résolues avec des représentations eulériennes moyennées ou statistiques des phases dispersées [24, 53].

Dans ce mémoire nous nous intéressons aux écoulements diphasiques et plus particulièrement à la simulation des écoulements diphasiques multi-échelles avec la volonté de simuler les écoulements présentés possédant une large gamme de structures interfaciales.

1.2 Quel modèle physique initial pour les écoulements ?

On s'intéresse à la simulation d'écoulements incompressibles constitués de phases liquide et/ou gazeuse, ces deux états correspondant à la définition générale d'un fluide. Ainsi, un fluide est un milieu matériel déformable, composé d'un ensemble d'atomes ou de molécules identiques avec plus ou moins de cohérence entre les liaisons de celles-ci. Selon l'échelle considérée, le modèle que l'on applique pour reproduire le comportement d'un fluide n'est pas le même. A l'échelle microscopique, les molécules interagissent entre elles via les forces de Van der Waals ou électrostatiques et il existe de fortes fluctuations des phénomènes associés à ces particules élémentaires d'une zone à l'autre de l'espace. Chaque particule constitue donc un système indépendant à part entière. A l'échelle macroscopique, on considère plutôt des volumes locaux contenant un grand nombre de molécules, évoluant lentement ou continuellement dans l'espace où l'ensemble des propriétés sont moyennées sur ce grand nombre de particules. Le fluide est donc observé de plus loin et les mouvements individuels des molécules sont ignorés au profit du mouvement d'ensemble du fluide.

On introduit ainsi, pour décrire un fluide, la notion de "particule fluide", comme étant un "élément de fluide" suffisamment petit devant les dimensions de l'écoulement à grande échelle pour que l'on puisse considérer ses propriétés comme homogènes et suffisamment grand pour contenir un très grand nombre d'atomes ou de molécules. Le fluide est alors considéré comme un milieu continu lorsque que le modèle de la particule fluide est applicable. Dans ce mémoire, nous considérerons toujours cette hypothèse comme vérifiée, c'est à dire que le libre parcours moyen des atomes ou des molécules est petit par rapport à l'échelle caractéristique du volume élémentaire de référence appelé élément fluide. Ces régimes correspondent à de petits nombres de Knudsen, généralement pris inférieurs à 10^{-3} .

1.2.1 Équations de conservation de la masse et du mouvement

Considérons $\mathcal{V}(t)$, un volume contenant un ensemble de particules fluides délimité par une surface $\Sigma(t)$. Soit $f(M, t)$ une grandeur volumique définie dans $\mathcal{V}(t)$, dont l'intégrale volumique s'écrit :

$$F(t) = \int_{\mathcal{V}(t)} f(M, t) d\mathcal{V}$$

La dérivée particulaire de $F(t)$ est donnée par :

$$\frac{dF(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}(t)} f d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}(t)} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot f \bar{u} \right) d\mathcal{V} \quad (1.1)$$

avec \bar{u} la vitesse locale du fluide. Lorsque le volume $\mathcal{V}(t)$, constitué des mêmes particules fluide, se déplace au cours du temps, celui ci est conservé même si sa position et ses dimensions varient au cours du temps. Cette propriété se traduit par la relation de conservation de la masse :

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}(t)} \rho d\mathcal{V} = 0$$

L'application de la relation (1.1) à cette propriété nous donne :

$$\int_{\mathcal{V}(t)} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot \rho \bar{u} \right) d\mathcal{V} = 0$$

Le volume \mathcal{V} étant choisi comme arbitraire, on retombe sur l'équation de conservation de la masse locale suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot \rho \bar{u} = 0 \quad (1.2)$$

En ce qui concerne la quantité de mouvement, selon le principe fondamental de la dynamique, sa variation temporelle sur le volume $\mathcal{V}(t)$ est égale à la somme des forces extérieures agissant sur ce volume. Ce principe s'écrit ainsi :

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}(t)} \rho \bar{u} d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}(t)} \rho \bar{f} d\mathcal{V} + \int_{\Sigma} \bar{\bar{T}} \cdot \bar{n} d\Sigma$$

où \bar{f} désigne les forces extérieures volumiques s'appliquant sur $\mathcal{V}(t)$, comme la gravité par exemple, et $\bar{\bar{T}}$ les forces surfaciques de contact. Avec l'application de l'équation (1.1) à cette relation et l'utilisation du théorème de la divergence sur l'intégrale surfacique des forces de contact, l'équation de quantité de mouvement se réécrit en formulation locale :

$$\frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u} \otimes \bar{u}) = \rho \bar{f} + \bar{\nabla} \cdot \bar{\bar{T}} \quad (1.3)$$

On obtient ainsi les équations de Navier-Stokes isothermes (1.2)-(1.3), sous une forme conservative.

1.2.2 Hypothèses sur les fluides et les écoulements

Incompressibilité des écoulements

Les équations (1.2-1.3) sont la forme la plus générale des équations de Navier-Stokes. Selon l'écoulement que l'on considère, elles peuvent être simplifiées. On s'intéressera dans ce mémoire aux problèmes à masse volumique constante. Avec cette hypothèse, la relation (1.2) devient :

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{u} = 0 \quad (1.4)$$

En utilisant l'hypothèse d'incompressibilité, on peut réécrire la relation (1.3) sous une forme non conservative :

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \bar{\nabla}) \bar{u} \right) = \rho \bar{f} + \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathcal{T}} \quad (1.5)$$

Fluide newtonien

Les forces surfaciques s'exerçant sur l'élément fluide sont représentées par le tenseur $\bar{\mathcal{T}}$, comme le montre la relation (1.5). Ce tenseur se décompose en une force isotrope liée à la pression thermodynamique et une force anisotrope liée aux effets visqueux :

$$\bar{\mathcal{T}} \equiv -p \bar{\mathcal{I}} + 2\mu \bar{\mathcal{D}} \quad (1.6)$$

avec $\bar{\mathcal{I}}$ la matrice identité et $\bar{\mathcal{D}}$ le tenseur des taux de déformations visqueux. Nous considérerons uniquement dans la suite les fluides newtoniens tel que :

$$\bar{\mathcal{D}} = \frac{1}{2} (\bar{\nabla} \bar{u} + \bar{\nabla} \bar{u}^t) \quad (1.7)$$

1.3 Quels modèles pour les écoulements diphasiques ?

L'aspect diphasique des écoulements n'est pas a priori pris en compte dans les équations du système (1.2) et (1.3) présentées auparavant, qui régissent intrinsèquement, c'est à dire sans termes sources ou physiques additionnels, les écoulements monophasiques. Nous nous restreignons dans ce travail à l'étude des fluides qui sont supposés non miscibles. Nous ne considérerons pas tous les systèmes diphasiques qui concernent les mélanges de gaz, de plasma, ...

A partir d'un changement d'échelle entre la vision moléculaire (de l'ordre de l'Ångström) et celle du système diphasique étudié (entre le micromètre et le mètre),

si nous nous appuyons sur les travaux de physiciens de la matière molle comme Gibbs [3, 42], nous pouvons considérer la zone de séparation entre deux fluides non-miscibles comme une surface d'épaisseur négligeable (l'épaisseur réelle est de l'ordre de l'Ångström alors que le système et le volume élémentaire représentatif associé sont de l'ordre de la centaine de nanomètres à celle du centimètre). Cette surface est l'interface entre deux fluides à travers laquelle les propriétés physiques des fluides changent brutalement. Cette variation des propriétés physiques peut se traduire sous la forme de conditions de saut à travers l'interface qui doivent être satisfaites (voir 1.3.1), en plus des équations de Navier-Stokes (1.2-1.3) loin de l'interface. Ces relations de saut intègrent des contributions de forces nouvelles et spécifiques liées à l'interface, que nous appelons tensions superficielles. Elles peuvent être complétées lorsque le problème est anisotherme par des effets Marangoni ou de transfert de masse par changement de phase.

Tension de surface

Dans un fluide, les molécules exercent entre elles des forces de type Van Der Waals pour assurer la cohésion du milieu. Chaque molécule est attirée par la molécule voisine, ce qui assure l'équilibre des forces. En présence d'une interface, cet équilibre est rompu car les molécules reçoivent plus de force qu'elles ne peuvent en distribuer aux molécules voisines. La force de surface permet de rétablir l'équilibre de ces forces au niveau de l'interface. Cette force est appelée tension de surface, tension superficielle ou encore force capillaire. En l'absence d'autres forces extérieures, la tension de surface a pour effet de minimiser l'aire interfaciale pour réduire le déficit énergétique. Pour un fluide au repos, la loi de Laplace est une conséquence du rétablissement de l'équilibre au niveau de l'interface. Une surpression est générée du côté de la concavité de la surface pour équilibrer la tension de surface de sens opposé. Cette loi s'exprime comme suit :

$$[p] = \sigma \left(\frac{1}{R_{//}} + \frac{1}{R_{\perp}} \right) = \sigma \kappa \quad (1.8)$$

$[p] = p_2 - p_1$ traduit le saut de pression entre les fluides 1 et 2, σ est le coefficient de tension de surface exprimant la différence énergétique des liaisons intermoléculaires entre deux fluides, $R_{//}$ et R_{\perp} sont les rayons de courbure principaux en un point donné de l'interface et κ la courbure associée.

Modélisation des écoulements diphasiques

Comme nous l'avons évoqué dans la première partie de l'introduction, les écoulements diphasiques à phases séparées peuvent revêtir des formes d'interface, des

échelles ou des caractéristiques dynamiques très variées. Nous allons dans la suite de cette partie rappeler quels sont les modèles existants pour décrire des écoulements diphasiques. Nous porterons une attention particulière à donner les hypothèses et les configurations d'écoulements pour lesquelles chaque modèle peut être mis en oeuvre. Il faut garder en mémoire que nous souhaitons positionner ce travail comme une première pierre dans la construction d'un modèle et de méthodes numériques capables de traiter un écoulement diphasique multi-échelle, comme ceux présentés en introduction (atomisation d'un jet, crise d'ébullition, déferlement d'une vague). L'ensemble des modèles qui sera évoqué dans cette partie ne permet pas seul d'aborder le caractère multi-échelle. Par contre, il pourra servir de base à la construction future d'un modèle global, constitué de couplages entre les modèles unitaires évoqués ici.

1.3.1 Modèle à 2-fluides discontinu pour les interfaces résolues

A partir du moment où nous admettons l'hypothèse de surface de Gibbs, c'est-à-dire que l'interface entre deux fluides, vue à l'échelle du milieu continu, est discontinue, le modèle d'écoulement diphasique est le modèle monophasique dans chaque fluide (Navier-Stokes pour nous mais cela pourrait être du Boltzmann BGK ou d'autres approches en fonction des préférences du modélisateur), l'interface entre les sous-domaines (l'interface physique que nous voyons) étant une condition limite pour chaque sous-domaine fluide. Sur cette interface, prise du point de vue de la modélisation comme un raccord de deux sous-domaines fluides de propriétés constantes (si l'écoulement est isotherme), les conditions limites correspondent à des relations de saut que nous allons rappeler maintenant.

Pour un fluide en mouvement, la loi de Laplace ne suffit plus à décrire le saut à travers l'interface fluide/fluide car il faut prendre en compte la contribution des forces visqueuses liées aux contraintes de déformation. Le saut du tenseur des contraintes dans les directions normale et tangentielle à l'interface s'écrit :

$$\bar{n} \cdot (\bar{\mathcal{T}}_1 - \bar{\mathcal{T}}_2) \cdot \bar{n} = \sigma \kappa \quad (1.9)$$

$$\bar{t} \cdot (\bar{\mathcal{T}}_1 - \bar{\mathcal{T}}_2) \cdot \bar{n} = (\bar{\nabla} \sigma) \cdot \bar{t} \quad (1.10)$$

Avec \bar{n} , le vecteur normal orienté sortant par rapport au fluide 1 et \bar{t} le vecteur tangent à l'interface et $\kappa \equiv \bar{\nabla} \cdot \bar{n}$ la courbure associée à l'interface. Avec l'hypothèse que les contraintes de viscosité interdisent le glissement d'un fluide par rapport à l'autre, le champ de vitesse est continu lorsque l'on traverse l'interface. Cette propriété se traduit par le saut de vitesse suivant :

$$\bar{u}_1 - \bar{u}_2 = 0 \quad (1.11)$$

Pour un coefficient de tension de surface constant, nous avons $\bar{\nabla}\sigma = 0$.

Ainsi, pour modéliser la physique au niveau de la séparation entre les deux fluides, le modèle le plus simple (pas d'hypothèses autres que Gibbs) et le plus proche de la réalité à toutes les échelles d'interface consiste à résoudre les équations monophasiques dans chaque phase tout en tenant compte du saut à l'interface. On parle alors de modèles à 2-fluides pour les interfaces résolues, c'est-à-dire d'échelles caractéristiques plus grandes que le volume élémentaire représentatif (VER, ou alors le pas d'espace h si nous regardons d'un point de vue numérique). Par analogie avec la turbulence ou abus de langage, ce modèle est adapté à une résolution de l'ensemble du spectre des échelles d'interface, on le nomme donc parfois aussi DNS ou simulation numérique directe. En pratique, il consiste à considérer en première approche les écoulements diphasiques non miscibles comme deux écoulements monophasiques situés dans deux sous-domaines, les fluides 1 et 2 étant séparés par une interface Γ , comme illustré dans la figure 1.2. Pour chaque fluide k , les équations de Navier-Stokes incompressibles et isothermes sont résolues pour décrire l'écoulement :

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_k \bar{u}_k) = 0 \quad (1.12)$$

$$\frac{\partial \rho_k \bar{u}_k}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_k \bar{u}_k \otimes \bar{u}_k) = \rho_k \bar{g} + \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathcal{T}}_k \quad (1.13)$$

avec le tenseur des contraintes

$$\bar{\mathcal{T}}_k \equiv -p_k \bar{\mathcal{I}} + \mu_k (\bar{\nabla} \bar{u}_k + (\bar{\nabla} \bar{u}_k)^t)$$

La présence de l'interface Γ est prise en compte au travers des relations de saut présentées auparavant :

$$\begin{aligned} \bar{u}_1 &= \bar{u}_2 \\ \bar{n} \cdot (\bar{\mathcal{T}}_1 - \bar{\mathcal{T}}_2) \cdot \bar{n} &= \sigma \kappa \\ \bar{t} \cdot (\bar{\mathcal{T}}_1 - \bar{\mathcal{T}}_2) \cdot \bar{n} &= 0 \end{aligned}$$

La solution la plus naturelle pour la simulation des écoulements diphasiques représentés par ce formalisme 2-fluides résolu est d'utiliser des approches de type ALE considérant une grille qui s'adapte à la forme de l'interface à chaque itération temporelle [15]. Parmi ces approches, nous pouvons citer les méthodes basées sur la construction de grilles non structurées [27, 28] ou les maillages curvilignes orthogonaux [45] lorsque les interfaces restent de forme simple. Le principal avantage de cette approche directe est que les équations de Navier-Stokes sont résolues sans aucune approximation faite au niveau de l'interface. Cependant le coût de calcul

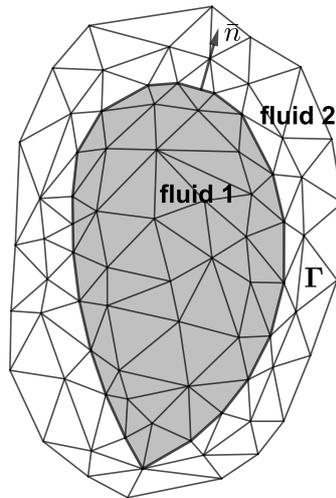


FIGURE 1.2 – Représentation d'un écoulement diphasique, le comportement de l'écoulement est prédit à l'aide d'une l'approche directe avec une grille adaptative non structurée

lié au processus de remaillage de la grille mobile curviligne ou non structurée, dynamique et à chaque pas de temps, et la complexité de la gestion et de l'automatisation de cette approche en 3D, rendent cette méthode difficile d'utilisation, en pratique.

Plusieurs solutions alternatives ont été proposées pour modéliser et résoudre les écoulements diphasiques, en introduisant des hypothèses sur la forme des interfaces ou leur échelle. Le choix de la modélisation dépend principalement des phénomènes physiques que l'on souhaite étudier ou du niveau de précision des résultats attendus. Nous allons présenter dans ce qui suit quelques modèles dérivés du modèle "de base" à 2-fluides résolu, permettant de simuler plus facilement des écoulements diphasiques.

1.3.2 Modèle à 1-fluide continu pour les interfaces résolues

Compte tenu des difficultés de mise en œuvre du modèle à 2-fluides résolu dit DNS des interfaces, qui requiert la mise en place de grilles non structurées ou de maillages curvilignes orthogonaux mobiles, d'autres approches basées sur la résolution des écoulements diphasiques sur une grille eulérienne fixe (voir Fig. 1.3) ont été proposées. Le point de départ concerne les travaux de [36] qui servirent de base aux modèles 1-fluide et 2-fluides. On introduit ainsi une nouvelle variable,

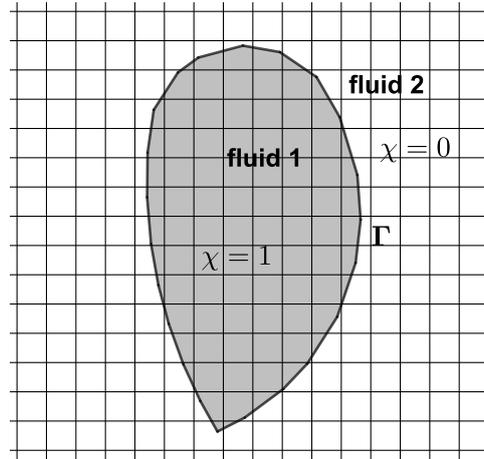


FIGURE 1.3 – Représentation d'un écoulement diphasique, le comportement de l'écoulement est prédit à l'aide d'une approche sur grille fixe structurée, χ est la fonction indicatrice de phase

la fonction indicatrice χ_k afin de localiser chacune des phases k dans le domaine d'étude telle que :

$$\chi_k(\bar{x}, t) = 1 \text{ si } k = p \quad (1.14)$$

$$\chi_k(\bar{x}, t) = 0 \text{ si } k \neq p \quad (1.15)$$

avec $k, p = 1, 2$. En tout point de l'écoulement :

$$\sum_{k=1}^2 \chi_k(\bar{x}, t) = 1 \quad (1.16)$$

Sachant que χ_k se conserve dans le mouvement de l'interface, on peut écrire :

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial t} + \bar{V} \cdot \bar{\nabla} \chi_k = 0 \quad (1.17)$$

Par ailleurs on montre que :

$$\bar{\nabla} \chi_k = -\bar{n} \delta_s \quad (1.18)$$

avec δ_s la fonction de Dirac centrée sur l'interface et \bar{V} la vitesse de l'interface. La relation (1.18) est définie car χ_k est constant dans chaque phase. Son gradient est donc non nul uniquement sur l'interface. De plus il est nécessairement positionné selon la normale à l'interface dans le sens opposé à \bar{n} car χ_k passe de la valeur 1 dans la phase k à 0.

En supposant que l'interface est sans masse et décrite par une tension superficielle constante et en utilisant les relations de saut données dans la section dévolue au

modèle à 2-fluides DNS, la conservation de la masse et du mouvement à la traversée de l'interface s'écrivent :

$$\sum_{k=1}^2 \rho_k (\bar{V} - \bar{u}_k) \cdot \bar{n} = 0 \quad (1.19)$$

$$\sum_{k=1}^2 \rho_k \bar{u}_k (\bar{V} - \bar{u}_k) \cdot \bar{n} + \bar{\mathcal{T}}_k \cdot \bar{n} + \sigma (\bar{\nabla}_s \cdot \bar{n}) \cdot \bar{n} = 0 \quad (1.20)$$

Considérons l'équation de conservation de la masse (1.12), que l'on multiplie par la fonction indicatrice χ_k .

$$\chi_k \bar{\nabla} \cdot \bar{u}_k = 0 \Rightarrow \bar{\nabla} \cdot (\chi_k \bar{u}_k) - \bar{u}_k \cdot \bar{\nabla} \chi_k = 0 \quad (1.21)$$

En introduisant les relations (1.17) et (1.18) dans l'équation (1.12) et en multipliant le résultat obtenue par ρ_k , on obtient l'équation bilan de masse diphasique pour le fluide k :

$$\frac{\partial(\rho_k \chi_k)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\chi_k \rho_k \bar{u}_k) = \rho_k (\bar{V} - \bar{u}_k) \cdot \bar{n} \delta_s \quad (1.22)$$

Par le même procédé, l'équation (1.13) combiné aux relations (1.17) et (1.18) devient l'équation bilan de quantité de mouvement diphasique pour le fluide k :

$$\frac{\partial(\chi_k \rho_k \bar{u}_k)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\chi_k \rho_k \bar{u}_k \otimes \bar{u}_k) = \chi_k \rho_k \bar{g} + \bar{\nabla} \cdot \chi_k \bar{\mathcal{T}}_k + \rho_k \bar{u}_k (\bar{V} - \bar{u}_k) \cdot \bar{n} \delta_s + \bar{\mathcal{T}}_k \cdot \bar{n} \delta_s \quad (1.23)$$

A ce stade, se pose le choix de modélisation que l'on souhaite entreprendre. La formulation du modèle 2-fluides sera adaptée si on s'intéresse séparément à chacune des phases dans des écoulements où le glissement entre les différentes phases est important. Les échanges interfaciaux sont modélisés par les relations (1.19) et (1.20). La difficulté de cette méthode réside en premier lieu dans la modélisation de ces termes d'échanges. Par ailleurs, cette approche est relativement coûteuse dans la mesure où les équations bilans sont résolues dans chacun des fluides. Il y a ainsi autant d'équations à résoudre que de phases k à considérer.

Une alternative à cette approche est le modèle-1-fluide, qui paraît alors approprié pour modéliser les écoulements diphasiques sur des maillages fixes si l'on s'intéresse aux interfaces résolues globalement, mais vu comme un modèle de mélange de ces écoulements localement dans les cellules coupées par l'interface.

Le formalisme monofluide ou modèle-1-fluide a été introduit par Kataoka [40] en 1986. Il permet de regrouper les équations de Navier-Stokes définies pour chaque phase en un seul système permettant de décrire l'évolution de chaque phase ainsi que la transition à l'interface. Pour aboutir à ce formalisme, les équations du système (Eqs. 1.12-1.13) sont multipliées par $\chi_k(\bar{x}, t)$ et les contributions de chaque phase en chaque point sont ensuite sommées en combinant les relations (1.19),

(1.20) et (1.16).

À ce stade, comme l'explique [50], les équations ne sont pas exploitables car elles contiennent des valeurs discontinues (Eqs. 1.14-1.15). Pour obtenir des variables continues, il faut filtrer les équations obtenues en espace ou en temps. De manière générale, le filtrage spatial est utilisé car il est en adéquation avec le traitement numérique des problèmes étudiés. On définit ainsi :

$$\alpha_k(\bar{x}, t) = \int_{\mathcal{V}(t)} \chi_k(\bar{x}', t) G(\bar{x} - \bar{x}') d\bar{x}' \quad (1.24)$$

où $\mathcal{V}(t)$ désigne le volume caractéristique du filtre (généralement de l'ordre de la taille de la cellule). α_k désigne la fraction volumique occupée autour de \bar{x} , à l'instant t par la phase k . À partir de la relation (1.24), on définit pour chaque grandeur Φ sa moyenne phasique $\tilde{\Phi}$ telle que :

$$\alpha_k(\bar{x}, t) \tilde{\Phi}(\bar{x}, t) = \int_{\mathcal{V}(t)} \chi_k(\bar{x}', t) \Phi(\bar{x}', t) G(\bar{x} - \bar{x}') d\bar{x}' \quad (1.25)$$

$\tilde{\Phi}$ désigne l'application du filtre G à la variable Φ (1.25).

En omettant les indices k , on peut écrire un système d'équations associé à un écoulement diphasique avec le formalisme monofluide :

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u}) = 0 \quad (1.26a)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \otimes \tilde{u}) = \tilde{\rho} \tilde{g} + \sigma \kappa \bar{n} \delta_s + \bar{\nabla} \cdot \tilde{\mathcal{T}} \quad (1.26b)$$

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \tilde{u} \cdot \bar{\nabla} \alpha_k = 0 \quad (1.26c)$$

Pour la suite, le symbole $\tilde{\cdot}$ sera omis pour alléger l'écriture, lorsqu'il sera question des équations (Eqs. 1.26a-1.26c) du modèle 1-fluide. Les variables de mélange sont également définies en fonction de C telles que :

$$\bar{u} = \sum_k \alpha_k \bar{u}_k \quad (1.27)$$

$$\rho = \sum_k \alpha_k \rho_k \quad (1.28)$$

$$\mu = \sum_k \alpha_k \mu_k \quad (1.29)$$

Le terme source de quantité de mouvement $\sigma \kappa \bar{n} \delta_s$ apparaît dans l'équation (1.26b) pour modéliser les forces de tension de surface. Le modèle final 1-fluide permet de résoudre la dynamique d'interfaces résolues à grande échelle mais vues comme des

mélanges dans les mailles coupées par l'interface (qui n'est connue qu'au travers de la fraction volumique). Ce modèle 1-fluide est une sorte de LES des interfaces résolues, alors que le modèle à 2-fluides d'interface résolue est un modèle qui s'apparente à une DNS des interfaces.

Le nouveau système décrit ci-dessus est une formulation plus simple des équations de Navier-Stokes pour un écoulement à deux phases se rapprochant beaucoup du modèle monophasique. Pour aboutir à ce système, plusieurs hypothèses ont été faites notamment l'absence de changement entre les phases mais aussi l'absence de glissement local entre les phases.

1.3.3 Modèle à 2-fluides dispersé

Le modèle à 2-fluides pour les écoulements dispersés, aussi parfois appelé modèle de Ishii [37], modèle à 2 champs ou modèle Euler-Euler, doit être compris comme étant un modèle dans lequel coexistent deux phases, l'une réelle qui est le fluide porteur, et l'autre fictive qui est la phase dispersée. Le terme Euler-Euler veut dire :

- pour le premier Euler, modélisation et résolution de la phase porteuse par une approche ou une grille eulérienne, c'est à dire une grille fixe qui n'évolue pas dans le temps en fonction des mouvements des phases
- pour le deuxième Euler, modélisation et résolution également de la phase dispersée par une représentation (et un grille) eulérienne, c'est à dire que l'on regarde la phase dispersée de façon moyennée ou statistique en faisant un bilan de population de gouttes ou de bulles dans un VER (ou une cellule eulérienne). Cette approche repose intrinsèquement sur une hypothèse de séparation d'échelles d'une part, c'est à dire que les gouttes ou bulles doivent être petites par rapport à la taille du VER (ou cellules du maillage), et de forme imposée des objets dispersés (sphères en général, de rayon constant ou utilisant des pdf de tailles pour les modèles les plus sophistiqués).

Les équations du modèle 2-fluides sont obtenues après avoir moyenné les relations (1.22) et (1.23). La moyenne utilisée est généralement une moyenne spatiale de l'ordre de la taille de la cellule (voir (1.25)).

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \bar{u}_k) = \Gamma_k \quad (1.30)$$

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k \bar{u}_k)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \bar{u}_k \otimes \bar{u}_k) = -\alpha_k \bar{\nabla} p_k + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \mu_k \bar{\bar{D}}_k) + \alpha_k \rho_k \bar{g} + \bar{I}_k \quad (1.31)$$

Les termes Γ_k et I_k représentent les transferts de masse et de quantité de mouvement définis comme suit :

$$\Gamma_k = \rho_k(\bar{V} - \bar{u}_k) \cdot \bar{n} \quad (1.32)$$

$$\bar{I}_k = \rho_k \bar{u}_k (\bar{V} - \bar{u}_k) \cdot \bar{n} + \bar{\bar{T}}_k \cdot \bar{n} + \sigma (\bar{\nabla}_s \cdot \bar{n}) \cdot \bar{n} \quad (1.33)$$

Contrairement au modèle 1-fluide, les masses volumiques ρ_k , les viscosités μ_k ou les vitesses \bar{u}_k sont définies dans chaque phase k . Pour la fermeture du système (Eqs.1.30-1.31), il faut satisfaire, en plus des conditions (1.19) et (1.20), la relation :

$$\sum_k \alpha_k = 1 \quad (1.34)$$

Sans transfert de masse à l'interface, $\Gamma_k = 0$. Le transfert de quantité de mouvement \bar{I}_k à l'interface est quant à lui modélisé par des forces (traînée, portance ...) pour représenter les interactions entre la phase dispersée et la phase porteuse. De plus la pression est généralement supposée commune dans chacune des phases ($p_k = p$).

Ces approches multi-champs sont largement utilisées, surtout dans le milieu industriel (code Neptune développée par EDF) [24, 53]. L'intérêt de leur utilisation réside dans le fait de pouvoir simuler des écoulements diphasiques à des échelles réelles ou industrielles (réacteurs chimiques, injection et combustion dans les moteurs, lits fluidisés,...). Cette modélisation s'apparente aux approches RANS en turbulence. Seuls les problèmes d'une phase dispersée contenant des particules (gouttes, bulles) de très petites tailles dans un système à grande échelle ne peuvent être abordés par cette modélisation.

1.3.4 Modèle mixte Euler/Lagrange dispersé

Comme dans l'approche Euler/Euler, deux phases coexistent, une phase porteuse et une phase dispersée.

- pour le premier Euler, la phase porteuse est modélisée et résolue à l'aide d'une grille eulérienne fixe. En pratique, elle est indépendante du mouvement de la phase dispersée.
- pour l'aspect lagrangien, chaque élément ou particule fluide de la phase dispersée est suivie de façon individuelle ou éventuellement par parcelle au travers d'un ensemble de coordonnées des centres de masse de ces éléments. L'écoulement autour de ces particules n'est pas résolu mais les interactions physiques entre celles-ci et la phase porteuses (force de traînée ou de portance) sont modélisées.

D'un point de vue eulérien, la phase porteuse est modélisée par les équations monophasiques résolues sur une grille fixe.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u}) = 0 \quad (1.35)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u} \otimes \bar{u}) = \rho \bar{g} + \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathcal{T}} \quad (1.36)$$

où ρ est la masse volumique de la phase porteuse. Pour la phase dispersée, la position de chaque particule est connue grâce à la seconde loi de Newton :

$$m_p \frac{d\bar{x}_p}{dt} = \bar{f}_d + \bar{f}_l + \bar{f}_b + \dots \quad (1.37)$$

Avec m_p la masse de chaque particule fluide et \bar{x}_p leur position. Les termes \bar{f}_d , \bar{f}_l et \bar{f}_b représentent les forces exercées sur chaque particule. Le terme \bar{f}_d représente la force de traînée liée au frottements visqueux entre les particules et le fluide porteur, son rôle étant de s'opposer à leur mouvement relatifs. Il s'écrit :

$$\bar{f}_d = -\frac{\pi}{4} d_p^2 C_d \rho \|\bar{u}_r\| \bar{u}_r \quad (1.38)$$

avec $\bar{u}_r = \bar{u} - V_p$ la vitesse relative de la particule par rapport au fluide et d_p le diamètre de celle-ci. Le coefficient de traînée s'écrit généralement selon des lois de la littérature sous la forme :

$$C_d = \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0,15 Re_p^{0,687}\right) \quad (1.39)$$

avec Re_p le nombre de Reynolds particulaire basé sur le diamètre de la particule fluide (d_p). La relation (1.39) est valable pour des $Re_p < 800$.

La force de portance \bar{f}_l est proportionnelle au rotationnel de la vitesse dans la phase porteuse et est donnée par la relation :

$$\bar{f}_l = -m_f C_l \bar{u} \nabla \times \bar{u} \quad (1.40)$$

Le coefficient C_l est généralement pris comme constant et égal à 1/2 pour une particule sphérique. Enfin la force de flottabilité \bar{f}_b est liée à l'effet de la gravité sur la particule fluide :

$$\bar{f}_b = (\rho_p - \rho) V_p \bar{g} \quad (1.41)$$

A ces forces classiques peuvent s'ajouter d'autres effets comme la force de masse ajoutée liée à l'accélération de la particule fluide dans la phase porteuse ou encore des forces d'interactions entre les particules ou forces de collision.

Lorsque que la phase porteuse exerce des forces sur les particules fluides sans rétroaction de celles-ci sur la phase porteuse, on parle de one-way coupling.

Si de plus, les particules induisent des forces sur le fluide, on parle de two-way coupling. Dans ce cas il faut rajouter à l'équation de conservation de la quantité de mouvement (1.36) un terme supplémentaire pour modéliser cet effet.

Enfin, si les particules réagissent entre elles, on parle de four-way coupling car les fluides agissent sur les particules, ces dernières rétroagissent sur le fluide et chaque particule agit sur sa voisine. Dans ce cas, il faut rajouter (en plus du terme lié au "two-way coupling" dans l'équation de quantité de mouvement) un terme pour modéliser les forces d'interactions entre les particules dans l'équation (1.37).

Une séparation d'échelle est mise en place afin de tenir compte de l'effet des particules sans pour autant résoudre les équations de la phase porteuse à l'échelle de la particule. On distingue ainsi généralement la micro-échelle, à savoir l'échelle de résolution des particules fluides et la méso ou macro-échelle qui est l'échelle de résolution de la phase porteuse, beaucoup plus grande que la taille des particules. L'intérêt des approches Euler-Lagrange est de pouvoir simuler des écoulements diphasiques contenant une phase dispersée mono ou poly-dispersée à des échelles intermédiaires entre l'échelle réelle des systèmes industriels et l'échelle réduite micro des approches DNS ou 2-fluides résolues. Cette modélisation permet de traiter des centaines de millions voir quelques milliards de particules de façon plus précise que l'équivalent (séparation d'échelle, formes fixées) en modélisation Euler-Euler. L'approche Euler-Lagrange est par contre plus coûteuse numériquement (la phase porteuse doit en général être décrite par des grilles plus fines, associées à des modèles de turbulence de type LES) que l'approche Euler-Euler qui repose sur des modélisations turbulentes RANS et des grilles relativement grossières.

1.4 Quelles méthodes numériques pour le suivi d'interface ?

En plus de la prise en compte de la physique des écoulements par la résolution des équations de Navier-Stokes, les écoulements diphasiques nécessitent une approche spécifique pour décrire la physique à l'échelle de l'interface entre deux fluides. En effet, au cours du temps, les fluides sont en mouvement et la position relative des deux fluides change, entraînant des modifications topologiques pour l'interface. Plusieurs méthodes ont été développées afin de localiser précisément l'interface et décrire son mouvement et les changements topologiques induites sur celle-ci par l'écoulement. Ces techniques de suivi peuvent être classifiées en trois grandes familles :

- les méthodes lagrangiennes ou méthodes dites de suivi d'interface
- les méthodes eulériennes ou méthodes dites de capture d'interface
- les méthodes combinant les deux approches

Le choix d'une méthode ou d'une autre dépend principalement du problème physique que l'on va traiter car la qualité de la simulation des écoulements diphasiques est tributaire de la capacité de la méthode choisie à décrire le comportement de l'interface le plus précisément possible.

Les méthodes lagrangiennes suivent explicitement l'évolution de l'interface par une localisation basée sur l'imposition et l'advection d'un maillage déformable qui s'adapte au mouvement de cette dernière. Le suivi lagrangien est réalisé grâce à la résolution d'un champ de vitesse local et les conditions de saut à l'interface sont traités directement au niveau de l'interface avec une grande précision. Le problème des méthodes lagrangiennes réside dans le fait que leur utilisation sur des configurations complexes peut générer un important coût de calcul. De plus la gestion de problèmes comme la rupture ou la coalescence de l'interface nécessite la prise en compte d'approches supplémentaires dont la mise en œuvre peut être complexe en 3D. De manière générale, même si les méthodes lagrangiennes offrent plus de précision que les méthodes eulériennes, leur difficulté de mise en œuvre limite leur application, généralement réduite à la modélisation d'écoulements à surface libre ou autour d'inclusions isolées.

Dans le cas des méthodes eulériennes, l'interface n'est pas suivie explicitement. Une fonction indicatrice (Eqs. 1.14-1.15) est définie sur une grille fixe eulérienne pour identifier les différentes phases. Cette fonction est advectée au cours du temps par le champ de vitesse de l'écoulement afin de localiser l'interface. La méthode Volume Of Fluid (VOF) [104], pour laquelle l'interface est représentée au moyen d'une fonction indicatrice, est l'une des plus anciennes, mais encore populaire approche eulérienne, car elle permet de conserver naturellement le volume. Une autre approche très utilisée par la communauté scientifique est la méthode Level-Set [87]. Avec cette méthode, l'interface est localisée par une fonction distance signée qui est continue à travers l'interface et qui permet une estimation précise de la courbure et de la normale à l'interface. Une combinaison des deux méthodes Level-Set et VOF a été proposée par divers auteurs, tels que [85, 19, 12], pour assurer une approche qui conserve la masse tout en préservant la définition et la simplicité de mise en œuvre de la méthode Level-Set.

Toutes ces méthodes sont largement utilisées pour résoudre des écoulements complexes multiphasiques. Leur principal inconvénient est que la taille des petites structures interfaciales résolues est contrôlée par la grille eulérienne. Peu de méthodes VOF et Level Set ont été étendues pour calculer le caractère multi-échelle des écoulements multiphasiques impliquant des bulles, des gouttelettes ou des ligaments dont la taille est plus petite que la grille eulérienne. Parmi eux, on peut citer [49, 47, 36, 6, 96] pour les méthodes de type VOF avec une description sous-maille de l'interface, [98, 71, 105] pour le raffinement adaptatif du maillage autour des interfaces, [106, 88] pour le couplage VOF et level set avec un suivi ponctuel

des petites gouttes et bulles, [32] pour une approche duale Level-set pour laquelle l'interface est toujours résolue sur un maillage très fin et la technique Moment of Fluid [39] qui permet une reconstruction sous-maille de l'interface en utilisant le centre de gravité des phases d'une cellule donnée. Même dans leurs améliorations les plus récentes, la principale difficulté des approches eulériennes consiste à maintenir la précision de l'interface dans l'écoulement tout en tenant compte des structures dont la taille caractéristique est inférieure ou égale à la longueur d'une cellule de la grille eulérienne.

Une autre classe de méthode est celle permettant de gérer l'évolution de l'interface à travers un maillage spécifique sur une grille eulérienne fixe. Cette approche, dite de front-tracking très précise permet intrinsèquement de conserver les structures interfaciales dont l'échelle caractéristique est plus petite que la taille de la grille eulérienne. Cependant la gestion des deux grilles peut s'avérer très complexe pour des surfaces bidimensionnelles ou tridimensionnelles. Malgré cette difficulté, la finesse de l'interface est toujours maintenue même pour les grilles eulériennes sous-résolues, ce qui en fait une des méthodes les plus précises pour suivre les interfaces. Cette méthode a été largement développée et étudiée dans la littérature. De nombreux auteurs [20, 95, 72, 82, 91] ont montré dans leurs travaux la force de cette approche en comparaison aux méthodes de capture d'interface eulérienne les plus populaires. Glimm et *al.* [29] ont d'abord représenté l'interface par des marqueurs connectés pour les applications d'ondes de choc. Ensuite, Unverdi et Tryggvason [95] ont généralisé l'application de cette méthode aux écoulements multiphasiques visqueux et incompressibles pour la simulation d'une bulle montante. Popinet et Zaleski [72] ont notamment amélioré le calcul des forces capillaires dans la méthode front-tracking en modifiant l'étape de projection des méthodes de splitting temporel pour les écoulements diphasiques incompressibles. Tryggvason et *al.* [92] ont également simulé des écoulements homogènes de bulles à l'aide de cette méthode. Un guide complet de l'utilisation de la méthode front-tracking pour des écoulements multiphasiques est détaillé dans [93]. Nous pouvons souligner que la méthode front-tracking est plus généralement utilisée pour des applications à petites plages d'échelles interfaciales telles que les écoulements de bulles ou les ondes de choc. La grosse difficulté de la méthode concerne la coalescence et la rupture qui doivent être imposées avec une échelle de longueur physique à priori inconnue.

Nous allons maintenant présenter les approches les plus classiques de suivi d'interface.

1.4.1 Méthode VOF(volume of fluid)

Cette méthode a été mise en place par Hirt et Nichols en 1984 [34]. Basée sur la conservation de la masse, cette méthode est la première à utiliser le principe d'advection d'un champ scalaire.

La méthode VOF repose sur l'introduction de la fonction indicatrice $\chi(\bar{x}, t)$ dont on rappelle la définition :

$$\begin{cases} \chi_k(\bar{x}, t) = 1 & \text{si } k = p \\ \chi_k(\bar{x}, t) = 0 & \text{si } k \neq p \end{cases}$$

Cette fonction $\chi(\bar{x}, t)$ est solution de l'équation d'advection :

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \bar{u} \cdot \bar{\nabla} \chi = 0 \quad (1.42)$$

où \bar{u} représente le champ de vitesse eulérien. Le lieu de la discontinuité de χ détermine la position de l'interface. On introduit l'équivalent discret de la fonction indicatrice $\chi(\bar{x}, t)$, la fonction couleur noté C tel que :

$$C_{ij} = \frac{1}{h_x \times h_y} \int_{\mathcal{V}_{ij}} \chi(x, t) d\mathcal{V} \quad (1.43)$$

avec h_x et h_y les longueurs respectives horizontales et verticales de la cellule (ij) de la grille uniforme eulérienne et \mathcal{V}_{ij} le volume de cette cellule. La valeur de la fraction volumique est comprise entre 0 et 1 indique la présence de l'interface. Pour un champ de vitesse à divergence nulle, la formulation conservative de l'équation de transport de la fonction couleur s'écrit :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \cdot \bar{\nabla} C = 0 \quad (1.44)$$

ou sous une formulation conservative :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{u} C) = 0 \quad (1.45)$$

La figure 1.4 illustre la représentation de la fonction couleur C valant 1 dans le fluide 1 et 0 dans le fluide 2. Pour la résolution de l'équation (1.44), on peut utiliser un schéma numérique permettant de discrétiser directement cette équation hyperbolique sous forme conservative en respectant la condition $0 < C < 1$. Cependant dans la majorité des cas, cette équation n'est pas directement discrétisée car l'advection de la fonction couleur discontinue peut poser des problèmes de traitement numérique. La diffusion numérique peut par exemple induire un lissage de la discontinuité au cours du temps.

Afin de palier à ce problème, une étape de reconstruction de l'interface est réalisée avant d'advecter la fonction couleur.

0	0.35	0.7
0.4	0.99	1
0.8	1	1

FIGURE 1.4 – Méthode VOF : interface réelle et fonction couleur associée

Reconstruction géométrique de l'interface

On peut trouver dans le papier de Pilliod et Puckett [69] une revue détaillée des différentes techniques de reconstruction de l'interface avec la méthode VOF. Dans ces algorithmes de reconstruction, l'interface est généralement approchée de façon linéaire dans chaque cellule. Ces approximations sont continues seulement par morceaux et ne permettent donc pas d'obtenir une précision au second ordre. Celui-ci est éventuellement atteint si l'interface est reproduite de façon exacte. Pour la plupart de ces algorithmes, la normale à l'interface est reconstruite à partir des fractions volumiques locales données par C . En plus de discrétisation conservative de l'équation d'avection (1.44), la qualité de la méthode VOF dépend ainsi principalement de la reconstruction de l'interface. L'une des premières méthodes développées pour cette reconstruction est la méthode VOF-SLIC (*Simple Line Interface Calculation*) par Noh et Woodward [54]. Pour cette méthode, l'interface reconstruite est composée de segments parallèles à la grille eulérienne. Dans cette configuration, la représentation de l'interface dépend du sens de déplacement selon l'axe horizontal ou vertical. Selon le nombre de cellules voisines utilisées dans les opérateurs de différenciation, on peut distinguer différentes variantes de cette méthode. Un bloc 3x1 est utilisé dans la méthode de Noh et Woodward [54] alors que Chorin [13] utilise un bloc 3x3. Cette approche est toutefois insuffisante pour décrire l'interface et l'approche VOF-PLIC (*Piecewise Linear Interface Calculation*) est préférentiellement utilisée. Elle consiste à déterminer la normale locale à l'interface pour une reconstruction par morceaux de l'interface avec des segments non nécessairement parallèles à la grille eulérienne. Les figures 1.5a-1.5b illustrent la reconstruction de l'interface par les méthodes VOF-SLIC et VOF-PLIC. Saltzman [74], propose de calculer le centre de masse en considérant que les fluides ont une densité respective de 0 et de 1 avec la normale \bar{n} pointant du centre de la cellule

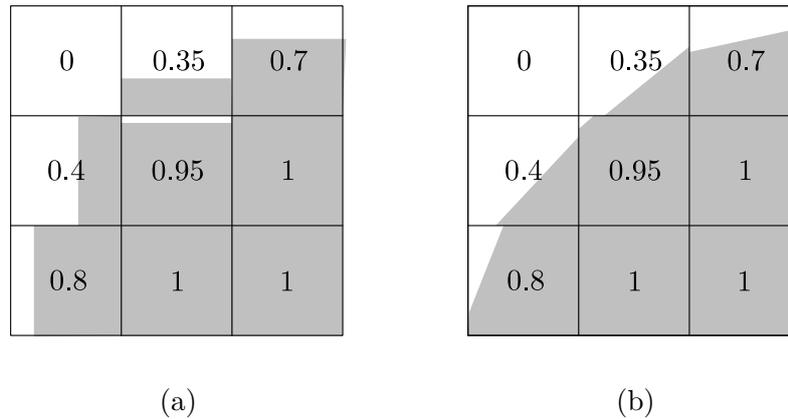


FIGURE 1.5 – Méthode VOF : (a) classe de méthodes SLIC pour la reconstruction l'interface ; (b) classe de méthodes PLIC

vers le centre de masse. La méthode de Parker et Young [62] consiste à déterminer la normale à partir du gradient de la fonction couleur C . Ces méthodes sont au mieux du premier ordre. La méthode LVIRA (Least squares Volume of fluid Interface Reconstruction Algorithm) [73] et une amélioration de cette dernière la méthode ELVIRA [68], plus récemment développées, consistent à minimiser la norme de l'erreur (norme $\|\cdot\|_2$) entre la fonction couleur et l'interface reconstruite. La méthode ELVIRA est du second ordre en ce qui concerne la reconstruction de l'interface. Cependant, la méthode de Young et Parker est en pratique plus précise sur un maillage grossier.

Algorithme d'advection

Une fois l'interface reconstruite, le transport de l'interface est modélisé par un algorithme d'advection. L'équation (1.45) est ainsi discrétisée comme suit :

$$C_{ij}^{n+1} = C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{h_x} (F_{i-\frac{1}{2},j}^n - F_{i+\frac{1}{2},j}^n) + \frac{\Delta t}{h_y} (G_{i,j-\frac{1}{2}}^n - G_{i,j+\frac{1}{2}}^n) \quad (1.46)$$

Avec $F_{i-\frac{1}{2},j}^n = (Cu)_{i-\frac{1}{2},j}^n$ le flux dans la direction horizontale et $G_{i,j-\frac{1}{2}}^n = (Cv)_{i,j-\frac{1}{2}}^n$ le flux dans la direction verticale. La reconstruction géométrique de l'interface permet le calcul de ces flux de manière à conserver la masse.

De manière générale, les méthodes VOF permettent une gestion naturelle des déformations de l'interface tout en conservant la masse. Le problème de leur utilisation réside dans la difficulté de calcul des propriétés géométriques de l'interface comme la normale ou la tangente à l'interface surtout en 3D à cause du caractère très raide de la fonction C . La précision de la solution va dépendre principalement

de la méthode employée pour la reconstruction et des algorithmes utilisés pour la résolution de l'équation de transport.

1.4.2 Méthode Level-Set

Il s'agit de l'approche la plus utilisée avec la méthode VOF. Elle a été introduite par Osher et Sethian [59] en 1988. L'interface Γ est représentée par le zéro d'une fonction distance à l'interface, Φ . Pour un domaine Ω divisé en deux sous-domaines fluides, le fluide 1 et le fluide 2 séparés par l'interface Γ , Φ est défini comme suit :

$$\begin{cases} \Gamma = \{x \in \Omega, \Phi(x) = 0\} \\ \Phi(\bar{x}, t) > 0 \text{ si } \bar{x} \in \text{fluide 1} \\ \Phi(\bar{x}, t) < 0 \text{ si } \bar{x} \in \text{fluide 2} \end{cases} \quad (1.47)$$

La fonction distance Φ permet de connaître à chaque instant à partir de la grille eulérienne fixe la distance à l'interface ainsi que le fluide dans lequel on se trouve grâce à son signe. La fonction Level-Set Φ admet une multitude d'iso-surfaces ou lignes de niveau. La ligne de niveau zéro correspond à l'interface que l'on cherche précisément à décrire. La figure 1.6 illustre quelques iso-surfaces, dont l'interface

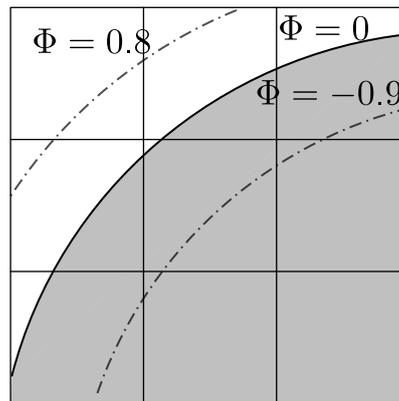


FIGURE 1.6 – Principe de la méthode Level-Set : les iso-surfaces $\Phi = -0,9$, $\Phi = 0$ et $\Phi = 0,8$ sont représentées. L'interface correspond à $\Phi = 0$.

$\Phi = 0$. Les lignes de niveau sont parallèles les unes aux autres et la position d'un point situé sur une ligne de niveau ne varie pas en fonction du temps dans le repère mobile lié à l'interface ie : $\|\bar{\nabla}\Phi\| = 1$. Le mouvement de l'interface se fait par la résolution d'une équation de transport dont l'inconnu est la fonction Level-set :

$$\frac{d\Phi}{dt} \iff \frac{\partial\Phi}{\partial t} + \bar{u} \cdot \bar{\nabla}\Phi = 0 \quad (1.48)$$

La résolution de cette équation, non conservative dans (1.48), appliquée à la fonction distance Φ permet de décrire le mouvement de l'interface dans un champ de vitesse eulérien \bar{u} . Cette équation, de type hyperbolique, est discrétisée et résolue par des schémas d'ordre élevé.

L'avantage de la méthode Level-Set est qu'elle ne nécessite pas de reconstruction géométrique, les déformations de l'interface sont directement prises en compte et les propriétés comme la courbure κ ou encore la normale à l'interface \bar{n} sont bien calculées. Cependant, la conservation de la masse avec cette méthode n'est pas vérifiée numériquement et la précision de la solution dépend fortement du niveau de résolution de l'équation d'advection du scalaire Φ . De plus, un algorithme de redistanciation est requis afin de garder les isosurfaces équidistantes d'un pas de temps à l'autre car cette propriété est perdue durant l'advection de la fonction Level-Set. Cet algorithme engendre généralement des pertes de masse en modifiant de façon artificielle la position de l'interface. Cela constitue un défaut majeur de la méthode.

1.4.3 Méthode couplée VOF/Level-Set (CLSVOF)

Cette approche consiste en un couplage des méthodes VOF et Level-Set. Introduite par Sussman et *al.* [86] cette méthode permet de bénéficier des avantages des deux méthodes. Elles sont toutes deux adaptées aux écoulements diphasiques dont la déformation de l'interface est importante. Contrairement à la méthode VOF, la méthode Level-Set est facile à mettre en place en 2D ou 3D avec un calcul des propriétés géométriques telles que la normale ou la courbure à l'interface qui sont directes. Elle ne conserve cependant pas la masse. La méthode VOF, quant à elle, conserve la masse mais nécessite une reconstruction géométrique parfois complexe, surtout en 3D. L'approche CLSVOF permet à la fois de conserver la masse tout en calculant facilement les propriétés géométriques. Le problème de cette méthode réside dans la reconstruction complexe de la géométrie de l'interface liée à la méthode VOF nécessaire à sa mise en place.

1.4.4 Méthode de Front-tracking

Cette méthode combine une approche à la fois eulérienne et lagrangienne.

- D'une part, un maillage spécifique de la surface séparant les phases est utilisé pour suivre explicitement l'interface. Ce maillage de surface est mobile sur le maillage eulérien fixe. Il se déforme en fonction du mouvement de l'écoulement et des effets capillaires qu'il exerce.
- D'autre part, une grille fixe eulérienne est considérée pour résoudre les équations de conservation dans les deux phases fluides. Un couplage entre la

grille fixe et le maillage mobile est requis. Toute la subtilité et la pertinence physique de la méthode est dépendante de cette étape.

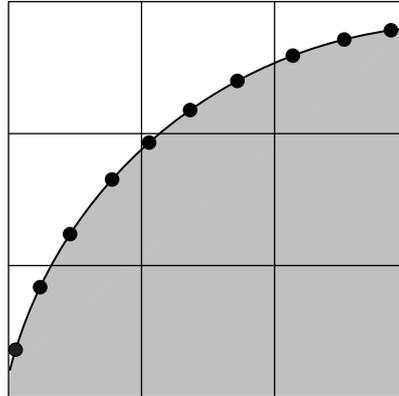


FIGURE 1.7 – Principe de la méthode Front-tracking : des marqueurs sans masse sont utilisés pour représenter l'interface.

Des marqueurs sont ainsi utilisés pour suivre l'interface (voir fig. 1.7). La position de l'interface est ainsi repérée par ces marqueurs qui sont suivis de façon lagrangienne sur une grille eulérienne fixe. Ces marqueurs peuvent être connectés entre eux [92] ou non [82]. L'échange d'information entre la grille eulérienne vers les marqueurs ou inversement peut entraîner une perte de résolution. De plus, la précision de cette méthode dépend fortement de l'espacement entre les marqueurs qui varie selon la dynamique de l'écoulement. Il est souvent nécessaire d'ajouter ou d'enlever dynamiquement des particules au cours de la simulation *reseeding* (réensemencement) pour avoir une répartition régulière des marqueurs sur l'interface. Une autre difficulté de cette méthode réside dans le changement de topologie de l'interface qui n'est pas directement pris en compte. Il faut parfois imposer des critères définis par l'utilisateur pour créer une rupture ou une coalescence de l'interface. Malgré ces inconvénients, la méthode front-tracking reste la méthode la plus précise pour le suivi d'interface même lorsque la taille caractéristique de celle-ci est inférieure à la taille de la cellule de la grille eulérienne. L'utilisation de cette méthode paraît donc assez naturelle pour des écoulements diphasiques dont la taille de l'interface est fortement variable, résolue comme sous-maille.

1.5 Bilan et objectifs

Nous avons présenté dans ce chapitre le modèle physique choisi pour la simulation des écoulements diphasiques. Les équations à résoudre sont les équations

de Navier-Stokes sous l'hypothèse d'incompressibilité pour des fluides Newtoniens isothermes. Dans le cadre des écoulements diphasiques, l'hypothèse de non miscibilité des fluides a été adoptée afin de pouvoir utiliser la notion d'interface ainsi que les conditions de saut à la traversée de celle-ci pour assurer l'équilibre des forces superficielles et visqueuses.

Nous avons présenté quelques approches permettant de modéliser les écoulements diphasiques. Le choix de la modélisation du fluide à savoir la simulation directe ou encore les modèles de type 1-fluide ou 2-fluides repose essentiellement sur le problème physique étudié, le niveau de précision que l'on souhaite atteindre mais aussi les moyens de calcul que l'on est prêt à investir dans la simulation de l'écoulement diphasique auquel on s'intéresse.

La simulation directe reste l'approche la plus précise car les équations régissant le comportement de chaque fluide sont résolues et le saut des propriétés physiques est traité avec exactitude au niveau de l'interface. Nous avons vu que l'utilisation d'un maillage non structuré mobile s'adaptant à l'interface rend cette approche difficile à exploiter lorsque l'on considère des écoulements diphasiques avec une grande variété d'échelles interfaciales. Pour des interfaces larges, le modèle 1-fluide permet une simulation assez précise. Cependant, lorsque les écoulements étudiés contiennent des inclusions de tailles variables, le maillage doit être raffiné afin de capturer les plus petites structures. Pour des interfaces dont la taille caractéristique est plus petite que la grille eulérienne, ce modèle peut difficilement fonctionner car les maillages générés seraient beaucoup trop coûteux en terme de temps de calcul. De plus, une attention particulière doit être portée au traitement de l'interface avec les différentes méthodes de suivi d'interface couplées à ce modèle selon la description souhaitée des grandes ou petites structures formées dans l'écoulement. Les modèles à 2-fluides dispersés, plus largement utilisés dans l'industrie, sont adaptés à la simulation d'écoulements contenant des petites bulles dispersées dans une phase porteuse. Lorsque que l'écoulement contient de grandes interfaces déformables, ces modèles dispersés peuvent générer d'importants niveaux d'erreur. Toutes ces méthodes présentent de nombreux avantages mais ne peuvent pas toutes simuler avec une grande précision et un temps de calcul raisonnable des écoulements contenant des interfaces avec un large éventail d'échelles interfaciales.

Nous proposons dans ce travail de thèse une alternative à ces approches proposées, l'objectif étant de résoudre à terme, avec le plus de précision possible, les écoulements diphasiques possédant une grande variété de structures interfaciales. Le choix le plus naturel en terme de précision est la modélisation discontinue avec le traitement de chaque fluide de façon séparée et la prise en compte du saut des propriétés à l'interface. Compte tenu de la difficulté de la gestion du maillage mobile non structuré adaptatif, nous avons opté pour la résolution des équations

de chaque fluide sur un grille fixe eulérienne. Les équations que nous souhaitons résoudre sont les suivantes :

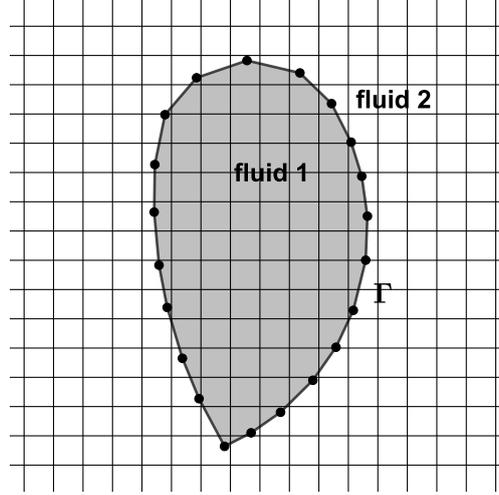


FIGURE 1.8 – Représentation de notre approche de modélisation d'écoulements diphasiques, le comportement de l'écoulement est prédit à l'aide d'une approche sur grille fixe structurée et la méthode front-tracking est utilisée pour suivre explicitement l'interface

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{u}_k = 0 \quad (1.49)$$

$$\frac{\partial \rho_k \bar{u}_k}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_k \bar{u}_k \otimes \bar{u}_k) = \rho_k \bar{g} + \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathcal{T}}_k \quad (1.50)$$

avec la prise en compte des relations de saut à l'interface :

$$\bar{u}_1 = \bar{u}_2 \quad (1.51)$$

$$\bar{n} \cdot (\bar{\mathcal{T}}_1 - \bar{\mathcal{T}}_2) \cdot \bar{n} = \sigma \kappa \quad (1.52)$$

$$\bar{t} \cdot (\bar{\mathcal{T}}_1 - \bar{\mathcal{T}}_2) \cdot \bar{n} = 0 \quad (1.53)$$

Le choix de cette modélisation sur une grille fixe eulérienne structurée nécessite l'utilisation d'une méthode de suivi d'interface adaptée. Nous avons opté pour la méthode de front-tracking permettant le traitement explicite des interfaces même quand leur taille caractéristique est plus petite que la taille de la cellule eulérienne. La figure 1.8 illustre la modélisation choisie dans ce travail pour représenter les écoulements diphasiques. Cette modélisation nécessite une bonne maîtrise de l'outil de suivi d'interface à savoir la méthode de front-tracking ainsi que la bonne intégration des relations de saut dans le modèle pour aboutir à une formulation la plus précise possible.

Nous allons présenter dans le chapitre suivant la méthode de front-tracking que nous avons développée dans le cadre de la simulation d'écoulements diphasiques multi-échelles.

Chapitre 2

La méthode Front-Tracking

Sommaire

2.1	Structure générale de la surface front-tracking 2D . . .	38
2.2	Transport de la surface front-tracking	39
2.2.1	Discrétisation temporelle	40
2.2.2	Interpolation des vitesses des marqueurs lagrangiens . . .	41
2.2.3	Validation : particule dans un écoulement rotationnel . .	44
2.3	Restructuration de la surface front-tracking (reseeding) 48	
2.3.1	Procédure d'ajout d'éléments	50
2.3.2	Procédure de suppression d'éléments	51
2.4	Cas test : Déformation d'une interface circulaire par un tourbillon (Serpentin)	51
2.5	Conservation du volume	55
2.5.1	Méthode homothétique (HR) – FTR-PERM-HR	56
2.5.2	Méthode de correction basée sur la vitesse (VBC) – FTR-PERM-VBC	58
2.5.3	Commentaires sur les méthodes de conservation du volume	59
2.6	Calcul des propriétés géométriques de l'interface . . .	61
2.6.1	Méthode de Frenet	61
2.6.2	Méthode du cercle circonscrit	63
2.6.3	Validation : courbe statique	64
2.6.4	Validation : déformation d'un disque par un écoulement potentiel impactant une plaque plane	66
2.7	Rupture et coalescence de l'interface	68
2.7.1	Procédure générale	69
2.7.2	Procédure de Coalescence	71
2.7.3	Procédure de rupture	71

2.8	Fraction volumique et indicatrice de phase : fonction couleur C	73
2.8.1	Méthode de ray-casting : calcul de la fonction couleur binaire	74
2.8.2	Calcul de la fraction volumique exacte C	75
2.9	Comparaison avec des méthodes de suivi d'interfaces de la littérature	76

Contrairement aux méthodes de suivi d'interfaces basées sur le transport d'un champ scalaire comme les méthodes Volume Of Fluid (VOF) ou Level-Set, où l'interface n'est pas explicitement connue, le principe de la méthode front-tracking repose sur le transport de marqueurs sans masse connectés entre eux et advectés de façon lagrangienne. L'un des avantages de cette méthode réside dans le fait que l'interface est explicitement connue à travers la position des marqueurs.

Plusieurs aspects, parfois complexes, doivent être pris en considération pour la compréhension et le développement de la méthode front-tracking.

- L'utilisation de marqueurs connectés est requise pour le suivi de l'interface. Divers aspects techniques tels que la gestion ou l'organisation de l'interface au cours du temps doivent être maîtrisés.
- Le transport des marqueurs nécessite la connaissance de leur vitesse à des instants discrets. Pour cela, on utilise une méthode d'interpolation pour transférer les informations de la grille eulérienne vers le maillage lagrangien. Cette communication permanente entre la grille fixe et le maillage mobile entraîne généralement une perte de précision liée à la méthode d'interpolation utilisée. Cette perte de précision est également accrue par les éventuelles interpolations temporelles nécessaires pour calculer la vitesse des marqueurs à des instants différents de ceux du champ de vitesse eulérien.
- La mise à jour de la chaîne de marqueurs (reseeding), lorsque l'interface subit d'importantes déformations, est généralement nécessaire dans la méthode de front-tracking. En effet, les marqueurs tendent à fortement se rapprocher ou à s'éloigner les uns des autres selon la dynamique de l'écoulement. Pour conserver une bonne représentation de l'interface, il faut donc supprimer ou ajouter des éléments au cours du temps en modifiant, si nécessaire, les connectivités de la chaîne de marqueurs. Cette mise à jour doit être faite dynamiquement selon des critères à définir.
- Pour des écoulements incompressibles, le volume n'est pas intrinsèquement conservé avec la méthode de front-tracking. Le schéma temporel utilisé lors du transport de l'interface et la représentation approchée de l'interface par des éléments ne permettent pas de conserver parfaitement le volume délimité par l'interface. Il faut donc développer des algorithmes supplémentaires

pour conserver le volume au cours du temps.

- Le calcul des propriétés géométriques de l'interface, comme sa courbure locale ou le vecteur unitaire normal local, est un élément clef pour l'évaluation de la force capillaire lorsque nous considérons des écoulements polyphasiques.
- Lorsque la topologie de l'interface est fortement modifiée, comme lors de la rupture de l'interface (séparation d'une chaîne de marqueurs en deux chaînes distinctes) ou coalescence entre deux interfaces (fusion de deux chaînes distinctes), la séparation ou fusion de chaînes de marqueurs front-tracking doit être explicitement traitée. Contrairement aux méthodes de suivi d'interfaces basées sur le transport d'une fonction indicatrice où le changement de topologie de l'interface est automatique dès lors que deux portions d'interfaces entrent ou quittent une maille, dans la méthode de front-tracking, il faut mettre en place des algorithmes spécifiques permettant de gérer la connexion ou déconnexion des marqueurs lors de la fusion ou rupture d'interfaces.
- A partir d'une surface front-tracking, il est possible de construire un champ scalaire à l'image de la fonction couleur de la méthode VOF ou de la fonction distance de la méthode level-set. L'interface construite à partir de la chaîne de marqueurs est projetée sur la grille fixe afin de retrouver un suivi d'interface eulérien. C'est un point intéressant de la méthode front-tracking car on peut comparer la précision des champs scalaires reconstruits aux champs directement obtenus par des méthodes eulériennes (VOF ou Level-Set) et aussi exploiter cette fonction indicatrice obtenue par la méthode Front-tracking dans la résolution des équations de mouvement pour la simulation d'écoulements diphasiques.

Dans ce chapitre, nous allons aborder ces différents éléments de la méthode front-tracking. Ainsi, les aspects techniques incluant la structure générale de la méthode front-tracking en 2D mais aussi la comparaison de différentes méthodes d'advection de second ordre tenant compte de procédures de réensemencement sera présentée.

La simple advection de l'interface ne garantissant pas la conservation du volume, nous avons développé une méthode originale pour pallier cet inconvénient et assurer cette propriété fondamentale pour les écoulements incompressibles.

Aussi, une attention particulière a été accordée au calcul de la courbure de l'interface et à la direction de la force de tension superficielle avec la méthode front-tracking.

Nous détaillerons également dans ce chapitre l'algorithme utilisé pour la gestion de la connexion/déconnexion des marqueurs permettant la prise en compte efficace des problèmes de coalescence ou rupture de gouttes/bulles lorsque la topologie de

l'interface l'impose.

Enfin nous présenterons quelques méthodes de projection de la surface front-tracking sur une grille fixe Eulérienne permettant la construction d'une fonction indicatrice comparable aux méthodes VOF ou Level-Set. Nous allons considérer des surfaces bidimensionnelles en gardant à l'esprit la possibilité d'extension de la méthode en 3D.

2.1 Structure générale de la surface front-tracking 2D

La méthode front-tracking que nous présentons ici est basée sur les travaux de Tryggvason et *al.* [92] portant sur une méthode front-tracking pour des écoulements polyphasiques isothermes. Contrairement à la méthode front-tracking développée par Shin et Juric [82], nous avons choisi de conserver la connectivité des éléments afin de permettre un calcul direct de certaines propriétés comme la courbure ou la normale à l'interface, toutes deux nécessaires pour déterminer la force de tension de surface. Ainsi, l'interface est représentée par une chaîne de marqueurs sans masse connectés par des éléments.

On note $\mathcal{D} = (\mathcal{E}, \mathcal{M}, \mathcal{T})$, l'ensemble de discrétisation d'une surface front-tracking bidimensionnelle.

- \mathcal{E} est l'ensemble des $N_{\mathcal{E}}$ éléments (ou segments) connectés deux à deux par leurs sommets, donnant ainsi une courbe fermée. Chaque composante de \mathcal{E} est noté e .
- \mathcal{M} est l'ensemble des $N_{\mathcal{M}}$ points, appelés marqueurs ou nœuds, qui relient deux éléments adjacents. Chaque composante de \mathcal{M} est noté m . Pour une courbe fermée en 2D, il y a autant d'éléments que de marqueurs et donc l'égalité $N_{\mathcal{E}} = N_{\mathcal{M}}$ est systématiquement vérifiée. La notation $m_{[e,1]}$ et $m_{[e,2]} \in \mathcal{M}$ est employée pour numéroter les deux marqueurs m appartenant à l'élément e .

Pour tout $e \in \mathcal{E}$, l'élément voisin partageant le marqueur $m_{[e,1]}$ (resp. $m_{[e,2]}$) est noté $e_{[1]}$ (resp. $e_{[2]}$). La numérotation locale des marqueurs est telle que $m_{[e,1]}$ et $m_{[e_{[1]},2]}$ sont liés à une composante unique de \mathcal{M} car ils représentent tous deux le même sommet connectant les éléments e et $e_{[1]}$. Le principe est le même pour $m_{[e,2]}$ et $m_{[e_{[2]},1]}$. Afin de mettre en exergue l'équivalence entre les différentes notations, le symbole " \equiv " est utilisé ($m_{[e,1]} \equiv m_{[e_{[1]},2]}$ et $m_{[e,2]} \equiv m_{[e_{[2]},1]}$). On définit également :

- \mathcal{T} l'ensemble des $N_{\mathcal{E}}$ couples tel que pour tout $e \in \mathcal{E}$ et $(m_{[e,1]}, m_{[e,2]}) \in \mathcal{M}^2$, on a $(m_{[e,1]}, m_{[e,2]}) \in \mathcal{T}$. Les deux marqueurs sont ordonnés si, pour tout $e \in \mathcal{E}$, $m_{[e,2]} \equiv m_{[e_{[2]},1]}$ (le second marqueur de l'élément e est le premier marqueur de son voisin $e_{[2]}$).

La figure 2.1 illustre toutes les notations présentées auparavant pour un élément e ainsi que ses sommets associés et ses éléments voisins.

Pour tout $m \in \mathcal{M}$, on désigne par \bar{x}_m et \bar{V}_m ses coordonnées et sa vitesse. On définit également \bar{n}_m , le vecteur normal unitaire sortant par rapport au volume délimité par l'interface et localisé au niveau du marqueur $m \in \mathcal{M}$. L'expression

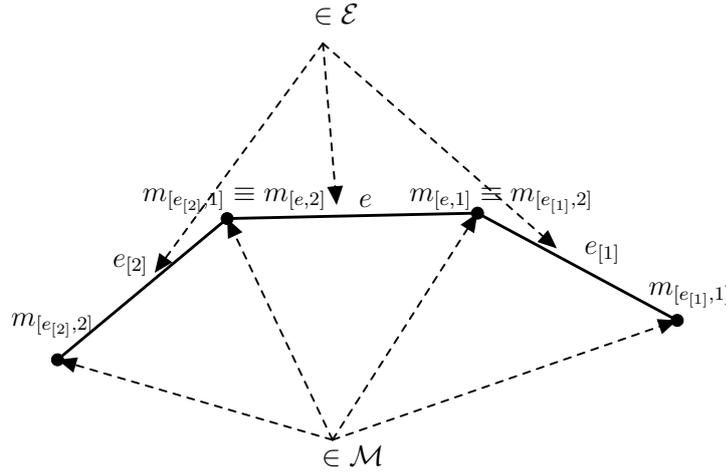


FIGURE 2.1 – Représentation d'un élément front-tracking ainsi que ses sommets et ses éléments voisins associés

mathématique du vecteur \bar{n}_m sera présentée et discutée ultérieurement en Sec. 2.6. Il est important de souligner que la taille et la valeur des composantes des différents ensembles évoluent au cours du temps. Par exemple, $\mathcal{E}^{(n)}$ représente l'ensemble des éléments au temps $t^{(n)}$.

Enfin pour clarifier le vocabulaire dans ce qui va suivre, on utilisera l'appellation "grille" pour le maillage eulérien fixe décalé dédié à la résolution des équations du mouvement fluide (Navier-Stokes). Le terme "maillage" seul, se réfère exclusivement à la discrétisation de l'interface lagrangienne constituée d'éléments et marqueurs comme décrit au-dessus.

2.2 Transport de la surface front-tracking

L'interface lagrangienne est transportée en résolvant l'équation lagrangienne suivante : $\forall m \in \mathcal{M}$,

$$\frac{d\bar{x}_m}{dt} = \bar{V}_m(t) \quad (2.1)$$

où $\bar{V}_m(t)$ est la vitesse lagrangienne du marqueur m . La position des marqueurs est obtenue en intégrant l'équation d'advection lagrangienne (2.1). Pour cela, la vitesse \bar{V}_m doit être connue en chaque marqueur, à chaque instant. Il faut donc déterminer la vitesse \bar{V}_m du marqueur m à partir des vitesses calculées aux nœuds de la grille eulérienne en interpolant les vitesses aux marqueurs de la surface front-tracking. Il faut rappeler que nous faisons l'hypothèse d'absence de changement de phase sans laquelle la vitesse de l'interface ne pourrait être obtenue comme une simple interpolation des vitesses du fluide.

Nous allons présenter brièvement quelques schémas numériques appropriés pour la résolution temporelle de l'équation (2.1) mais aussi différentes méthodes d'interpolation permettant d'évaluer les vitesses aux marqueurs de la surface lagrangienne.

2.2.1 Discrétisation temporelle

Nous avons choisi d'intégrer le terme temporel de l'équation (2.1) en utilisant le schéma temporel Runge-Kutta offrant un très bon compromis entre stabilité et précision. Il s'agit d'un schéma à un pas utilisant une formule d'intégration numérique à un ou plusieurs points intermédiaires pour calculer l'intégrale. Plus le nombre de points intermédiaires utilisés est grand, plus le schéma est précis. Dans notre étude, nous avons testé les schémas Runge-Kutta allant de l'ordre 1 à l'ordre 3 afin de caractériser l'influence du schéma temporel sur l'ordre de précision numérique pour un marqueur advecté de façon lagrangienne. Pour tout $m \in \mathcal{M}^{(n,n+1)}$, on définit les différents schémas Runge-Kutta comme suit :

Runge-Kutta d'ordre 1 ou schéma d'Euler (RK1) :

$$\bar{x}_m^{(n+1)} = \bar{x}_m^{(n)} + \Delta t \bar{V}_m^{(n)} \quad (2.2)$$

Runge-Kutta d'ordre 2 (RK2) :

$$\bar{x}_m^* = \bar{x}_m^{(n)} + \Delta t \bar{V}_m^{(n)} \quad (2.3a)$$

$$\bar{x}_m^{(n+1)} = \frac{1}{2} (\bar{x}_m^{(n)} + \bar{x}_m^*) + \frac{\Delta t}{2} \bar{V}_m^{(*,n+1)} \quad (2.3b)$$

Runge-Kutta d'ordre 3 (RK3) :

$$\bar{x}_m^* = \bar{x}_m^{(n)} + \Delta t \bar{V}_m^{(n)} \quad (2.4a)$$

$$\bar{x}_m^{**} = \frac{3}{4} \bar{x}_m^{(n)} + \frac{1}{4} [\bar{x}_m^* + \Delta t \bar{V}_m^{(*,n+1)}] \quad (2.4b)$$

$$\bar{x}_m^{(n+1)} = \frac{1}{3} \bar{x}_m^{(n)} + \frac{2}{3} [\bar{x}_m^{**} + \Delta t \bar{V}_m^{(**,n+\frac{1}{2})}] \quad (2.4c)$$

Avec $\Delta t \stackrel{\text{def}}{=} t^{(n+1)} - t^{(n)}$ le pas de temps, et $\bar{x}_m^{(n)}$ (resp. $\bar{x}_m^{(n+1)}$) la position du marqueur m à $t^{(n)}$ (resp. $t^{(n+1)}$). Les vitesses intermédiaires lagrangiennes $\bar{V}_m^{(\star, n+1)}$ et $\bar{V}_m^{(\star\star, n+1)}$ correspondent aux vitesses aux positions \bar{x}_m^\star et $\bar{x}_m^{\star\star}$ et au temps $t^{(n+1)}$. Elles sont calculées en interpolant les vitesses des nœuds de la grille eulérienne et en utilisant la méthode d'extrapolation d'Adams-Bashforth pour obtenir ces vitesses au temps *a priori* inconnu $t^{(n+1)}$.

Schéma à pas multiples (Adams-Bashforth) :

Le principe de ce schéma à pas multiples est d'obtenir une dérivée d'ordre supérieur à 1 en utilisant des valeurs du second membre de l'équation (2.1) à des instants antérieurs à t^n . Avec une méthode d'extrapolation d'Adams-Bashforth du second ordre, la vitesse lagrangienne intermédiaire $\bar{V}_m^{(\star, n+1)}$ à la position \bar{x}_m^\star et au temps $t^{(n+1)}$ s'écrit par exemple :

$$\bar{V}_m^{(\star, n+1)} \stackrel{\text{def}}{=} 2\bar{u}^{(n)}(\bar{x}_m^\star) - \bar{u}^{(n-1)}(\bar{x}_m^\star) \quad (2.5)$$

où $\bar{u}^{(n)}(\bar{x})$ et $\bar{u}^{(n-1)}(\bar{x})$ sont les vitesses de la grille eulérienne aux temps $t^{(n)}$ et $t^{(n-1)}$ et à la position \bar{x} . Sachant que \bar{x}_m , \bar{x}_m^\star et $\bar{x}_m^{\star\star}$ ne sont pas directement localisés sur la grille des vitesses eulériennes, il faut calculer la vitesse en ces points en utilisant, par exemple, des méthodes d'interpolation.

2.2.2 Interpolation des vitesses des marqueurs lagrangiens

Pour le transport de la surface front-tracking, la vitesse aux nœuds est calculée à partir du champ de vitesse de la grille eulérienne. Il est donc nécessaire d'échanger les informations entre la grille fixe et le maillage de la structure lagrangienne. Nous avons étudié dans ce travail trois méthodes d'interpolation. Deux d'entre elles sont plus généralement utilisées dans le cadre des méthodes front-tracking, à savoir la méthode d'interpolation bilinéaire [56] et la méthode de Peskin [64]. La troisième méthode présentée dans ce travail est la méthode PERM (Parabolic Edge Reconstruction Method) de McDermott et *al.* [51] qui permet de reconstruire une vitesse à divergence nulle sur les marqueurs de la surface front-tracking à partir des vitesses de la grille Eulérienne.

Dans les méthodes d'interpolation bilinéaire ou Peskin, la vitesse des marqueurs de la surface front-tracking est directement calculée en utilisant les vitesses connues aux nœuds de la grille eulérienne à partir d'un stencil de nœuds plus ou moins compact. Ainsi la vitesse du marqueur m de l'interface s'écrit :

$$\bar{V}_m = \sum_{i,j} \omega_{i,j}^m \bar{u}_{i,j} \quad (2.6)$$

où \bar{V}_m est la vitesse du marqueur m , $\bar{u}_{i,j}$ la vitesse du nœud (i, j) de la grille eulérienne et $\omega_{i,j}^m$ le poids de chaque nœud de la grille fixe appliqué au marqueur

m pour une sommation effectuée sur des nœuds de la grille fixe situés autour du marqueur m .

Idéalement, la valeur interpolée au marqueur doit être identique à la valeur au point de la grille si la position du marqueur coïncide avec ce point. Pour ce faire, les poids doivent satisfaire la condition suivante.

$$\sum_{i,j} \omega_{i,j}^m = 1 \quad (2.7)$$

Le choix des nœuds pour l'interpolation dépend de la fonction de poids adoptée. Cette étape est déterminante dans la qualité de l'interpolation. Selon le stencil utilisé (ou le nombre de points), on peut distinguer la méthode d'interpolation bilinéaire où les quatre nœuds de la grille eulérienne autour du marqueur m sont utilisés pour l'interpolation ou encore les méthodes introduites par Peskin dans ses travaux [64, 65, 66] où un stencil beaucoup plus large (9 points) autour de m est utilisé pour l'interpolation.

Méthode d'interpolation bilinéaire

L'interpolation bilinéaire [56] est une méthode classique d'interpolation bidimensionnelle où quatre points de la grille fixe autour du marqueur m sont considérés pour calculer la vitesse interpolée en ce marqueur en 2D. Ici, les poids $\omega_{i,j}^m$ sont simplement les portions surfaciques délimitées par les projections verticale et horizontale du marqueur dans une cellule (i, j) donnée, comme l'illustre la Figure 2.2.

En pratique, les fonctions de poids s'écrivent :

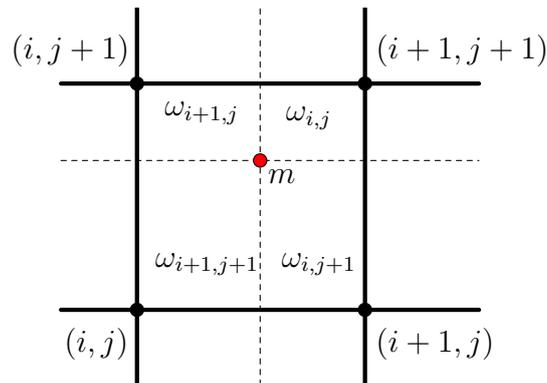


FIGURE 2.2 – Poids surfaciques utilisés dans la méthode bilinéaire pour interpoler la vitesse au niveau du marqueur m

$$\omega_{I,J}^m(\bar{x}_m) = d(r_x^I) \times d(r_y^J), \text{ pour } I \in \{i, i+1\}, J \in \{j, j+1\} \quad (2.8)$$

avec $\bar{x}_m = (x_m, y_m)^t$, $r_x^I = x_m - x_{2i+1-I}$, $r_y^J = y_m - y_{2j+1-J}$, et $d(x) = |x|$.

On peut également utiliser d'autres types de fonctions utilisant un stencil plus large pour une transition plus lisse.

Méthode de Peskin

Peskin et ses coauteurs [64, 65, 66] ont introduit des fonctions de poids faisant intervenir 9 points de la grille fixe autour du nœud considéré (27 en 3D). Dans ce cas, l'interface est épaissie sur plus d'une maille. Le Tableau 2.1 présente différentes fonctions de Peskin pouvant être utilisées pour calculer la vitesse interpolée aux marqueurs.

Plusieurs études menées dans le cadre de simulations polyphasiques, avec l'utilisa-

$$d(r) = \begin{cases} (1/4)(1 + \cos(\pi r/2)), & |r| < 2 \\ 0, & |r| \geq 2 \end{cases} \quad (2.9)$$

$$d(r) = \begin{cases} d_1(r), & |r| \geq 1 \\ 1/2 - d_1(2 - |r|), & 1 < |r| < 2 \\ 0, & |r| \geq 2 \end{cases} \quad (2.10)$$

$$\text{avec } d_1(r) = \frac{3 - 2|r| + \sqrt{1 + 4|r| - 4r^2}}{8}$$

TABLE 2.1 – Fonctions de poids utilisées dans la méthode Peskin pour interpoler la vitesse au niveau du marqueur m

tion de l'interpolation bilinéaire ou les méthodes de type Peskin, ont généralement montré des différences minimes, même si par principe, l'utilisation d'un support eulérien le plus compact possible est préférable afin de minimiser l'erreur d'interpolation. Par ailleurs, les méthodes d'interpolation introduites par Peskin sont plus coûteuses car elles requièrent l'utilisation d'un stencil plus grand pour l'interpolation d'une quantité autour d'un marqueur m . Il est difficile de conclure sur la meilleure méthode à utiliser. Dans ce travail, nous avons utilisé la deuxième fonction de poids (2.10) de Peskin présentée dans le Tableau 2.1 afin de comparer les résultats obtenus par cette méthode aux résultats obtenus par la méthode bilinéaire et la méthode PERM.

Méthode PERM

Mc Dermott et Pope présentent dans leur travail [51] une méthode de transport de particules lagrangiennes pour un couplage Volumes Finis/Large Eddy Simulation dans des écoulements faiblement compressibles : c'est la méthode PERM ou Parabolic Edge Reconstruction Method. Notre intérêt pour cette méthode réside dans le fait qu'elle est en premier lieu applicable à tout type de particules fluides même lorsque celles-ci sont très nombreuses. La méthode repose sur une reconstruction de la vitesse, elle-même basée sur un calcul de divergence au centre des cellules eulériennes et des nœuds. Cette vitesse reconstruite est continue et parabolique par morceaux dans la direction de la composante de vitesse et linéaire par morceaux dans la direction normale. Dans une maille donnée, la divergence reconstruite est bilinéaire et consistante avec la divergence discrète de la maille des vitesses. Pour un problème à masse volumique constante, la divergence de la vitesse reconstruite est nulle car l'intensité de la différence des divergences aux nœuds est nulle entre deux cellules voisines. L'implémentation de cette méthode est largement discutée dans [51].

Nous avons comparé ces trois méthodes d'interpolation à travers des cas test analytiques afin d'évaluer la méthode la plus précise pour calculer la vitesse des marqueurs de la surface front-tracking.

2.2.3 Validation : marqueur dans un écoulement rotationnel

On cherche ici à valider les méthodes d'interpolation et de discrétisation temporelle présentées auparavant à travers un cas test. Nous allons ainsi réaliser une étude de convergence en calculant l'erreur et l'ordre de précision induit par le schéma de transport et les méthodes d'interpolation utilisées.

On considère un marqueur lagrangien, initialement située en $(1.5 m; 0.75 m)$, et advectée dans un champ sinusoïdal de vitesse $\bar{u} = u\bar{e}_x + v\bar{e}_y$ dont les caractéristiques sont les suivantes : $\forall(x, y) \in [0 m; 2\pi m] \times [0 m; 2\pi m]$,

$$u(x, y) = 1 - 2 \cos x - t \sin(y - t) \quad [u] = m/s \quad (2.11a)$$

$$v(x, y) = 1 + 2 \sin x - t \cos(y - t) \quad [v] = m/s \quad (2.11b)$$

Pour ce cas test, le terme temporel de l'équation (2.1) a été résolu avec les schémas RK1, RK2 et RK3 afin de voir l'influence du schéma temporel sur la position du marqueur. Nous avons également comparé les méthodes d'interpolation bilinéaire, Peskin et PERM pour l'évaluation la vitesse \bar{V}_m du marqueur à chaque instant. La solution analytique de ce champ de vitesse n'étant pas connue, nous avons calculé une position de référence du marqueur en utilisant un schéma temporel RK4

avec un faible pas de temps, $\Delta t = 10^{-5}$ s, et la vitesse analytique (Eq. 2.11a-2.11b) directement imposée au marqueur afin de s'affranchir des erreurs d'interpolation des vitesses.

Etude temporelle

Cette étude a été menée en 2 temps. Afin de s'affranchir de l'erreur spatiale d'interpolation des vitesses, la vitesse analytique (Eq. 2.11a-2.11b) a d'abord été imposée au marqueur lagrangien. Ensuite, nous avons conservé la connaissance de la vitesse analytique sur la grille eulérienne et nous avons utilisé une interpolation bilinéaire pour approximer la vitesse du marqueur. L'erreur temporelle ainsi mesurée est définie comme suit :

$$\|E_{\Delta t}\| = \frac{\sum_{n=1\dots N} |\bar{x}_{\text{ref}}^{(n)} - \bar{x}_m^{(n)}|}{\sum_{n=1\dots N} |\bar{x}_{\text{ref}}^{(n)}|} \quad (2.12)$$

avec $\bar{x}_{\text{ref}}^{(n)}$ la position de référence du marqueur à l'instant $t^{(n)}$ et $N = (t/\Delta t)$ le nombre d'itérations effectué sur le temps d'intégration $t = 4$ s.

Pour une vitesse exacte du marqueur, le tableau 2.2 présente l'erreur commise sur la position en fonction du pas de temps ainsi que l'ordre local de convergence. Celui-ci est obtenu par la relation suivante :

$$\text{Ordre} = \frac{\ln(E_{\Delta t_2}/E_{\Delta t_1})}{\ln(\Delta t_2/\Delta t_1)} \quad (2.13)$$

où $E_{\Delta t_2}$ et $E_{\Delta t_1}$ sont les erreurs temporelles associées aux solutions correspondant respectivement aux pas de temps Δt_2 et Δt_1 . Toutes les études de convergence présentées ici ont été réalisées avec un rapport $(\Delta t_1/\Delta t_2) = 10$. Les ordres de

Δt (s)	$\ E_{\Delta t}\ $ RK1	Ordre	$\ E_{\Delta t}\ $ RK2	Ordre	$\ E_{\Delta t}\ $ RK3	Ordre
0,1	2,7E-01	-	1,3E-02	-	9,9E-04	-
0,01	3,2E-02	0,9	1,4E-04	2,0	9,9E-07	3,0
0,001	3,3E-03	1,0	1,4E-06	2,0	9,9E-10	3,0
0,0001	3,3E-04	1,0	1,4E-08	2,0	9,1E-13	3,0

TABLE 2.2 – Erreur temporelle sur un temps d'intégration de 4 s et les ordres de convergence associés, obtenus en utilisant les schémas d'intégration temporelle RK1, RK2, RK3 et la vitesse analytique directement imposée à la position du marqueur

convergence retrouvés dans le tableau 2.2 sont en accord avec l'ordre de précision

des différentes méthodes d'intégration temporelle Runge-Kutta. L'erreur diminue bien avec le pas de temps et la précision du schéma temporel.

Pour une vitesse interpolée \bar{V}_m du marqueur, nous adoptons un maillage $h = 2\pi/512 m$. Le tableau 2.3 présente l'erreur en temps pour les méthodes Runge-Kutta d'ordre 2 et 3. Les ordres de précision obtenus pour les méthodes RK2 et

$\Delta t(s)$	$\ E_{\Delta t}\ $ RK2	Ordre	$\ E_{\Delta t}\ $ RK3	Ordre
0,1	6,1E-01	-	6,3E-01	-
0,01	5,1E-02	1,1	5,1E-02	1,1
0,001	5,1E-03	1,0	5,1E-03	1,0
0,0001	5,1E-04	1,0	5,1E-04	1,0

TABLE 2.3 – Erreur temporelle sur un temps d'intégration de 4 s et les ordres de convergence associés, obtenus en utilisant les schémas d'intégration temporelle RK2, RK3 et l'interpolation bilinéaire pour le calcul de vitesse du marqueur pour un pas d'espace donné $h = 2\pi/512 m$.

RK3 ne sont pas les ordres que prédisent ces schémas temporels. L'ordre de précision semble être dégradé par l'utilisation de la méthode d'interpolation bilinéaire pour la vitesse du marqueur. Les mêmes calculs ont été effectués en utilisant la méthode Peskin ou PERM et les ordres de convergence étaient identiques.

Sachant que ces méthodes d'interpolation sont au moins d'ordre 2, on s'attend à obtenir un ordre global similaire lorsque le schéma temporel est aussi d'ordre 2.

Ce résultat s'explique par la mauvaise utilisation des schémas RK2 et RK3. En effet, les vitesses eulériennes utilisées lors de l'interpolation pour le calcul de la vitesse \bar{V}_m du marqueur, sont des vitesses obtenues à l'instant $t^{(n)}$, alors que le principe de la méthode RK2 repose sur le calcul de vitesses aux instants $t^{(n)}$ et $t^{(n+1)}$ et la méthode RK3, aux instants $t^{(n)}$, $t^{(n)} + \Delta t/2$ et $t^{(n+1)}$.

En pratique, à l'instant $t^{(n)}$, les vitesses au temps $t^{(n+1)}$ ne sont pas connues. Pour remédier à cela, nous avons appliqué la méthode d'Adams-Bashforth pour extrapoler les vitesses eulériennes utilisées pour calculer la vitesse du marqueur à l'instant $t^{(n+1)}$. Le tableau 2.4 présente l'erreur temporelle sur un temps d'intégration de 4 s obtenue en utilisant la méthode bilinéaire pour calculer la vitesse du marqueur ainsi qu'une combinaison de schémas RK2 - Adams-Bashforth pour l'intégration temporelle. On constate que l'ordre de précision numérique a été amélioré et on obtient l'ordre 2 en combinant le schéma RK2 avec la méthode d'Adams-Bashforth. Pour atteindre l'ordre 3 prédit par le schéma RK3 il faudrait de la même manière reconstruire une vitesse à l'instant $t^{(n+1)}$ à partir des vitesses aux instants $t^{(n)}$, $t^{(n-1)}$ et $t^{(n-2)}$. En pratique, il est très coûteux de sauvegarder

$\Delta t(s)$	$\ E_{\Delta t}\ $ RK2	Ordre	$\ E_{\Delta t}\ $ RK3	Ordre
0,1	9,2E-02	-	7,7E-02	-
0,01	8,0E-04	2,1	6,7E-04	2,1
0,001	8,0E-06	2,0	6,7E-06	2,0
0,0001	8,0E-08	2,0	6,7E-08	2,0

TABLE 2.4 – Erreur temporelle sur un temps d'intégration de 4 s maillage $h = 2\pi/512 m$ avec la combinaison RK2 - Adams-Bashforth pour le schéma temporel et l'interpolation bilinéaire pour la vitesse.

les trois champs de vitesse des instants $t^{(n)}$, $t^{(n-1)}$ et $t^{(n-2)}$ dans une simulation d'écoulements diphasiques.

Pour la suite des calculs, nous utiliserons la méthode RK2 combinée à la méthode d'extrapolation d'Adams-Bashforth à l'ordre 2 pour intégrer la dérivée temporelle de l'équation (2.1).

Etude spatiale

On s'intéresse maintenant à la précision des différents schémas d'interpolation. On définit l'erreur spatiale :

$$\|E_h\| = \frac{\sum_{n=1\dots N} |\bar{x}_{\text{ref}} - \bar{x}_m^{(n)}|}{\sum_{n=1\dots N} |\bar{x}_{\text{ref}}|} \quad (2.14)$$

Le pas de temps est contrôlé par la condition de Courant-Friedrichs-Lewy, notée CFL, dont la valeur doit être choisie inférieure à 1.

$$\Delta t = \frac{CFL}{\frac{\max|u|}{h} + \frac{\max|v|}{h}} \quad (2.15)$$

Le tableau 2.5 présente l'erreur spatiale à CFL fixé ($CFL = 0,5$), commise sur la position du marqueur en fonction du pas d'espace h ainsi que l'ordre local de convergence, pour les trois méthodes d'interpolation. Celui-ci est obtenu par la relation suivante :

$$Ordre = \frac{\ln(E_{h_2}/E_{h_1})}{\ln(h_2/h_1)} \quad (2.16)$$

où E_{h_2} et E_{h_1} sont les erreurs spatiales associées aux solutions correspondant respectivement aux pas d'espace h_2 et h_1 . Toutes les études de convergence présentées ici ont été réalisées avec un rapport $(h_1/h_2) = 2$. Les méthodes d'interpolation sont toutes d'ordre 2. L'erreur diminue pour chacune des méthodes lorsque nous raffine le maillage. Cependant, à maillage fixé, l'erreur obtenue avec la méthode PERM

$h(m)$	PERM			Bilinéaire			Peskin		
	$\ E_h\ $	RK2	Ordre	$\ E_h\ $	RK2	Ordre	$\ E_h\ $	RK2	Ordre
$2\pi/16$	3,5E-02		-	8,3E-02		-	2,2E-01		-
$2\pi/32$	8,9E-03			2,2E-02	1,9		5,9E-02	1,9	
$2\pi/64$	2,2E-03		2,0	5,1E-03	2,1		1,5E-02	2,0	
$2\pi/128$	5,5E-04		2,0	1,2E-03	2,1		3,7E-03	2,0	
$2\pi/256$	1,3E-04		2,0	3,1E-04	2,0		9,3E-04	2,0	
$2\pi/512$	3,4E-05		2,0	7,8E-05	2,0		2,3E-04	2,0	

TABLE 2.5 – Erreur spatiale relative sur un temps d’intégration de 4 s pour une condition CFL de 0,5.

est la plus petite. Les erreurs mesurées avec les méthodes d’interpolation bilinéaire et Peskin sont généralement 5 à 10 fois plus grandes pour des grilles grossières ($h = 2\pi/16 m$ ou $h = 2\pi/32 m$), même si la méthode bilinéaire offre de meilleurs résultats que la méthode Peskin. La méthode PERM offre quant à elle un bon niveau de précision même pour les pas d’espace h les plus grossiers.

Les figures 2.3a-2.3c comparent la solution de référence aux solutions calculées avec les méthodes PERM, Peskin et bilinéaire pour les maillages $h = 2\pi/16 m$ et $h = 2\pi/128 m$. Pour le maillage $h = 2\pi/16 m$, la solution de la méthode PERM est la méthode la plus proche de la solution de référence. Les méthodes bilinéaires et Peskin offrent de moins bons résultats en terme de précision. Pour le maillage $h = 2\pi/128 m$, les trois solutions sont très proches de la solution de référence même si la figure 2.3c montre que la solution obtenue avec la méthode PERM est la plus précise.

Au vu des résultats obtenus avec la méthode PERM, nous allons nous concentrer sur cette approche pour calculer les vitesses aux nœuds de la surface lagrangienne à transporter. Le terme temporel de l’équation de transport (2.1) sera intégré avec une méthode RK2 combinée à la méthode d’extrapolation d’Adams-Bashforth.

2.3 Restructuration de la surface front-tracking (reseeding)

Dans les écoulements polyphasiques de fluide, l’interface peut subir d’importantes déformations pouvant entraîner l’apparition de régions avec des fortes densités de marqueurs ou au contraire des zones où la concentration des marqueurs est faible. Une densité de marqueurs trop faible par rapport à la taille de la grille eulérienne h peut entraîner une perte de précision au niveau de l’interface. En

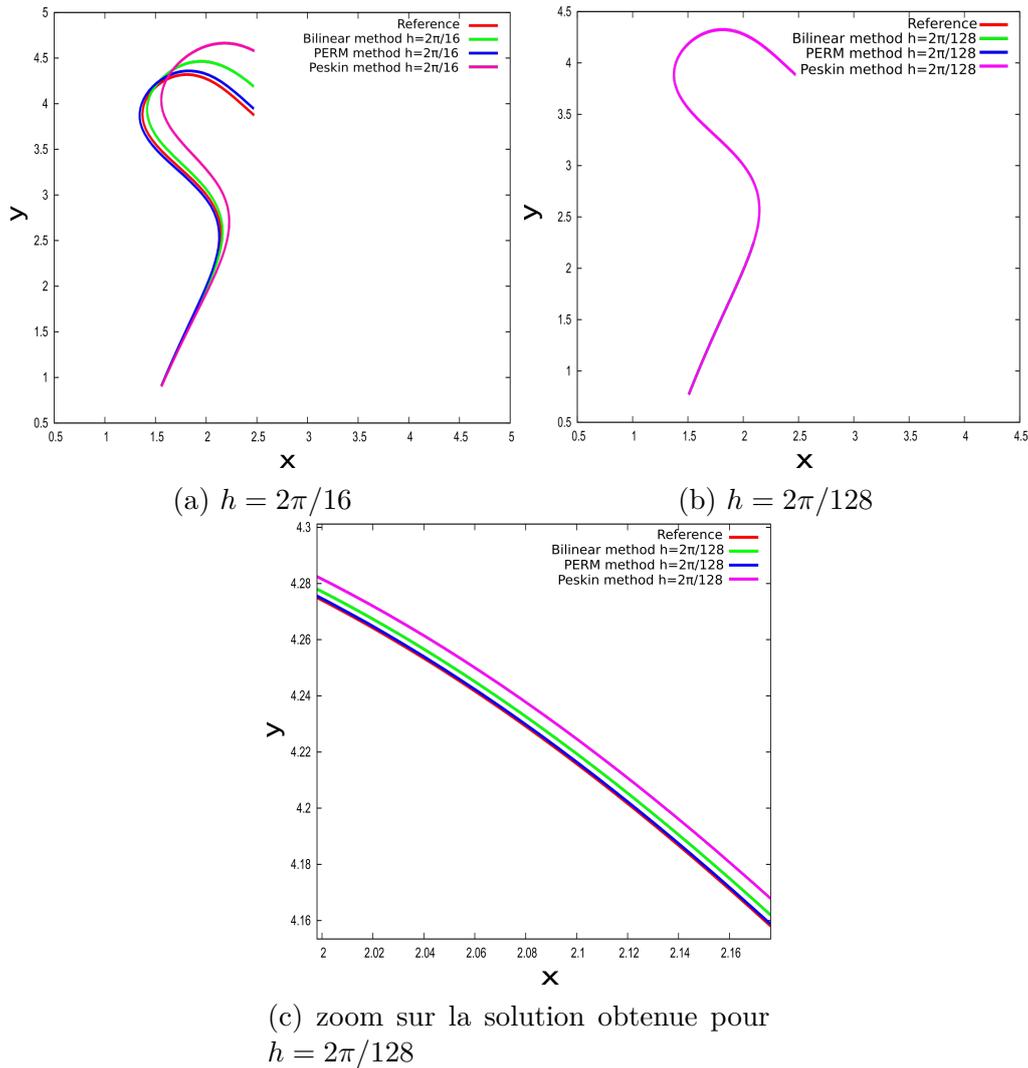


FIGURE 2.3 – Représentation de la position du marqueur dans un écoulement rotationnel (Eq. 2.11a-2.11b) : comparaison des méthodes bilinéaire, Peskin et PERM pour le calcul de la vitesse à la solution de référence.

revanche, une densité de marqueurs trop importante consomme beaucoup de ressources CPU et de mémoire et peut créer des oscillations parasites durant l'étape d'advection de l'interface (voir [48]). Ainsi, pour préserver une bonne résolution de l'interface, on doit conserver un écart à peu près constant entre les marqueurs au cours du temps en rajoutant ou supprimant localement des marqueurs. Notons $h_e^{(n)}$, la taille d'un élément $e \in \mathcal{E}^{(n)}$ à l'instant $t^{(n)}$. Initialement, celle-ci est définie de manière à correspondre à la moitié de la taille de la grille eulérienne ($h_e \stackrel{\text{def}}{=} h_e^{(0)} \approx h/2$, voir Sec. 2.4). Durant l'étape de transport, la taille des éléments

est contrôlée afin qu'elle reste comprise entre la moitié et le double de la taille de la grille eulérienne. Ainsi la taille des éléments est généralement comprise entre $h_e/2$ et $2h_e$ (voir [92]).

2.3.1 Procédure d'ajout d'éléments

Le processus d'ajout d'éléments est le suivant. A l'instant $t^{(n)}$, si la taille $h_e^{(n)}$ de l'élément $e \in \mathcal{E}^{(n)}$ est trop grande ($h_e^{(n)} > 2h_e$), on enrichit le maillage de la surface front-tracking. Le nombre $N_{\mathcal{E}}$ des ensembles \mathcal{E} , \mathcal{M} et \mathcal{T} est ainsi augmenté d'un objet, $N_{\mathcal{E}} \leftarrow N_{\mathcal{E}} + 1$. L'élément e est divisé en deux éléments deux fois plus petits (Fig. 2.4), le nouvel élément e' et l'élément e'' , qui se substituent à l'ancien élément e . Un nouveau marqueur $m_{[e',1]} \equiv m_{[e'',2]}$ est également inséré au centre de l'ancien

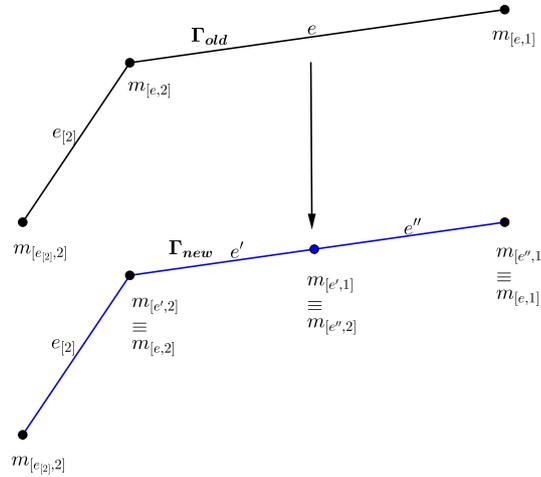


FIGURE 2.4 – Subdivision de l'élément e , Γ_{old} représente la surface front-tracking avant l'opération de reseeding et Γ_{new} la surface après le reseeding.

élément e , $\bar{x}_{m_{[e'',2]}} \equiv \bar{x}_{m_{[e',1]}} = (\bar{x}_{m_{[e,1]}} + \bar{x}_{m_{[e,2]}})/2$, et un nouveau couple est défini pour le nouvel élément e' : $(m_{[e',1]}, m_{[e',2]}) \in \mathcal{T}$. Les connexions entre le nouveau marqueur et les éléments adjacents sont également mises à jour :

- Nouvel élément e' : $m_{[e',2]} \equiv m_{[e,2]}$, $e'_{[1]} = e''$ et $e'_{[2]} = e_{[2]}$. Réciproquement, le premier voisin de l'élément $e_{[2]}$ est $e_{[2][1]} = e'$.
- Élément e'' , anciennement l'élément e : $m_{[e'',1]} \equiv m_{[e,1]}$, $e''_{[2]} = e'$ et $e''_{[1]} = e_{[1]}$. Réciproquement, le second voisin de l'élément $e_{[1]}$ est $e_{[1][2]} = e''$.

La vitesse du nouveau marqueur $m_{[e',1]} \equiv m_{[e'',2]}$ est approximée par une combinaison linéaire des vitesses des marqueurs adjacents : $\bar{V}_{m_{[e'',2]}} \equiv \bar{V}_{m_{[e',1]}} = (\bar{V}_{m_{[e,1]}} +$

$$\bar{V}_{m_{[e,2]}})/2$$

2.3.2 Procédure de suppression d'éléments

A l'instant $t^{(n)}$, la suppression d'un élément trop petit $e \in \mathcal{E}^{(n)}$ dépend également de la courbure adimensionnée par la taille des éléments calculée au niveau des marqueurs $m_{[e,1]}$ et $m_{[e,2]}$ afin d'éviter une forte modification locale de l'aspect topologique de l'interface. En effet, supprimer un élément dans une zone de forte courbure, même si ce dernier est trop petit, peut avoir des répercussions sur l'aspect de l'interface. C'est le cas par exemple des interfaces possédant des régions très anguleuses où l'on peut risquer de faire disparaître la zone angulaire et fortement modifier l'interface en y supprimant un élément.

Ainsi, si $\kappa_{[e,1]}h_e^{(n)}$ et $\kappa_{[e,2]}h_e^{(n)}$ sont inférieurs à la valeur limite $\kappa_{th} = 0.1$ (voir Sec. 2.6 pour l'approximation des courbures), les deux marqueurs de l'élément e sont fusionnés afin de créer un seul marqueur situé entre les deux marqueurs précédents (Fig. 2.5). Les coordonnées du nouveau marqueur sont calculées à partir

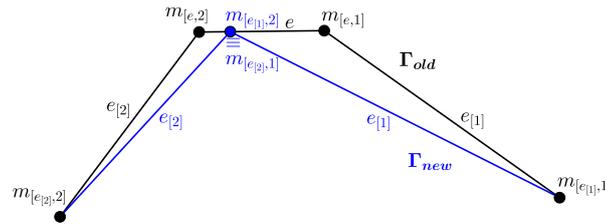


FIGURE 2.5 – Suppression de l'élément e , Γ_{old} représente la surface front-tracking avant l'opération de reseeding et Γ_{new} la surface après le reseeding.

de la moyenne harmonique des coordonnées de ses deux parents, pondérée par les courbures respectives :

$$\bar{x}_{m_{[e_{[1],2}]} \equiv \bar{x}_{m_{[e_{[2],1}]}} = \frac{\kappa_{[e,1]}\bar{x}_{m_{[e,2]}} + \kappa_{[e,2]}\bar{x}_{m_{[e,1]}}}{\kappa_{[e,1]} + \kappa_{[e,2]}}$$

Les composantes $e \in \mathcal{E}^{(n)}$, $m_{[e,2]} \in \mathcal{M}^{(n)}$ et $(m_{[e,1]}, m_{[e,2]}) \in \mathcal{T}^{(n)}$ sont supprimées entraînant une diminution de la taille des différents ensembles $N_{\mathcal{E}} \leftarrow N_{\mathcal{E}} - 1$. Les connectivités locales sont à nouveau mises à jour.

2.4 Cas test : Déformation d'une interface circulaire par un tourbillon (Serpentin)

Ce problème introduit par Bell, Collela et Glaz [4] consiste à transporter dans un domaine carré $[0; 1 m] \times [0; 1 m]$, une interface circulaire de rayon $0,15 m$, initialement centrée en $(0,5 m; 0,75 m)$, par le champ de vitesse $\vec{u} = u\vec{e}_x + v\vec{e}_y$:

$$u(x, y) = -2\sin(\pi x)^2 \cos(\pi y) \sin(\pi y) \quad [u] = m/s \quad (2.17a)$$

$$v(x, y) = 2\sin(\pi y)^2 \cos(\pi x) \sin(\pi x) \quad [v] = m/s \quad (2.17b)$$

Le champ de vitesse (2.17a-2.17b) représenté sur la figure 2.6 possède les caractéristiques d'un tourbillon centré en $(0,5 m; 0,5 m)$ qui va déformer l'interface initiale pour engendrer un filament s'étirant indéfiniment et qualifié de "serpentin". Ce dernier est également illustré sur la Fig. 2.6 aux instants $t = 0$ et $4 s$ pour la grille eulérienne $h = 1/512 m$, le pas de temps $\Delta t = h/(2V_0) s$ avec $V_0 = 1 m/s$ et une vitesse des marqueurs calculée à partir de la méthode PERM. Dans cette simulation,

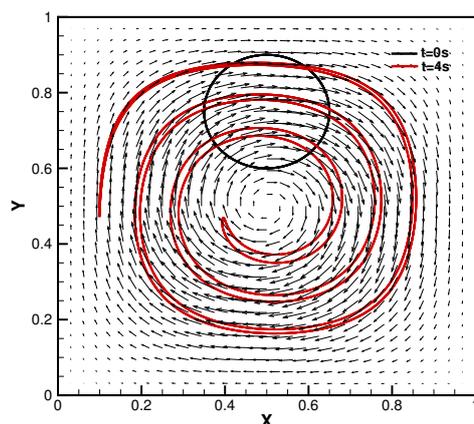


FIGURE 2.6 – Déformation de l'interface circulaire dans un champ de vitesse tourbillonnaire (2.17a-2.17b). Solution initiale en noir, $t = 4 s$ en rouge avec le champ des vecteurs vitesses.

l'interface est largement étirée et déformée pour finalement devenir complètement sous maille, c'est-à-dire d'épaisseur plus petite que la taille de la grille eulérienne h .

Étant donné qu'il n'existe pas de solution analytique pour ce problème, une solution de référence $\Gamma_{h_{ref}}(t)$ a été calculée en utilisant un schéma Runge-Kutta

d'ordre 4 et en imposant la vitesse exacte au niveau des marqueurs avec un pas de temps $\Delta t = h^{\text{ref}}/2$ et une taille initiale d'élément de la surface front-tracking définie telle que pour tout $e \in \mathcal{E}^{(0)}$, $h_e^{\text{ref}} \stackrel{\text{def}}{=} h_e^{\text{ref}}(0) = h^{\text{ref}}/100$, avec $h^{\text{ref}} = 1/4096$ (correspondant à une taille de grille eulérienne très fine).

Les solutions grossières de la surface front-tracking ont quant à elles été calculées avec un maillage de l'ordre de la taille de la grille eulérienne h , avec une taille initiale d'élément $h_e = h/2$, $\forall e \in \mathcal{E}^{(0)}$, un pas de temps $\Delta t = h/(2V_0) s$, un schéma Runge-Kutta d'ordre 2 et différentes méthodes d'interpolation pour obtenir la vitesse des marqueurs à partir de la grille eulérienne.

L'erreur est ainsi mesurée en calculant la distance entre les marqueurs de la surface front-tracking grossière $\Gamma_{h_e}^{(n)}$ et la surface de référence $\Gamma_{h_e^{\text{ref}}}^{(n)}$ au temps $t \stackrel{\text{def}}{=} n\Delta t = 4 s$ (see Fig. 2.6) :

$$\|E_{h_e}\|_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N_{\mathcal{E}}^{(n)}} \sum_{m \in \mathcal{M}^{(n)}} \min_{p \in \Gamma_{h_e^{\text{ref}}}^{(n)}} \|\bar{x}[p] - \bar{x}_m\|_2 \quad (2.18a)$$

$$\|E_{h_e}\|_{\infty} \stackrel{\text{def}}{=} \max_{m \in \mathcal{M}^{(n)}} \left(\min_{p \in \Gamma_{h_e^{\text{ref}}}^{(n)}} \|\bar{x}[p] - \bar{x}_m\|_2 \right) \quad (2.18b)$$

où $\|\cdot\|_2$ est la norme euclidienne, $N_{\mathcal{E}^{(n)}}$ est le nombre d'éléments dans l'ensemble $\mathcal{M}^{(n)}$, p est un point quelconque de la surface $\Gamma_{h_e^{\text{ref}}}^{(n)}$ et $\bar{x}[p]$ les coordonnées de ce point. On redéfinit également l'ordre de convergence pour la quantité $X(h)$ entre deux grilles ou maillages h_1 et h_2 par le ratio :

$$\text{Ordre} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\log(\|X(h_1)\| / \|X(h_2)\|)}{\log(h_1/h_2)} \quad (2.19)$$

Le tableau 2.6 présente pour différentes tailles de grille eulérienne h et différentes méthodes d'interpolation des vitesses des marqueurs, les erreurs et l'ordre de convergence locale de la méthode front-tracking pour des éléments dont la taille initiale est $h_e = h/2$. A l'exception de la méthode Peskin pour le maillage le plus grossier, les trois méthodes convergent à l'ordre 2 pour les erreurs $\|E_{h_e}\|_1$. L'algorithme PERM s'avère être la méthode d'interpolation la plus précise, avec un niveau d'erreur six à seize fois plus faible que les méthodes d'interpolation bilinéaire et Peskin respectivement. Pour les erreurs $\|E_{h_e}\|_{\infty}$, il est plus difficile de discriminer les méthodes d'interpolation même si la méthode PERM est généralement la plus précise. En terme d'ordre de convergence, les méthodes Peskin et bilinéaire tendent à être du second ordre. Pour la méthode PERM, l'ordre de convergence local semble être plus erratique mais elle est globalement du second ordre si on considère l'intervalle $h \in [1/512; 1/32]$. Globalement, la méthode d'interpolation PERM offre de meilleurs résultats.

Interpolation scheme	PERM [51]		BILINEAR		PESKIN [64]	
$h \equiv 2h_e$	$\ E_{h_e}\ _1$	Ordre	$\ E_{h_e}\ _1$	Ordre	$\ E_{h_e}\ _1$	Ordre
1/16	8.8E-04	-	4.6E-03	-	7.6E-03	-
1/32	1.9E-04	2.2	1.2E-03	2.0	3.0E-03	1.3
1/64	4.7E-05	2.0	2.9E-04	2.0	7.6E-04	2.0
1/128	1.2E-05	2.0	7.3E-05	2.0	1.9E-04	2.0
1/256	2.9E-06	2.0	1.8E-05	2.0	4.8E-05	2.0
1/512	7.2E-07	2.0	4.6E-06	2.0	1.2E-05	2.0
$h \equiv 2h_e$	$\ E_{h_e}\ _\infty$	Ordre	$\ E_{h_e}\ _\infty$	Ordre	$\ E_{h_e}\ _\infty$	Ordre
1/16	2.6E-02	-	1.2E-02	-	2.9E-02	-
1/32	2.4E-03	3.5	4.6E-03	1.4	9.9E-03	1.6
1/64	1.2E-03	1.0	1.6E-03	1.5	3.4E-03	1.5
1/128	1.6E-04	2.9	6.4E-04	1.4	1.4E-03	1.3
1/256	3.9E-05	2.0	1.9E-04	1.8	5.4E-04	1.4
1/512	3.5E-05	0.2	5.1E-05	1.9	1.5E-04	1.9

TABLE 2.6 – Erreur $\|E_{h_e}\|_1$ et $\|E_{h_e}\|_\infty$ (Eq. 2.18a et Eq. 2.18b) et ordre local de convergence (Eq. 2.19) pour différentes tailles de grille ou de maillage et différentes méthodes d'interpolation.

On étudie maintenant l'influence de la taille initiale des éléments h_e de la surface front-tracking, avec la vitesse des marqueurs déterminée avec la méthode PERM (Tab. 2.7), pour différentes tailles de grille Eulérienne h . Quelle que soit la grille eulérienne considérée, on constate que l'erreur diminue à l'ordre 2 tant que $h_e \geq h/2$. Une fois que h_e est plus petit que $h/2$, on n'observe plus aucune amélioration, voire même une légère augmentation de l'erreur. La taille initiale d'élément $h_e = h/2$, correspondant à une surface front-tracking dont la taille des éléments va évoluer dans la gamme $h_e(t) \in [h/4, h]$, semble donc être le meilleur choix possible.

Dans cette partie, nous avons montré que l'algorithme d'interpolation PERM était la méthode la plus précise pour estimer la vitesse du marqueur à partir des grilles de vitesse eulériennes. Ces résultats confirment les conclusions sur l'étude du marqueur dans un champ de vitesse tourbillonnaire menée dans la section (2.2.3) où la méthode PERM s'était révélée être la plus précise parmi les trois méthodes testées (PERM, bilinéaire et Peskin).

Par ailleurs, le meilleur choix de discrétisation de la surface front-tracking initiale est celui d'une taille d'élément h_e deux fois plus petite que la taille de la grille eulérienne h .

h \downarrow	h_e \Rightarrow	$h_e = 2h$	$h_e = h$	$h_e = h/2$	$h_e = h/10$	$h_e = h/100$
1/16	$\ E_{h_e}\ _1$	1,7E-02	4,2E-03	8,8E-04	1,2E-03	1,3E-03
	Ordre	-	2,0	2,2	-0,2	-0,0
1/32	$\ E_{h_e}\ _1$	4,3E-03	1,5E-03	1,9E-04	3,1E-04	3,2E-04
	Ordre	-	1,5	3,0	-0,3	-0,0
1/64	$\ E_{h_e}\ _1$	1,3E-03	3,0E-04	4,7E-05	7,9E-05	8,1E-05
	Ordre	-	2,1	2,7	-0,3	-0,0
1/128	$\ E_{h_e}\ _1$	3,6E-04	5,3E-05	1,2E-05	2,0E-05	2,0E-05
	Ordre	-	2,7	2,2	-0,3	-0,0
1/256	$\ E_{h_e}\ _1$	7,0E-05	1,7E-05	2,9E-06	4,9E-06	5,1E-06
	Ordre	-	2,1	2,5	-0,3	-0,0
1/512	$\ E_{h_e}\ _1$	1,9E-05	3,4E-06	7,2E-07	1,2E-06	1,3E-06
	Ordre	-	2,5	2,2	-0,3	-0,0

TABLE 2.7 – Influence de la taille initiale des éléments h_e sur la précision de la méthode front-tracking - l'ordre de convergence local est présenté pour différentes tailles d'éléments h_e .

Dans ce qui va suivre, la méthode front-tracking basée sur :

- (i) l'algorithme PERM pour l'interpolation des vitesses des marqueurs,
- (ii) la taille initiale des éléments égale à $h/2$,
- (iii) l'algorithme de reseeding,

sera appelée méthode FTR-PERM pour simplifier et la majorité des simulations sera réalisée avec la méthode FTR-PERM.

2.5 Conservation du volume

Comme les marqueurs de la surface front-tracking sont uniquement transportés par le champ de vitesse, la méthode front-tracking ne peut géométriquement conserver le volume délimité par les éléments pour des écoulements incompressibles, sachant que l'interface est approchée par des segments. Ce problème reste intrinsèque à cette méthode même si l'algorithme de transport avait été exact. Le calcul du volume d'une surface front-tracking $\mathcal{V}^{(n)}$ est direct. Quel que soit le point O de coordonnée \bar{x}_O que l'on considère, on a :

$$\mathcal{V}^{(n)} = \frac{1}{2} \left(\sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n)}} (\bar{x}_{m_1} - \bar{x}_O) \wedge (\bar{x}_{m_2} - \bar{x}_O) \right) \cdot \bar{e}_z \quad (2.20)$$

avec $\bar{e}_z = \bar{e}_x \wedge \bar{e}_y$. La figure 2.7a présente l'évolution de l'erreur sur le volume pour

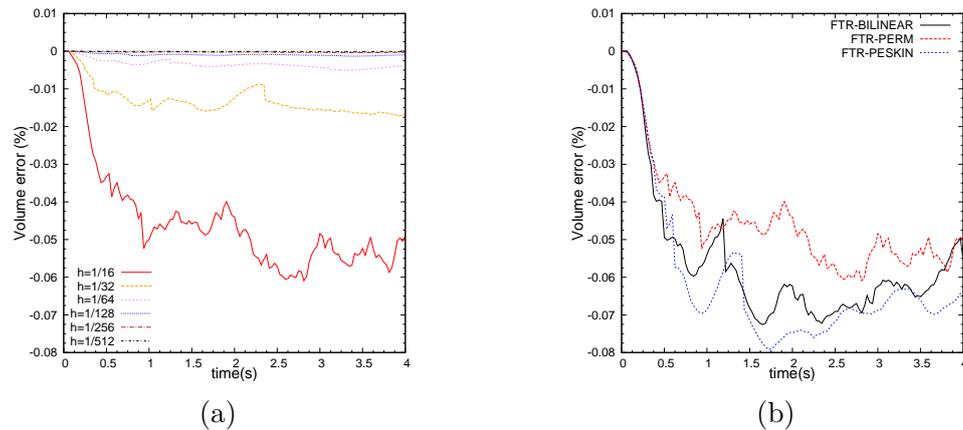


FIGURE 2.7 – Évolution de l’erreur sur le volume au cours du temps pour la déformation de l’interface circulaire dans un champ de vitesse tourbillonnaire (Eqs. 2.17a-2.17b) pour la méthode front-tracking : (a) Erreur sur le volume en fonction du pas d’espace h quand la méthode PERM est utilisée pour le calcul de la vitesse des marqueurs ; (b) Erreur sur le volume pour le pas d’espace $h = 1/16 m$ quand les méthodes PERM, bilinéaire ou Peskin sont utilisées.

le cas de la déformation d’un disque dans un tourbillon pour différentes tailles de grille eulériennes h (voir Fig. 2.6 pour l’aspect de l’interface et (Eqs. 2.17a-2.17b) pour le champ de vitesse). On constate en premier lieu que la variation de volume est faible, moins de 1 % pour le maillage le plus grossier $h = 1/16 m$, et elle décroît lorsque l’on raffine le maillage. La figure 2.7b, comparant l’évolution de l’évolution de l’erreur sur le volume dans le cas de la déformation d’un disque dans un tourbillon pour $h = 1/16 m$ montre que la variation de volume est plus faible quand la méthode PERM est utilisée pour le calcul des vitesses des marqueurs. Malgré les petites variations de volume induites par la méthode front-tracking, il est tout de même préférable de contrôler le volume à chaque pas de temps afin d’éviter une perte ou un gain de volume trop important lors de longues intégrations temporelles ou pour des écoulements incompressible très complexes.

Nous allons présenter deux algorithmes de conservation du volume pour des écoulements incompressibles qui seront largement discutés afin de mettre en avant leurs avantages et inconvénients.

2.5.1 Méthode homothétique (HR) – FTR-PERM-HR

La méthode homothétique (HR pour homothetic rescaling) est purement géométrique et ne dépend pas de l’écoulement. Elle consiste à déplacer les marqueurs de la surface front-tracking selon une homothétie après l’étape de transport pour

corriger le volume délimité par l'interface. Pour des écoulements incompressibles, le volume entre deux pas de temps consécutifs doit être préservé, ce qui implique $\mathcal{V}^{(n+1)} = \mathcal{V}^{(n)}$ avec $\mathcal{V}^{(n)}$ le volume connu au temps $t^{(n)}$. Une fois le centre d'homothétie \bar{x}_O choisi, le coefficient d'homothétie s'exprime par :

$$k_{\bar{x}_O} = \sqrt{\frac{\mathcal{V}^{(n)}}{\mathcal{V}^{(n+1,adv)}}}$$

où $\mathcal{V}^{(n)}$ et $\mathcal{V}^{(n+1,adv)}$ sont exprimés par la relation (2.20), pour les marqueurs respectivement définis aux temps $t^{(n)}$ et $t^{(n+1)}$, la fin de l'étape de transport. Ainsi, pour tout $m \in \mathcal{M}^{(n,n+1)}$, les coordonnées \bar{x}_m du marqueur m sont ajustées afin de satisfaire la conservation du volume comme suit :

$$\bar{x}_m^{(n+1)} = \bar{x}_O + k_{\bar{x}_O} (\bar{x}_m^{(n+1,adv)} - \bar{x}_O) \quad (2.21)$$

A ce stade, la position du centre d'homothétie est laissée libre. Sa position joue clairement un rôle sur l'aspect de l'interface. Utiliser le centre du volume délimité par l'interface à la fin de l'étape de transport comme centre d'homothétie \bar{x}_O paraît être le choix le plus naturel.

$$\bar{x}_O = \frac{\sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n+1)}} [(\bar{x}_{m_1} - \bar{x}_{O'}) \wedge (\bar{x}_{m_2} - \bar{x}_{O'})] \cdot \bar{e}_z (\bar{x}_{m_1} + \bar{x}_{m_2} + \bar{x}_{O'})}{\sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n+1)}} 3 [(\bar{x}_{m_1} - \bar{x}_{O'}) \wedge (\bar{x}_{m_2} - \bar{x}_{O'})] \cdot \bar{e}_z} \quad (2.22)$$

avec $\bar{x}_{O'}$ les coordonnées de tout point O' . Un autre choix est d'utiliser simplement le barycentre de l'ensemble des marqueurs, $\bar{x}_O = \sum_{m \in \mathcal{M}^{(n+1)}} \bar{x}_m / N_{\mathcal{E}}^{(n+1)}$. Cette dernière approche est celle que nous avons adoptée dans nos simulations pour déterminer le centre d'homothétie.

La figure 2.8 détaille le procédé de conservation du volume lorsque l'on utilise la méthode homothétique (FTR-PERM-HR) dans le cas d'une perte de volume entre $t^{(n)}$ et $t^{(n+1)}$.

2.5.2 Méthode de correction basée sur la vitesse (VBC) – FTR-PERM-VBC

La méthode de correction basée sur la vitesse (VBC pour velocity based correction) diffère significativement de la précédente dans la mesure où elle est basée sur l'écoulement et plus spécifiquement sur le déplacement des marqueurs sur un pas de temps ($\approx \bar{V} \Delta t$). La première étape consiste à écrire la conservation du volume (voir le calcul du volume (2.20)) entre deux pas de temps $t^{(n)}$ and $t^{(n+1)}$:

$$\sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n, n+1)}} \left((\bar{x}_{m_1}^{(n+1)} - \bar{x}_O) \wedge (\bar{x}_{m_2}^{(n+1)} - \bar{x}_O) \right) \cdot \bar{e}_z = 2\mathcal{V}^{(n)} \quad (2.23)$$

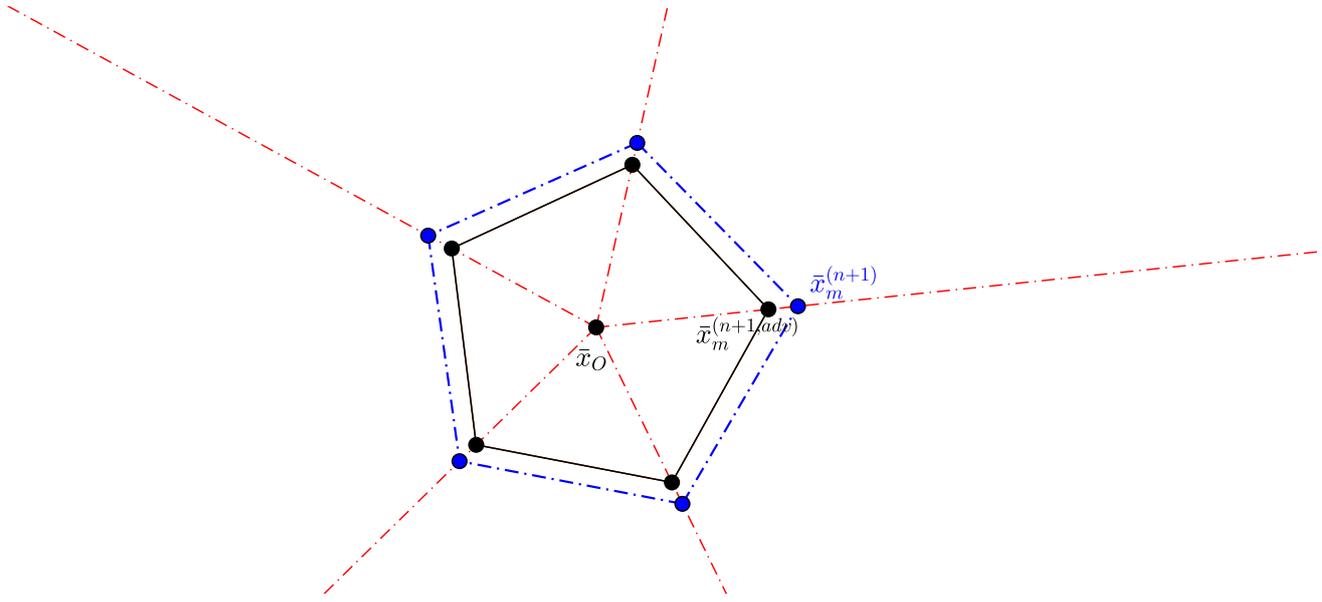


FIGURE 2.8 – Homothétie barycentrique de la surface front-tracking (en noir configuration initiale, en bleu configuration après homothétie)

On peut alors réécrire la relation (2.23) en utilisant la position des marqueurs au temps $t^{(n+1,adv)}$:

$$\sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n, n+1)}} \left(\left[(\bar{x}_{m_1}^{(n+1)} - \bar{x}_{m_1}^{(n+1,adv)}) + (\bar{x}_{m_1}^{(n+1,adv)} - \bar{x}_O) \right] \wedge \left[(\bar{x}_{m_2}^{(n+1)} - \bar{x}_{m_2}^{(n+1,adv)}) + (\bar{x}_{m_2}^{(n+1,adv)} - \bar{x}_O) \right] \right) \cdot \bar{e}_z = 2\mathcal{V}^{(n)} \quad (2.24)$$

A ce stade, la position des marqueurs à $t^{(n+1)}$ doit être déterminée afin de maintenir le volume $\mathcal{V}^{(n)}$. Après le transport, chaque marqueur $m \in \mathcal{M}^{(n+1)}$ est légèrement déplacé dans la direction normale à l'interface selon la normale unitaire $\bar{n}_m^{(n+1)}$: Pour tout $m \in \mathcal{M}^{(n, n+1)}$ (même marqueur à $t^{(n)}$ et $t^{(n+1)}$),

$$\bar{x}_m^{(n+1)} = \bar{x}_m^{(n+1,adv)} + k\bar{p}_m \quad (2.25)$$

avec $\bar{p}_m \stackrel{\text{def}}{=} \left| (\bar{x}_m^{(n+1,adv)} - \bar{x}_m^{(n)}) \cdot \bar{n}_m^{(n+1,adv)} \right| \bar{n}_m^{(n+1,adv)}$.

La relation (2.24) est alors écrite en fonction du coefficient k et du déplacement \bar{p}_m :

$$\sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n, n+1)}} \left(\left[k\bar{p}_{m_1} + (\bar{x}_{m_1}^{(n+1,adv)} - \bar{x}_O) \right] \wedge \left[k\bar{p}_{m_2} + (\bar{x}_{m_2}^{(n+1,adv)} - \bar{x}_O) \right] \right) \cdot \bar{e}_z = 2\mathcal{V}^{(n)} \quad (2.26)$$

Le coefficient k est solution du polynôme de second ordre :

$$\left[k^2 \sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n, n+1)}} \bar{p}_{m_1} \wedge \bar{p}_{m_2} + k \sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n, n+1)}} (\bar{x}_{m_1}^{(n+1, adv)} - \bar{x}_O) \wedge \bar{p}_{m_2} + \bar{p}_{m_1} \wedge (\bar{x}_{m_2}^{(n+1, adv)} - \bar{x}_O) + \sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n, n+1)}} (\bar{x}_{m_1}^{(n+1, adv)} - \bar{x}_O) \wedge (\bar{x}_{m_2}^{(n+1, adv)} - \bar{x}_O) \right] \cdot \bar{e}_z = 2\mathcal{V}^{(n)} \quad (2.27)$$

La méthode front-tracking basée sur l'algorithme PERM pour le calcul des vitesses des marqueurs et la méthode de conservation du volume basée sur la correction des vitesses est appelée FTR-PERM-VBC.

2.5.3 Commentaires sur les méthodes de conservation du volume

Afin d'étudier l'influence des algorithmes de conservation du volume, nous avons à nouveau considéré le cas de la déformation du disque dans un tourbillon défini par le champs de vitesse (Eqs. 2.17a-2.17b, voir Fig. 2.6). Les simulations ont été réalisées avec la méthode FTR-PERM avec un pas de temps $\Delta t = h/2$ et une taille initiale d'éléments $h_e = h/2$. Les solutions obtenues ont été comparées à la solution de référence décrite en Sec. 2.4 au temps $t = 4 s$. Le tableau 2.8 présente les erreurs moyennes sur la position des marqueurs pour une solution calculée avec la méthode FTR-PERM avec ou sans activation de l'algorithme de conservation du volume. Pour les deux méthodes proposées, la prise en compte de la conservation du volume dans les simulations ne modifie pas substantiellement la précision des solutions obtenues quels que soient les maillages considérés. Sur le maillage le plus grossier, l'erreur $\|E_{h_e}\|_1$ définie par Eq. (2.18a) augmente seulement de $8,8E-04$ à $9,4E-04$ pour la méthode FTR-PERM-HR alors qu'elle reste inchangée pour la méthode FTR-PERM-VBC. Ce commentaire est également valide pour les grilles les plus fines mais aussi lorsque l'on considère les erreurs $\|E_{h_e}\|_\infty$. Ce résultat n'est pas réellement surprenant car même si le volume n'est pas strictement conservé au cours du temps, la méthode front-tracking reste très précise pour le cas du serpentini avec une erreur sur le volume de moins de 1% quand la conservation du volume n'est pas activée (Fig. 2.7b). Ces conclusions sont les mêmes pour toutes les grilles considérées de 1/16 à 1/512.

La figure 2.9 présente le temps de calcul total CPU pour le cas de la déformation d'un cercle dans un tourbillon en fonction du pas d'espace h pour les méthodes FTR-PERM-HR et FTR-PERM-VBC. Bien que le temps de calcul augmente proportionnellement au carré du pas d'espace h pour les deux méthodes, on constate

FTR method	FTR-PERM		FTR-PERM-HR		FTR-PERM-VBC	
$h \equiv 2h_e$	$\ E_{h_e}\ _1$	Order	$\ E_{h_e}\ _1$	Order	$\ E_{h_e}\ _1$	Order
1/16	8.8E-04	-	9.2E-04	-	8.8E-04	-
1/32	1.9E-04	2.2	1.9E-04	2.2	1.9E-04	2.2
1/64	4.7E-05	2.0	4.7E-05	2.0	4.7E-05	2.0
1/128	1.2E-05	2.0	1.2E-05	2.0	1.2E-05	2.0
1/256	2.9E-06	2.0	2.8E-06	2.0	2.9E-06	2.0
1/512	7.2E-07	2.0	7.2E-07	2.0	7.2E-07	2.0
$h \equiv 2h_e$	$\ E_{h_e}\ _\infty$	Order	$\ E_{h_e}\ _\infty$	Order	$\ E_{h_e}\ _\infty$	Order
1/16	2.6E-02	-	2.8E-02	-	2.7E-02	-
1/32	2.4E-03	3.5	2.8E-03	3.3	2.5E-03	3.5
1/64	1.2E-03	1.0	1.3E-03	1.1	1.3E-03	0.9
1/128	1.6E-04	2.9	1.7E-04	2.9	1.7E-04	2.9
1/256	3.9E-05	2.0	3.6E-05	2.3	3.9E-05	2.1
1/512	3.5E-05	0.2	3.4E-05	0.1	3.5E-05	0.2

TABLE 2.8 – Erreur $\|E_{h_e}\|_1$ et $\|E_{h_e}\|_\infty$ (Eq. 2.18a et Eq. 2.18b) et ordre de convergence local (Eq. 2.19) en fonction de la taille de la grille h sans (FTR-PERM) ou avec activation de la conservation du volume (FTR-PERM-HR et FTR-PERM-VBC).

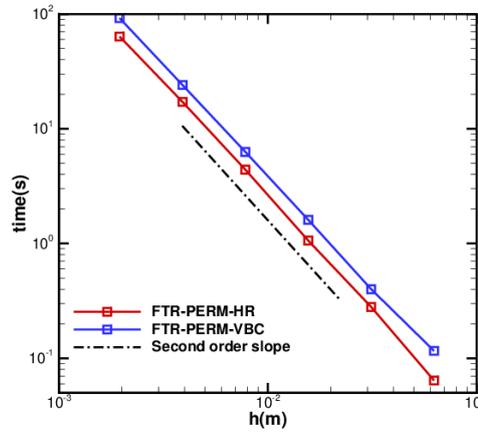


FIGURE 2.9 – Temps de calcul CPU ($t = 4 s$) pour le cas de la déformation d'un cercle dans un tourbillon (Eq. 2.17a-2.17b) quand la conservation du volume est activée. Comparaison des méthodes FTR-PERM-HR et FTR-PERM-VBC

que la méthode FTR-PERM-VBC est légèrement plus coûteuse que la méthode FTR-PERM-HR.

Alors que les deux méthodes de conservation du volume semblent toutes deux être efficaces, la méthode homothétique reste purement géométrique, ce qui peut entraîner diverses difficultés. Par exemple, si une goutte ou bulle se rapproche d'un mur, la méthode homothétique peut déplacer les marqueurs de l'interface au-delà des limites physiques. Un comportement similaire peut être rencontré si deux gouttes ou bulles se rapprochent : la méthode homothétique peut engendrer une fusion d'origine purement numérique. La méthode de correction du volume basée sur la vitesse est moins sensible à un tel inconvénient, car le déplacement des marqueurs dépend de la vitesse locale d'advection.

Le choix du centre d'homothétie est également déterminant. Si l'interface est circulaire et que le centre O du volume est choisi comme centre d'homothétie, la correction est la même pour tous les marqueurs. Mais pour des structures allongées, où la distance entre les marqueurs et O est très différente, la méthode homothétique peut considérablement augmenter et/ou déformer la forme initiale. Au vu de ces remarques, nous avons choisi la méthode de correction basée sur la vitesse pour assurer la conservation du volume pour le transport de l'interface, à savoir la méthode FTR-PERM-VBC.

2.6 Calcul des propriétés géométriques de l'interface

Un des challenges des simulations d'écoulements diphasiques est l'évaluation de la force de tension de surface correspondant au saut de contrainte à l'interface. L'intensité de ce vecteur est proportionnelle à la courbure locale de l'interface. Il est dirigé selon le vecteur unitaire normal à l'interface. Il est donc nécessaire de pouvoir calculer avec une grande précision les propriétés géométriques de l'interface comme la courbure locale et le vecteur normal à l'interface pour obtenir une bonne estimation de la force de tension de surface.

Dans cette section, deux méthodes sont décrites pour calculer les propriétés géométriques de l'interface requises pour obtenir la force capillaire. Leur niveau de précision est également discuté et comparé. La première méthode repose sur la méthode de Frenet, qui exprime la courbure en fonction de la dérivée du vecteur unitaire tangentiel par rapport à l'abscisse curviligne, puis transforme une intégrale le long d'une courbe en une différence entre les valeurs exprimées aux deux extrémités de celle-ci. La seconde méthode consiste à rechercher des cercles passant par des marqueurs spécifiques pour exprimer le rayon de courbure local en chaque marqueur et donc par déduction la courbure locale. Chacune de ces méthodes sera comparée à une solution analytique.

2.6.1 Méthode de Frenet

Soit Δs une courbe dans un plan 2d, avec s l'abscisse curviligne, dans le repère de Frenet-Serret (\bar{t}, \bar{n}) , l'égalité $\partial \bar{t} / \partial s = \kappa \bar{n}$ est vérifiée. Soient p_1 et p_2 deux points appartenant à Δs tel que $s(p_2) > s(p_1)$, alors la force de tension de surface le long du morceau $\Delta s_{p_1 p_2}$ de la courbe Δs s'écrit selon [82] en utilisant la méthode dite de Frenet :

$$\bar{f}_{\Delta s_{p_1 p_2}} = \int_{\Delta s_{p_1 p_2}} \left(\sigma \kappa \bar{n} + \frac{\partial \sigma}{\partial s} \bar{t} \right) ds = \int_{\Delta s_{p_1 p_2}} \frac{\partial \sigma}{\partial s} \bar{t} ds = (\sigma \bar{t})_{p_2} - (\sigma \bar{t})_{p_1}$$

où σ est le coefficient de tension de surface. En supposant une constante valeur de σ , on obtient

$$\int_{\Delta s_{p_1 p_2}} \kappa \bar{n} ds = \bar{t}_{p_2} - \bar{t}_{p_1} \quad (2.28)$$

Pour évaluer la force de tension de surface discrète au niveau du marqueur $m \in \mathcal{M}$, un point appartenant à $\Delta s_{p_1 p_2}$, on considère deux éléments adjacents e et $e_{[1]}$ tel que $m_{[e,1]} \equiv m_{[e_{[1]},2]} \equiv m$ ainsi que leur centre respectif C_e et $C_{e_{[1]}}$ (Fig. 2.10).

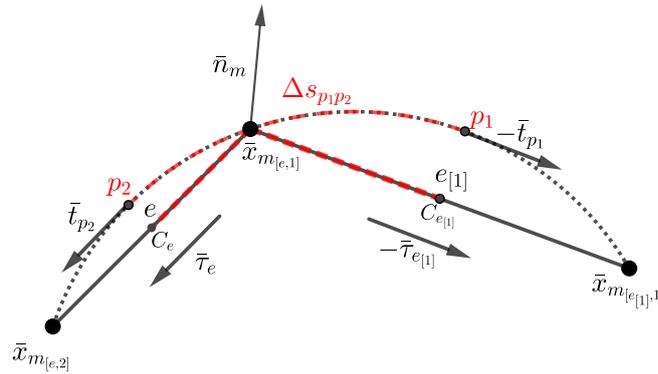


FIGURE 2.10 – Notations pour l'estimation de la courbure locale et de la normale à l'aide de la méthode de Frenet

Choisissons le point p_2 (resp. p_1) tel que sa projection orthogonale sur l'élément e (resp. $e_{[1]}$) est C_e (resp. $C_{e_{[1]}}$), alors en notant

$$\bar{\tau}_e \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\bar{x}_{m[e,2]} - \bar{x}_{m[e,1]}}{h_e}, \quad \bar{\tau}_{e_{[1]}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\bar{x}_{m[e_{[1]},2]} - \bar{x}_{m[e_{[1]},1]}}{h_{e_{[1]}}}$$

on obtient les approximations

$$\bar{t}_{p_2} \approx \bar{\tau}_e, \quad \bar{t}_{p_1} \approx \bar{\tau}_{e_{[1]}}, \quad \int_{\Delta s_{p_1 p_2}} \kappa \bar{n} ds \approx \kappa_m \bar{n}_m \frac{h_e + h_{e_{[1]}}}{2}$$

En supposant que les approximations ci-dessus sont suffisamment représentatives de la relation continue (2.28), on obtient une estimation de la courbure κ_m et du vecteur unitaire normal \bar{n}_m au marqueur m :

$$\kappa_m = 2 \frac{\|\bar{\tau}_e - \bar{\tau}_{e_{[1]}}\|}{h_e + h_{e_{[1]}}}, \quad \bar{n}_m = \frac{\bar{\tau}_e - \bar{\tau}_{e_{[1]}}}{\|\bar{\tau}_e - \bar{\tau}_{e_{[1]}}\|}$$

Ici les tangentes $\bar{\tau}_e$ et $\bar{\tau}_{e_{[1]}}$ sont calculées directement à partir des éléments e et $e_{[1]}$. Il existe d'autres approches pour calculer les tangentes à l'interface. Febres et Legendre [22] proposent une technique différente pour calculer les vecteurs tangents dans le cadre de la méthode front-tracking afin d'estimer la force de tension de surface à l'interface.

2.6.2 Méthode du cercle circonscrit

Ici, le principe de l'évaluation des paramètres géométriques au niveau du marqueur $m \in \mathcal{M}$ est purement géométrique (Fig. 2.11). Le cercle circonscrit (O_m, R_m)

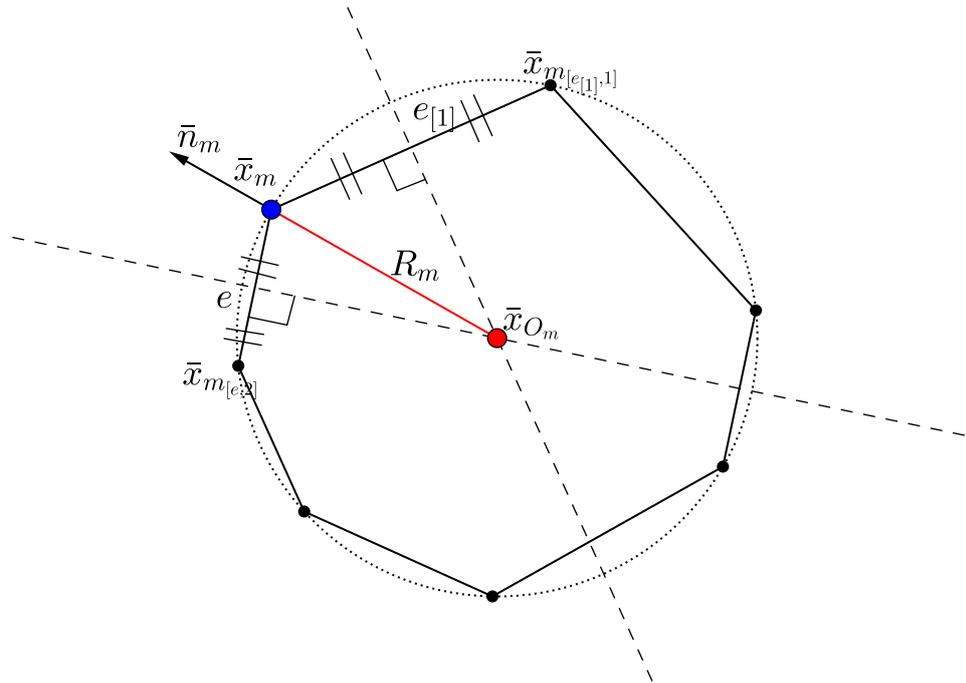


FIGURE 2.11 – Points de l'interface lagrangienne utilisés pour l'estimation de la courbure en chaque marqueur avec la méthode du cercle circonscrit

passant par les trois marqueurs successifs des deux éléments adjacents e et $e_{[1]}$, à

savoir $m \equiv m_{[e,1]} \equiv m_{[e_{[1]},2]}$, $m_{[e,2]}$ et $m_{[e_{[1]},1]}$ permet d'estimer la courbure locale κ_m et le vecteur unitaire normal \bar{n}_m de l'interface comme suit :

$$\bar{n}_m = \frac{\bar{x}_m - \bar{x}_{O_m}}{R_m} \text{sign}[(\bar{x}_m - \bar{x}_{O_m}) \cdot \bar{n}], \quad \kappa_m = \frac{\text{sign}[(\bar{x}_m - \bar{x}_{O_m}) \cdot \bar{n}]}{R_m}$$

où $R_m \stackrel{\text{def}}{=} \|\bar{x}_m - \bar{x}_{O_m}\|$ est le rayon du cercle circonscrit, $\text{sign}[x]$ représente le signe de la valeur du réel x , $\bar{n} \stackrel{\text{def}}{=} \bar{n}_e + \bar{n}_{e_{[1]}}$ est la somme des deux vecteurs normaux unitaires sortant à e et $e_{[1]}$, et les coordonnées \bar{x}_{O_m} sont solutions du système linéaire :

$$\begin{aligned} (\bar{x}_{O_m} - (\bar{x}_{m_{[e_{[1]},1]} + \bar{x}_m)/2}) \cdot (\bar{x}_{m_{[e_{[1]},1]} - \bar{x}_m) &= 0 \\ (\bar{x}_{O_m} - (\bar{x}_{m_{[e,2]} - \bar{x}_m)/2}) \cdot (\bar{x}_{m_{[e,2]} - \bar{x}_m) &= 0 \end{aligned}$$

Il faut souligner que $\kappa_{\bar{x}_m}$ et $\bar{n}_{\bar{x}_m}$ sont tous deux obtenus de façon exacte pour une interface circulaire, quelle que soit la taille des éléments, avec la méthode du cercle circonscrit.

2.6.3 Validation : courbe statique

Afin de valider le calcul des courbures et normales par la méthode de Frenet et la méthode du cercle circonscrit, on considère une fonction analytique $f(x) = -x \sin(3\pi x^2/2)$ définie sur l'intervalle $x \in [0, 1]$. Soit l'ensemble $\mathcal{D} = (\mathcal{E}, \mathcal{M}, \mathcal{T})$ de la courbe $\Gamma = \{M(x, f(x)); x \in [0, 1]\}$. Sachant que Γ est une courbe ouverte, le nombre de marqueurs est non plus $N_{\mathcal{E}}$ mais $N_{\mathcal{E}} + 1$. Pour tout marqueur $m \in \mathcal{M}$, on définit $\kappa_{m_{\text{ref}}}$ et $\bar{n}_{m_{\text{ref}}}$ la courbure exacte et le vecteur unitaire normal sortant. Les erreurs sur la courbure entre la solution calculée et la solution exacte sont données par :

$$\|E_{\kappa}\|_1 = \frac{\sum_{m \in \mathcal{M}^*} |\kappa_{m_{\text{ref}}} - \kappa_m|}{\sum_{m \in \mathcal{M}^*} |\kappa_{m_{\text{ref}}}|}, \quad \|E_{\kappa}\|_{\infty} = \frac{\max_{m \in \mathcal{M}^*} |\kappa_{m_{\text{ref}}} - \kappa_m|}{\max_{m \in \mathcal{M}^*} |\kappa_{m_{\text{ref}}}|} \quad (2.29)$$

Celles sur le vecteur unitaire normal à l'interface s'écrivent :

$$\|E_{\bar{n}}\|_1 = \sum_{m \in \mathcal{M}^*} \|\bar{n}_{m_{\text{ref}}} - \bar{n}_m\|, \quad \|E_{\bar{n}}\|_{\infty} = \max_{m \in \mathcal{M}^*} \|\bar{n}_{m_{\text{ref}}} - \bar{n}_m\| \quad (2.30)$$

où $\mathcal{M}^* = \mathcal{M} - \{m_0; m_{N_{\mathcal{E}}}\}$, avec m_0 et $m_{N_{\mathcal{E}}}$ les deux marqueurs appartenant à \mathcal{M} d'abscisses $x_{[m_0]} = 0$ et $x_{[m_{N_{\mathcal{E}}}] = 1$.

Dans le premier cas, l'ensemble \mathcal{D} est tel que la projection de tous les éléments de l'ensemble \mathcal{E} donne une répartition uniforme du segment $[0; 1]$ situé sur l'axe x . La figure 2.12 illustre les variations de l'erreur pour la courbure et la normale en fonction de la taille des éléments projetés $h = 1/N_{\mathcal{E}}$. Pour l'évaluation de la

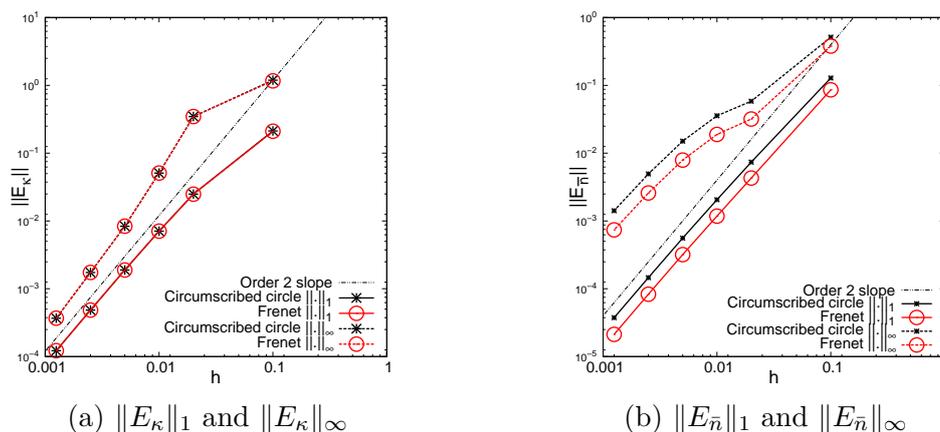


FIGURE 2.12 – Convergence de la courbure et de la normale pour l'approximation discrète de la courbe $f(x) = -x \sin(3\pi x^2/2)$, $x \in [0, 1]$, en fonction de la taille de grille constante $h = 1/N_\mathcal{E}$. La taille des éléments projetés sur l'axe x est égale à h .

courbure (Fig. 2.12a), il est difficile de discriminer les deux méthodes quelle que soit la norme considérée. Pour des petites valeurs de h , les deux méthodes tendent vers le second ordre en norme $\|\cdot\|_1$ et $\|\cdot\|_\infty$. Pour le calcul du vecteur normal (Fig. 2.12b), la méthode de Frenet semble donner des résultats légèrement meilleurs que la méthode du cercle circonscrit. Là encore, la convergence asymptotique des erreurs est du second ordre, comme pour la courbure. Il faut souligner pour ce cas que le maillage de la courbe Γ n'est pas uniforme, seule sa projection l'est. La taille des éléments varie discrètement en $\sqrt{h^2 + (f(ih) - f((i+1)h))^2}$, avec $i = 0, N_\mathcal{E} - 1$. Ainsi, les tailles de deux éléments adjacents sur Γ seront d'autant plus proches que $N_\mathcal{E}$ augmentera.

Dans le second cas, l'espace de discrétisation \mathcal{D} de la courbe Γ est le même que précédemment, excepté la projection des éléments sur l'axe x qui forment une succession de segments de longueur $h/2$ et $3h/2$, avec $h = 1/N_\mathcal{E}$. Ainsi, la longueur moyenne des éléments reste h . La Figure 2.13a montre que les deux méthodes d'estimation de la courbure sont proches excepté pour le maillage le plus grossier où Frenet donne des résultats très légèrement meilleurs. Pour ce type de maillage irrégulier, l'ordre de convergence est plus faible que dans le cas où le maillage est régulier : il est du premier ordre. Les changements majeurs sur les courbes de convergence concernent l'estimation des vecteurs normaux (Fig. 2.13). Les erreurs obtenues avec la méthode Frenet sont significativement plus élevées qu'avec la méthode du cercle circonscrit. L'ordre de convergence est également affecté puisqu'il chute à 1 contrairement à la méthode du cercle circonscrit qui reste du second ordre.

Ces deux tests permettent de mettre en évidence le fait que la méthode du

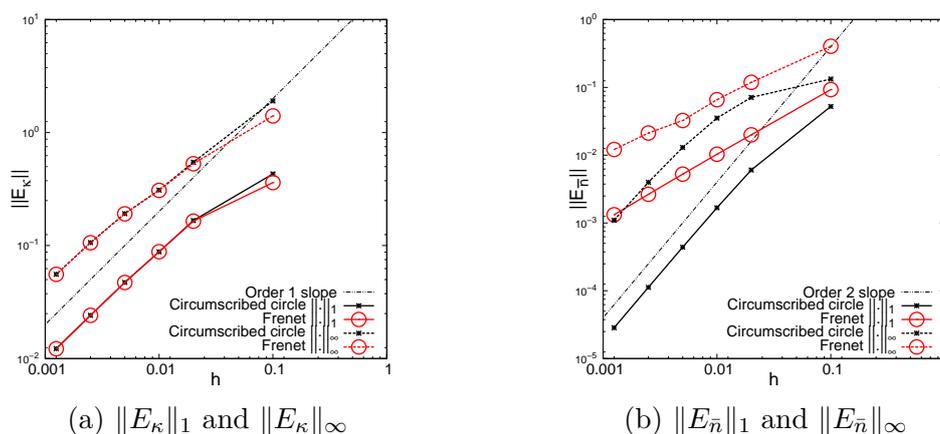


FIGURE 2.13 – Convergence de la courbure et du vecteur normal pour une approximation discrète de la courbe $f(x) = -x \sin(3\pi x^2/2)$, $x \in [0, 1]$, en fonction de la taille de grille moyenne $h = 1/N_\mathcal{E}$. Les tailles des éléments projetés sur l'axe x sont successivement $h/2$ et $3h/2$.

cerce circonscrit est moins sensible au maillage de l'interface, plus particulièrement pour le calcul de la normale qui semble rester du second ordre pour des maillages suffisamment fins. Concernant la courbure, la précision de l'algorithme est du 1er ordre ou alors du second ordre quand les tailles des éléments adjacents sont assez régulières.

Ainsi, en tenant compte du maillage non uniforme utilisé dans les problèmes physiques réels, la méthode du cercle circonscrit sera dès lors adoptée pour évaluer les courbures et les normales requises pour calculer les forces de tension de surface dans les écoulements diphasiques.

2.6.4 Validation : déformation d'un disque par un écoulement potentiel impactant une plaque plane

L'objectif de ce cas test est d'évaluer les performances du calcul de la courbure et de la normale durant l'advection d'une interface avec la méthode FTR-PERM-VBC. Nous considérons la déformation d'une interface circulaire de rayon R_0 , centrée en $(x_0; y_0)$, par un écoulement potentiel impactant une plaque plane [8] dont les caractéristiques du champ de vitesse sont données par :

$$u(x, y) = 2\alpha(x - x_a) \quad [u] = m/s \quad (2.31a)$$

$$v(x, y) = -2\alpha(y - y_a) \quad [v] = m/s \quad (2.31b)$$

avec x_a et y_a les coordonnées du point d'arrêt et α la fréquence caractéristique. Tout point $(x(t), y(t))$ de l'interface est solution de l'équation :

$$\left(\frac{x(t) - x_a}{a(t)}\right)^2 + \left(\frac{y(t) - y_c(t)}{b(t)}\right)^2 = 1 \quad (2.32)$$

avec $a(t) = R_0 \exp(2\alpha t)$, $b(t) = R_0 \exp(-2\alpha t)$ et $y_c(t) = y_a + (y_0 - y_a) \exp(-2\alpha t)$. La relation (2.32) est l'équation d'une ellipse centrée en $(x_a, y_c(t))$, avec $a(t)$ et $b(t)$ les demi grand axe et petit axe. On a donc une interface, initialement circulaire centrée à l'abscisse du point d'arrêt, qui est advectée sous la forme d'une ellipse dont l'ordonnée du centre et la longueur des axes sont variables au cours du temps. L'intérêt de cette étude réside dans la possibilité de comparer les courbures calculées à l'aide de la méthode du cercle circonscrit présentée auparavant aux courbures analytiques et d'évaluer l'aptitude de la méthode FTR-PERM-VBC à représenter correctement l'interface, principalement dans le cas le plus discriminant où l'ellipse est très aplatie avec des zones de forte courbure.

Les paramètres suivants sont choisis : $x_0 = 0 \text{ m}$, $y_0 = 0.75 \text{ m}$, $R_0 = 0.15 \text{ m}$, $x_a = 1 \text{ m}$, $y_a = 0 \text{ m}$ et $\alpha = 1 \text{ s}^{-1}$.

Le tableau 2.9 présente l'erreur sur l'estimation de la courbure et le vecteur nor-

		Erreur sur la courbure				Erreur sur la normale			
$t = 0.3 \text{ s}$									
h	$\ E_\kappa\ _1$	Ordre	$\ E_\kappa\ _\infty$	Ordre	$\ E_{\bar{n}}\ _1$	Ordre	$\ E_{\bar{n}}\ _\infty$	Ordre	
1/50	4.9E-03	-	1.1E-02	-	2.2E-03	-	7.9E-03	-	
1/100	1.2E-03	2.0	2.8E-03	2.0	5.5E-04	2.0	2.0E-03	2.0	
1/200	3.1E-04	2.0	7.1E-04	2.0	1.4E-04	2.0	5.0E-04	2.0	
1/400	7.8E-05	2.0	1.8E-04	2.0	3.4E-05	2.0	1.3E-04	2.0	
1/800	1.9E-05	2.0	4.4E-05	2.0	8.5E-06	2.0	3.1E-05	2.0	
$t = 0.75 \text{ s}$									
h	$\ E_\kappa\ _1$	Ordre	$\ E_\kappa\ _\infty$	Ordre	$\ E_{\bar{n}}\ _1$	Ordre	$\ E_{\bar{n}}\ _\infty$	Ordre	
1/50	3.0E-01	-	2.9E-01	-	9.5E-03	-	4.7E-01	-	
1/100	2.0E-01	0.6	2.5E-01	0.2	2.9E-03	1.7	2.2E-01	1.1	
1/200	1.8E-01	0.1	2.1E-01	0.3	7.5E-04	2.0	1.1E-01	1.0	
1/400	1.0E-01	0.8	1.5E-01	0.4	2.5E-04	1.6	3.9E-02	1.5	
1/800	6.9E-02	0.6	7.3E-02	1.1	8.1E-05	1.6	1.7E-02	1.2	

TABLE 2.9 – Convergence des courbures (Eq. 2.29) et des normales (Eq. 2.30) avec l'ordre de convergence (voir Eq. 2.19) pour la déformation d'un disque soumis à un écoulement potentiel sur une plaque plane aux temps $t = 0.3 \text{ s}$ et $t = 0.75 \text{ s}$

mal avec les ordres de convergence associés. A $t = 0.1 \text{ s}$, l'interface est quasiment

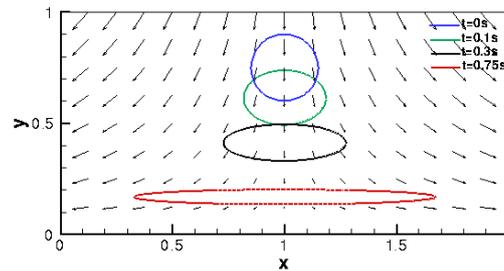


FIGURE 2.14 – Déformation d'une interface initialement circulaire soumise à un écoulement potentiel (Eq. 2.31) : Interface initiale circulaire (bleu) et solutions à $t = 0.1 s$ (vert), $t = 0.3 s$ (noir) and $t = 0.75 s$ (rouge).

circulaire et à $t = 0.3 s$, l'interface est modérément déformée (Fig. 2.14). Les solutions pour ces deux instants sont du second ordre avec un faible niveau d'erreur. Pour un temps plus long, à $t = 0.75 s$, l'ellipse est très aplatie avec des zones de forte courbure. A ce temps, on perd totalement le second ordre et les niveaux d'erreurs sont plus élevés, spécialement pour l'approximation de la courbure et pour la norme infinie de la normale. Pour comprendre ces mauvais résultats, nous avons concentré notre attention sur deux points spécifiques situés à l'extrémité des grand et petit axes de l'ellipse afin de tenir compte à la fois des fortes et des faibles courbures. Les erreurs relatives sur les courbures évaluées en ces points aux temps $t = 0.1 s$, $t = 0.3 s$ et $t = 0.75 s$ sont présentées sur la figure 2.15 en fonction de la courbure adimensionnée par la taille des éléments. Ce graphe montre clairement que le second ordre est atteint en tout point de l'interface lorsque $\kappa h_e < 1$, correspondant au cas où la taille des éléments adjacents est au moins inférieure au rayon de courbure local en ce point. De plus, l'erreur sur la courbure est indépendante de la courbure elle-même tant que la taille de l'élément est adimensionnée par la courbure locale κ .

2.7 Rupture et coalescence de l'interface

Une des difficultés majeures de la méthode front-tracking est la gestion du changement de topologie de l'interface lorsqu'elle subit de grandes déformations, lors des ruptures ou coalescences, par exemple. En effet, la méthode front-tracking autorise la formation de ligaments infiniment fins. Par ailleurs deux interfaces distinctes proches peuvent être transportées sans jamais fusionner même si la distance entre elles tend vers zéro. Cela pose un véritable problème car la physique de certains écoulements ne valide pas ce comportement. Il faut donc construire des algorithmes et définir des critères permettant la gestion dynamique de rupture ou

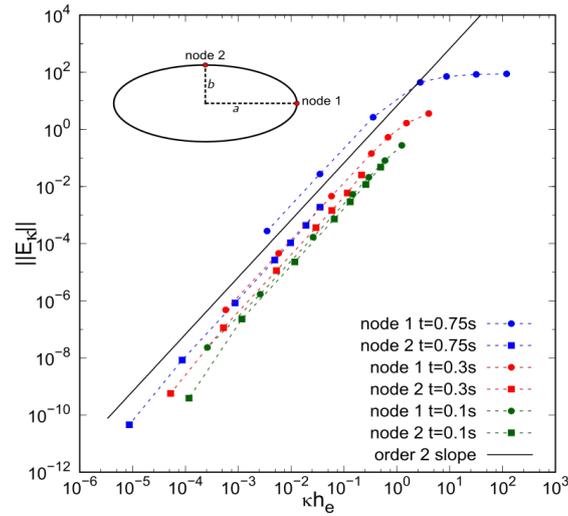


FIGURE 2.15 – Variation des erreurs relatives sur la courbure pour différentes tailles d'éléments adimensionnée par la courbure locale κ pour différentes ellipses définies par leur aplatissement à différents instants de simulation ($t = 0.1 s$, $t = 0.3 s$ et $t = 0.75 s$) sur deux points particuliers : le nœud 1 situé à l'extrémité du grand axe et le nœud 2 situé à l'extrémité du petit axe, avec la méthode du cercle circonscrit.

coalescence d'interfaces.

Pour une surface front-tracking bidimensionnelle, la procédure de rupture ou coalescence est la suivante :

- (i) Il y a rupture (respectivement coalescence) si la distance entre deux sommets non consécutifs est inférieure à une distance physique à définir, qui est prise égale à $h/5$ ici conformément à [91].
- (ii) Il y a coalescence si ces deux sommets non consécutifs appartiennent à deux surfaces front-tracking différentes.
- (iii) Il y a rupture si les deux sommets non consécutifs appartiennent à la même surface front-tracking.

2.7.1 Procédure générale

Afin de détailler la procédure générale de coalescence ou rupture d'interface, on rappelle $\mathcal{D} = (\mathcal{E}, \mathcal{M}, \mathcal{T})$ (voir Sec. 2.1), l'ensemble de discrétisation d'une surface front-tracking bidimensionnelle. Afin d'adopter un formalisme général et de simplifier les appellations, chaque surface front-tracking bidimensionnelle quelconque considérée sera dénommée bulle ou \mathcal{D} . Si on considère plusieurs surfaces front-tracking dans un problème, il y a alors $N_{\mathcal{D}}$ surfaces ou $N_{\mathcal{D}}$ bulles.

Généralement, pour tout \mathcal{D} et pour tout $m \in \mathcal{M} \in \mathcal{D}$, on calcule la distance entre

m et les $N_{\mathcal{M}-1}$ autres marqueurs appartenant à \mathcal{D} et tous les $N_{\mathcal{M}}$ marqueurs appartenant aux autres $N_{\mathcal{D}-1}$ bulles existantes.

Soient $\mathcal{D}' = (\mathcal{E}', \mathcal{M}', \mathcal{T}')$ et $\mathcal{D}^* = (\mathcal{E}^*, \mathcal{M}^*, \mathcal{T}^*)$ deux bulles distinctes. Si la distance entre deux marqueurs $m^* \in \mathcal{D}^*$ et $m' \in \mathcal{D}'$ est plus petite que $h/5$ alors les conditions (i) et (ii) sont vérifiées et il y a coalescence.

Si on considère la bulle seule $\mathcal{D}' = (\mathcal{E}', \mathcal{M}', \mathcal{T}')$ et que la distance entre deux marqueurs m' et $m'' \in \mathcal{D}'$, ($m', m'' \notin \mathcal{T}'$) (ils sont non consécutifs), est plus petite que $h/5$ alors les conditions (i) et (iii) sont vérifiées et il y a rupture.

Le temps de calcul engendré par la procédure de rupture ou coalescence est en partie pilotée par le calcul de la distance entre les marqueurs. Si on procède comme décrit dans le paragraphe précédent, la méthode peut rapidement devenir coûteuse ($\approx \mathcal{O}(N_{\mathcal{M}}^2)$) si $N_{\mathcal{M}}$ ou $N_{\mathcal{D}} \rightarrow \infty$.

Une autre manière de procéder est de subdiviser le domaine physique de calcul en sous-régions pour effectuer ces calculs de distance. Un choix simple est d'utiliser la grille eulérienne qui est une subdivision régulière du domaine de pas h . La figure 2.16 présente la distance minimale ou distance critique entre des marqueurs appartenant à deux bulles distinctes. Les points essentiels de l'évaluation de cette distance sont donnés dans l'algorithme 2.10. Soient K et L le nombre de cellules de la grille eulérienne dans les directions horizontale et verticale, pour une cellule donnée (i, j) il faut connaître le nombre de marqueurs m contenu dans celle-ci (*decompte*(i, j)). Une fois ce travail préliminaire effectué, la distance entre un marqueur donné ($m_{i,j}(n)$) et ceux dans un voisinage proche ($m_{ii,jj}(m)$) est évaluée. La distance critique est la plus petite des distances évaluées. Une fois ce travail effectué, on procède à la rupture (respectivement coalescence) de la structure front-tracking.

2.7.2 Procédure de Coalescence

Soient les bulles $\mathcal{D}' = (\mathcal{E}', \mathcal{M}', \mathcal{T}')$ et $\mathcal{D}^* = (\mathcal{E}^*, \mathcal{M}^*, \mathcal{T}^*)$. A l'instant $t^{(n)}$, la procédure de coalescence entre \mathcal{D}' et \mathcal{D}^* est la suivante :

- On dédouble les sommets critiques $m^* \in \mathcal{D}^*$ et $m' \in \mathcal{D}'$. On crée ainsi les marqueurs m'' et m^{**} tel que $m' \equiv m''$ et $m^* \equiv m^{**}$. La taille des ensembles $\mathcal{M}' \in \mathcal{D}'$ et $\mathcal{M}^* \in \mathcal{D}^*$ se voit ainsi augmenté de 1 tels que $N_{\mathcal{M}'} \leftarrow N_{\mathcal{M}'+1}$ et $N_{\mathcal{M}^*} \leftarrow N_{\mathcal{M}^*+1}$.
- On copie la bulle \mathcal{D}^* dans \mathcal{D}' tel que $N_{\mathcal{D}'} \leftarrow N_{\mathcal{D}'} + N_{\mathcal{D}^*}$ et $\mathcal{D}' = (\mathcal{E}' + \mathcal{E}^*, \mathcal{M}' + \mathcal{M}^*, \mathcal{T}' + \mathcal{T}^*)$. Les ensembles \mathcal{E}' , \mathcal{M}' et \mathcal{T}' sont ainsi modifiés tels que $N_{\mathcal{M}'} \leftarrow N_{\mathcal{M}'} + N_{\mathcal{M}^*}$ et $N_{\mathcal{E}'} \leftarrow N_{\mathcal{E}'} + N_{\mathcal{E}^*}$.
- On crée deux nouveaux éléments e'' et e^{**} tel que $m_{[e'',1]} \equiv m'$ et $m_{[e'',2]} \equiv m^*$. De la même manière $m_{[e^{**},1]} \equiv m''$ et $m_{[e^{**},2]} \equiv m^{**}$. Le voisinage de ces

Algorithme de calcul de la distance critique entre deux marqueurs

```

1 do j = 1,K
2   do i = 1,L
3     do n = 1,decompte(i,j)
4        $m_{i,j}(n) = \text{false}$ 
5       do jj = j - 1, j + 1
6         do ii = i - 1, i + 1
7           do m=1,decompte(ii,jj)
8             if ( $m_{ii,jj}(m) = \text{true}$ ) then
9                $m_{ii,jj}(m) = \text{vu}$ 
10              calcul distance ( $m_{i,j}(n), m_{ii,jj}(m)$ )
11            end if
12          end do
13        end do
14      end do
15    end do
16  end do
17 end do

```

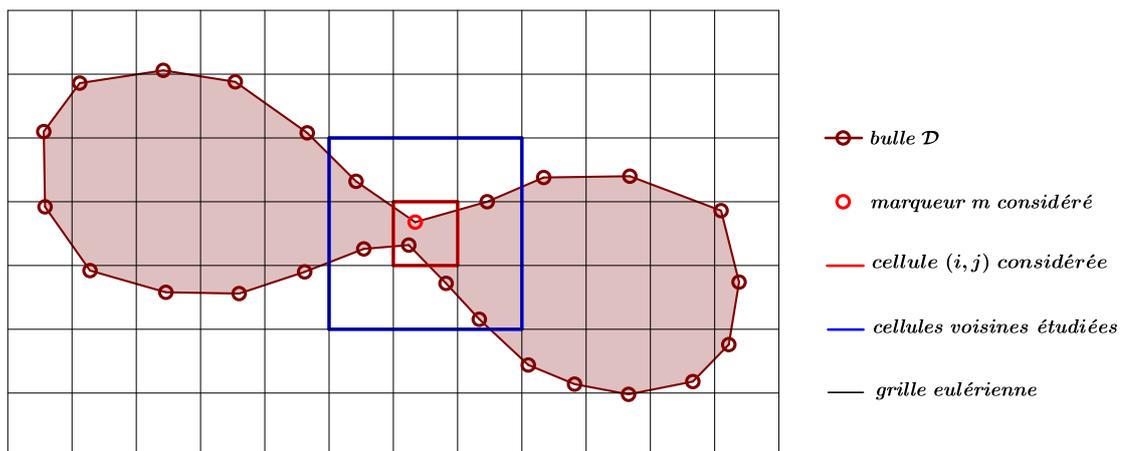
TABLE 2.10 – Calcul de la distance entre les marqueurs $m \in \mathcal{D}$ 

FIGURE 2.16 – Calcul de la distance critique avant d'entamer la procédure de rupture (le procédé est le même lorsqu'il y a coalescence)

nouveaux éléments est également redéfini comme décrit en Sec. 2.3.

- On supprime la bulle \mathcal{D}^* et toutes ses composantes. On a ainsi une unique bulle \mathcal{D}' obtenue à partir des bulles \mathcal{D}^* et \mathcal{D}' .

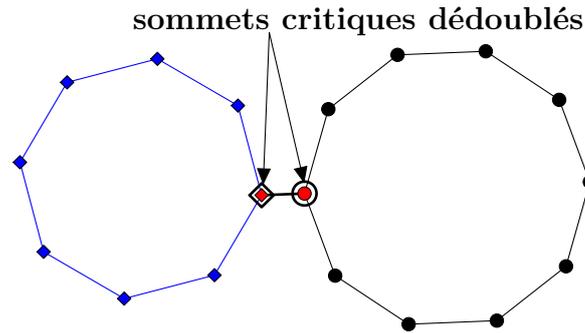


FIGURE 2.17 – Dédoublage des sommets : les sommets critiques (en rouges) sont dédoublés et reliés par des éléments additionnels superposés

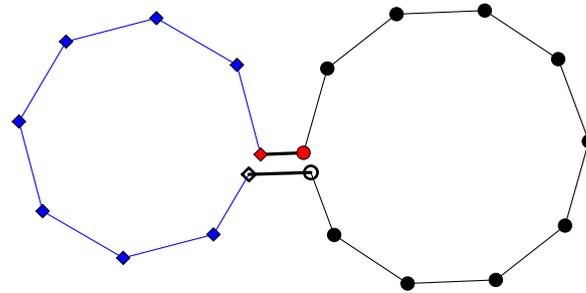


FIGURE 2.18 – Surface front-tracking obtenue après procédure complète de coalescence

2.7.3 Procédure de rupture

Soit la bulle $\mathcal{D}' = (\mathcal{E}', \mathcal{M}', \mathcal{T}')$. A l'instant $t^{(n)}$, la procédure de rupture sur \mathcal{D}' est la suivante :

- On dédouble les sommets critiques m' et $m'' \in \mathcal{D}'$. On crée ainsi les marqueurs m^* et m^{**} tel que $m' \equiv m^*$ et $m'' \equiv m^{**}$. La taille de $\mathcal{M}' \in \mathcal{D}'$ se voit ainsi augmenté de 2 tel que $N_{\mathcal{M}'} \leftarrow N_{\mathcal{M}'+2}$.
- On crée un nouvelle bulle $\mathcal{D}^* = (\mathcal{E}^*, \mathcal{M}^*, \mathcal{T}^*)$ qui va contenir tous les éléments compris entre m' et $m'' \in \mathcal{D}'$. Les ensembles \mathcal{E}' , \mathcal{M}' et \mathcal{T}' sont ainsi modifiés tels que $N_{\mathcal{M}'} \leftarrow N_{\mathcal{M}'} - N_{\mathcal{M}^*}$ et $N_{\mathcal{E}'} \leftarrow N_{\mathcal{E}'} - N_{\mathcal{E}^*}$.
- On crée deux nouveaux éléments e''' et e^* tel que $m_{[e''',1]} \equiv m'$ et $m_{[e''',2]} \equiv m''$. De la même manière $m_{[e^*,1]} \equiv m^*$ et $m_{[e^*,2]} \equiv m^{**}$. Le voisinage de ces nouveaux éléments est également redéfini comme décrit en Sec. 2.3. La taille des ensembles \mathcal{E}' et \mathcal{E}^* est ainsi augmentée tels que $N_{\mathcal{E}'} \leftarrow N_{\mathcal{E}'} + 1$ et

2.8. Fraction volumique et indicatrice de phase : fonction couleur C 74

$$N_{\mathcal{E}^*} \leftarrow N_{\mathcal{E}^*} + 1$$

— On a ainsi deux bulles \mathcal{D}' et \mathcal{D}^* obtenue à partir d'une unique bulle \mathcal{D}' .

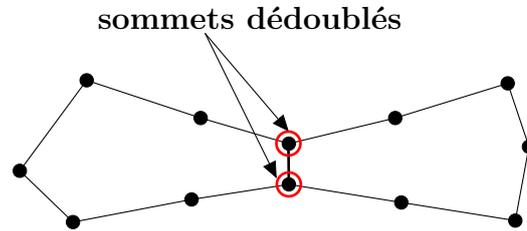


FIGURE 2.19 – Dédoublage des sommets : les sommets critiques sont dédoublés et reliés par des éléments additionnels superposés

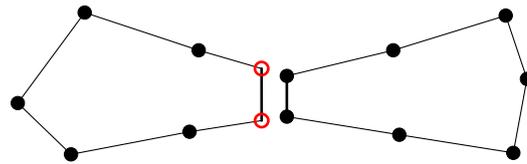


FIGURE 2.20 – Surface front-tracking obtenue après rupture, au bout de quelques itérations temporelles

Une fois la procédure de coalescence ou rupture terminée, il faut porter une attention particulière au fait que deux bulles venant de fusionner (respectivement rompre) à l'instant $t^{(n)}$ ne doivent pas rompre (respectivement fusionner) immédiatement à l'instant $t^{(n+1)}$. Selon le problème étudié, il faut fixer un critère généralement temporel (Nombre d'itérations, temps physique...) empêchant ce phénomène et permettant ainsi aux forces de tension de surface de jouer leur rôle sur les surfaces front-tracking.

2.8 Fraction volumique et indicatrice de phase : fonction couleur C

La résolution des équations du mouvement des phases fluides nécessite la connaissance des propriétés physiques locales telles que la masse volumique ou

la viscosité au cours du temps. Pour des écoulements diphasiques, ces propriétés ne sont pas directement connues dans les cellules de la grille eulérienne coupées par l'interface. Il peut être alors utile de calculer la fraction volumique d'une phase dans un volume de la grille eulérienne ou de définir l'indicatrice de phase sur les nœuds de la grille. Par la suite, ces deux quantités seront respectivement nommées "fonction couleur" et "fonction couleur binaire". La fonction couleur binaire est déterminée par une méthode de ray-casting et la fraction volumique est calculée par une méthode géométrique exacte basée sur la connaissance de l'interface discrète. Ces deux méthodes sont décrites ci-dessous. Notons que ces deux approches sont différentes des techniques proposées dans les méthodes originales de front-tracking [92, 82].

2.8.1 Méthode de ray-casting : calcul de la fonction couleur binaire

La méthode de ray-casting est une méthode graphique basée sur le théorème de **Jordan curve** : "*Toute courbe fermée Γ divise les points du plan n'appartenant pas à Γ en deux domaines distincts ayant Γ comme limite commune*".

Ainsi, si le nombre d'intersections d'un segment $[AB]$ avec les multiples interfaces d'un écoulement diphasique est pair, les points A et B sont dans la même phase. Inversement, si ce nombre est impair, les points sont dans des phases distinctes. Pour connaître la phase de B , il suffit donc de connaître celle de A . Le choix de A peut, par exemple, être pris à l'extérieur du domaine et il sera alors attribué à la phase porteuse. Cette méthode ne nécessite aucun calcul préalable et est purement géométrique. De ce fait, elle est classée comme une des méthodes les plus rapides pour tester une inclusion dans un maillage lagrangien surfacique triangulaire (3D) ou un simple contour en 2D.

L'algorithme 2.11 présente un exemple de calcul de la fonction couleur binaire. Une demi-droite, parallèle à l'axe des x ou y , partant d'une cellule eulérienne (i, j) , à l'infini, est initialisée. Pour une cellule (i, j) donnée, si le nombre d'intersections avec la surface lagrangienne est impair, la fonction couleur de la cellule, $C_{ij} = 1$ et $C_{ij} = 0$ dans les autres cas. Les entiers K et L représentent les nombres de cellules de la grille eulérienne dans les directions verticale et horizontale respectivement et nts le nombre d'intersections entre un segment donné et les cellules eulériennes. Le segment $[\bar{x}_i \bar{x}_{inf_i}]$ va d'un nœud eulérien donné de coordonnée \bar{x}_i à un point quelconque de coordonnée \bar{x}_{inf_i} suffisamment loin de la surface front-tracking. Pour des raisons pratiques, \bar{x}_{inf_i} est différent pour tout \bar{x}_i et est généralement choisi de manière à ce que le segment $[\bar{x}_i \bar{x}_{inf_i}]$ soit parallèle à la grille eulérienne. Cet algorithme nous permet de générer une fonction de couleur binaire (C_{ij}) qui est égale à 1 à l'intérieur de la surface front-tracking et 0 à l'extérieur.

Algorithme de calcul de la fonction couleur binaire

```

1 do j = 1,K
2   nts = 0
3   do i = 1,L
4     if ( intersection(  $[\bar{x}_i, \bar{x}_{inf_i}]$ ,  $\Gamma$  ) ) then
5       nts = nts + 1
6     end if
7   end do
8   if ( nts pair ) then
9      $C_{ij} = 0$ 
10  else
11     $C_{ij} = 1$ 
12  end if
13 end do

```

TABLE 2.11 – Détermination de la fonction couleur binaire par la méthode Ray-casting

On peut améliorer l'efficacité de la méthode en utilisant des *octree*, un raffinement local du maillage eulérien pour mieux classifier les éléments lagrangiens. Les caractéristiques et les améliorations de cette méthode sont décrits dans les travaux [55, 79].

2.8.2 Calcul de la fraction volumique exacte C

Dans cette approche, la fraction volumique C est calculée exactement en utilisant la position de la surface lagrangienne. Cette procédure nécessite la connaissance préalable des intersections entre la surface front-tracking et toutes les cellules de la grille eulérienne. La figure 2.21, illustre une cellule coupée par trois surfaces lagrangiennes. Dans cet exemple, la cellule est divisée en quatre parties distinctes et le volume de chaque partie est obtenu par l'intégration de la surface fermée délimitant chacun de ces volumes. Sachant que les surfaces lagrangiennes sont orientées (sens trigonométrique), le volume calculé peut être positif ou négatif. L'algorithme 2.12 présente les étapes de calcul de la fraction volumique exacte. Dans cet algorithme, nts représente le nombre total d'intersections entre une cellule eulérienne i, j et les surfaces front-tracking existantes, n le numéro de l'intersection traité et C_{temp} la fraction volumique temporaire ou fraction volumique d'une portion de surface lagrangienne intersectant la cellule i, j . L'algorithme ne s'arrête que lorsque tous les intersections ont été traitées et donc toutes les portions de surfaces calculées. La fraction volumique totale de la cellule est la somme de toutes les portions de surfaces ($\sum C_{temp}$) sur une cellule eulérienne i, j donnée. Le sommet A de la cellule considérée est toujours le point de départ et le point central du calcul de

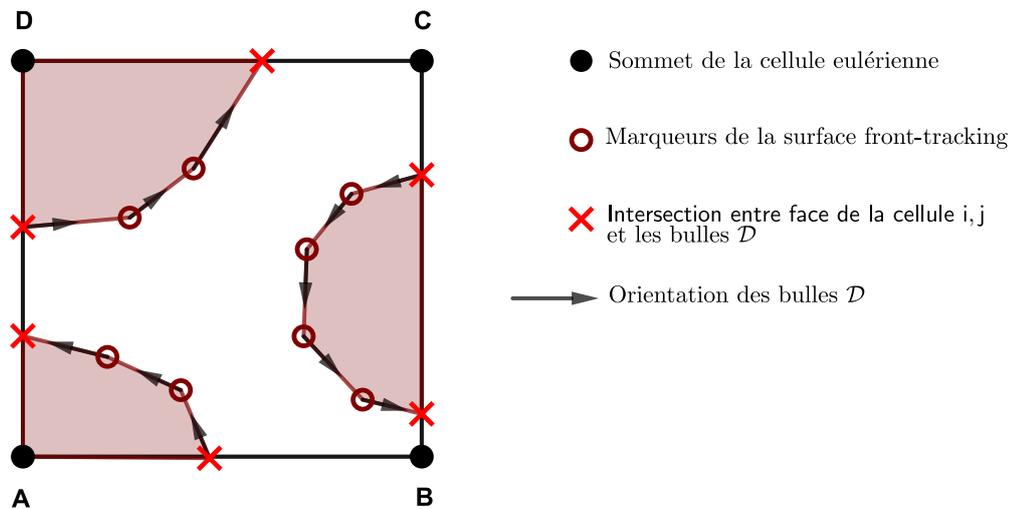


FIGURE 2.21 – Cellule eulérienne intersectée par trois surfaces lagrangiennes (bulle \mathcal{D}) distinctes

volume. Si ce point est dans la phase du fluide dont la fraction volumique est calculée (en général le fluide 2), alors nous calculons C . Si le sommet A appartient au fluide 1, nous calculons la fraction volumique de la phase complémentaire $1 - C$ et il est alors aisé de remonter à la valeur C . Pour connaître l'appartenance du sommet A à une des deux phases 1 ou 2, on utilise l'algorithme 2.11 de calcul de la fonction couleur binaire. Le calcul de la fraction volumique C tel qu'il est décrit dans l'algorithme du tableau 2.12 est illustré sur les figures 2.22a, 2.22b et 2.22c pour une cellule coupée par trois surfaces lagrangiennes. Ce procédé est généralisable quelle que soit la cellule eulérienne coupée et le nombre de surfaces lagrangiennes intersectant cette dernière.

2.9 Comparaison avec des méthodes de suivi d'interfaces de la littérature

La méthode front-tracking FTR-PERM-VBC, présentée dans les sections précédentes, est maintenant comparée à d'autres techniques de suivi d'interfaces de la littérature. Le cas test étudié est similaire à celui présenté en Sec. 2.4. Une interface circulaire de rayon $0,15\text{ m}$, initialement centrée en $(0,5\text{ m}; 0,75\text{ m})$, est

Algorithme de calcul de la fonction couleur

```

1 Initialisation
2  $C_{ij} = 0$ 
3  $nts = nts$ 
4  $n = 0$ 
5 if ( $A \subset \mathcal{D}$ )
6   on est dans le fluide 2
7    $C_{ij} = C_{ij}$ 
8 else
9   on est dans le fluide 1
10   $C_{ij} = 1 - C_{ij}$ 
11 end if
12 Calcul des fractions volumiques temporaires  $C_{temp}$  dans la cellule  $(i, j)$ 
13 do while  $nts > 0$ 
14   if (intersection( $\mathcal{D}$ , faces( $AB, BC, CD, DA$ ))) then
15      $n = n + 1$ 
16      $nts = nts - 1$ 
17     intersection( $n$ ) = false
18     Calcul du volume ( $V_{calc}$ ) entre les points  $A$ ,  $int(n)$  et  $int(m \neq n)$ 
19      $C_{temp} = V_{calc}/h^2$ 
20     if ( $C_{temp} \geq 0$ )
21        $C_{ij} = C_{ij} + C_{temp}$ 
22     else
23        $C_{ij} = C_{ij} + (1 - C_{temp})$ 
24     end if
25      $nts = nts - 1$ 
26     intersection( $m$ ) = false
27      $\vdots$ 
28      $\vdots$ 
29      $\vdots$ 
30   end if
31 end do

```

TABLE 2.12 – Détermination de la fonction couleur exacte

advectionnée par le champ de vitesse tourbillonnaire instationnaire suivant :

$$u(x, y) = -2\sin(\pi x)^2 \cos(\pi y) \sin(\pi y) \cos(\pi t/T) \quad [u] = m/s \quad (2.33a)$$

$$v(x, y) = 2\sin(\pi y)^2 \cos(\pi x) \sin(\pi x) \cos(\pi t/T) \quad [v] = m/s \quad (2.33b)$$

L'interface initialement circulaire est dans un premier temps déformée et étirée par ce champ de vitesse jusqu'à la période $T/2$, puis elle évolue dans le sens inverse de manière à retrouver sa position et son aspect initial à l'instant $t = T$ (Fig. 2.23).

Afin de réaliser des comparaisons quantitatives avec d'autres méthodes de suivi

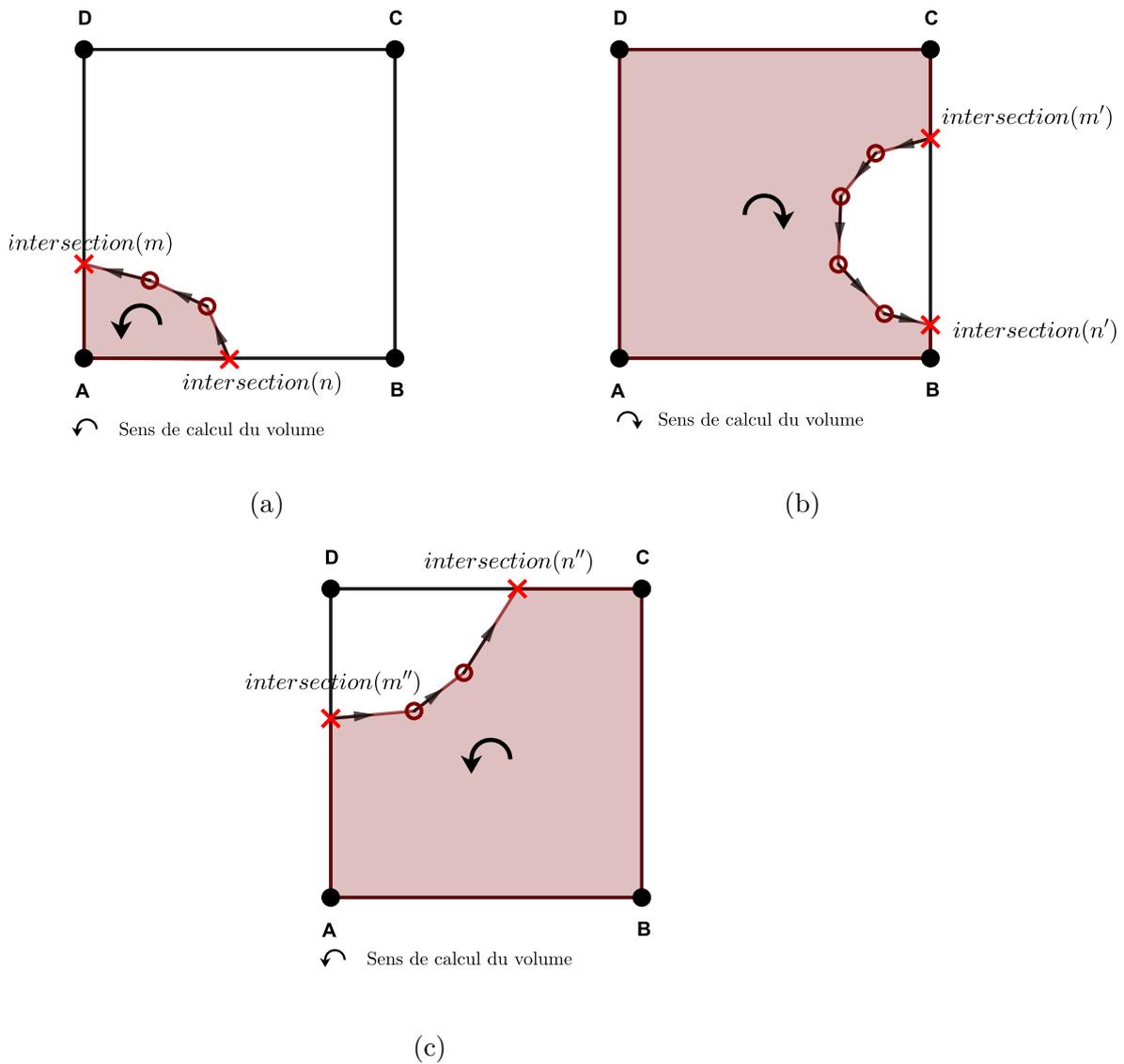


FIGURE 2.22 – Calcul de la fraction volumique $C_{i,j}$: (a) Le calcul de la fraction volumique temporaire C_{temp} se fait dans le même sens que l'orientation de la surface, le volume est donc positif, $C_{i,j} = C_{i,j} + C_{temp}$. (b) Le calcul de C_{temp} se fait dans le sens contraire de l'orientation de la bulle considérée, le volume est négatif et $C_{i,j} = C_{i,j} + (1 - C_{temp})$. (c) Le calcul de C_{temp} se fait encore dans le sens contraire de l'orientation de la bulle, $C_{i,j} = C_{i,j} + (1 - C_{temp})$

d'interfaces, généralement basées sur le transport d'une fonction indicatrice, la fraction volumique exacte de la représentation discrète de l'interface via la méthode

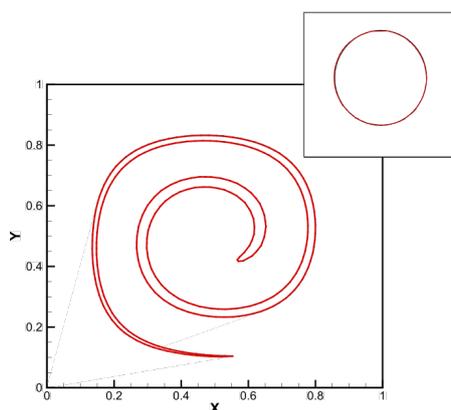


FIGURE 2.23 – Déformation d'un cercle par un champ de vitesse tourbillonnaire instationnaire (Eqs. 2.33a-2.33b) pour le pas d'espace $h = 1/32$ et la période $T = 8 s$, au temps $t = T/2$ (figure principale), $t = 0$ et $t = T$ (figure en haut à droite). Un zoom de l'interface à $t = 0$ et $t = T$ est représenté sur la figure 2.24a.

front-tracking a été calculée (voir Sec. 2.8.2). Les tableaux 2.13 et 2.14 indiquent l'erreur moyenne sur la fraction volumique

$$\|E_C\|_1 = \sum_{i,j} h^2 |C^i(i,j) - C^f(i,j)| \quad (2.34)$$

au temps $T = 2 s$ et $T = 8 s$, pour différentes méthodes de suivi d'interface de la littérature, avec $C^f(i,j)$ et $C^i(i,j)$ les fractions volumiques finales et initiales au nœuds (i,j) . Quelle que soit la période T considérée, la méthode FTR-PERM-

Méthodes	h=1/32	Ordre	h=1/64	Ordre	h=1/128
ELVIRA [81]	2.52E-03	1.96	6.46E-04	2.16	1.45E-04
Quadratic fit continuity [81]	1.09E-03	1.96	2.80E-04	2.29	5.72E-05
Quadratic fit/EI-LE [81]	1.88E-03	2.09	4.42E-04	2.24	9.36E-05
Rider-Kothe/Puckett [77]	2.36E-03	2.01	5.85E-04	2.16	1.31E-04
Stream/Puckett [31]	2.37E-03	2.07	5.65E-04	2.10	1.32E-04
FTR-FRONTIER [20]	1.03E-03	2.11	2.39E-04	1.32	9.54E-05
2D conservative FTR [17]	5.67E-03	1.68	1.77E-03	1.26	7.43E-04
FTR-PERM-VBC	2.26E-04	2.05	5.45E-05	1.98	1.38E-05

TABLE 2.13 – Erreurs moyennes sur la fraction volumique (Eq. 2.34) et ordre de convergence associé (Eq. 2.18a) pour différentes techniques de suivi d'interfaces de la littérature – Déformation d'une interface circulaire par un champ de vitesse tourbillonnaire instationnaire (2.33a-2.33b) à $T = 2 s$.

Méthodes	h=1/32	Ordre	h=1/64	Ordre	h=1/128
DS-CLSVOF [85]	5.45E-02	2.38	1.05E-02	2.59	1.74E-03
DS-CLSMOF [38]	2.92E-02	2.41	5.51E-03	2.01	1.37E-03
Stream/Youngs [31]	3.61E-02	1.85	1.00E-02	2.21	2.16E-03
Rider-Kothe/Puckett [77]	4.78E-02	2.78	6.96E-03	2.27	1.44E-03
Stream/Puckett [31]	3.72E-02	2.45	6.79E-03	2.52	1.18E-03
MMCUSL [61]	1.04E-02	2.95	1.34E-03	1.94	3.49E-04
THINC/LS [75]	2.85E-02	3.07	3.39E-03	2.32	6.79E-04
LFRM [83]	-	-	1.23E-02	1.91	3.28E-03
FTR-PERM-VBC	1.14E-03	1.66	3.59E-04	1.77	1.05E-04

TABLE 2.14 – Erreurs moyennes sur la fraction volumique (Eq. 2.34) et ordre de convergence associé (Eq. 2.18a) pour différentes techniques de suivi d'interfaces de la littérature – Déformation d'une interface circulaire par un champ de vitesse tourbillonnaire instationnaire (Eqs. 2.33a-2.33b) à $T = 8 s$.

VBC présente toujours les fractions volumiques les plus précises avec une erreur en moyenne dix fois plus petites que les autres approches. De plus, notre méthode tend vers le second ordre avec le raffinement du pas d'espace h . La précision de la méthode FTR-PERM-VBC est à nouveau confirmée graphiquement lorsque nous comparons pour la grille grossière $h = 1/32$, l'écart entre l'interface à la fin de la période $t = T = 8 s$ et au temps initial $t = 0 s$ (Figs. 2.24a-2.24d).

Dans ce paragraphe, l'efficacité de la méthode FTR-PERM-VBC est étudiée pour le champ tourbillonnaire instationnaire, sur une période complète $T = 8 s$, et comparée aux méthodes Stream/Youngs [31] et DS-CLSVOF [85]. En raison du manque de données pour ces références, les temps de calcul CPU des méthodes Stream/Youngs et DS-CLSVOF ont été assimilés à ceux des méthodes usuelles VOF-PLIC et LSET-WENO développées il y a quelques années (voir Tab. 2.15 pour plus de détails). Ces choix sont justifiés par les commentaires suivants : (i) la méthode Stream/Youngs est basée sur le schéma VOF-PLIC et (ii) le temps de calcul total requis pour la méthode DS-CLSVOF est essentiellement piloté par l'algorithme level-set. Tous les calculs ont été réalisés sur système Linux avec un ordinateur Intel Xeon CPU E7-8890 V4 2.2GHz. La figure 2.25a, donne pour les méthodes FTR-PERM-VBC, Stream/Youngs (VOF-PLIC) and DS-CLSVOF (LSET-WENO), le temps CPU requis pour le suivi de l'interface du temps initial à $t = T = 8 s$, en fonction du pas d'espace h . La méthode Stream/Youngs (VOF-PLIC) s'est révélée être le schéma le moins coûteux quelle que soit la grille considérée. Pour les grilles grossières, la méthode FTR-PERM-VBC est plus coûteuse que la méthode DS-CLSVOF (LSET-WENO). Cependant, le coût de calcul

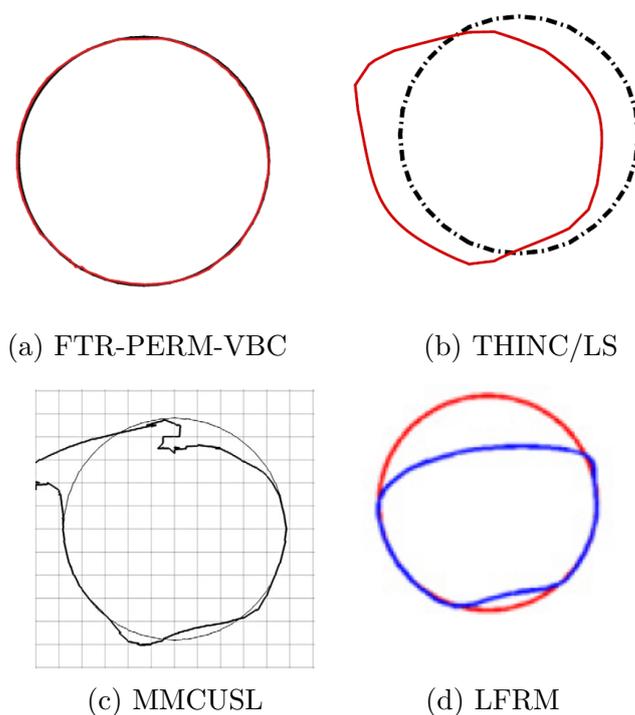
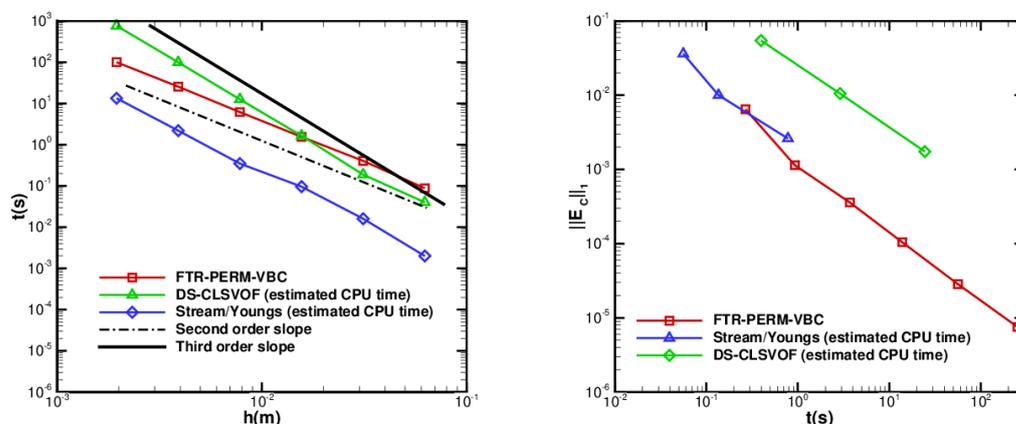


FIGURE 2.24 – Comparaison de l'interface aux temps initial et final pour le cas de la déformation d'une interface circulaire par un tourbillon instationnaire avec la méthode FTR-PERM-VBC et différentes méthodes de suivi d'interfaces de la littérature, $h = 1/32$ et $T = 8$ s. Méthodes : (a) FTR-PERM-VBC, (b) Méthode couplée THINC et level set (THINC/LS) [75], (c) Mass and momentum conserving unsplit semi-Lagrangian (MMCUSL) [61], (d) Local Front Reconstruction (LFRM) avec facteur de résolution $nc = 2$ *i.e* le rapport entre la grille de reconstruction et la grille eulérienne [83].

de la méthode FTR-PERM-VBC est inversement proportionnel au carré de $1/h$ alors que les deux autres méthodes croissent approximativement en $\mathcal{O}(1/h^3)$. Le coût de calcul de la méthode FTR-PERM-VBC devient ainsi compétitif lorsque la grille eulérienne est raffinée.

L'efficacité de la méthode numérique dépend à la fois du coût de calcul et la précision de la solution numérique. La figure 2.25b présente l'erreur sur la fraction volumique (Eq. 2.34) en fonction du temps de calcul CPU estimé pour les méthodes FTR-PERM-VBC, Stream/Youngs (VOF-PLIC) et DS-CLSVOF (LSET-WENO). Dans ce cas, les temps de calcul ont été estimés alors que les erreurs pour les méthodes Stream/Youngs et DS-CLSVOF ont été respectivement extraites de [31] et [85] (aussi reporté dans Tab. 2.14).



(a) Temps de calcul CPU en fonction du pas d'espace h (b) Erreurs moyennes sur la fraction volumique en fonction du temps CPU

FIGURE 2.25 – Déformation d'une interface circulaire dans un champ tourbillonnaire instationnaire (Eqs. 2.33a-2.33b) sur une période $T = 8$ s pour les méthodes FTR-PERM-VBC, Stream/Youngs (VOF-PLIC) et DS-CLSVOF (LSET-WENO).

Méthode	Abréviation	Référence
Méthode Volume of Fluid avec reconstruction PLIC	VOF-PLIC	[104, 80]
Méthode Level-Set avec schéma WENO conservatif	LSET-WENO	[58, 57]
Méthod hybride particule/Level-Set	LSET-PART	[91]
Méthode Front-tracking sans connectivité avec reconstruction des lignes de niveau	FTR-LCRM(-VC)	[82]
Front-tracking method with PERM reconstruction for velocity nodes calculation (and volume conservation)	FTR-PERM(-VBC)	Notre méthode

TABLE 2.15 – Méthodes utilisées pour les comparaisons

La méthode Stream/Youngs (VOF-PLIC) semble être la plus efficace si on recherche une solution grossière. Dès l'instant où une meilleure solution est recherchée, la méthode FTR-PERM-VBC devient rapidement moins coûteuse en comparaison aux méthodes DS-CLSVOF (LSET-WENO) et Stream/Youngs (VOF-PLIC). On peut aussi ajouter que le temps CPU est inversement proportionnel à l'erreur sur la fraction volumique pour les approches FTR-PERM-VBC et DS-CLSVOF (LSET-WENO).

Sachant que les méthodes front-tracking sont généralement considérées comme étant les plus précises, nous avons comparé les méthodes FTR-PERM et FTR-LCRM (resp. FTR-PERM-VBC et FTR-LCRM-VC) sans (resp. avec) l'algorithme de conservation du volume sur le cas de la déformation d'une interface circulaire dans un champ de vitesse tourbillonnaire stationnaire à $t = 4 s$ (voir Eqs. 2.17a-2.17b en Sec. 2.4). Le tableau 2.16 résume les différents résultats. Contrairement à

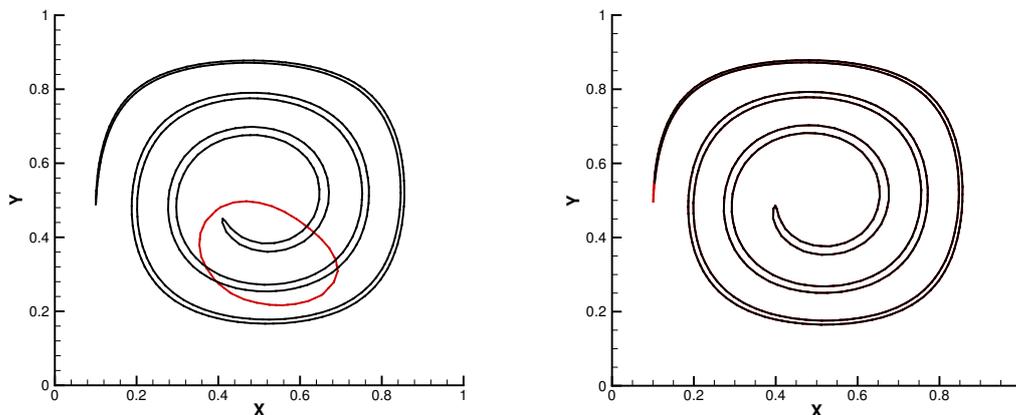
h	FTR-PERM(-VBC)		FTR-LCRM		FTR-LCRM-VC	
	$\ E_{h_e}\ _1$	Ordre	$\ E_{h_e}\ _1$	Ordre	$\ E_{h_e}\ _1$	Ordre
1/16	8.8E-04	-	7.7E-03	-	3.3E-02	-
1/32	1.9E-04	2.2	3.0E-03	1.3	3.1E-02	0.1
1/64	4.7E-05	2.0	7.6E-04	2.0	2.4E-02	0.4
1/128	1.2E-05	2.0	1.9E-04	2.0	1.7E-02	0.5
1/256	2.9E-06	2.0	4.8E-05	2.0	4.4E-03	1.9
1/512	7.2E-07	2.0	1.2E-05	2.0	1.1E-03	2.0

TABLE 2.16 – Erreur moyenne sur les positions (Eq. 2.18a) et ordre de convergence (Eq. 2.19) pour les méthodes FTR-PERM(-VBC) ou FTR-LCRM(-VC) (Tab. 2.15) - Déformation d'une interface circulaire par un tourbillon Eqs. 2.17a-2.17b

la méthode FTR-LCRM qui perd beaucoup en précision lorsque sa version conservative en volume est utilisée (FTR-LCRM-VC), notre méthode est tout aussi précise avec ou sans conservation du volume. Bien que l'approche FTR-LCRM soit du second ordre au-delà de $h = 1/32$ ($h = 1/128$ pour FTR-LCRM-VC), les erreurs sont au moins d'un ordre plus grand que celles obtenues avec la méthode FTR-PERM(-VBC). L'augmentation de l'erreur liée à l'activation de la conservation du volume dans la méthode FTR-LCRM est illustrée dans la figure 2.26a avec la grille relativement grossière $h = 1/32$.

On constate pour cette grille eulérienne que l'utilisation de l'algorithme de conservation du volume pour cette méthode détruit totalement la forme de l'interface. La version conservative de notre méthode FTR-PERM, c'est-à-dire FTR-PERM-VBC, n'altère pas de façon significative l'aspect de l'interface sauf au niveau des extrémités du serpentin où quelques légères différences sont visibles (Fig. 2.26b).

Le dernier test compare la capacité des différentes méthodes présentées dans le tableau 2.15 à conserver le volume en fonction du temps (Fig. 2.27). Sachant que les solutions calculées avec les méthodes FTR-PERM-VBC and FTR-LCRM-VC sont par construction conservatives, elles ne sont pas présentées dans cette



(a) FTR-LCRM (noir) et FTR-LCRM-VC (rouge) (b) FTR-PERM (noir) and FTR-PERM-VBC (rouge)

FIGURE 2.26 – Déformation d'une interface circulaire par un champ de vitesse tourbillonnaire stationnaire (Eqs. 2.17a-2.17b) à $t = 4 s$, $h = 1/32$. L'interface rouge (resp. noir) est obtenue avec (resp. sans) l'algorithme de la conservation du volume.

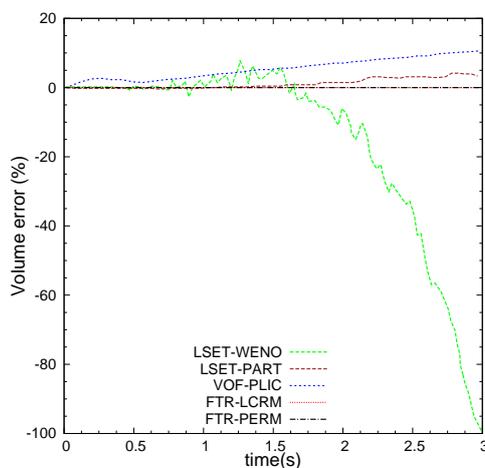


FIGURE 2.27 – Évolution de l'erreur sur le volume pour le cas de la déformation du disque dans un tourbillon Eqs. 2.17a-2.17b pour différentes méthodes de front-tracking et front-capturing - $h = 1/64$

étude. La méthode FTR-PERM est la méthode la plus précise avec une variation de volume inférieure à 0.1%. Globalement, les méthodes front-tracking conservent relativement bien le volume. Par ordre de précision décroissant, les méthodes FTR-

LCRM, LSET-PART, VOF-PLIC et LSET-WENO engendrent des variations de volume de 1%, 4%, 10% à $\approx 90\%$ de la valeur initiale.

2.10 Conclusions

Nous avons présenté la méthode front-tracking bidimensionnelle développée dans ces travaux. Ce choix de modélisation a été justifié par les nombreux apports de la méthode front-tracking et plus particulièrement le traitement explicite des interfaces qu'elle permet, même quand leur taille est caractéristique est inférieure à une cellule eulérienne. Plusieurs cas test ont été menés afin de valider les différents aspects de la méthode front-tracking développée. Nous avons également confronté notre approche de suivi d'interface de la littérature afin de tester sa performance en comparaison aux autres approches.

Pour conclure, nous avons montré que notre méthode de front-tracking FTR-PERM-VBC est (i) très précise, (ii) converge à l'ordre 2, (iii) ne détériore pas les solutions lorsque l'algorithme de conservation du volume est activé, (iv) fournit toujours des résultats plus précis en comparaison aux autres méthodes existantes de la littérature.

Chapitre 3

Reconstruction de la vitesse de l'interface pour des écoulements diphasiques

Sommaire

3.1	Algorithme de reconstruction	87
3.1.1	Relations de saut	87
3.1.2	Fonction d'approximation linéaire pour les composantes de vitesse	88
3.1.3	Approximation de la pression sur les marqueurs	90
3.1.4	Reconstruction de la vitesse du marqueur m de l'interface	90
3.2	Validation : écoulement axisymétrique autour d'une sphère fluide, solution de Hadamard-Rybczynski . . .	92

Les validations effectuées dans les sections précédentes montrent la capacité de la méthode FTR-PERM-VBC à suivre efficacement les interfaces, même lorsqu'elles sont largement étirées et déformées, tout en maintenant le volume constant. Nous avons également montré que l'algorithme le plus précis pour calculer la vitesse du marqueur à partir du champ de vitesse Eulérien s'avérait être la méthode PERM. Cependant, la méthode PERM ainsi que les méthodes bilinéaires ou Peskin supposent une certaine régularité du champ de vitesse à travers l'interface, ce qui est clairement discutable pour des écoulements à deux phases où les dérivées de vitesse sont discontinues à cause du saut des propriétés physiques à l'interface [18].

Pour surmonter ce problème, nous avons développé une méthode originale de re-

construction de vitesse basée sur le saut des propriétés physiques à l'interface. L'objectif est de construire le couplage entre la grille Eulérienne et le maillage de la surface front-tracking sur des considérations physiques plutôt que des interpolations numériques, comme cela est proposé dans la plupart des méthodes front-tracking.

Nous montrerons ci-dessous que cet aspect joue un rôle fondamental lorsque nous considérons des écoulements avec un saut des propriétés physiques à l'interface.

3.1 Algorithme de reconstruction

3.1.1 Relations de saut

Considérons un écoulement incompressible à deux fluides non miscibles, le fluide 1 et le fluide 2, séparés par une interface Γ de tension de surface σ (Fig. 3.1). En

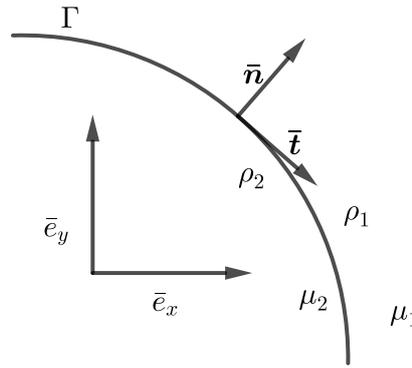


FIGURE 3.1 – Interface Γ séparant les fluides 1 et 2 dans un système de coordonnées cartésiennes (x,y) . Les vecteurs \bar{t} et \bar{n} sont respectivement les vecteurs tangent et normal à l'interface, le vecteur normal pointant vers le fluide 1.

supposant une interface d'épaisseur nulle, le vecteur vitesse \bar{u} doit être continu à travers l'interface Γ , alors que la force de contrainte s'appliquant des deux côtés de l'interface, $\bar{\mathcal{T}} \cdot \bar{n} \equiv (-p\bar{\mathcal{I}} + \mu(\bar{\nabla}\bar{u} + (\bar{\nabla}\bar{u})^t)) \cdot \bar{n}$, est discontinue [18]. Pour chaque point appartenant à l'interface Γ , on a :

$$\bar{u}_1 = \bar{u}_2 \quad (3.1a)$$

$$\bar{n} \cdot (\bar{\mathcal{T}}_1 - \bar{\mathcal{T}}_2) \cdot \bar{n} = \sigma(\bar{\nabla} \cdot \bar{n}) \quad (3.1b)$$

$$\bar{t} \cdot (\bar{\bar{T}}_1 - \bar{\bar{T}}_2) \cdot \bar{n} = (\bar{\nabla} \sigma) \cdot \bar{t} \quad (3.1c)$$

avec \bar{n} la vecteur normal sortant par rapport au domaine fluide 2. Pour des problèmes tridimensionnels, les équations (3.1c)–(3.1b) sont des relations vectorielles à deux composantes chacune. En utilisant un repère cartésien classique (\bar{e}_x, \bar{e}_y) pour exprimer les vecteurs unitaires normal et tangentiel à l'interface $\bar{n} = n_x \bar{e}_x + n_y \bar{e}_y$ et $\bar{t} = n_y \bar{e}_x - n_x \bar{e}_y$ et en supposant une tension de surface uniforme $((\bar{\nabla} \sigma) \cdot \bar{t} = 0)$, les relations de saut (3.1a)–(3.1c) peuvent être reformulées comme suit :

$$[u]_2^1 = 0, \quad [v]_2^1 = 0 \quad (3.2a)$$

$$\left[-p + 2\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} n_x^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) n_x n_y + \frac{\partial v}{\partial y} n_y^2 \right) \right]_2^1 = \sigma \kappa \quad (3.2b)$$

$$\left[\mu \left(\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) n_x n_y + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (n_y^2 - n_x^2) \right) \right]_2^1 = 0 \quad (3.2c)$$

où $\kappa \equiv \bar{\nabla} \cdot \bar{n}$ est la courbure locale de l'interface et $[X]_2^1 \equiv X_1 - X_2$ représente le saut de la quantité X à travers l'interface. Le principe de notre méthode de reconstruction de vitesse est d'évaluer la vitesse des marqueurs de la surface lagrangienne, \bar{V}_m mais aussi les gradients de vitesse au marqueur m grâce aux conditions de saut (3.2a)–(3.2c). Une fois les vitesses et les gradients obtenus, l'interface est advectée et les différents algorithmes décrits en Sec. 2.1 sont appliqués.

L'élément clef de notre méthode de reconstruction de vitesse sur chaque marqueur m repose sur l'approximation des vitesses et des pressions obtenues à partir de la grille eulérienne utilisée pour la résolution des équations du mouvement. Ces approximations sont alors introduites dans les relations de saut (3.2a)–(3.2c) afin de former un système d'équations algébriques dont les inconnues sont les composantes de vitesse du marqueur considéré. Les différentes étapes pour obtenir la vitesse du marqueur sont décrites dans les parties suivantes.

3.1.2 Fonction d'approximation linéaire pour les composantes de vitesse

La construction de fonctions d'approximation linéaires pour les composantes de vitesse dans chaque domaine fluide est détaillée ici en utilisant l'exemple du calcul de cette fonction pour le calcul de la composante horizontale de vitesse du marqueur. Le procédé est identique pour le calcul de la composante verticale de cette vitesse.

Soit $V_m^{x,1}$ l'inconnue de vitesse horizontale du fluide 1, exprimée au marqueur $m \in \mathcal{M}$ de l'interface, de coordonnées \bar{x}_m . Pour une approximation locale continue

$\tilde{u}^{x,1}(\bar{x})$, on construit un polynôme d'interpolation linéaire sur un triangle défini par le marqueur m et deux nœuds de la grille eulérienne $n_2^{x,1}$ et $n_3^{x,1}$ (Fig. 3.2). Les coordonnées de ces deux nœuds sont $\bar{x}_2^{x,1}$ et $\bar{x}_3^{x,1}$ et leurs vitesses sont $u_2^{x,1}$ et $u_3^{x,1}$. Ils appartiennent aux composantes horizontales de vitesse du domaine fluide 1. L'approximation de la composante horizontale de vitesse s'écrit alors :

$$\tilde{u}^{x,1}(\bar{x}) = V_m^{x,1} \psi_m^{x,1}(\bar{x}) + u_2^{x,1} \psi_2^{x,1}(\bar{x}) + u_3^{x,1} \psi_3^{x,1}(\bar{x})$$

avec $\psi_\alpha^{x,1}(\bar{x})$ les polynômes de Lagrange tels que $\psi_\alpha^{x,1}(\bar{x}_\beta^{x,1}) = \delta_{\alpha,\beta}$, pour $(\alpha, \beta) \in \{m, 2, 3\} \times \{m, 2, 3\}$, avec le symbole de Kronecker $\delta_{\alpha,\beta} = 0$ si $\alpha \neq \beta$ et $\delta_{\alpha,\alpha} = 1$. Les variables $u_k^{x,1}$, $k = 2, 3$, sont les vitesses horizontales connues de la grille eulérienne et $V_m^{x,1}$ est la vitesse horizontale inconnue du marqueur de l'interface pour le fluide 1. Le choix des nœuds $n_2^{x,1}$ et $n_3^{x,1}$ de la grille eulérienne utilisée pour construire le

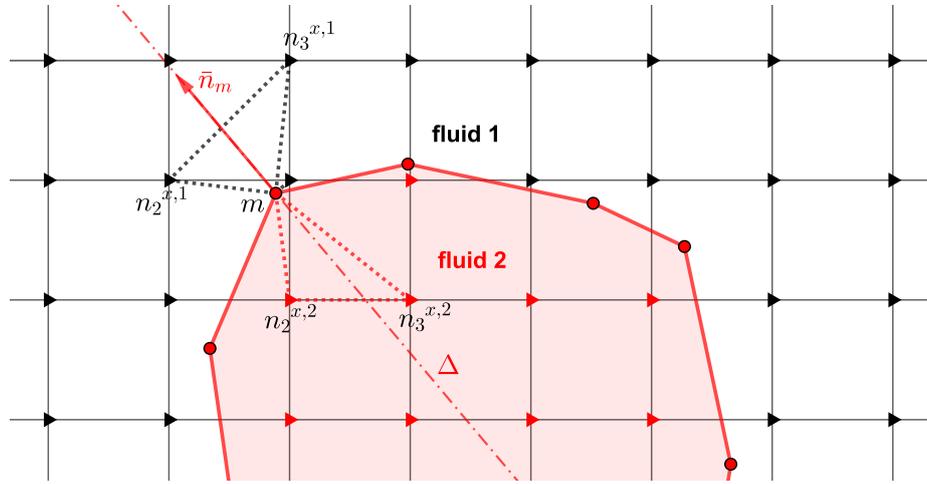


FIGURE 3.2 – Calcul de la vitesse de chaque marqueur $m \in \mathcal{M}$: en rouge (resp. noir) les symboles triangulaires représentent les positions des vitesses horizontales des nœuds de la grille Eulérienne appartenant au fluide 2 (resp. 1). Le triangle pointillé rouge (resp. noir) est le support utilisé pour construire la fonction d'approximation linéaire pour la vitesse horizontale dans le domaine fluide 2 (resp. 1).

triangle s'effectue selon les critères suivants :

Ils doivent être situés

- (i) dans le domaine du fluide 1 et sur la grille eulérienne horizontale,
- (ii) de part et d'autre de la droite $\Delta = \{\bar{x}_m + \xi \bar{n}_m; \xi \in \mathcal{R}\}$ avec \bar{n}_m la normale unitaire à l'interface en m ,
- (iii) suffisamment proches de m et
- (iv) tels que les sommets m , $n_2^{x,1}$ et $n_3^{x,1}$ du triangle soient aussi équilatéraux que possible.

Cette dernière condition est mesurée à travers la qualité Q du triangle qui est définie comme deux fois le ratio entre les rayons des cercles inscrit et circonscrit à ce triangle [78]. Pour un triangle équilatéral, $Q = 1$. Dans notre cas, on considère la qualité comme acceptable si $Q \geq 0.1$. L'ensemble des triangles $S^{x,1}$ qui satisfont aux conditions (i)-(iv), avec $Q \geq 0.1$, sont des candidats potentiels pour construire une approximation linéaire précise de la composante de vitesse à déterminer dans un domaine fluide donné. Pour chaque composante de vitesse et chacune des phases fluides, les nœuds seront choisis parmi les candidats potentiels de sorte que le système linéaire traduisant les relations de saut soit correctement conditionné.

3.1.3 Approximation de la pression sur les marqueurs

Contrairement à la vitesse qui est inconnue à ce stade, les deux pressions des deux domaines fluides en chaque marqueur $m \in \mathcal{M}$ de l'interface sont directement approximées en utilisant les nœuds de la grille eulérienne de pression. Pour chaque fluide, par exemple le fluide 1, on sélectionne deux nœuds de la grille $n_2^{p,1}$ et $n_3^{p,1}$, de coordonnées $\bar{x}_2^{p,1}$ et $\bar{x}_3^{p,1}$, situés :

- (i) sur la grille eulérienne décalée de pression et dans le bon domaine fluide (domaine 1 dans cet exemple),
- (ii) de part et d'autre de la droite $\Delta = \{\bar{x}_m + \xi \bar{n}_m; \xi \in \mathcal{R}\}$ et
- (iii) suffisamment proches du marqueur m de l'interface.

Soient p_2^1 et p_3^1 les pressions en $n_2^{p,1}$ et $n_3^{p,1}$. La pression p_m^1 du marqueur m est alors simplement égale à la pression interpolée au point d'intersection n_I^1 , de coordonnées \bar{x}_I^1 , situé à l'intersection entre Δ et $(n_2^{p,1}n_3^{p,1})$. La pression du marqueur, coté du fluide 1, s'écrit donc

$$p_m^1 = \frac{\|\bar{x}_2^{p,1} - \bar{x}_I^1\| p_3^1 + \|\bar{x}_3^{p,1} - \bar{x}_I^1\| p_2^1}{\|\bar{x}_3^{p,1} - \bar{x}_2^{p,1}\|}$$

La Figure 3.3 illustre l'approximation de la pression en m avec la représentation de tous les nœuds de pression utilisés pour le calcul.

3.1.4 Reconstruction de la vitesse du marqueur m de l'interface

Dans cette partie, les approximations linéaires des composantes de vitesse ainsi que l'approximation des pressions sont directement intégrées dans les relations de saut (3.2a)–(3.2c). La première condition (3.2a) est naturellement satisfaite en imposant l'égalité $V_m^x \stackrel{\text{def}}{=} V_m^{x,1} = V_m^{x,2}$ and $V_m^y \stackrel{\text{def}}{=} V_m^{y,1} = V_m^{y,2}$. Soit $\psi_i^{x,k}(\bar{x})$ (resp. $\psi_i^{y,k}(\bar{x})$), $i \in \{m, 2, 3\}$, le $i^{\text{ème}}$ polynôme linéaire de Lagrange construit à partir du triangle défini par les nœuds m , $n_2^{x,k}$ et $n_3^{x,k}$ (resp. m , $n_2^{y,k}$ et $n_3^{y,k}$), dans le fluide

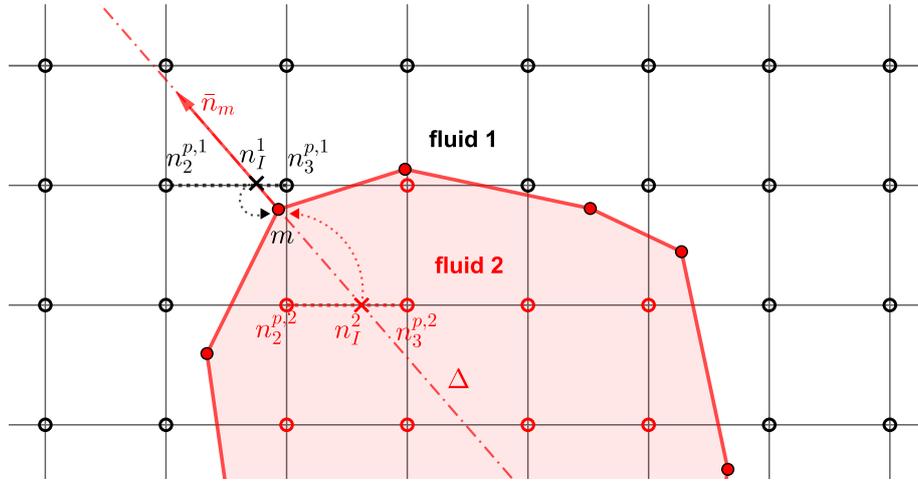


FIGURE 3.3 – Calcul de la pression en chaque marqueur $m \in \mathcal{M}$: les symboles circulaires rouges (resp. noirs) sont les nœuds de pression de la grille eulérienne appartenant au fluide 2 (resp. 1). Les symboles connectés par le segment rouge en pointillés (resp. noir) sont utilisés pour obtenir la pression interpolée au niveau de la croix (\times), puis au niveau de la position du marqueur m , pour le fluide 2 (resp. 1).

k . Avec des notations similaires $u_i^{x,k}$ (resp. $u_i^{y,k}$) est la composante horizontale (resp. verticale) de la grille Eulérienne aux nœuds $n_i^{x,k}$ (resp. $n_i^{y,k}$), $i = 2, 3$, situés dans le domaine fluide k . En intégrant les interpolations linéaires et les pressions approchées dans les relations de saut (3.2b)–(3.2c), on obtient le système linéaire suivant :

$$A(1, 1)V_m^x + A(1, 2)V_m^y = B(1) \quad (3.3a)$$

$$A(2, 1)V_m^x + A(2, 2)V_m^y = B(2) \quad (3.3b)$$

avec

$$A(1, 1) = 2 \left(\sum_{k=1}^2 (-1)^k \mu_k \left(n_x^2 \partial_x \psi_m^{x,k} + n_x n_y \partial_y \psi_m^{x,k} \right) \right)$$

$$A(1, 2) = 2 \left(\sum_{k=1}^2 (-1)^k \mu_k \left(n_x n_y \partial_x \psi_m^{y,k} + n_y^2 \partial_y \psi_m^{y,k} \right) \right)$$

$$A(2, 1) = \left(\sum_{k=1}^2 (-1)^k \mu_k \left(n_x n_y \partial_x \psi_m^{x,k} + \frac{n_y^2 - n_x^2}{2} \partial_y \psi_m^{x,k} \right) \right)$$

$$A(2, 2) = \left(\sum_{k=1}^2 (-1)^k \mu_k \left(-n_x n_y \partial_y \psi_m^{y,k} + \frac{n_y^2 - n_x^2}{2} \partial_x \psi_m^{y,k} \right) \right)$$

$$B(1) = - \sum_{k=1}^2 (-1)^k \left(-p_m^k + 2\mu_k \sum_{i=2}^3 \left(n_x^2 u_i^{x,k} \partial_x \psi_i^{x,k} + n_x n_y \left(u_i^{y,k} \partial_x \psi_i^{y,k} + u_i^{x,k} \partial_y \psi_i^{x,k} \right) + n_y^2 u_i^{y,k} \partial_y \psi_i^{y,k} \right) \right) - \sigma \kappa$$

$$B(2) = - \sum_{k=1}^2 (-1)^k \mu_k \sum_{i=2}^3 \left(n_x n_y \left(u_i^{x,k} \partial_x \psi_i^{x,k} - u_i^{y,k} \partial_y \psi_i^{y,k} \right) + \frac{n_y^2 - n_x^2}{2} \left(u_i^{x,k} \partial_y \psi_i^{x,k} + u_i^{y,k} \partial_x \psi_i^{y,k} \right) \right)$$

Comme cela est décrit en Sec. 3.1.2, quatre ensembles de triangles $S^{x,1}$, $S^{y,1}$, $S^{x,2}$ et $S^{y,2}$ sont définis pour réunir les candidats potentiels pour les approximations linéaires des composantes de vitesse en x et y dans les deux domaines fluides. Les quatre triangles retenus, chacun appartenant aux différents ensembles $S^{x,1}$, $S^{y,1}$, $S^{x,2}$ and $S^{y,2}$, sont déterminés en identifiant la combinaison qui fournit le meilleur conditionnement pour le système linéaire (3.3a-3.3b), $\text{cond}(A) = \lambda_M/\lambda_m$, avec λ_M et λ_m les valeurs singulières maximale et minimale de A (valeurs propres de $A^t A$).

3.2 Validation : écoulement axisymétrique autour d'une sphère fluide, solution de Hadamard-Rybczynski

Afin d'évaluer la précision de méthode de reconstruction de vitesse des marqueurs, on considère la solution d'Hadamard-Rybczynski qui consiste en une goutte/bulle sphérique (fluide 2) se déplaçant dans un fluide environnant (fluide 1) sous l'unique effet de la gravité $\bar{g} = -g\bar{e}_y$. On suppose que l'écoulement est stationnaire, incompressible et gouverné par les équations de Stokes. La sphère est non déformable, de rayon fixe $r = a$. La tension de surface est constante et les relations de saut (3.2a)–(3.2c) sont vérifiées. Pour maintenir la forme sphérique de l'interface, la pression dans l'Eq. (3.2b) doit être la pression hydrostatique. Les équations de Stokes sont résolues dans le référentiel de la sphère, en coordonnées sphériques (r, θ, Φ) . Sachant que l'écoulement est axisymétrique dans la direction verticale ($\theta = 0$), toutes les dérivées azimutales et les composantes azimutales de la vitesse sont nulles. Les longueurs, vitesses et pressions sont respectivement adimensionnées par a , $ga^2(\rho_1 - \rho_2)/\mu_1$ et $\rho_1 ga$. Les vitesses et pressions du fluide k s'écrivent :

$$v_{r,k}(r, \theta) = -2 \cos \theta \left(\frac{A_k}{r^3} + \frac{B_k}{r} + C_k + D_k r^2 \right) \quad (3.5a)$$

$$v_{\theta,k}(r, \theta) = \sin \theta \left(\frac{-A_k}{r^3} + \frac{B_k}{r} + 2C_k + 4D_k r^2 \right) \quad (3.5b)$$

$$p_k(r, \theta) = p_{0,k} - \frac{\rho_k}{\rho_1} r \cos \theta - \frac{\mu_k}{\mu_1} \left(1 - \frac{\rho_2}{\rho_1}\right) \left(\frac{2B_k}{r^2} + 20D_k r\right) \cos \theta \quad (3.5c)$$

avec $p_{0,2} - p_{0,1} = 2\sigma/(\rho_1 g a^2)$. Les expressions du fluide environnant 1 s'écrivent

$$A_1 = \frac{\mu_2}{4(\mu_1 + \mu_2)} V, \quad B_1 = -\frac{2\mu_1 + 3\mu_2}{4(\mu_1 + \mu_2)}, \quad C_1 = \frac{V}{2}, \quad D_1 = 0$$

tandis que celles du fluide 2 constituant la goutte ou bulle sont données par

$$A_2 = 0, \quad B_2 = 0, \quad C_2 = -\frac{\mu_1}{4(\mu_1 + \mu_2)} V, \quad D_2 = \frac{\mu_1}{4(\mu_1 + \mu_2)} V$$

avec

$$V = \frac{1}{3} \left(\frac{\mu_1 + \mu_2}{\mu_1 + 3\mu_2/2} \right)$$

la vitesse de flottabilité adimensionnée.

Les calculs ont été réalisés avec des couples fluides dont les ratios de viscosité varient de 0,01 à 100, les ratios de densité de 0,001 à 1000 et des coefficients de tension de surface égaux à 0,022 et 0,075 N/m (Tab. 3.1).

Fluides	Air/eau	Air/essence	Essence/air	Eau/air
μ_2/μ_1	0,01	0,1	10	100
ρ_2/ρ_1	0,001	0,0015	680	1000
$\sigma(N/m)$	0,075	0,022	0,022	0,075

TABLE 3.1 – Caractéristiques physiques de l'écoulement d'Hadamard-Rybczynski

Les lignes de courant présentées sur la Figure 3.4 pour le couple eau/air ($\mu_2/\mu_1 = 100$) montrent deux larges tourbillons symétriques dans la goutte ainsi que les déviations du fluide environnant autour de l'obstacle. Sachant que la vitesse analytique est connue, il est aisé de comparer les vitesses obtenues numériquement aux solutions exactes sur les marqueurs de l'interface.

Le Tableau 3.2 donne les erreurs relatives du calcul des vitesses en fonction de la taille de la grille fixe Eulérienne h ($h_e = h/2$).

$$\|E\|_1 = \frac{\sum_{m \in \mathcal{M}} \left| \|\bar{V}_m\| - \|\bar{v}(\bar{x}_m)\| \right|}{\sum_{m \in \mathcal{M}} \|\bar{v}(\bar{x}_m)\|} \quad (3.6)$$

Les vitesses sont calculées, soit avec la méthode PERM adaptée pour le suivi d'interface pour des fluides homogènes, soit avec notre méthode de reconstruction des vitesses qui tient compte des discontinuités des contraintes à l'interface

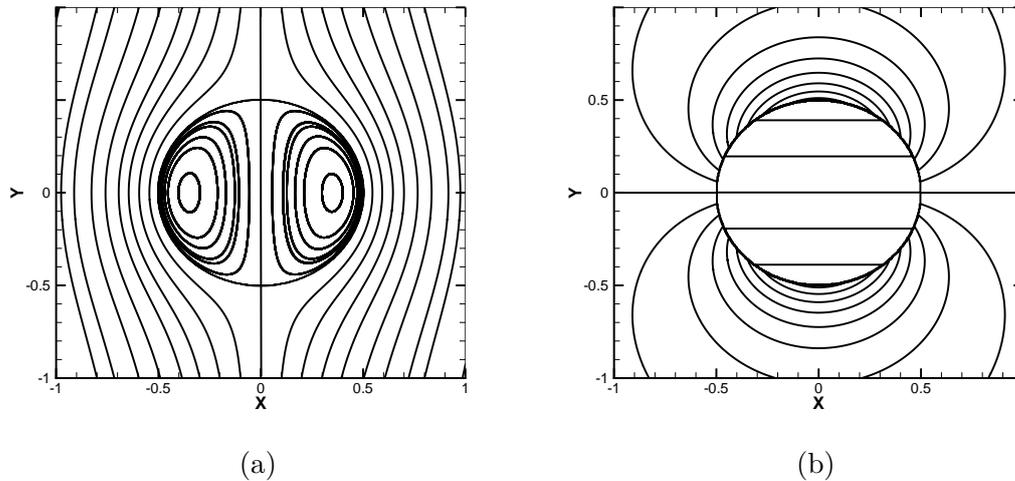


FIGURE 3.4 – Lignes de courant (a) et pressions (b) pour l’écoulement d’Hadamard-Rybczynski (plan \mathbf{x} - \mathbf{y}) - Couple Eau/Air (Tab. 3.1) tel que $\mu_2/\mu_1 = 100$

entre des fluides non miscibles. Cette dernière méthode est désormais appelée méthode “JUMP”. Les résultats montrent que les deux méthodes de reconstruction des vitesses (PERM ou JUMP) donnent des solutions qui convergent. Cependant, l’ordre de convergence calculé avec notre méthode basée sur les relations de saut est environ deux fois plus grand que celui obtenu avec la méthode PERM. Pour des rapports de viscosité inférieurs à un, les erreurs relatives sont faibles quelle que soit la méthode considérée. Hormis le maillage le plus grossier, la méthode JUMP est plus précise, jusqu’à un ordre de grandeur plus faible pour les grilles les plus raffinées. Pour des rapports de viscosité supérieurs à un, les erreurs obtenues avec l’algorithme PERM se dégradent considérablement, d’autant plus que ce rapport augmente. Ces erreurs restent élevées malgré le raffinement de la grille Eulérienne, environ 20% pour la grille la plus fine quand $\mu_2/\mu_1 = 100$. A l’opposé, les erreurs obtenues avec notre méthode s’avèrent être insensibles au rapport de viscosité μ_2/μ_1 , diminuant de $\approx 10\%$ à $\approx 0.02\%$ lorsque la taille de la grille diminue.

3.3 Conclusions

Nous avons présenté dans ce chapitre la méthode JUMP, une méthode originale de reconstruction de vitesse basée sur le saut des propriétés physiques à l’interface. L’idée du développement de cette méthode était de s’affranchir des dépendances des méthodes d’interpolation classiques (PERM, bilénaire,...) à la régularité des champs de vitesse à travers l’interface et de se baser des considérations physiques

		$\mu_2/\mu_1 = 0, 1$				$\mu_2/\mu_1 = 0, 01$			
$h = 2h_e$	PERM		JUMP		PERM		JUMP		
	$\ E\ _1$	Ordre	$\ E\ _1$	Ordre	$\ E\ _1$	Ordre	$\ E\ _1$	Ordre	
1/16	5,1E-02		1,2E-01		5,6E-02		1,2E-01		
1/32	3,1E-02	0,7	2,6E-02	2,2	3,4E-02	0,7	2,7E-02	2,2	
1/64	1,3E-02	1,2	9,7E-03	1,4	1,5E-02	1,2	1,3E-02	1,1	
1/128	7,5E-03	0,9	2,2E-03	2,1	8,2E-03	0,9	2,8E-03	2,2	
1/256	3,6E-03	1,0	6,0E-04	1,9	4,0E-03	1,0	7,2E-04	1,9	
1/512	1,9E-03	0,9	1,6E-04	1,9	2,1E-03	0,9	1,9E-04	1,9	
		$\mu_2/\mu_1 = 10$				$\mu_2/\mu_1 = 100$			
$h = 2h_e$	PERM		JUMP		PERM		JUMP		
	$\ E\ _1$	Ordre	$\ E\ _1$	Ordre	$\ E\ _1$	Ordre	$\ E\ _1$	Ordre	
1/16	5,6E-01		1,1E-01		6,0E+00		1,3E-01		
1/32	3,1E-01	0,9	4,1E-02	1,5	3,4E+00	0,8	4,5E-02	1,5	
1/64	1,4E-01	1,2	1,1E-02	1,9	1,5E+00	1,2	1,2E-02	1,9	
1/128	7,5E-02	0,9	2,3E-03	2,2	8,3E-01	0,9	2,8E-03	2,1	
1/256	3,6E-02	1,0	6,7E-04	1,8	4,0E-01	1,0	8,3E-04	1,8	
1/512	1,9E-02	0,9	1,6E-04	2,0	2,1E-01	0,9	2,0E-04	2,1	

TABLE 3.2 – Erreur relative sur les vitesses des marqueurs de l’interface (Eq. 3.6) et ordre de convergence (Eq. 2.19) en fonction de la taille de la grille eulérienne h pour la solution d’Hadamard-Rybczynski. Plusieurs rapports de viscosité (μ_2/μ_1) ont été considérés (Tab. 3.1).

de résolutions.

Le cas test d’Hadamard-Rybczynski a montré clairement que la méthode de reconstruction de la vitesse basée sur les relations de saut, JUMP, est plus adaptée au calcul de vitesse des marqueurs que la méthode PERM quand des écoulements diphasiques avec des variations de propriétés réalistes à l’interface sont considérés. L’utilisation de cette méthode de reconstruction des vitesses intégrant les relations de saut sera dorénavant privilégiée pour le transport des surfaces front-tracking lorsque des écoulements à saut de propriétés physiques à l’interface seront considérés. Les résultats présentés dans les chapitres 2 et 3 ont été soumis au journal *Communications in Computational Physics* et acceptés pour publication.

Chapitre 4

Résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles diphasiques avec le modèle à 1-fluide et la méthode FTR-JUMP pour le suivi d'interface

Sommaire

4.1	Résolution numérique des équations de Navier-Stokes	97
4.1.1	Modèle d'écoulement diphasique utilisé pour la résolution des équations de Navier-Stokes	97
4.1.2	Intégration temporelle	98
4.1.3	Maillage et volume de contrôle	101
4.1.4	Traitement des conditions aux limites	103
4.1.5	Approximation spatiale des termes de l'équation de quantité de mouvement	104
4.1.6	Résolution du système linéaire	108
4.2	Expression du terme capillaire de l'équation de quantité de mouvement	108
4.2.1	Présentation des méthodes	109
4.2.2	Courants parasites	112
4.2.3	Discrétisation du terme capillaire	113
4.3	Tests de validation d'écoulements diphasiques	115

4.3.1	Goutte statique (test de Laplace)	115
4.3.2	Bulle ascendante	118

Dans ce chapitre, nous allons décrire la résolution des équations de Navier-Stokes diphasiques incompressibles implémentées dans le code FUGU. Ce code est un solveur 2D/3D, développé au sein de l'équipe Transfert de Chaleur et Matière du laboratoire MSME et dédié à la simulation d'écoulements diphasiques de fluides non miscibles isothermes. Ces écoulements sont résolus avec le modèle à 1-fluide (Eqs 1.26a-1.26c) sur une grille eulérienne structurée. Les équations du modèle à 1-fluide sont résolues implicitement, sous forme conservative, avec l'utilisation de la méthode du lagrangien augmenté pour le traitement du couplage vitesse/pression. Les méthodes de suivi d'interface VOF et Level-Set y sont implémentées. La méthode de front-tracking a, quant à elle, été développée dans le cadre de cette thèse.

Nous allons présenter dans ce chapitre l'intégration de la méthode de front-tracking au modèle à 1-fluide préexistant dans le solveur FUGU. La méthode de front-tracking (Chap. 2) sera ainsi utilisée (plutôt que les méthodes VOF ou Level-Set) pour représenter l'interface avec les vitesses des marqueurs de la surface lagrangienne calculées par la méthode JUMP (Chap. 3), qui prend en compte le saut des propriétés physiques à l'interface. La méthode de suivi d'interface est ainsi non plus considérée de façon isolée mais couplée avec la résolution des équations de Navier-Stokes.

Nous nous intéresserons dans un premier temps à l'obtention des termes des équations de Navier-Stokes à discrétiser par la méthode des volumes finis ainsi que la grille eulérienne associée. Nous présenterons également le traitement des conditions aux limites dans notre algorithme de résolution et une attention particulière sera portée aux conditions de saut à l'interface avec le traitement du terme capillaire. Des cas tests classiques de la littérature seront enfin présentés afin de valider le modèle complet de résolution des équations de Navier-Stokes.

4.1 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes

4.1.1 Modèle d'écoulement diphasique utilisé pour la résolution des équations de Navier-Stokes

Nous nous intéressons aux écoulements diphasiques à deux fluides non miscibles où l'interface Γ entre les deux fluides est clairement identifiée. Chaque fluide possède ses propres caractéristiques, à savoir sa masse volumique et sa viscosité

(ρ_1, μ_1 pour le fluide 1 et ρ_2, μ_2 pour le fluide 2). On utilise le modèle à 1-fluide présentée au chapitre 1 pour décrire l'écoulement diphasique. Les équations de Navier-Stokes d'un écoulement incompressible diphasique s'écrivent de la façon suivante :

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{u} = 0 \quad (4.1a)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u} \otimes \bar{u}) = \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathcal{T}} + \rho \bar{g} + \bar{F}_\sigma \quad (4.1b)$$

où $\bar{\mathcal{T}} \equiv -p\bar{\mathcal{I}} + 2\mu\bar{\mathcal{D}}$ représente le tenseur des contraintes, $\bar{\mathcal{D}} = \frac{1}{2}(\bar{\nabla}\bar{u} + \bar{\nabla}\bar{u}^T)$ le tenseur des taux de déformations et \bar{F}_σ la force de tension de surface.

Grâce à la méthode de front-tracking présentée au chapitre 2, nous disposons d'un algorithme efficace de suivi d'interface. De plus, la fraction volumique C , reconstruite à partir de la surface discrète front-tracking, permet de calculer la force capillaire \bar{F}_σ ainsi que les propriétés de mélange comme la masse volumique ρ et la viscosité μ :

$$\rho = C\rho_2 + (1 - C)\rho_1 \quad (4.2)$$

$$\mu = C\mu_2 + (1 - C)\mu_1 \quad (4.3)$$

avec ρ_1, μ_1 pour le fluide 1 et ρ_2, μ_2 pour le fluide 2. D'autres choix sont possibles pour calculer les lois de mélange du modèle 1 fluide [67]. En considérant que les quantités ρ et μ sont localement constantes, les équations 4.1a-4.1b peuvent être réécrites :

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{u} = 0 \quad (4.4a)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{u} \otimes \bar{u}) \right) = \bar{\nabla} \cdot (2\mu\bar{\mathcal{D}}) + \rho \bar{g} + \bar{F}_\sigma \quad (4.4b)$$

Afin de résoudre les équations de Navier-Stokes incompressibles et isothermes (Eqs. 4.4a-4.4b), il est nécessaire de développer un outil numérique suffisamment performant pour décrire correctement les champs de vitesse \bar{u} et de pression p . Le choix des solveurs et des discrétisations est également important dans la mesure où l'interface est transportée grâce au champ de vitesse obtenu après la résolution des équations de Navier-Stokes.

4.1.2 Intégration temporelle

Le système (Eqs. 4.4a-4.4b) est d'abord discrétisé en temps avant d'être résolu spatialement. Cette intégration temporelle est réalisée avec un pas de temps

$$\Delta t = t^{n+1} - t^n.$$

L'approximation de la dérivée temporelle $\rho \frac{\partial \bar{u}}{\partial t}$ est obtenue à partir d'un développement de Taylor tronqué à l'ordre N . Plus le pas de temps est petit, pour des écoulements instationnaires, plus la précision est élevée. Nous avons utilisé pour cette approximation le schéma Euler d'ordre 1 s'écrivant :

$$\left(\rho \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} \right) = \rho^{n+1} \left(\frac{\bar{u}^{n+1} - \bar{u}^n}{\Delta t} \right) \quad (4.5)$$

Pour résoudre le système d'équations de Navier-Stokes, il est nécessaire de découpler dans l'équation de conservation de mouvement les variables de vitesse et de pression à travers la contrainte d'incompressibilité $\bar{\nabla} \cdot \bar{u} = 0$. En plus de la non linéarité de l'équation de quantité de mouvement liée au terme de transport $\bar{\nabla} \cdot (\bar{u} \otimes \bar{u})$ présent dans l'équation (4.4b), le couplage entre la vitesse et la pression au travers de la contrainte d'incompressibilité constitue une difficulté majeure dans la résolution du système (Eqs. 4.4a-4.4b). En effet, dans les écoulements incompressibles, il n'existe pas d'équation explicite donnant directement la pression. Il existe plusieurs techniques pour la résolution de ce type de problèmes. Les méthodes de projection [14], qui sont les méthodes les plus populaires pour la simulation numérique des écoulements incompressibles, ou encore l'approche du lagrangien augmenté, sont des techniques utilisées pour la gestion du découplage vitesse/pression dans le cadre de la résolution des équations de Navier-Stokes.

La méthode de projection

La méthode de projection, initialement développée par Chorin [14], découple la vitesse et la pression par une discrétisation totalement explicite des termes d'advection et de diffusion dans une étape de prédiction où une vitesse intermédiaire \bar{u}^* est déterminée. La contrainte d'incompressibilité est ensuite considérée pour déterminer la pression par la résolution d'une équation de Poisson. Le champ de vitesse à divergence nulle est finalement estimé. L'algorithme détaillant le procédé de la méthode de projection est le suivant :

1. Etape de prédiction

$$\bar{u}^* = \bar{u}^{(n)} + \Delta t \left(-\bar{\nabla} \cdot (\bar{u}^{(n)} \otimes \bar{u}^{(n)}) + \frac{1}{\rho} \bar{\nabla} \cdot (2\mu \bar{\bar{D}}^{(n)}) \right)$$

2. Calcul de la pression (Etape de projection)

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

3. Etape de correction

$$\bar{u}^{(n+1)} = \bar{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \bar{\nabla} p^{(n+1)}$$

où Δt est le pas de discrétisation temporelle et n l'indice de référence de l'itération temporelle. La méthode de projection présentée ici est d'ordre 1 en temps avec des conditions limites classiques. Il est possible d'obtenir un ordre plus élevé de la résolution de la vitesse par l'augmentation de l'ordre de discrétisation temporelle. L'évaluation de la vitesse \bar{u}^* peut également être améliorée en incorporant le calcul du terme $\bar{\nabla} p^{(n)}$ dans l'étape de prédiction. Le traitement implicite du terme visqueux ainsi qu'une légère modification des étapes de prédiction et projection peut également améliorer la précision du calcul.

La méthode du lagrangien augmenté

Contrairement à la méthode de projection, la méthode du lagrangien augmenté propose de satisfaire les deux équations du système (Eqs. 4.4a-4.4b) en même temps. Cette méthode utilise à la fois une minimisation sous contrainte et un terme de pénalisation pour accélérer la convergence. La pression p est ici un multiplicateur de Lagrange permettant d'assurer la contrainte d'incompressibilité. La méthode standard du lagrangien augmenté a été introduite par Fortin et Glowinski [25]. On rajoute aux équations de Navier-Stokes un terme de contrainte, à partir d'un champ de pression donné. L'équation de continuité modifiée permet de calculer un nouveau champ de pression. Le processus itératif est stoppé une fois le seuil de précision, basé sur le niveau de divergence, atteint. L'algorithme itératif du lagrangien augmenté est le suivant :

1. Initialisation des champs

$$\bar{u}^{*,0} = \bar{u}^{(n)} \quad \text{et} \quad p^{*,0} = p^{(n)}$$

2. Calcul du champ de vitesse sous la contrainte d'incompressibilité, c'est à dire tant que $(\bar{\nabla} \cdot \bar{u} / \|\bar{u}\|) > \epsilon$

$$\rho \left(\frac{\bar{u}^{*,m} - \bar{u}^{*,0}}{\Delta t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{u}^{*,m-1} \otimes \bar{u}^{*,m}) \right) - r \bar{\nabla} (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}^{*,m}) = -\bar{\nabla} p^{*,m-1} + \rho \bar{g} + \bar{\nabla} \cdot (2\mu \bar{\mathcal{D}}^{*,m})$$

3. Calcul du champ de pression

$$p^{*,m} = p^{*,m-1} - r \bar{\nabla} \cdot \bar{u}^{*,m}$$

Ici, r représente le paramètre du lagrangien augmenté utilisé pour imposer la contrainte d'incompressibilité, m l'indice de convergence itératif du processus de

minimisation tel que $m > 0$ et ϵ le seuil contrôlant la contrainte. Généralement, une valeur constante de r est utilisée. Des améliorations de la méthode standard du lagrangien augmenté ont été proposées par Vincent et *al.* [99]. La méthode du lagrangien augmenté peut également être couplée à une méthode de projection vectorielle [10].

La formulation lagrangien augmenté comporte quelques avantages comme la robustesse à pas de temps donné surtout lorsque les rapports de masse volumique ($\rho_2 > \rho_1$) sont grands ou encore la gestion des conditions limites par rapport à la méthode de projection.

Même si la méthode de projection est largement utilisée par la communauté, le choix de la méthode de découplage vitesse/pression développée dans FUGU s'est porté sur la méthode du lagrangien augmenté permettant de résoudre de manière couplée et itérative l'équation de conservation de la quantité de mouvement et celle de la conservation de la masse.

Sachant qu'une unique itération du lagrangien augmenté est généralement suffisante pour obtenir une bonne divergence, le schéma discret en temps des équations de conservation de la quantité de mouvement avec l'ajout du terme du lagrangien augmenté pour le découplage vitesse/pression, s'écrit :

$$\rho^{n+1} \left(\frac{\bar{u}^{n+1} - \bar{u}^n}{\Delta t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{u}^{n+1} \otimes \bar{u}^{n+1}) \right) - r \bar{\nabla} \cdot (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}^{n+1}) = -\bar{\nabla} p^n + \rho^{n+1} \bar{g} + \bar{\nabla} \cdot (2\mu^{n+1} \bar{\mathcal{D}}^{n+1}) + \bar{F}_\sigma^{n+1} \quad (4.6)$$

$$p^{n+1} = p^n - r \bar{\nabla} \cdot \bar{u}^{n+1} \quad (4.7)$$

Les termes du système (Eqs. 4.6-4.7) sont traités implicitement afin de s'affranchir de la condition de stabilité de type CFL (2.15) reliant le pas de temps au pas d'espace et permettant ainsi l'utilisation de grands pas de temps. Ceci est particulièrement intéressant lorsque l'on veut obtenir rapidement une solution pilotée par un pas de temps supérieur à la condition de stabilité. Pour des problèmes diphasiques, le choix du pas de temps peut parfois reposer sur le temps caractéristique physique du problème instationnaire étudié et non plus sur la contrainte de stabilité CFL. L'utilisation d'une méthode implicite dans ces cas s'avère là aussi intéressante. La contrainte d'utilisation de méthodes implicites est que cela nécessite la résolution d'un système linéaire pouvant être de grande taille, surtout en 3D. Il faut donc disposer d'un solveur linéaire très performant.

Le terme $\bar{\nabla} \cdot (\bar{u}^{n+1} \otimes \bar{u}^{n+1})$ est linéarisé en le réécrivant sous la forme $\bar{\nabla} \cdot (\bar{u}^n \otimes \bar{u}^{n+1})$.

4.1.3 Maillage et volume de contrôle

Pour une simplicité de mise en œuvre des schémas numériques et par soucis de rapidité des calculs, la grille eulérienne considérée est une grille cartésienne

uniforme. Les variables discrètes de vitesse et de pression sont positionnées sur une grille décalée présentée initialement par Harlow et Welch [30] dans leur méthode Marker And Cell (MAC). Les pressions sont localisées sur les nœuds de la grille alors que les composantes des vitesses sont localisées sur les faces du volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$. Ce choix permet de traiter naturellement les conditions limites en vitesse aux parois. L'emploi d'une grille eulérienne décalée oblige l'utilisation d'une numérotation i, j associée à chaque variable. La figure 4.1 illustre les volumes de

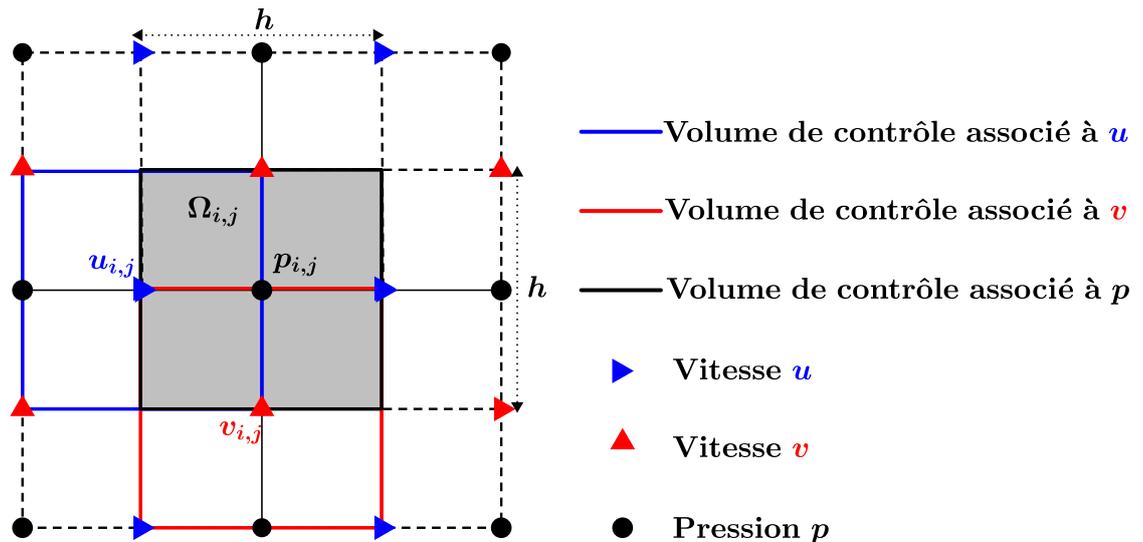


FIGURE 4.1 – Représentation de la grille décalée 2D utilisée : la pression $p_{i,j}$ est localisée sur les nœuds de la grille eulérienne, la vitesse horizontale $u_{i,j}$ est définie sur la face gauche du volume de contrôle $\Omega_{i,j}$ (en gris) associé à $p_{i,j}$ et la vitesse verticale $v_{i,j}$ est définie sur la face inférieure du volume de contrôle associé à $p_{i,j}$

contrôle décalés associés aux différentes variables pression/vitesse. Les pas d'espace dans les directions horizontales h_x et verticales h_y sont constants par direction et par composante tel que :

$$h_x = h_y = h \quad (4.8)$$

La structure de cette grille décalée permet de faciliter le calcul de la divergence de la vitesse et du gradient de pression. Elle permet également d'éviter les oscillations parasites du champ de pression que l'on constate avec l'utilisation de variables colocalisées par exemple.

4.1.4 Traitement des conditions aux limites

L'utilisation de la méthode du lagrangien augmenté, couplée à une discrétisation implicite des termes de l'équation de mouvement, nous a conduit à employer une formulation spécifique du traitement des conditions aux limites. Ce traitement est indispensable pour la gestion de l'influence de la géométrie du problème étudié sur la dynamique de l'écoulement.

Généralement, on cherche à imposer des conditions limites classiques de type Neumann ou encore des conditions d'adhérence (Dirichlet) au bord du domaine.

Pour discrétiser ces conditions limites, il faut tenir compte des spécificités de la grille décalée (Fig. 4.1). La figure 4.2 illustre la position des nœuds de vitesse

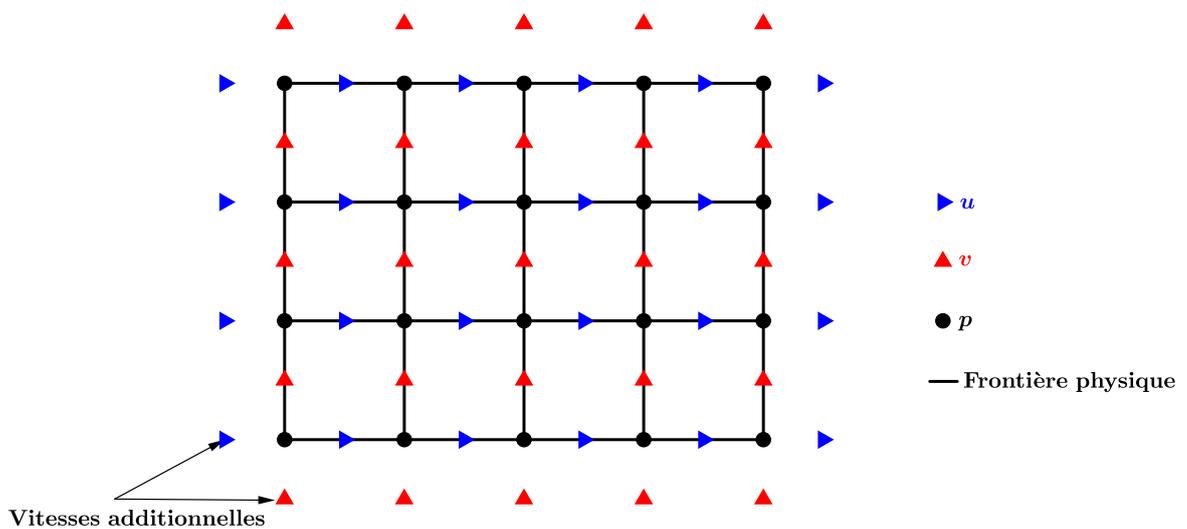


FIGURE 4.2 – Grille décalée de vitesse et pression : représentation des nœuds supplémentaires de vitesse en dehors de la frontière physique

par rapport aux frontières du domaine physique. On peut voir que les frontières du domaine coïncident avec les nœuds de pression de bord. Le décalage entre les nœuds de pression et de vitesse ne permet pas de définir naturellement une des deux composantes de la vitesse sur le bord du domaine, tout en engendrant des nœuds fictifs à l'extérieur du domaine physique. Pour contourner ce problème, nous avons utilisé la technique de pénalisation volumique qui consiste à ajouter un terme de pénalisation, $\bar{\beta}_{\bar{u}}(f(\bar{u}^{n+1}) - \bar{A})$, à l'équation de quantité de mouvement,

pour intégrer les conditions aux limites tel que :

$$\rho^{n+1} \left(\frac{\bar{u}^{n+1} - \bar{u}^n}{\Delta t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{u}^n \otimes \bar{u}^{n+1}) \right) - r \bar{\nabla} (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}^{n+1}) = - \bar{\nabla} p^n + \rho^{n+1} \bar{g} + \bar{\nabla} \cdot \left(2\mu^{n+1} \bar{\mathcal{D}}^{n+1} \right) + \bar{F}_\sigma^{n+1} + \bar{\beta}_{\bar{u}} (f(\bar{u}^{n+1}) - \bar{A}) \quad (4.9)$$

$\bar{\beta}_{\bar{u}}$ est le tenseur des coefficients de pénalisation, \bar{A} la condition à la limite à imposer et $f(\bar{u})$, une fonction dépendant de \bar{u} exprimant le type de condition limite à imposer. La méthodologie est la suivante : les équations de Navier-Stokes sont discrétisées dans tout le domaine de calcul, y compris aux limites tel que :

— si $\bar{\beta}_{\bar{u}} \rightarrow 0$, nous résolvons :

$$\rho^{n+1} \left(\frac{\bar{u}^{n+1} - \bar{u}^n}{\Delta t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{u}^n \otimes \bar{u}^{n+1}) \right) - r \bar{\nabla} (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}^{n+1}) = - \bar{\nabla} p^n + \rho^{n+1} \bar{g} + \bar{\nabla} \cdot \left(2\mu^{n+1} \bar{\mathcal{D}}^{n+1} \right) + \bar{F}_\sigma^{n+1}$$

— si $\bar{\beta}_{\bar{u}} \rightarrow \infty$:

$$f(\bar{u}^{n+1}) = \bar{A}$$

Pour exprimer une condition aux limites de Dirichlet, il suffit de poser $f(\bar{u}^{n+1}) = \bar{u}^{n+1}$ et $\bar{A} = \bar{u}_{imp}$ où \bar{u}_{imp} est la valeur de la vitesse à la paroi à imposer. Pour une condition de Neumann, le terme $f(\bar{u}^{n+1})$ vaut $\bar{\nabla} \bar{u}^{n+1} \cdot \bar{n}$ et $\bar{A} = \bar{0}$. De cette manière, une équation unique permet d'imposer des vitesses à l'intérieur ou au bord du domaine par l'ajout du terme supplémentaire de pénalisation. On peut ainsi traiter une large gamme de conditions aux limites (paroi solide, obstacle, glissement ...) en modifiant les conditions limites par cette formulation.

4.1.5 Approximation spatiale des termes de l'équation de quantité de mouvement

Au-delà de l'intégration temporelle utilisée pour résoudre les équations de Navier-Stokes, il est nécessaire de définir une discrétisation spatiale des opérateurs spatiaux. Nous avons choisi d'approximer les dérivées spatiales des équations de Navier-Stokes diphasiques incompressibles par la méthode des volumes finis [63, 33]. Cette méthode consiste à intégrer les équations sous leur forme conservative sur chaque volume de contrôle de la grille eulérienne fixe. L'intégration des équations du modèle à 1-fluide, sur un volume élémentaire $\mathcal{V}_{i,j}$ délimité par la

surface $\Sigma_{i,j}$, s'écrit :

$$\rho \int_{\mathcal{V}_{i,j}} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{u} \otimes \bar{u}) \right) d\mathcal{V} = - \int_{\mathcal{V}_{i,j}} \bar{\nabla} p d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}_{i,j}} \bar{\nabla} \cdot (2\mu \bar{\mathcal{D}}) d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}_{i,j}} \rho \bar{g} d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}_{i,j}} \bar{F}_\sigma d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}_{i,j}} r \bar{\nabla} (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}) d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}_{i,j}} \bar{\beta}_{\bar{u}} (f(\bar{u}^{n+1}) - \bar{A}) d\mathcal{V} \quad (4.10)$$

L'utilisation du théorème de la divergence permet de transformer les intégrales sur un volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$ en intégrale surfacique sur le contour $\Sigma_{i,j}$ délimitant ce volume, de normale sortante \bar{n} par rapport à ce volume. On obtient :

$$\rho \int_{\mathcal{V}_{i,j}} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} d\mathcal{V} + \rho \int_{\Sigma_{i,j}} \bar{u} (\bar{u} \cdot \bar{n}) d\Sigma = - \int_{\Sigma_{i,j}} p \bar{n} d\Sigma + \int_{\Sigma_{i,j}} 2\mu \bar{\mathcal{D}} \cdot \bar{n} d\Sigma + \int_{\mathcal{V}_{i,j}} \rho \bar{g} d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}_{i,j}} \bar{F}_\sigma d\mathcal{V} + \int_{\Sigma_{i,j}} r (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}) \bar{n} d\Sigma + \int_{\mathcal{V}_{i,j}} \bar{\beta}_{\bar{u}} (f(\bar{u}^{n+1}) - \bar{A}) d\mathcal{V} \quad (4.11)$$

L'intégration de ces équations sur l'ensemble des volumes de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$ composant le domaine Ω permet d'obtenir une description globale de l'écoulement diphasique.

Terme convectif

On rappelle le terme convectif de l'équation (4.11), discrétisé au premier ordre en temps, intégré sur le volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$ et délimité par la surface $\Sigma_{i,j}$:

$$\rho \int_{\Sigma_{i,j}} \bar{u} (\bar{u} \cdot \bar{n}) d\Sigma \approx \rho^{n+1} \int_{\Sigma_{i,j}} \bar{u}^{n+1} (\bar{u}^n \cdot \bar{n}) d\Sigma$$

La discrétisation sur le maillage décalé 2D du terme convectif est réalisée avec un schéma centré de manière semi-implicite. Elle s'écrit pour la composante u de vitesse :

$$\rho^{n+1} \int_{\Sigma_{i,j}} \bar{u}^{n+1} (\bar{u}^n \cdot \bar{n}) d\Sigma = \rho_{i,j}^{n+1} \left(\frac{u_{i,j}^n + u_{i+1,j}^n}{2} \frac{u_{i,j}^{n+1} + u_{i+1,j}^{n+1}}{2} - \frac{u_{i-1,j}^n + u_{i,j}^n}{2} \frac{u_{i-1,j}^{n+1} + u_{i,j}^{n+1}}{2} \right) h + \rho_{i,j}^{n+1} \left(\frac{v_{i,j}^n + v_{i,j+1}^n}{2} \frac{u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j+1}^{n+1}}{2} - \frac{v_{i,j-1}^n + v_{i,j}^n}{2} \frac{u_{i,j-1}^{n+1} + u_{i,j}^{n+1}}{2} \right) h \quad (4.12)$$

La figure 4.3 présente les différents nœuds de vitesse, sur un volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$ selon la composante u , utilisés pour estimer les flux convectifs sur les faces ouest, sud, est et nord de $\mathcal{V}_{i,j}$.

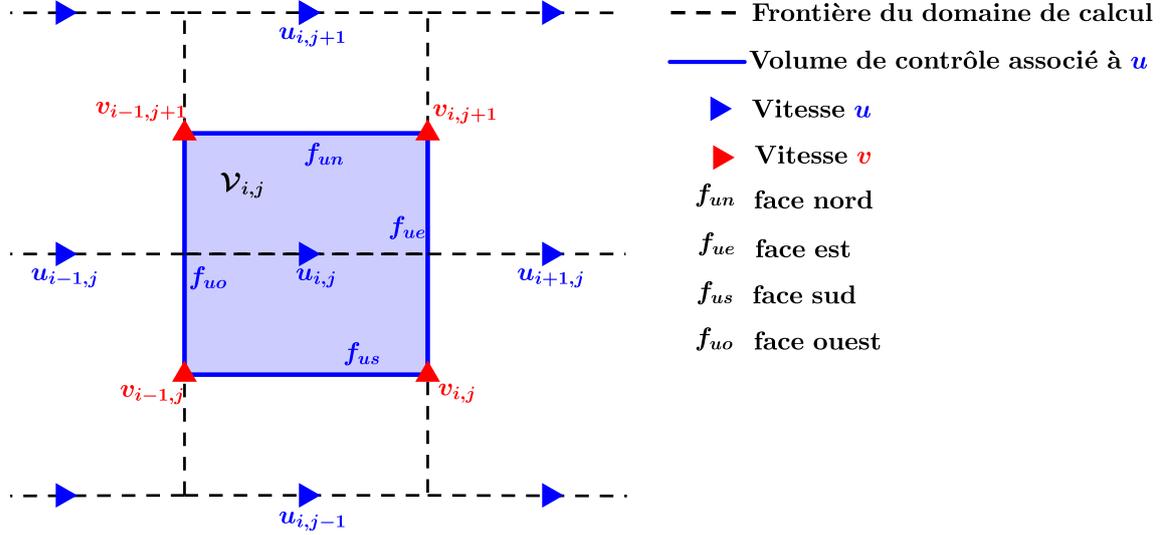


FIGURE 4.3 – Disposition des nœuds de vitesse sur le volume de contrôle selon la composante u : f_{uo} , f_{us} , f_{ue} et f_{un} sont les faces ouest, sud, est et nord du volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$ sur lesquelles sont estimés les flux de convection.

Terme visqueux

On rappelle le terme visqueux de l'équation (4.11)

$$\int_{\Sigma_{i,j}} 2\mu \bar{\bar{D}} \cdot \bar{n} d\Sigma \approx \int_{\Sigma_{i,j}} 2\mu^{n+1} \bar{\bar{D}}^{n+1} \cdot \bar{n} d\Sigma$$

avec :

$$\bar{\bar{D}}^{n+1} = \mu^{n+1} (\bar{\nabla} \bar{u}^{n+1} + \bar{\nabla} \bar{u}^{n+1t})$$

La discrétisation sur le maillage décalé 2D du terme visqueux est réalisée implicitement selon un schéma centré. Elle s'écrit pour la composante u de vitesse :

$$\int_{\Sigma_{i,j}} 2\mu^{n+1} \bar{\bar{D}}^{n+1} \cdot \bar{n} d\Sigma = 2 \left(\mu_{i,j}^{n+1} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}}{h} - \mu_{i,j}^{n+1} \frac{u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{h} \right) h + \mu_{i,j}^{n+1} \left[\left(\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j-1}^{n+1}}{h} + \frac{v_{i,j}^{n+1} - v_{i-1,j}^{n+1}}{h} \right) - \left(\frac{u_{i,j+1}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{h} + \frac{v_{i,j+1}^{n+1} - v_{i-1,j+1}^{n+1}}{h} \right) \right] h \quad (4.13)$$

Gradient de pression

On rappelle le terme de gradient de pression de l'équation (4.11)

$$\int_{\Sigma_{i,j}} p \bar{n} d\Sigma \approx \int_{\Sigma_{i,j}} p^n \bar{n} d\Sigma$$

Pour la composante horizontale de vitesse, ce terme est discrétisé comme suit :

$$\int_{\Sigma_{i,j}} p^n \bar{n} d\Sigma = (p_{i,j}^n - p_{i-1,j}^n)h \quad (4.14)$$

Les nœuds de pression, selon la composante u , utilisés pour calculer le gradient

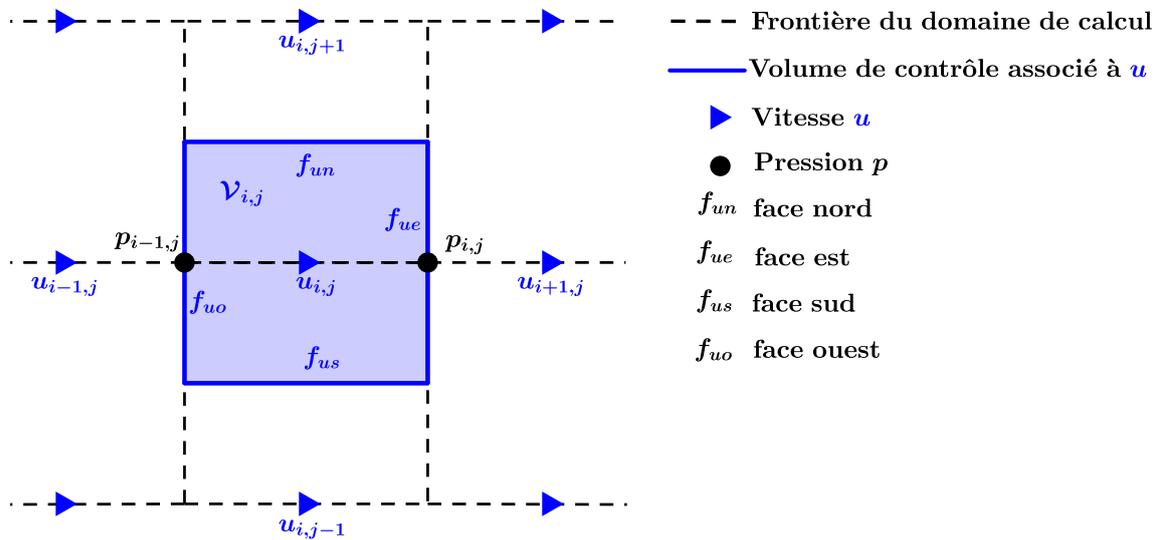


FIGURE 4.4 – Disposition des nœuds de pression sur le volume de contrôle selon la composante u : f_{uo} , f_{us} , f_{ue} et f_{un} sont les faces ouest, sud, est et nord du volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$ sur lesquelles est estimé le gradient de pression.

de pression sur un volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$, sont présentés sur la figure 4.4.

Terme du lagrangien augmenté

On rappelle le terme lié au lagrangien augmenté pour le découplage vitesse/-pression dans l'équation de quantité de mouvement :

$$\int_{\Sigma_{i,j}} r(\bar{\nabla} \cdot \bar{u}) \bar{n} d\Sigma \approx \int_{\Sigma_{i,j}} r(\bar{\nabla} \cdot \bar{u}^{n+1}) \bar{n} d\Sigma$$

Pour la composante horizontale de vitesse, ce terme est discrétisé comme suit :

$$\int_{\Sigma_{i,j}} r(\bar{\nabla} \cdot \bar{u}^{n+1}) \bar{n} d\Sigma = h \left(r_{i-1,j} \left[\frac{u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{h} + \frac{v_{i,j+1}^{n+1} - v_{i,j}^{n+1}}{h} \right] - r_{i,j} \left[\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}}{h} + \frac{v_{i-1,j+1}^{n+1} - v_{i-1,j}^{n+1}}{h} \right] \right) \quad (4.15)$$

Il faut se référer à la figure 4.3 pour la disposition des nœuds de vitesse utilisés pour calculer le terme du lagrangien augmenté.

4.1.6 Résolution du système linéaire

L'intégration temporelle de l'équation (4.1.4) s'effectue grâce à la résolution du système linéaire :

$$A\bar{u}^{n+1} = b \quad (4.16)$$

avec $\bar{u} = (u_{1,0}, u_{2,0} \dots u_{N_x, N_y}, v_{1,0}, v_{2,0} \dots v_{N_x, N_y})$, le vecteur solution du problème obtenu sur une grille eulérienne de taille $N_x \times N_y$, A la matrice des coefficients de discrétisation en temps et en espace et b le second membre contenant les termes explicites.

Pour calculer \bar{u}^{n+1} , il existe un nombre important de méthodes de résolution de systèmes linéaires comme les méthodes directes, itératives ou multigrilles. Nous avons utilisé le solveur direct MUMPS (MUltifrontal Massively Parallel sparse direct Solver) qui permet de résoudre de larges systèmes avec des matrices symétriques ou non et pouvant être creuses. La documentation renseignant sur les caractéristiques de ce solveur est accessible en ligne [21].

4.2 Expression du terme capillaire de l'équation de quantité de mouvement

Nous avons vu au chapitre 1 qu'il était nécessaire, pour des écoulements diphasiques, de décrire le saut des propriétés physiques à l'interface (Eqs. 1.9-1.10). Le respect de ces conditions, nécessite dans la formulation des équations de Navier-Stokes, l'intégration de termes sources pour raccorder les solutions des équations aux dérivées partielles à l'interface entre les deux fluides. Les deux techniques les plus souvent utilisées pour le traitement des discontinuités dans le cadre de la modélisation des écoulements diphasiques sont la méthode CSF (Continuum Surface Force) et la méthode Ghost-Fluid.

4.2.1 Présentation des méthodes

Méthode CSF (Continuum Surface Force)

Cette méthode a été développée par Brackbill *et al.* [7], même si Peskin [64] a initialement proposé l'idée d'une formulation volumique régularisée pour la simulation des écoulements de sang dans le cœur avec la méthode IBM (Immersed Boundary Method). La méthode CSF s'appuie sur la régularisation d'une force surfacique par une force volumique proche de la formulation initiale. L'utilisation de cette méthode est adaptée aux grilles eulériennes fixes car, en pratique, les points de discrétisation ne coïncidant pas systématiquement avec l'interface, il est nécessaire de régulariser la force surfacique sur une grille eulérienne. Nous présentons directement la méthode CSF appliquée aux équations de Navier-Stokes dans le cadre de la formulation à 1-fluide avec le terme de tension superficielle traité comme un terme source.

On rappelle l'équation de conservation de mouvement (4.11) intégrée sur un volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$, délimité par le contour $\Sigma_{i,j}$:

$$\int_{\mathcal{V}_{i,j}} \frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} d\mathcal{V} + \int_{\Sigma_{i,j}} \rho \bar{u} (\bar{u} \cdot \bar{n}) d\Sigma = - \int_{\Sigma_{i,j}} p \bar{n} d\Sigma + \int_{\Sigma_{i,j}} 2\mu \bar{\bar{D}} \cdot \bar{n} d\Sigma + \int_{\mathcal{V}_{i,j}} \rho \bar{g} d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}_{i,j}} \bar{\bar{F}}_{\sigma} d\mathcal{V} + \int_{\Sigma_{i,j}} r (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}) \bar{n} d\Sigma$$

où $\bar{\bar{F}}_{\sigma} = \sigma \kappa \bar{n} \delta_s$ est la force volumique de tension de surface avec $\delta_s = \delta(\bar{x} - \bar{x}_{\Gamma})$, la fonction de Dirac indicatrice de l'interface avec \bar{x}_{Γ} la position de l'interface. Pour obtenir ce terme, nous avons utilisé la méthode CSF qui permet une régularisation volumique du terme de tension de surface tel que :

$$\int_{\mathcal{V}_{i,j}} \sigma \kappa \bar{n} \delta_s d\mathcal{V} = \int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} d\Gamma \quad (4.17)$$

La force capillaire apparaît comme un terme volumique dans les équations de Navier-Stokes, plutôt qu'une force surfacique (représentation naturelle), agissant comme un terme source.

L'inconvénient de cette méthode réside dans le fait qu'elle est généralement discrétisée de manière à lisser les discontinuités sur quelques cellules autour de l'interface avec la régularisation volumique. Il en découle une perte de précision numérique de la solution physique liée au choix de ce type de modélisation.

Méthode Ghost-fluid

La méthode Ghost-Fluid [23] permet de traiter directement les conditions de saut à l'interface sans régularisation volumique. Les conditions de saut sont traitées tout en respectant la physique proche de l'interface. Dans la mesure où cette

méthode respecte le caractère discontinu de certaines variables physiques au niveau de l'interface, elle est préférentiellement utilisée dans le traitement des interfaces de type liquide-gaz dont l'épaisseur est de l'ordre du nanomètre contrairement à la méthode CSF qui introduit une épaisseur fictive de l'interface. Nous n'utiliserons pas cette méthode dans ce mémoire. Elle ne sera donc pas détaillée ici. Une description mathématique complète de la méthode Ghost-Fluid est proposée dans la thèse de Frédéric Couderc [16] pour des problèmes 1D et 2D.

Méthode de Frenet

Il est possible de calculer directement la tension de surface lorsque l'interface est représentée par une chaîne de marqueurs [70]. Soit un volume de contrôle \mathcal{V} intercepté par une interface Γ en deux points A et B , comme illustré sur la figure 4.5. La force de tension de surface peut se réécrire :

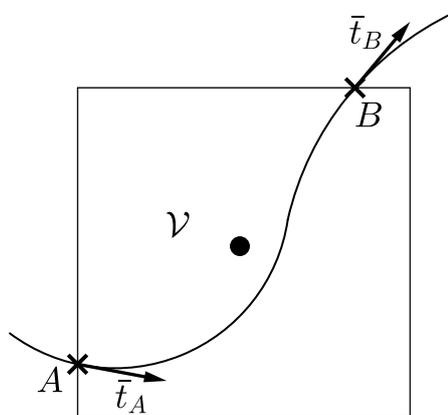


FIGURE 4.5 – Principe de la méthode de Frenet pour le calcul de la tension de surface à partir des tangentes \bar{t}_A et \bar{t}_B .

$$\int_{\mathcal{V}} \sigma \kappa \bar{n} \delta_s d\mathcal{V} = \int_A^B \sigma \kappa \bar{n} d\Gamma$$

L'utilisation de la formule de Frenet pour des courbes paramétriques permet d'écrire :

$$\int_A^B \sigma \kappa \bar{n} d\Gamma = \sigma \int_A^B d\bar{t} = \sigma (\bar{t}_B - \bar{t}_A) \quad (4.18)$$

avec \bar{t} la tangente unitaire à l'interface. Cette technique de calcul est exclusive aux méthodes lagrangiennes comme la méthode de front-tracking car elle nécessite la connaissance explicite de la forme de l'interface.

Méthode directe (DCC)

Une autre manière de calculer le terme de tension de surface dans les équations de Navier-Stokes diphasiques consiste à intégrer directement sa formulation surfacique. Si un volume de contrôle \mathcal{V} est intercepté par une interface Γ (Fig. 4.5), le terme capillaire s'écrit naturellement :

$$\int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} d\Gamma$$

La représentation discrète de l'interface par la méthode de front-tracking donne accès, à chaque instant, aux propriétés géométriques de l'interface comme les courbures et les normales issues des marqueurs de la surface front-tracking et permet de calculer ce terme.

Dans le cadre de la loi de Laplace, la relation de saut projetée dans la direction \bar{e}_x et intégrée sur Γ doit être respectée tel que :

$$\int_{\Gamma} (p^- - p^+) \bar{n} \cdot \bar{e}_x = \int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} \cdot \bar{e}_x$$

avec $(p^- - p^+)$ le saut de pression entre l'intérieur et l'extérieur de la bulle/goutte. Le saut de pression s'écrit ainsi :

$$(p^- - p^+) = \frac{\int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} \cdot \bar{e}_x}{\int_{\Gamma} \bar{n} \cdot \bar{e}_x}$$

Si on adapte cette formulation au gradient de pression discrétisé sur la grille eulérienne fixe, on peut écrire :

$$(p_1 - p_2)h = \frac{\int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} \cdot \bar{e}_x}{\int_{\Gamma} \bar{n} \cdot \bar{e}_x} h \quad (4.19)$$

On obtient ainsi une force moyenne de tension de surface qui permet d'équilibrer parfaitement le gradient de pression tel que :

$$\bar{F}_{\sigma_x} = \frac{\int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} \cdot \bar{e}_x}{\int_{\Gamma} \bar{n} \cdot \bar{e}_x} h \quad (4.20)$$

avec \bar{F}_{σ_x} la contribution capillaire moyenne dans la direction horizontale. La contribution verticale s'écrit de la même manière :

$$\bar{F}_{\sigma_y} = \frac{\int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} \cdot \bar{e}_y}{\int_{\Gamma} \bar{n} \cdot \bar{e}_y} h \quad (4.21)$$

Dans ce mémoire, cette méthode de calcul de la contribution capillaire équilibrant le gradient de pression sera appelée méthode DCC (Direct Capillary Contribution).

4.2.2 Courants parasites

L'utilisation de la méthode CSF, pour l'expression du terme capillaire, comme les méthodes Ghost-Fluid ou Frenet mais avec des intensités en général plus faibles, génère des vitesses parasites proche de l'interface, quelle que soit la méthode de suivi d'interface utilisée. Pour une goutte statique à l'équilibre dans un domaine fermé, ces courants parasites résultent du déséquilibre numérique entre la force ca-

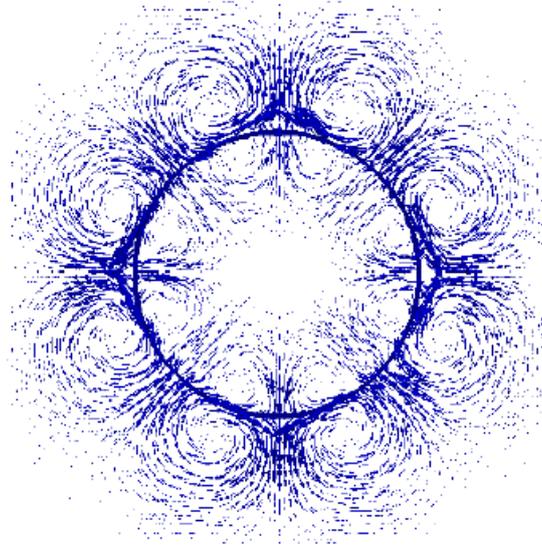


FIGURE 4.6 – Courants parasites au voisinage de l'interface [102].

pillaire et le gradient de pression dans les équations de Navier-Stokes du modèle à 1-fluide. La figure 4.6 illustre la présence des courants au voisinage d'une interface dans le cas d'une goutte/bulle statique dans un fluide environnant. Par ailleurs, l'algorithme de suivi d'interface a tendance à amplifier ce phénomène au cours du temps.

Plusieurs travaux ont été réalisés pour étudier ces courants parasites avec différentes méthodes de suivi d'interface. Des auteurs comme Popinet *et al* [71] ont réduit les courants parasites proche du zéro machine en améliorant le calcul de la courbure avec une méthode VOF-PLIC combinée à la technique de fonction de hauteur.

Nous pouvons également citer les travaux d'Abadie *et al* [1] qui s'est intéressé à la discrétisation de la courbure pour l'obtention de la force capillaire dans le cadre des méthodes de suivi d'interface VOF et Level-Set. Les courants parasites pouvaient être réduits jusqu'à $Ca \approx 1.10^{-13}$ en combinant la méthode VOF-PLIC avec la technique des fonctions de hauteur pour le cas de la bulle statique. La méthode Level-Set/SSF (Sharp Surface tension Force), sans l'activation de l'algorithme de

redistanciation, permet de retomber sur des vitesses parasites de l'ordre de l'erreur machine $Ca \approx 1.10^{-16}$. Il a clairement été montré que l'utilisation de la méthode CSF pour l'obtention du terme capillaire ne permet pas de réduire les courants parasites sous $Ca \approx 1.10^{-7}$ quelle que soit la méthode de suivi d'interface utilisée, VOF ou Level-Set.

Dans le cadre des méthodes de front-tracking, [93] a montré que le calcul plus précis des propriétés géométriques comme la courbure permet de réduire considérablement l'ordre de grandeur des courants parasites. Shin *et al* ont également proposé une formulation hybride de la tension de surface qui permet de réduire les vitesses parasites à l'erreur machine [84]. Plus récemment Febres *et al* [22] ont présenté une méthode de front-tracking avec une distribution non uniforme des marqueurs au niveau de l'interface permettant d'obtenir des vitesses de l'ordre du zéro machine pour le cas de la bulle statique.

Dans toutes ces études, les nombres de Laplace étudiés pour lesquels la simulation de la goutte statique était stable étaient limités à 12000. Pour des nombres de Laplace plus élevés, les solutions numériques donnent de forts courants parasites, voire ne convergent pas. De plus, même si les études réalisées ne présentaient pas de courants parasites, l'erreur sur le saut de pression restait relativement grande $\approx 2\%$ pour ces nombres de Laplace. Nous allons présenter les discrétisations utilisées pour le terme capillaire dans l'objectif de réduire les courants parasites.

4.2.3 Discrétisation du terme capillaire

Nous détaillons ici la discrétisation du terme de tension de surface \bar{F}_σ . Il est exprimé de façon explicite dans le système linéaire (4.16) et apparaît donc dans le second membre de ce système.

Avec la méthode CSF

On rappelle la définition de la force volumique de tension de surface donnée par la méthode CSF :

$$\bar{F}_\sigma = \sigma \kappa \bar{n} \delta_s \quad (4.22)$$

Avec \bar{n} , le vecteur normal à l'interface, κ la courbure associée à l'interface et δ la fonction de Dirac centrée sur l'interface. La courbure, la normale et la fonction de Dirac peuvent s'écrire en fonction de la fonction couleur C telle que :

$$\kappa = \bar{\nabla} \cdot \bar{n} \quad (4.23)$$

avec :

$$\bar{n} = \frac{\bar{\nabla} C^{n+1}}{\|\bar{\nabla} C^{n+1}\|}, \quad \bar{n} \delta_s = \bar{\nabla} C^{n+1} \quad (4.24)$$

Ici C^{n+1} est la fraction volumique construite à partir de la surface front-tracking discrète (voir chapitre 2). Le calcul de cette fonction couleur ne varie que d'une cellule eulérienne autour de l'interface ce qui permet d'avoir $\bar{\nabla}C$ non nul uniquement lorsque les cellules adjacentes sont monophasiques. La relation (4.22) est donc une bonne approximation de la tension de surface en raison du caractère local de $\bar{\nabla}C$.

Avec la méthode directe

On cherche à calculer directement la force de tension exprimée par la relation (4.20), la contribution de tension de surface associée à $\mathcal{V}_{i,j}$ équilibrant le gradient de pression. On peut faire l'approximation :

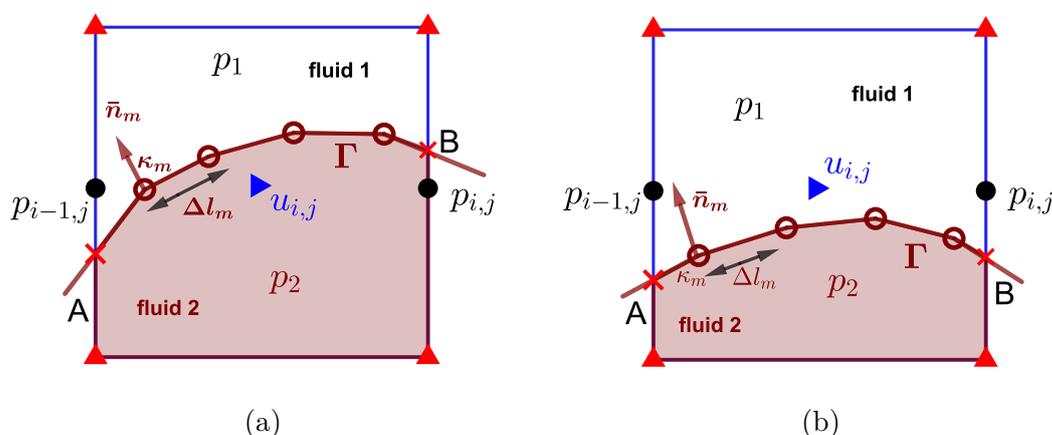


FIGURE 4.7 – Calcul de la contribution moyenne capillaire via la méthode DCC en considérant la composante u de vitesse : (a) $p_{i,j} - p_{i-1,j} \neq 0$, la contribution capillaire est calculée de manière à équilibrer ce terme (b) $p_{i,j} - p_{i-1,j} = 0$, la contribution capillaire n'est pas prise en compte.

$$\int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} d\Gamma \approx \sigma \sum_m \kappa_m \bar{n}_m \Delta l_m$$

où κ_m , \bar{n}_m et Δl_m sont respectivement les courbure, normale et tailles des éléments composant la portion d'interface Γ intersectant le volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$. Ainsi, la composante horizontale de tension de surface, associée à la cellule (i, j) est donnée par :

$$F_{\sigma_x i, j} = \frac{\sigma \sum_m \kappa_m n_{xm} \Delta l_m}{\sum_m n_{xm} \Delta l_m} \quad (4.25)$$

où n_{xm} est la composante horizontale de la normale \bar{n}_m . Une autre façon plus précise de procéder est d'utiliser la méthode des trapèzes pour calculer la force capillaire moyenne \bar{F}_σ . Cette contribution n'est prise en compte que lorsque le gradient de pression est non nul sur une cellule eulérienne considérée. Les figures 4.7a et 4.7a illustrent le calcul de cette contribution lorsqu'elle est calculée de manière à équilibrer le terme de pression et lorsqu'elle n'est pas prise en compte dans les calculs pour une cellule (i, j) associé à la composante u de vitesse.

4.3 Tests de validation d'écoulements diphasiques

Dans cette partie, nous allons nous attacher à la validation du modèle 1-fluide présenté dans ce chapitre et plus particulièrement les méthodologies numériques développées, à travers des cas test diphasiques. Nous allons ainsi évaluer la modélisation du terme capillaire avec le calcul direct de la force de tension de surface utilisant les propriétés géométriques (courbures, normales) issues de la surface front-tracking. L'apport de la méthode JUMP sur le mouvement des écoulements diphasiques avec un saut des propriétés physiques à l'interface entre deux fluides sera également étudié.

4.3.1 Goutte statique (test de Laplace)

Une goutte de rayon R est placée au centre d'un domaine fermé. Initialement, le champ de vitesse autour de la goutte est nul et on considère les effets dus à la force de gravité comme étant négligeables. La solution théorique de ce problème obéit à la loi de Laplace (1.8) exprimant le saut de pression de part et d'autre de l'interface comme étant proportionnel à la courbure de celle-ci. Cette solution est

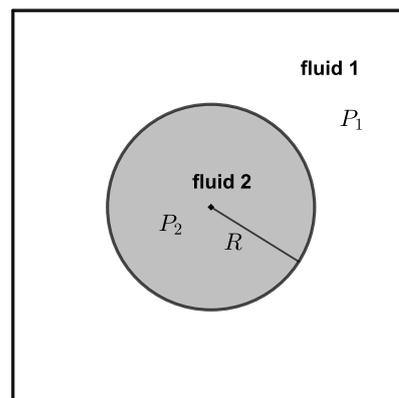


FIGURE 4.8 – Cas de la goutte statique

stationnaire et aucun champ de vitesse ne doit apparaître pendant la simulation de cet écoulement. Cependant, les erreurs numériques dues à la discrétisation spatiale des équations, de l'interface et de la mauvaise approximation de la force de tension de surface, peuvent créer des vitesses numériques, généralement autour de l'interface. Ces vitesses, non physiques, sont appelées courants parasites.

Ce cas test est particulièrement intéressant pour la validation de l'implémentation du terme de tension de surface car les effets capillaires y sont prépondérants.

On considère ainsi une interface circulaire de rayon $R = 0,25\text{ m}$ centrée dans un domaine carré de dimension $(1\text{ m}; 1\text{ m})$. Les nombres caractéristiques sont le nombre capillaire qui correspond à la vitesse maximale mesurée, adimensionnée par σ/μ

$$Ca = \frac{\|\bar{u}\|_{\infty} \mu_2}{\sigma} \quad (4.26)$$

pour mesurer l'intensité de la vitesse parasite et le nombre de Laplace

$$La = \frac{\rho_2 D \sigma}{\mu_2^2} \quad (4.27)$$

Les paramètres ρ_2 et μ_2 correspondent aux masse volumique et viscosité respectives de la goutte/bulle. Nous suivons la même méthodologie que celle présentée dans [71, 22]. Le nombre Capillaire est étudié en fonction du nombre de Laplace La pour lequel ρ et μ restent égaux à 1 ($D = 0,5\text{ m}$). Le nombre de Laplace est donc piloté par la tension de surface et variera de 12 à une valeur de 120000 qui est une situation difficile à simuler.

Pour ce cas, nous avons comparé les solutions obtenues avec différentes méthodes de suivi d'interface et méthodes de calcul de la tension de surface dans le cadre du modèle à 1-fluide. Les méthodes de suivi d'interface FTR-PERM-VBC et FTR-JUMP-VBC ont été étudiées et nous avons également testé la modélisation du terme capillaire avec la méthode CSF d'une part et le calcul direct (DCC) d'autre part. Ainsi, lorsque la méthode FTR-PERM-VBC (respectivement FTR-JUMP-VBC) est utilisée pour le mouvement de l'interface et la méthode CSF pour la modélisation du terme capillaire, nous employons l'acronyme FTR-PERM-VBC/CSF (respectivement FTR-JUMP-VBC/CSF). De même, lorsque le calcul direct (DCC) est utilisé pour la tension de surface, nous parlons des méthodes FTR-PERM-VBC/DCC et FTR-JUMP-VBC/DCC.

L'évolution du nombre capillaire pour les méthodes FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour différents nombre de Laplace (12, 120, 1200, 12000, 120000) et $h = 1/50$ est illustrée sur les figures 4.9a et 4.9b. Pour les deux méthodes, le nombre capillaire se stabilise très rapidement autour de $Ca = 1.10^{-2}$. Les approches FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF ne permettent donc pas de réduire les courants parasites pour le cas de la goutte statique.

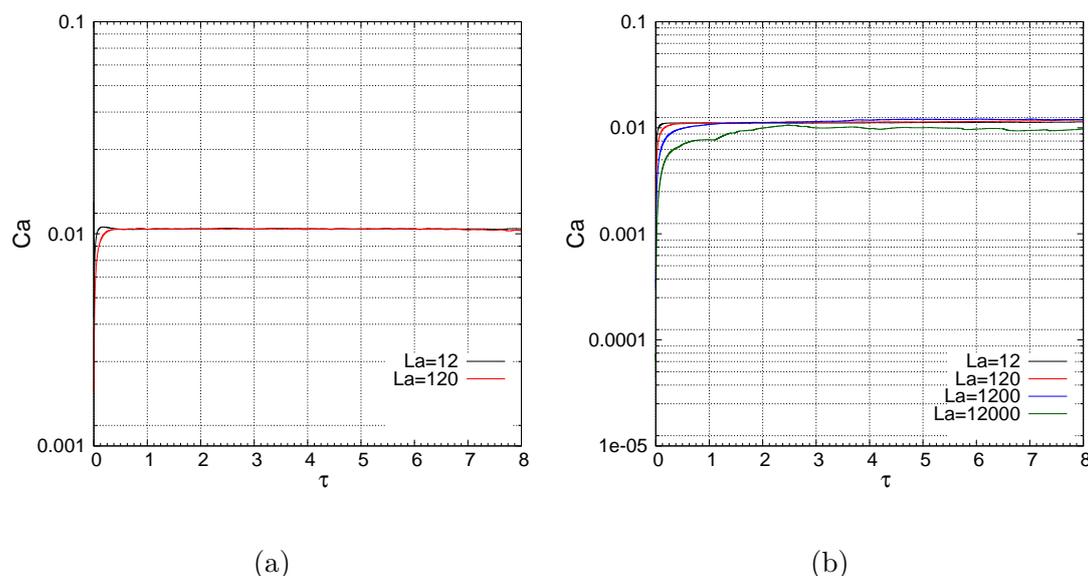


FIGURE 4.9 – Evolution du nombre capillaire en fonction du temps adimensionné τ pour différents nombre de Laplace et $h = 1/50$: (a) méthode FTR-PERM-VBC/CSF. (b) méthode FTR-JUMP-VBC/CSF.

La figure 4.10a présente l'évolution du nombre capillaire en fonction du temps adimensionné par le temps capillaire $\sqrt{\rho D^3/\sigma}$ pour différents nombres de Laplace (12, 120, 1200, 12000, 120000) et $h = 1/50$. La vitesse augmente rapidement jusqu'à $\tau = 1$ pour atteindre un palier aux alentours de $Ca = 4.10^{-15}$. Plus le nombre de Laplace augmente, plus la convergence est atteinte pour des temps longs, supérieurs à $\tau = 8$ lorsque le nombre de Laplace vaut 120000 par exemple. Quels que soient les nombres de Laplace étudiées, la valeur du nombre capillaire est toujours proche du zéro machine comme Popinet avec une méthode géométrique VOF/CSF [71], Febres avec une méthode front-tracking/Frenet [22] ou encore Abadie avec la méthode LS-SSF (Level-set sharp surface force) [1]. La méthode de Febres présente tout de même une stabilisation plus rapide du nombre capillaire.

Pour quantifier les potentielles erreurs commises sur la pression, nous avons calculé l'erreur relative du saut de pression par rapport à σ/R . Nous avons ainsi défini :

$$\|E_{\Delta P_{max}}\| = \frac{|\Delta P_{max} - \sigma/R|}{\sigma/R} \quad (4.28)$$

où ΔP_{max} représente la différence maximale entre les pressions à l'extérieur et l'intérieur de la bulle. La figure 4.10b présente la variation de l'erreur $\|E_{\Delta P_{max}}\|$ en fonction du nombre de Laplace. Nous pouvons constater que l'erreur sur la pression est de l'ordre de l'erreur machine, même pour de très grandes valeurs du

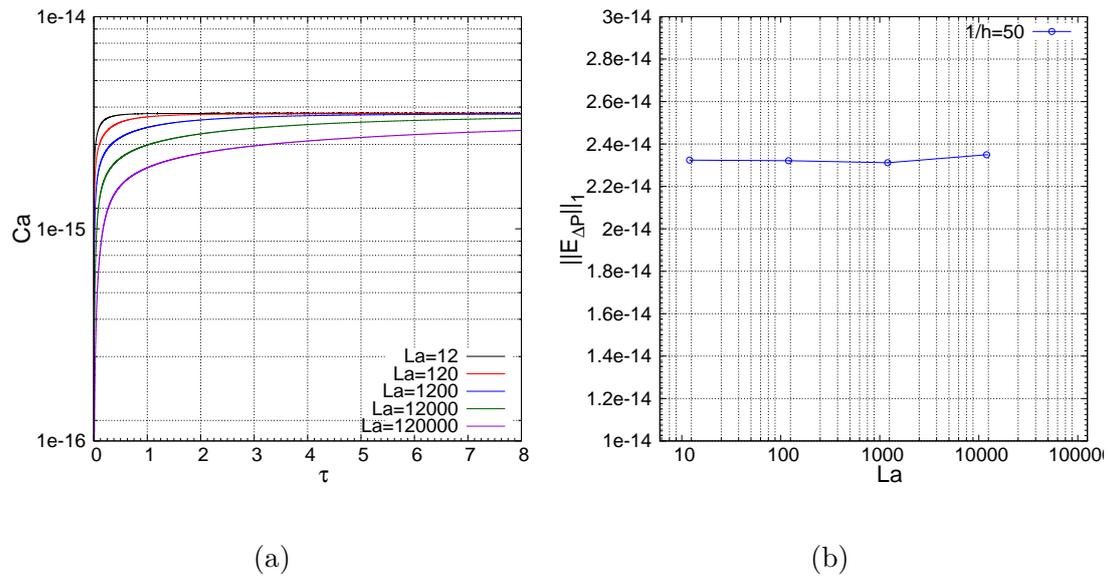


FIGURE 4.10 – (a) Évolution du nombre capillaire en fonction du temps adimensionné τ pour différents nombre de Laplace et $h = 1/50$, méthode FTR-JUMP-VBC/DCC. (b) Erreur sur le saut de pression dans la bulle $\|E_{\Delta P_{max}}\|$ en fonction du nombre de Laplace.

nombre de Laplace.

Par ailleurs, nous pouvons voir sur la figure 4.11 que le profil du champ de pression de la bulle statique est parfaitement discontinu à la traversée de l'interface sans perturbation remarquable. La figure 4.12b présente l'erreur sur la pression en fonction du maillage représenté par le rapport R/h pour un nombre de Laplace valant $La = 12000$. Plus le rapport R/h est grand, plus l'erreur sur le saut de pression augmente. Cette erreur tend à se stabiliser pour des rapports $R/h > 62.5$. La diminution du pas de maillage entraîne une augmentation du nombre de mailles et d'éléments de la front-tracking et donc une augmentation du nombre d'opérations et donc un cumul des erreurs numériques plus important. Cependant, les erreurs restent de l'ordre de la précision machine, quel que soit le maillage étudié. Les remarques sont les mêmes pour l'analyse de l'évolution du nombre capillaire en fonction du rapport R/h (figure 4.12a).

4.3.2 Bulle ascendante

Nous considérons, dans cette partie, un exercice de comparaisons (benchmark) composé de deux configurations de bulles ascendantes 2D dans une colonne de

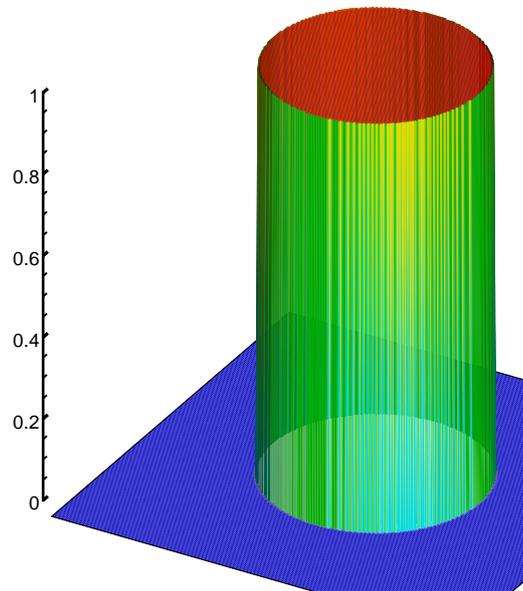


FIGURE 4.11 – Profil du champ de pression de la bulle statique normalisé par σ/R pour $R/h = 62,5$ et $La = 12000$.

liquide [35]. Les cas étudiés permettent d'évaluer la robustesse de l'algorithme complet de résolution d'écoulements diphasiques lorsque l'interface est en mouvement et subit des déformations relativement importantes. Dans ce benchmark, les auteurs comparent les solutions des deux configurations, obtenues grâce aux codes de calcul de différentes équipes. Trois groupes ont pris part à ces deux cas test, le groupe 1 (TU Dortmund, Inst. of Applied Math) avec le code TP2D élément-finis/Level-set, le groupe 2 (EPFL Lausanne, Inst. of Analysis and Sci. Comp.) avec le code FreeLIFE élément-finis/Level-set et le groupe 3 (Uni. Magdeburg, Inst. of Analysis and Num. Math.) avec le code MoonMD éléments-finis/ALE.

Une analyse quantitative des paramètres caractéristiques de la bulle ascendante, comme l'évolution de la position du centre de masse ou de la vitesse d'ascension de la bulle, a permis d'établir une solution de référence pour les paramètres choisis. Nous allons ici confronter les résultats de nos simulations aux solutions de référence obtenues par les auteurs de [35].

Une bulle initialement circulaire de rayon $R = 0,25\text{ m}$ est centrée en $(0,5\text{ m}; 0,5\text{ m})$ dans un domaine rectangulaire de dimension $(1\text{ m}; 2\text{ m})$. La densité de la bulle est

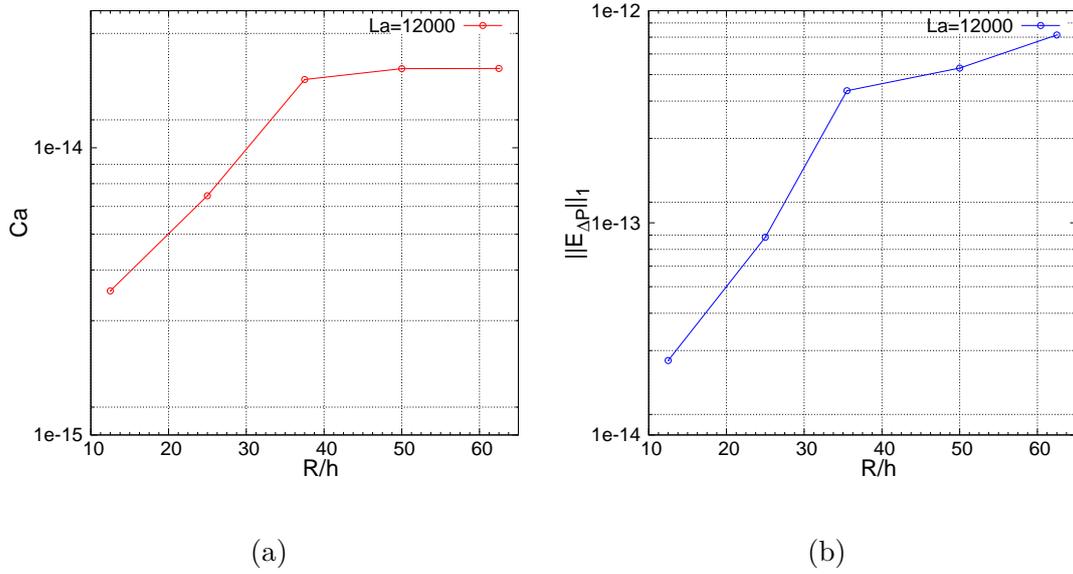


FIGURE 4.12 – Cas de la bulle statique, effet du rapport R/h à nombre de Laplace fixé ($La = 12000$) sur : (a) le nombre capillaire (b) l'erreur sur le saut de pression dans la bulle $\|E_{\Delta P_{max}}\|$.

plus faible que celle du liquide environnant ($\rho_2 < \rho_1$). Des conditions aux limites d'adhérence sont imposées aux parois horizontales :

$$\bar{u} = 0 \quad (4.29)$$

Sur les parois verticales, des conditions de glissement sont fixées :

$$\bar{u} \cdot \bar{n} = 0 \quad \text{et} \quad \bar{t} \cdot (\bar{\nabla} u + \bar{\nabla} u^T) \cdot \bar{n} = \bar{0} \quad (4.30)$$

La configuration initiale est identique pour les deux cas proposés. La figure 4.13 présente la configuration initiale ainsi que les conditions aux limites utilisées dans les deux cas de la bulle ascendante.

Les paramètres adimensionnels caractéristiques de cet écoulement sont le nombre de Reynolds :

$$Re = \frac{\rho_1 U_g D}{\mu_1} \quad (4.31)$$

représentant le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses et le nombre d'Eotvos :

$$Eo = \frac{\rho_1 U_g^2 D}{\sigma} \quad (4.32)$$

donnant le rapport entre les forces gravitationnelles et les effets de tension de surface. Les termes ρ_1 et μ_1 représentent la masse volumique et la viscosité du fluide

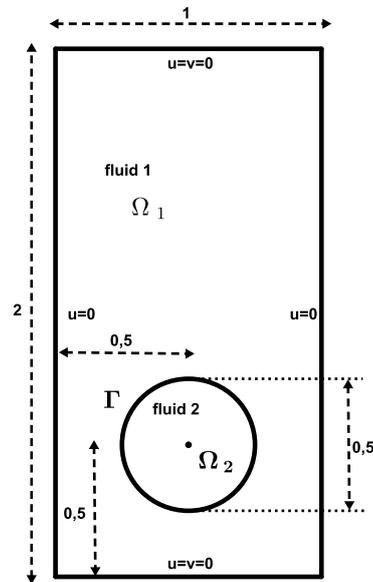


FIGURE 4.13 – Configuration initiale et conditions limites de la bulle ascendante

porteur, D est le diamètre de la bulle, $U_g = \sqrt{gD}$ la vitesse gravitationnelle et σ la tension de surface.

Dans les deux configurations, l'évolution de la bulle dans un fluide environnant est étudiée durant un temps $t = 3 s$.

Dans le premier cas, on considère un rapport de masse volumique et de viscosité de 10 entre la bulle et fluide extérieur. Selon le diagramme des formes de bulles donné par [76], la bulle initialement circulaire doit finir sous une forme elliptique. Même si cette analyse est tridimensionnelle, nous pouvons supposer que le même comportement est valable en 2D et que les effets capillaires sont suffisamment forts pour empêcher de fortes déformations de la bulle.

La deuxième configuration possède des paramètres plus sévères avec de forts rapports de masse volumique et de viscosité, respectivement 1000 et 100. La bulle se trouve ainsi dans un régime où son aspect est fortement altéré, induisant la création de ligaments de part et d'autre de sa surface pouvant s'étirer jusqu'à la rupture.

Le tableau 4.1 donne les propriétés physiques et les paramètres adimensionnels associés aux deux configurations.

Pour l'analyse quantitative des résultats, quelques caractéristiques ont été étudiées :

Cas	ρ_1	ρ_2	μ_1	μ_2	g	σ	Re	EO	ρ_1/ρ_2	μ_1/μ_2
1	1000	100	10	1	0,98	24,5	35	10	10	10
2	1000	1	10	0,1	0,98	1,96	35	125	1000	100

TABLE 4.1 – Paramètres physiques et adimensionnels définissant les deux cas test

- La position du centre de la masse de la bulle définie de la façon suivante :

$$\bar{x}_c(x_c, y_c) = \frac{\int_{\Omega_2} \bar{x} dx}{\int_{\Omega_2} 1 dx} \quad (4.33)$$

avec Ω_2 la surface occupée par la bulle.

- La vitesse de montée de la bulle dont la formule est donnée par :

$$\bar{u}_c = \frac{\int_{\Omega_2} \bar{u} dx}{\int_{\Omega_2} 1 dx} \quad (4.34)$$

Une alternative à ce calcul est d'utiliser directement la vitesse du centre de masse $\bar{u}_c = \bar{u}(\bar{x}_c)$, choix que nous avons adopté dans notre étude.

- La circularité donnée par :

$$C_b = \frac{\pi d_a}{P_b} \quad (4.35)$$

avec πd_a le périmètre d'un disque de diamètre d_a dont la surface est équivalente à celle de la bulle de périmètre P_b . Le calcul du périmètre P_b de la bulle avec la méthode front-tracking revient simplement à sommer la taille des éléments constituant la surface front-tracking. Pour une bulle parfaitement ronde, la circularité vaut 1.

Pour évaluer les erreurs commises, nous avons défini une solution de référence conformément aux auteurs de [35] :

$$\|E_{q_t}\|_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sum_{t=1}^{NT} |q_{t,ref} - q_t|}{\sum_{t=1}^{NT} |q_{t,ref}|} \quad (4.36)$$

$$\|E_{q_t}\|_\infty \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\max_t |q_{t,ref} - q_t|}{\max_t |q_{t,ref}|} \quad (4.37)$$

où q_t représente la quantité q en fonction du temps et NT est le nombre d'itérations temporelles effectuées durant la simulation jusqu'à $t = 3$ s. La solution de référence $q_{t,ref}$ est celle obtenue sur le maillage le plus fin possible avec un petit pas de temps.

Les quantités étudiées dans le benchmark sont données sur le site : <http://featflow.de/en/benchmarks/cfdbenchmarking/bubble.html>.

Résultats du cas 1

Ce test a été réalisé sur des grilles eulériennes de pas d'espace $h = 1/40, 1/80, 1/160$ et $1/320$ avec le pas de temps $\Delta t = h/(16V_0) s$ et $V_0 = 1 m/s$. La solution de référence est définie comme étant celle obtenue sur la grille eulérienne la plus raffinée, à savoir $h = 1/320$ avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC, les trois solutions raffinées (FTR-JUMP-VBC/CSF, FTR-JUMP-VBC/CSF, FTR-JUMP-VBC/DCC) étant parfaitement confondues.

Pour ce cas, nous avons comparé les solutions obtenues, durant un temps de simulation $t = 3 s$, avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF. Nous avons également comparé nos résultats aux solutions de référence des trois groupes du benchmark. La solution de référence du premier groupe (Ref group 1) est obtenue avec une méthode FEM/Level-set et un pas d'espace $h/320$. Celle du second groupe (Ref group 2) est obtenue avec une méthode FEM/Level-set et un pas $h = 1/160$. Enfin, le groupe 3 (Ref group 3) a construit une solution de référence avec une méthode FEM/ALE et une grille dont le pas d'espace est équivalent à $h = 1/900$.

Les figures 4.14a et 4.14b présentent la solution de la bulle ascendante obtenue

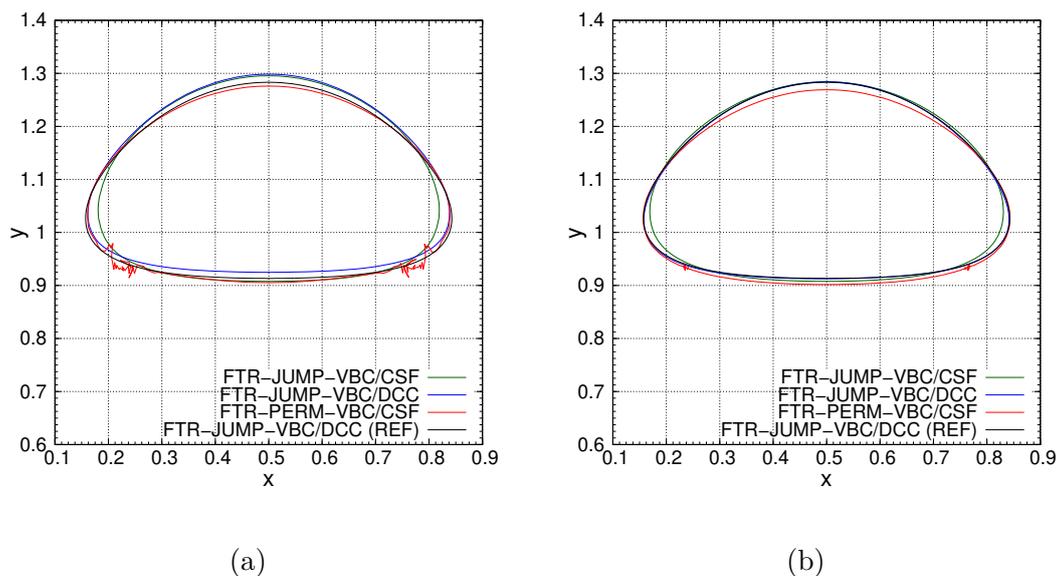


FIGURE 4.14 – Solutions de la bulle ascendante à $t = 3 s$: (a) Solutions obtenues avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/40$, comparaison à la solution de référence $h = 1/320$. (b) Solutions obtenues avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/80$, comparaison à la solution de référence $h = 1/320$.

à $t = 3 s$ pour les méthodes FTR-PERM-VBC/CSF, FTR-JUMP-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/DCC, lorsque les pas d'espace valent respectivement $1/40$ et $1/80$. Nous pouvons constater, pour la grille la plus grossière, un décalage entre la solution de référence et celles obtenues avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/DCC. La solution obtenue avec la méthode FTR-PERM-VBC/CSF est plus proche de la solution de référence mais présente de très fortes oscillations parasites de l'interface localisées de part et d'autre de la bulle. Ces oscillations non physiques, sont liées à la procédure globale de suivi d'interface de la méthode FTR-PERM-VBC (enrichissement, désenrichissement, transport, conservation du volume). La prise en compte du saut des propriétés physiques à l'interface par la méthode JUMP permet d'éliminer naturellement ces oscillations parasites, ce qui constitue un point intéressant de cette méthode.

Si nous considérons à présent les solutions pour la grille eulérienne $h = 1/80$, nous pouvons remarquer que la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC fournit une solution pratiquement confondue à la solution de référence. Nous remarquons que les oscillations de l'interface liées à l'utilisation de la méthode FTR-PERM-VBC/CSF diminuent en raffinant le maillage. Cependant, l'écart à la solution de référence persiste. La méthode FTR-JUMP-VBC/CSF quant à elle présente un écart à la solution de référence localisé sur les côtés de la bulle.

La comparaison des trois méthodes permet de tirer des premières conclusions sur les apports des méthodes FTR-PERM-VBC/CSF, FTR-JUMP-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/DCC. La méthode FTR-PERM-VBC/CSF provoque des oscillations parasites de l'interface qui tendent à disparaître avec le raffinement de la grille eulérienne. De plus, elle converge moins rapidement vers la solution de référence. Ce dernier point est valable aussi pour la méthode FTR-JUMP-VBC/CSF. La méthode FTR-JUMP-VBC/DCC fournit une solution plus précise qui converge rapidement vers la solution de référence.

Le choix de la modélisation DCC est donc plus intéressant que l'approche CSF dans la mesure où il permet d'améliorer la précision des solutions pour ce cas test. La méthode JUMP quant à elle permet d'éliminer naturellement les oscillations non physiques provoquées par la méthode de front-tracking lorsque les vitesses des marqueurs sont obtenues par interpolation.

Les figures 4.15a et 4.15b présentent les solutions obtenues pour le cas 1 de la bulle ascendante à $t = 3 s$. Nous pouvons voir sur la figure 4.15a que les solutions sont pratiquement confondues à la référence à l'exception de la solution grossière qui présente un décalage de la position du centre de masse par rapport à la référence. La figure 4.15b illustre la comparaison des méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour la grille eulérienne de référence $h = 1/320$ avec les solutions de référence des trois groupes du benchmark [35]. Pour les méthodes étudiées la forme de bulle est en accord avec les références

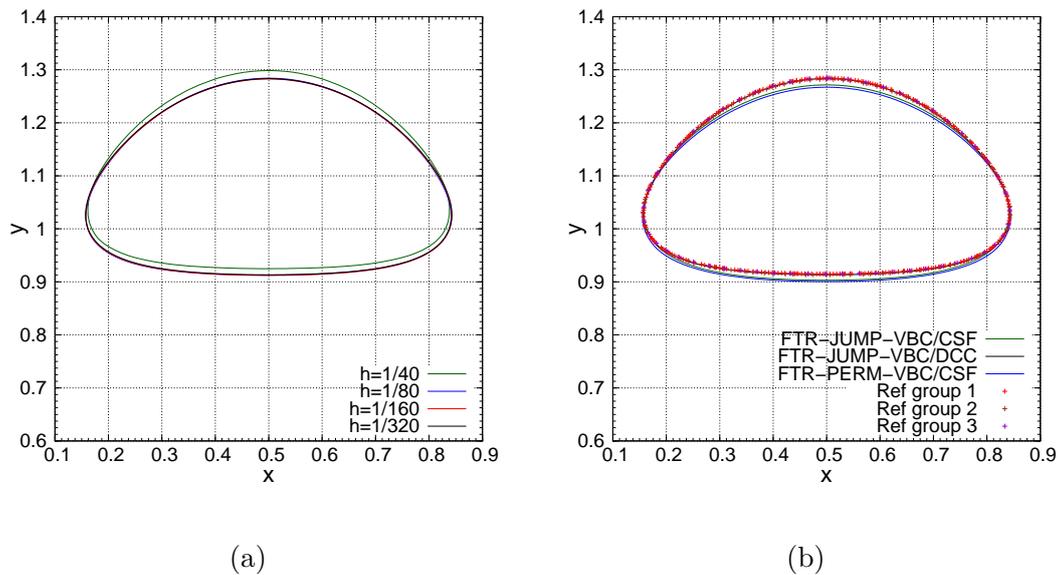


FIGURE 4.15 – Solutions de la bulle ascendante à $t = 3$ s : (a) Solutions obtenues avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC pour les grilles eulériennes $h = 1/40, 1/80, 1/160, 1/320$. (b) Solutions obtenues avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/320$, comparaison avec les solutions de référence des trois groupes du benchmark [35] (Ref group 1, ref group 2 et Ref group 3)

du benchmark. Nous observons cependant un décalage du centre de masse de la bulle entre les méthodes FTR-PERM-VBC/CSF, FTR-JUMP-VBC/CSF et les références du benchmark. La méthode FTR-JUMP-VBC/DCC est quant à elle en parfait accord avec les solutions de référence. D'un point de vue qualitatif la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC se démarque des deux autres méthodes avec des solutions très proches des trois références proposées dans le premier cas de ce benchmark.

Les figures 4.16a et 4.16b présentent l'évolution de la circularité (4.35) au cours du temps. La figure 4.16a donne l'évolution de la circularité calculée avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC pour les pas d'espace $h = 1/40, 1/80, 1/160$ et $1/320$. A l'exception de la solution obtenue sur la grille grossière $h = 1/40$, qui montre quelques différences à partir de $t = 1,75$ s, nous n'observons pas d'écarts significatifs entre les différentes grilles eulériennes. Nous observons également quelques oscillations aux temps courts pour les maillages les plus grossiers qui tendent à disparaître avec le raffinement du maillage. La figure 4.16b présente l'évolution de la circularité pour les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour la grille eulérienne de référence $h = 1/320$ ainsi

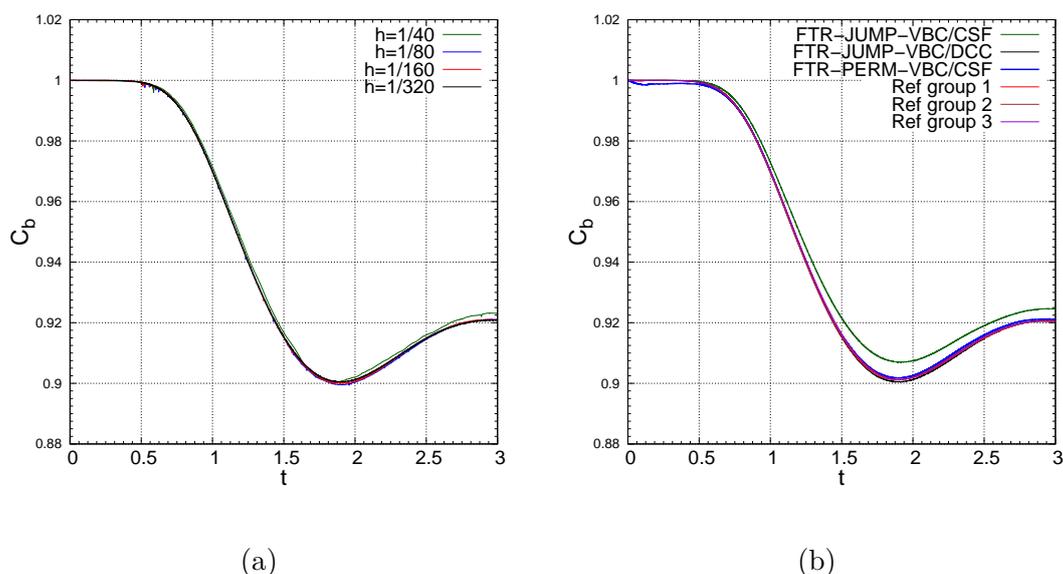


FIGURE 4.16 – Solutions de la bulle ascendante obtenues à $t = 3$ s : (a) Circularités C_b calculées avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC pour les grilles eulériennes $h = 1/40, 1/80, 1/160, 1/320$. (b) Circularités calculées avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/320$ et comparaison avec les références des trois groupes du benchmark [35] (Ref group 1, Ref group 2 et Ref group 3)

que les solutions de référence des trois groupes du benchmark. La solution obtenue par la méthode FTR-JUMP-VBC/CSF présente un écart considérable aux autres solutions même si la tendance globale de l'évolution de la circularité est correcte. Les solutions obtenues avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC et FTR-PERM-VBC/CSF sont proches des trois références du benchmark même si nous observons pour la méthode FTR-PERM-VBC/CSF un léger écart aux temps courts ($t < 0,5$ s).

En ce qui concerne l'évolution de la position du centre de masse, nous pouvons voir sur la figure 4.17a que les solutions convergent parfaitement pour la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC à partir de la grille $h = 1/80$. Pour le maillage le plus grossier $h = 1/40$, l'écart aux solutions fines est visible seulement à partir de la moitié du temps de simulation ($t \approx 1,5$ s). La comparaison entre les différentes méthodes étudiées et les références du benchmark (figure 4.17b), lorsque le pas d'espace h vaut $1/320$, montre un léger décalage de la position du centre de masse après $t \approx 1,5$ s pour les méthodes FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF. La position du centre de masse obtenue avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC est en parfait accord avec les références. Les conclusions sont similaires si on s'in-

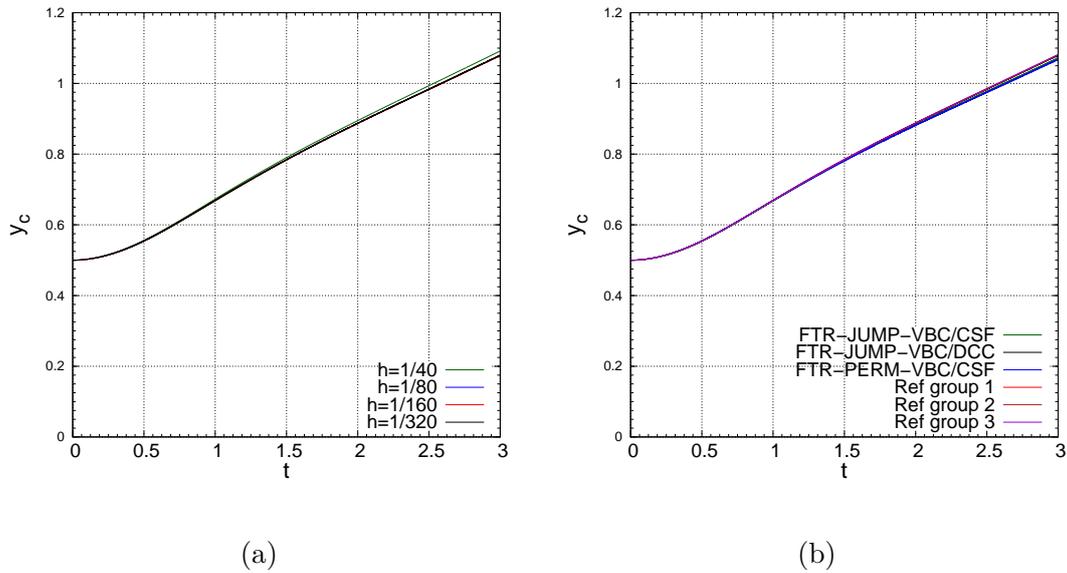


FIGURE 4.17 – Solutions de la bulles ascendante obtenues à $t = 3$ s : (a) Position du centre de masse y_c calculée avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC pour les grilles eulériennes $h = 1/40, 1/80, 1/160, 1/320$. (b) Position du centre de masse calculée avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/320$ et comparaison avec les positions de référence du centre de masse des trois groupes du benchmark [35] (Ref group 1, Ref group 2 et Ref group 3)

téresse à la vitesse de montée de bulle. La figure 4.18a présente l'évolution de la vitesse de montée de la bulle calculée avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC pour différentes grilles eulériennes. Les solutions convergent à partir de la grille la plus grossière considérée, $h = 1/40$. Si on compare les différentes méthodes étudiées et les références du benchmark pour la grille $h = 1/320$ (figure 4.18b), on constate que la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC donne une solution parfaitement en accord avec les références en terme de vitesse de montée. Les méthodes FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF s'écarte légèrement des références après $t \approx 1$ s. Le tableau 4.2 présente l'erreur $\|E_{q_i}\|_1$ et l'ordre de convergence pour différentes pas d'espace h . La méthode FTR-JUMP-VBC/DCC est la plus précise et converge globalement vers la solution de référence même si on observe une saturation sur la position du centre de masse y_c pour $h = 1/160$. Les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC et FTR-JUMP-VBC/DCC quand à elles saturent aussi pour la même quantité. Les erreurs sur la circularité et la vitesse de montée de la bulle sont toutefois plus importantes même si elles convergent vers la solution de référence.

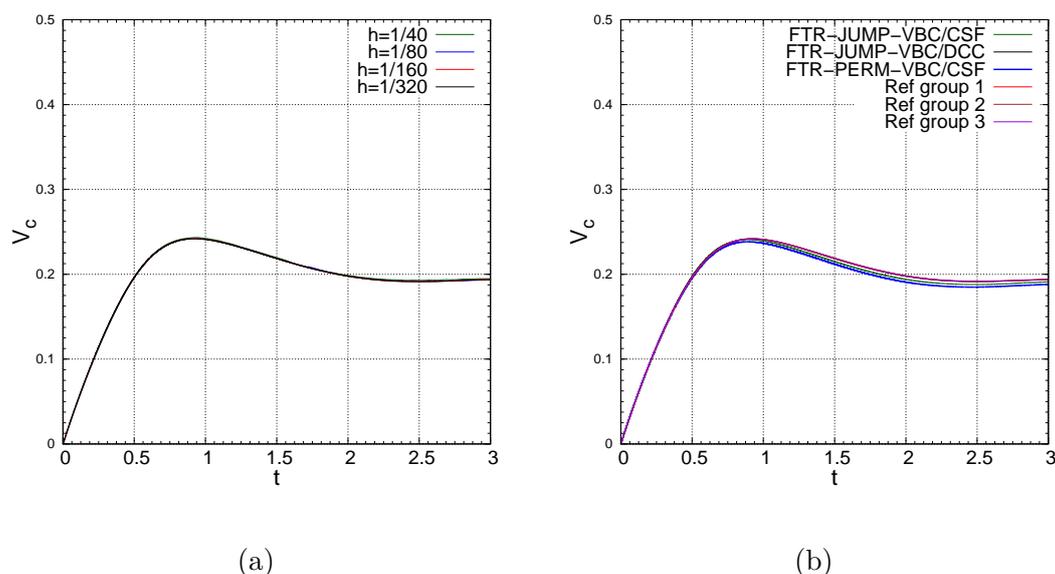


FIGURE 4.18 – Solutions de la bulles ascendante obtenues à $t = 3 s$: (a) Vitesse de montée de la bulle v_c calculée avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC pour les grilles eulériennes $h = 1/40, 1/80, 1/160, 1/320$. (b) Vitesse de montée de la bulle v_c calculée avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/320$ et comparaison avec les vitesses de montée de référence des trois groupes du benchmark [35] (Ref group 1, Ref group 2 et Ref group 3)

Résultats du cas 2

Ce test a également été réalisé sur des grilles eulériennes de pas d'espace $h = 1/40, 1/80, 1/160, 1/320$ avec le même pas de temps $\Delta t = h/(16V_0) s$ et $V_0 = 1 m/s$ que le cas précédent. La solution de référence est obtenue à l'aide le méthode FTR-JUMP-VBC/DCC pour $h = 1/320$. En ce qui concerne les solutions de référence du benchmark, celle du premier groupe (Ref group 1) est obtenue avec un pas d'espace $h/640$, celle du second groupe (Ref group 2) avec un pas $h = 1/160$ et enfin le groupe 3 (Ref group 3) a construit une solution de référence avec une grille de pas d'espace équivalent à $h = 1/900$.

La figure 4.19 illustre la comparaison des méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour la grille eulérienne de référence $h = 1/320$ avec les solutions de référence des trois groupes du benchmark [35] pour le cas 2. A l'image du groupe 3 utilisant une méthode FEM/ALE, les différentes méthodes front-tracking étudiées ici ne permettent pas une rupture automatique des filaments engendrés par la montée de la bulle dans une configuration

h	FTR-JUMP-VBC/DCC		FTR-JUMP-VBC/DCC		FTR-JUMP-VBC/DCC	
Circularité	$\ E_{q_t}\ _1$	Ordre	$\ E_{q_t}\ _1$	Ordre	$\ E_{q_t}\ _1$	Ordre
1/40	1,07E-03	-	2,25E-02	-	4,47E-02	-
1/80	3,54E-04	1,6	1,24E-02	0,9	4,20E-03	3,4
1/160	1,86E-04	0,9	6,70E-03	0,9	7,83E-04	2,4
y_c	$\ E_{q_t}\ _1$	Ordre	$\ E_{q_t}\ _1$	Ordre	$\ E_{q_t}\ _1$	Ordre
1/40	7,48E-03	-	1,10E-02	-	3,30E-03	-
1/80	3,43E-04	4,4	4,34E-03	1,3	5,06E-03	-0,6
1/160	6,31E-04	-0,9	3,92E-03	0,1	5,43E-03	-0,1
V_c	$\ E_{q_t}\ _1$	Ordre	$\ E_{q_t}\ _1$	Ordre	$\ E_{q_t}\ _1$	Ordre
1/40	5,49E-03	-	8,97E-02	-	1,36E-02	-
1/80	1,37E-03	2,0	2,93E-02	1,6	2,15E-02	-0,7
1/160	5,98E-04	1,2	4,01E-03	2,9	2,37E-02	-0,1

TABLE 4.2 – Erreur relative $\|E_{q_t}\|_1$ (4.36) et ordre de convergence pour le cas 1 de la bulle ascendante

où la tension de surface est trop faible pour conserver la forme circulaire de l'interface. Malgré cet aspect, pour toutes les méthodes étudiées, la forme de bulle est globalement en bon accord avec les références du benchmark, au moins pour la partie centrale de la bulle. Le plateau inférieur de la bulle est légèrement décalé par rapport aux autres méthodes pour la solution obtenue avec la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC.

Les figures 4.20a, 4.20b et 4.20c présentent l'évolution au cours du temps de la circularité (4.35), de la position du centre de masse et de la vitesse de montée la bulle pour les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF lorsque la grille eulérienne de référence $h = 1/320$ est considérée ainsi que les solutions de référence des trois groupes du benchmark. Aux temps longs, les solutions obtenues avec les méthodes FTR-PERM-VBC/CSF et la référence du groupe 1 (Ref group 1) semblent s'écarter notablement des résultats des autres méthodes. Les solutions des méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC et FTR-JUMP-VBC/CSF sont proches des solutions de référence des deux autres groupes. En ce qui concerne l'évolution de la position du centre de masse, la comparaison entre les différentes méthodes étudiées et les références du benchmark (figure 4.17b), lorsque le pas d'espace h vaut $1/320$, montre un bon accord des méthodes qui ne permet pas de les discriminer.

Pour la vitesse de montée, après un temps $t \approx 1$ s les solutions semblent s'écarter les unes des autres. Aux temps longs ($t \approx 2,5$ s), les solutions des trois méthodes FTR étudiées et la référence du groupe 2 semblent converger même s'il est difficile

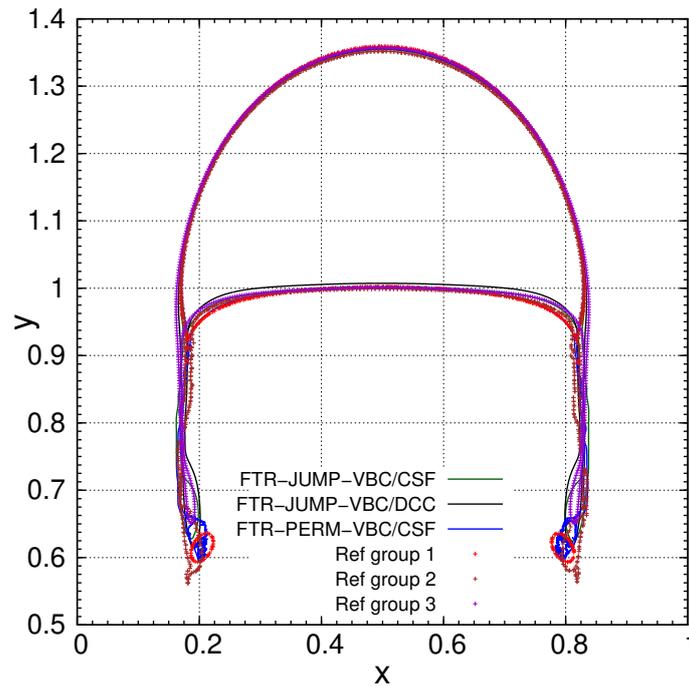


FIGURE 4.19 – Solutions de la bulle ascendante obtenues à $t = 3s$ avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF pour $h = 1/320$, comparaison avec les solutions de référence des trois groupes du benchmark [35] (Ref group 1, Ref group 2 et Ref group 3)

de discriminer les méthodes entre elles pour ce cas.

4.4 Conclusions

Dans ce chapitre nous avons décrit le modèle à 1-fluide tel qu'il est implémenté dans le code de résolution d'écoulements diphasiques à phases séparées, FUGU. Grâce à l'intégration de la méthode FTR-JUMP-VBC dans ce modèle, nous avons proposé une discrétisation du terme capillaire (DCC) permettant d'équilibrer le gradient de pression dans le cadre de la loi de Laplace. Pour le cas de la goutte statique, la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC a permis de réduire les courants parasites au niveau de la précision machine. Cette méthode s'est révélée performante dans le cas de bulle ascendante avec des résultats en accord avec les références de la littérature. De plus, nous avons montré que la méthode JUMP permettait d'éliminer naturellement les oscillations non physiques liées à l'utilisation de la méthode

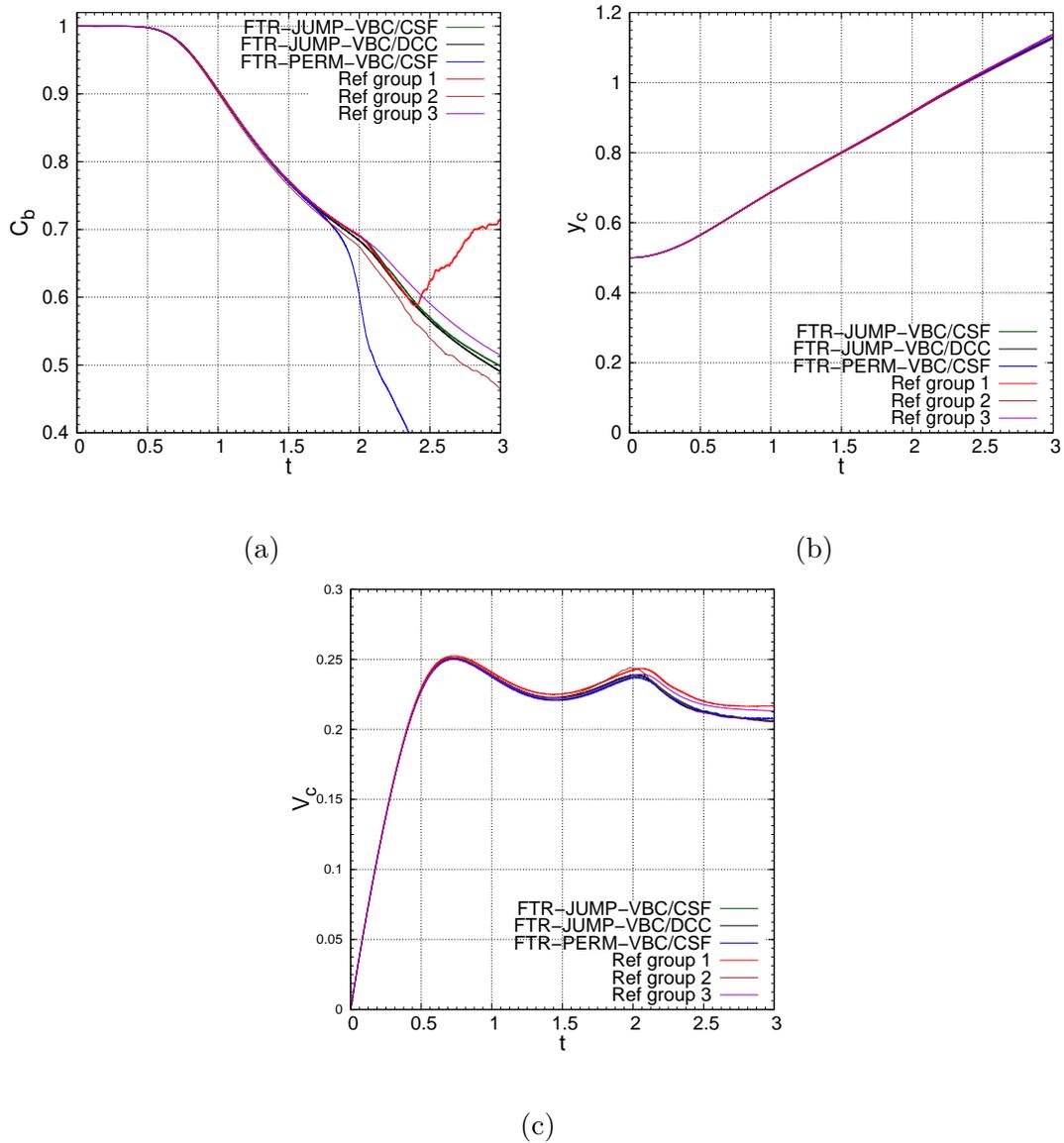


FIGURE 4.20 – Solutions de la bulle ascendante obtenues à $t = 3s$, pour $h = 1/320$ avec les méthodes FTR-JUMP-VBC/DCC, FTR-PERM-VBC/CSF et FTR-JUMP-VBC/CSF, comparaison avec les solutions de référence des trois groupes du benchmark [35] (Ref group 1, Ref group 2 et Ref group 3) : (a) Circularités, (b) Position du centre de masse, (c) Vitesse de montée de bulle.

de front-tracking avec les vitesses des marqueurs obtenues par interpolation.

Chapitre 5

Mise en œuvre d'un modèle à 2 fluide sur une grille eulérienne fixe avec la méthode de suivi d'interface FTR-JUMP

Sommaire

5.1	Résolution numérique des équations de Navier-Stokes par une approche de type 2-fluide	131
5.1.1	Présentation du modèle	131
5.1.2	Discrétisation sur un volume de contrôle composite . . .	132
5.1.3	Intégration temporelle	134
5.1.4	Approximation spatiale des autres termes de l'équation de quantité de mouvement	135
5.2	Test de validation	143
5.2.1	Écoulement de Couette diphasique instationnaire	143
5.2.2	Écoulement de Poiseuille diphasique stationnaire	146
5.2.3	Goutte statique (test de Laplace)	148

Dans ce chapitre, nous allons présenter le développement d'un modèle discontinu à 2-fluides pour les interfaces résolues sur une grille eulérienne fixe. Ce chapitre constitue un développement original qui a vocation à fournir une première contribution dans la construction d'une représentation numérique utilisable en 3D et parallèle au modèle à 2-fluide DNS (Sec. 1.3.1). Le principal atout de cette vision des modèles diphasiques est d'utiliser des grilles fixes et aussi de supprimer les moyennes dans les cellules coupées par l'interface. On voit ici les cellules

eulériennes coupées par l'interface comme des volumes de contrôle composites, dynamiques, sur lesquels nous nous appuyerons pour effectuer nos discrétisations volumes finis en présence d'une interface. Cela ressemble à des techniques de type cut-cell [94] qui sont utilisées dans les approches de frontières immergées pour représenter des interactions fluide-solide sur des grilles fixes. Les discrétisations resteront de type structuré afin de conserver l'intérêt et l'acquis des codes de calculs préexistants en diphasique.

Nous avons vu dans le chapitre précédent que l'utilisation du modèle à 1-fluide avec une fonction couleur reconstruite à partir d'une surface front-tracking permettait d'améliorer la précision des résultats avec une description plus fine de l'interface quelles que soient les validations proposées. De plus, l'emploi de la méthode FTR-JUMP intégrant le saut de propriétés physiques à l'interface pour le calcul de la vitesse des marqueurs, couplé au calcul direct du terme source de tension de surface dans les équations du modèle à 1-fluide, nous a permis d'améliorer la précision pour des cas test comme la goutte statique ou encore la bulle ascendante.

Cependant, cette formulation à 1-fluide reste un modèle de mélange local dans lequel l'interface est épaissie d'au moins une cellule eulérienne. La représentation explicite de l'interface liée à l'utilisation de la méthode front-tracking est donc malheureusement perdue. Aussi, toutes les échelles interfaciales dont la taille caractéristique est plus petite que la taille de la cellule eulérienne ne sont pas explicitement prises en compte, à moins de raffiner la grille eulérienne, ce qui est relativement coûteux.

L'objectif étant de réussir à simuler de façon précise les écoulements diphasiques quelle que soit la taille de l'interface, tout en conservant une complexité de mise en œuvre et un coût de calcul raisonnable, nous avons choisi de travailler avec une grille fixe eulérienne fixe dans laquelle l'interface est représentée explicitement à l'aide de la méthode front-tracking. Nous n'utilisons ainsi plus de lois de mélange (modèle à 1-fluide) mais un modèle où chaque fluide de l'écoulement est résolu de façon distincte et les sauts des propriétés physiques sont pris en compte à travers les relations de saut (Eqs. 1.9-1.10).

5.1 Résolution numérique des équations de Navier-Stokes par une approche de type 2-fluide

5.1.1 Présentation du modèle

Considérons un écoulement à deux fluides non miscibles où l'interface Γ divise le domaine \mathcal{V} en deux sous domaines Ω_1 pour le fluide 1 et Ω_2 pour le fluide 2. Chaque fluide possède ses caractéristiques physiques, à savoir sa masse volumique et sa viscosité (ρ_1, μ_1 pour le fluide 1 et ρ_2, μ_2 pour le fluide 2). Pour chaque

fluide $k = 1, 2$, les équations de Navier-Stokes incompressibles et isothermes sont résolues pour décrire l'écoulement diphasique :

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{u}_k = 0 \quad (5.1a)$$

$$\frac{\partial \rho_k \bar{u}_k}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_k \bar{u}_k \otimes \bar{u}_k) = \rho_k \bar{g} + \bar{\nabla} \cdot \bar{\mathcal{T}}_k \quad (5.1b)$$

avec $\bar{\mathcal{T}}_k \equiv -p_k \bar{\mathcal{I}} + 2\mu_k \bar{\mathcal{D}}_k$ le tenseur des contraintes et $\bar{\mathcal{D}}_k = \frac{1}{2}(\bar{\nabla} \bar{u}_k + \bar{\nabla} \bar{u}_k^T)$ le tenseur des taux de déformation associé à la phase k .

De plus, au niveau de l'interface Γ , le saut des propriétés physiques s'écrit :

$$\bar{u}_1 = \bar{u}_2 \quad (5.2a)$$

$$\bar{n} \cdot (\bar{\mathcal{T}}_1 - \bar{\mathcal{T}}_2) \cdot \bar{n} = \sigma \kappa \quad (5.2b)$$

$$\bar{t} \cdot (\bar{\mathcal{T}}_1 - \bar{\mathcal{T}}_2) \cdot \bar{n} = 0 \quad (5.2c)$$

Pour représenter et assurer le transport de l'interface, la méthode front-tracking conservative couplée à la méthode JUMP (FTR-JUMP-VBC) pour le calcul des vitesses des marqueurs de la surface front-tracking est utilisée. Comme dans le chapitre précédent, ces équations sont discrétisées sur une grille cartésienne uniforme avec les variables discrètes de vitesse et pression positionnées sur une grille décalée de type MAC (figure 4.1). Le pas d'espace h est constant dans les directions horizontales et verticales. Ainsi, par rapport aux modèle à 1-fluide du chapitre précédent, seules les discrétisations dans les cellules coupées par l'interface changent. Tout le reste des méthodes numériques est identique dans les cellules qui ne sont pas coupées par une interface.

5.1.2 Discrétisation sur un volume de contrôle composite

Soit un volume de contrôle \mathcal{V} associé à une variable de vitesse ou de pression et intersecté par une interface Γ . L'interface subdivise ce volume \mathcal{V} en deux sous-domaine, Ω_1 et Ω_2 , délimités respectivement par les contours fermés $\Sigma_1 + \Gamma$ et $\Sigma_2 + \Gamma$ de normales sortantes respectives \bar{n}_1 et \bar{n}_2 (voir figure 5.1). L'utilisation du théorème de transport de Reynolds sur ce volume \mathcal{V} s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_1(t)} \rho_1 \bar{u}_1 d\mathcal{V}_1 + \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_2(t)} \rho_2 \bar{u}_2 d\mathcal{V}_2 + \\ \int_{\Sigma_1 + \Gamma} \rho_1 \bar{u}_1 (\bar{u}_r \cdot \bar{n}_1) (d\Sigma_1 + d\Gamma) + \int_{\Sigma_2 + \Gamma} \rho_2 \bar{u}_2 (\bar{u}_r \cdot \bar{n}_2) (d\Sigma_2 + d\Gamma) = \\ \int_{\Sigma_1 + \Gamma} \bar{\mathcal{T}}_1 \cdot \bar{n}_1 (d\Sigma_1 + d\Gamma) + \int_{\Sigma_2 + \Gamma} \bar{\mathcal{T}}_2 \cdot \bar{n}_2 (d\Sigma_2 + d\Gamma) \quad (5.3) \end{aligned}$$

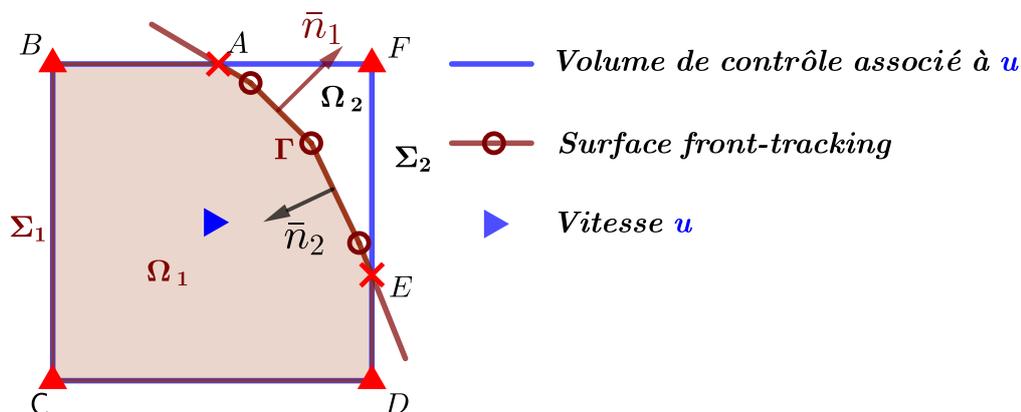


FIGURE 5.1 – Volume de contrôle \mathcal{V} associé à une vitesse u coupé par une interface Γ . Nous obtenons ainsi un volume de contrôle composite divisé en deux sous-domaine Ω_1 et Ω_2 .

avec $\bar{u}_r = \bar{u}_k - \bar{u}_\Gamma$ la différence entre la vitesse du fluide \bar{u}_k ($k = 1, 2$) et celle de l'interface \bar{u}_Γ et \bar{n}_1, \bar{n}_2 les vecteurs unitaires sortants des volumes respectifs Ω_1 et Ω_2 . Pour simplifier la relation (5.3), nous avons :

- (i) Sur Γ , $\bar{u}_r = 0$ car $\bar{u}_k = \bar{u}_\Gamma$
- (ii) Sur Σ_1 et Σ_2 , $\bar{u}_r = \bar{u}_k$ car $\bar{u}_\Gamma = 0$

De plus, les intégrales sur les contraintes peuvent être développées de manière à obtenir :

$$\int_{\Sigma_1+\Gamma} \bar{\bar{T}}_1 \cdot \bar{n}_1 (d\Sigma_1 + d\Gamma) + \int_{\Sigma_2+\Gamma} \bar{\bar{T}}_2 \cdot \bar{n}_2 (d\Sigma_2 + d\Gamma) = \int_{\Sigma_1} \bar{\bar{T}}_1 \cdot \bar{n}_1 d\Sigma_1 + \int_{\Sigma_2} \bar{\bar{T}}_2 \cdot \bar{n}_2 d\Sigma_2 + \int_{\Gamma} \bar{\bar{T}}_1 \cdot \bar{n}_1 d\Gamma + \int_{\Gamma} \bar{\bar{T}}_2 \cdot \bar{n}_2 d\Gamma$$

En remarquant que sur Γ , $\bar{n}_1 = -\bar{n}_2 = \bar{n}$, nous pouvons écrire :

$$\int_{\Gamma} \bar{\bar{T}}_1 \cdot \bar{n}_1 d\Gamma + \int_{\Gamma} \bar{\bar{T}}_2 \cdot \bar{n}_2 d\Gamma = \int_{\Gamma} \bar{\bar{T}}_1 \cdot \bar{n} d\Gamma - \int_{\Gamma} \bar{\bar{T}}_2 \cdot \bar{n} d\Gamma$$

la relation de saut (1.9) peut être utilisée pour réécrire :

$$\int_{\Gamma} (\bar{\bar{T}}_1 - \bar{\bar{T}}_2) \cdot \bar{n} d\Gamma = \int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} d\Gamma$$

L'équation (5.3) est ainsi simplifiée telle que :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_1(t)} \rho_1 \bar{u}_1 d\mathcal{V}_1 + \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_2(t)} \rho_2 \bar{u}_2 d\mathcal{V}_1 + \int_{\Sigma_1} \rho_1 \bar{u}_1 (\bar{u}_1 \cdot \bar{n}_1) d\Sigma_1 + \int_{\Sigma_2} \rho_2 \bar{u}_2 (\bar{u}_2 \cdot \bar{n}_2) d\Sigma_2 = \\ \int_{\Sigma_1} \bar{\bar{T}}_1 \cdot \bar{n}_1 d\Sigma_1 + \int_{\Sigma_2} \bar{\bar{T}}_2 \cdot \bar{n}_2 d\Sigma_2 + \int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} d\Gamma \end{aligned} \quad (5.4)$$

Sachant que les masses volumiques et les viscosités ρ_1 , ρ_2 , μ_1 et μ_2 sont constantes dans chacun des fluides, la relation (5.4) devient :

$$\begin{aligned} \rho_1 \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_1(t)} \bar{u}_1 d\mathcal{V}_1 + \rho_2 \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_2(t)} \bar{u}_2 d\mathcal{V}_1 + \rho_1 \int_{\Sigma_1} \bar{u}_1 (\bar{u}_1 \cdot \bar{n}_1) d\Sigma_1 + \rho_2 \int_{\Sigma_2} \bar{u}_2 (\bar{u}_2 \cdot \bar{n}_2) d\Sigma_2 = \\ \int_{\Sigma_1} p_1 \cdot \bar{n}_1 d\Sigma_1 + \int_{\Sigma_2} p_2 \cdot \bar{n}_2 d\Sigma_2 + 2\mu_1 \int_{\Sigma_1} \bar{\bar{D}}_1 \cdot \bar{n}_1 d\Sigma_1 + 2\mu_2 \int_{\Sigma_2} \bar{\bar{D}}_2 \cdot \bar{n}_2 d\Sigma_2 + \int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} d\Gamma \end{aligned} \quad (5.5)$$

En procédant de la même manière pour la conservation de la masse, on obtient :

$$\int_{\Sigma_1} \bar{u}_1 \cdot \bar{n}_1 d\Sigma_1 + \int_{\Sigma_2} \bar{u}_2 \cdot \bar{n}_2 d\Sigma_2 = 0 \quad (5.6)$$

Les relations (5.5) et (5.6) sur l'ensemble des volumes de contrôle \mathcal{V} composant le domaine $\Omega = \Omega_1 + \Omega_2$ permet d'obtenir une description globale de l'écoulement diphasique.

5.1.3 Intégration temporelle

La résolution des équations du modèle à 2-fluides nécessite également de découpler les variables de vitesse et de pression dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement à travers la contrainte d'incompressibilité. L'ajout du terme du lagrangien augmenté à l'équation (5.5) permet d'assurer ce découplage pour chaque volume de contrôle de vitesse considéré. On obtient la relation 5.7 :

$$\begin{aligned} \rho_1 \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_1(t)} \bar{u}_1 d\mathcal{V}_1 + \rho_2 \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_2(t)} \bar{u}_2 d\mathcal{V}_1 + \rho_1 \int_{\Sigma_1} \bar{u}_1 (\bar{u}_1 \cdot \bar{n}_1) d\Sigma_1 + \rho_2 \int_{\Sigma_2} \bar{u}_2 (\bar{u}_2 \cdot \bar{n}_2) d\Sigma_2 = \\ \int_{\Sigma_1} -p_1 \bar{n}_1 d\Sigma_1 + \int_{\Sigma_2} -p_2 \bar{n}_2 d\Sigma_2 + 2\mu_1 \int_{\Sigma_1} \bar{\bar{D}}_1 \cdot \bar{n}_1 d\Sigma_1 + 2\mu_2 \int_{\Sigma_2} \bar{\bar{D}}_2 \cdot \bar{n}_2 d\Sigma_2 + \int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} d\Gamma + \\ \int_{\Sigma_1} r (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}_1) \bar{n}_1 d\Sigma_1 + \int_{\Sigma_2} r (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}_2) \bar{n}_2 d\Sigma_2 \end{aligned} \quad (5.7)$$

avec r le paramètre du lagrangien augmenté présenté dans le chapitre précédent. La discrétisation temporelle utilise un schéma Euler d'ordre 1 (Eq. 4.5). Cette

discrétisation pourrait être étendue à un ordre supérieur sans changer la généralité de l'approche. Le terme temporel de l'équation (5.4)

$$\rho_1 \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_1(t)} \bar{u}_1 d\mathcal{V}_1 + \rho_2 \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_2(t)} \bar{u}_2 d\mathcal{V}_2$$

est réécrit pour la composante u de vitesse par exemple :

$$\rho_1 \left(\frac{u^{n+1} \mathcal{V}_1^{n+1} - u^n \mathcal{V}_1^n}{\Delta t} \right) + \rho_2 \left(\frac{u^{n+1} \mathcal{V}_2^{n+1} - u^n \mathcal{V}_2^n}{\Delta t} \right) \quad (5.8)$$

Dans ce terme, nous faisons l'approximation $\bar{u}_1 \approx \bar{u}_2 \approx \bar{u}$ car il n'y a pas de saut de vitesse à la traversée de l'interface (voir relation (5.2a)). L'erreur commise dans une cellule de vitesse donnée, en approchant la vitesse de chaque fluide par la vitesse du nœud associé au volume de contrôle étudié, doit tendre vers zéro lorsque la taille du volume tend vers zéro.

Lagrangien augmenté

Comme pour le terme temporel, nous considérons $\bar{u}_1 \approx \bar{u}_2 \approx \bar{u}$ pour l'intégration du terme du lagrangien augmenté

$$\int_{\Sigma_1} r(\bar{\nabla} \cdot \bar{u}_1) \cdot \bar{n} d\Sigma_1 + \int_{\Sigma_2} r(\bar{\nabla} \cdot \bar{u}_2) \cdot \bar{n} d\Sigma_2$$

Sa discrétisation reste donc inchangée par rapport au modèle à 1-fluide.

5.1.4 Approximation spatiale des autres termes de l'équation de quantité de mouvement

La discrétisation spatiale des opérateurs spatiaux de l'équation de quantité de mouvement est assurée par morceau pour toutes les cellules coupées par une surface front-tracking. Nous avons vu au chapitre 3 que l'utilisation de la méthode JUMP pour le calcul de la vitesse des marqueurs de la surface front-tracking permettait à la fois de prendre en compte les relations de saut des propriétés physiques à l'interface et de définir les vitesses, gradients et pression de part et d'autre de l'interface. Ces informations sont ici exploitées pour calculer les flux des volumes composites associés aux composantes de vitesse u et v . La figure 5.2 présente un volume de contrôle composite associé à la composante u de vitesse. Les flux sont calculés par morceau sur une face intersectée. Sur cette illustration, l'exemple de la face ouest f_{uo} associée à la composante $u_{i,j}$ est pris et les pressions, gradients et vitesses sont connus de chaque côté de l'interface.

Pour les cellules eulériennes qui ne sont pas intersectées, la discrétisation présentée au chapitre 4 reste valable.

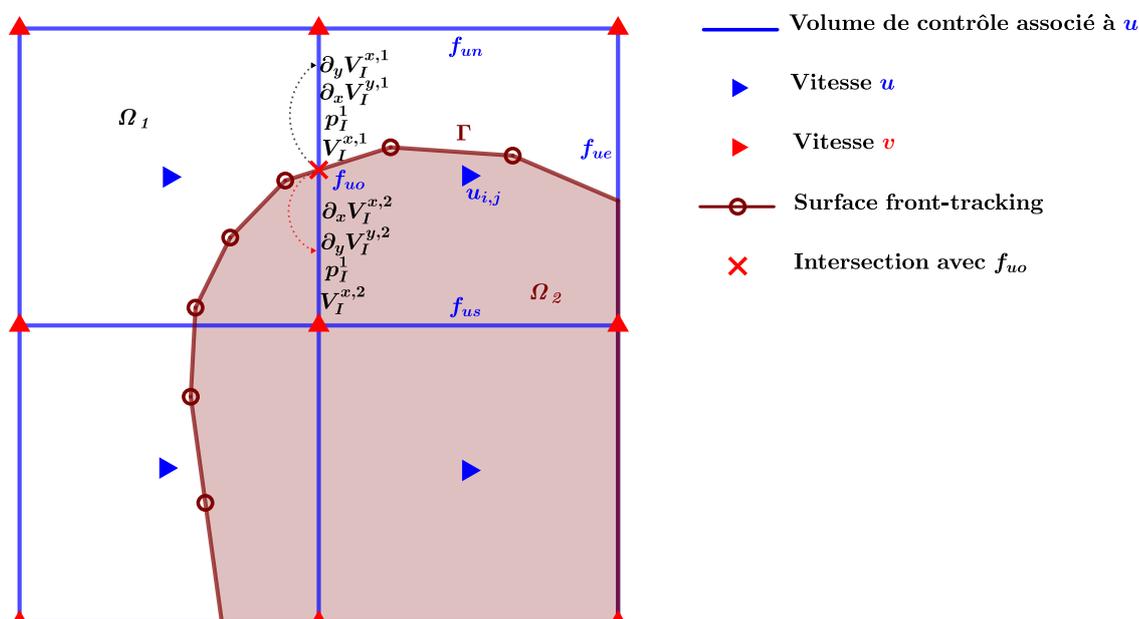


FIGURE 5.2 – Volume de contrôle composite associé à la composante u de vitesse ; les flux sont calculés par morceau sur une face intersectée : exemple de la face ouest f_{uo} coupée par une surface front-tracking Γ

Terme convectif

On rappelle le terme convectif de l'équation (5.7), intégré sur le volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$ et délimité par les surfaces Σ_1 et Σ_2 :

$$\rho_1 \int_{\Sigma_1} \bar{u}_1 (\bar{u}_1 \cdot \bar{n}_1) d\Sigma_1 + \rho_2 \int_{\Sigma_2} \bar{u}_2 (\bar{u}_2 \cdot \bar{n}_2) d\Sigma_2$$

Selon la manière dont la ou les surfaces front-tracking intersectent le volume de contrôle, on peut distinguer plusieurs cas de figure pour chaque face du volume de contrôle associé au nœud de vitesse considéré. Les flux convectifs Φ_{us} et Φ_{ue} des faces respectives f_{us} et f_{ue} associées au volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$ du nœud de vitesse $u_{i,j}$ sont calculés comme suit :

Flux convectif Φ_{us} de la face sud f_{us} de $\mathcal{V}_{i,j}$

— Si f_{us} est coupée par une interface Γ (figure 5.3) :

$$\Phi_{us} = \begin{cases} \rho_1 \left(h_1 V_I^{x,1}(f_{us}) V_I^{y,1}(f_{us}) \right) + \rho_2 \left(h_2 V_I^{x,2}(f_{us}) V_I^{y,2}(f_{us}) \right), & \text{si } C_{v_{i-1,j}} = 1 \\ \rho_2 \left(h_1 V_I^{x,1}(f_{us}) V_I^{y,1}(f_{us}) \right) + \rho_1 \left(h_2 V_I^{x,2}(f_{us}) V_I^{y,2}(f_{us}) \right), & \text{autrement} \end{cases}$$

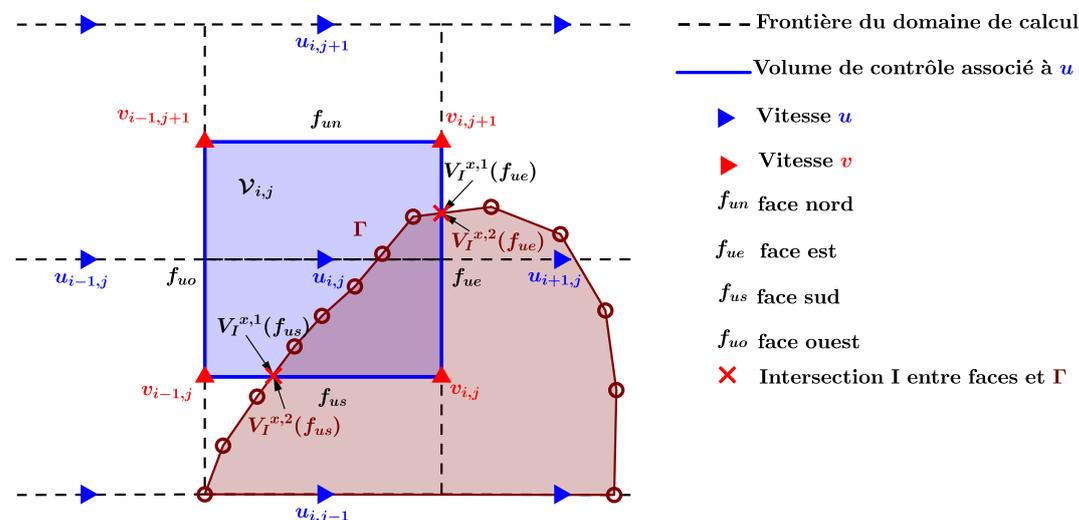


FIGURE 5.3 – Volume de contrôle composite associé à la composante u de vitesse. Les faces est f_{ue} et ouest f_{uo} sont coupées par une surface front-tracking Γ ; les flux sont calculés par morceau sur une face intersectée. Les faces nord f_{un} et sud f_{us} ne sont pas coupées; les flux calculés sur ces faces sont inchangés par rapport au modèle 1-fluide

Avec $C_{v_{i-1,j}}$ la couleur binaire présentée dans le chapitre précédent, associée à la composante verticale de vitesse v et valant 1 dans le fluide 1 et 0 dans le fluide 2. Les termes $V_I^{x,1}(f_{us})$ et $V_I^{y,1}(f_{us})$ (respectivement $V_I^{x,2}(f_{us})$ et $V_I^{y,2}(f_{us})$) sont les vitesses interpolées au point d'intersection I entre la face f_{us} et Γ dans le fluide 1 (respectivement le fluide 2). Les distances entre le point d'intersection I et les deux sommets $v_{i-1,j}$ et $v_{i,j}$ de la face f_{us} sont h_1 et h_2 tel que $h_1 + h_2 = h$. Du fait de la continuité des vitesses entre les phases 1 et 2 tels que $V_I^{x,1} = V_I^{x,2}$ et $V_I^{y,1} = V_I^{y,2}$, le flux peut être réécrit comme suit :

$$\begin{cases} V_I^{x,1}(f_{us})V_I^{y,1}(f_{us}) (\rho_1 h_1 + \rho_2 h_2), & \text{si } C_{v_{i-1,j}} = 1 \\ V_I^{x,1}(f_{us})V_I^{y,1}(f_{us}) (\rho_2 h_1 + \rho_1 h_2), & \text{autrement} \end{cases}$$

— Si f_{us} n'est pas intersectée mais que f_{uo} la face ouest du volume de contrôle

associé à $v_{i,j}$ est coupée :

$$\Phi_{us} = \begin{cases} \rho_1 h \frac{v_{i,j}^n + v_{i-1,j}^n}{2} V_I^{x,1}(f_{vo}), & \text{si } C_{v_{i-1,j}} = 1 \\ \rho_2 h \frac{v_{i,j}^n + v_{i-1,j}^n}{2} V_I^{x,1}(f_{vo}), & \text{autrement} \end{cases}$$

avec $V_I^{x,1}(f_{vo})$ la vitesse horizontale interpolée au point d'intersection I entre la face f_{vo} et Γ . S'il y a plusieurs intersections sur f_{vo} , l'intersection choisie est la plus proche de la face f_{us} .

- Si ni f_{us} , ni f_{vo} ne sont intersectés (figure 5.4), alors nous retombons sur un flux totalement monophasique (les faces f_{us} et f_{vo} sont soit dans le fluide 1 soit dans le fluide 2 et exprimée de façon implicite comme vu dans le chapitre précédent :

$$\Phi_{us} = \begin{cases} -\rho_1 h \frac{v_{i,j}^n + v_{i-1,j}^n}{2} \frac{u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1}}{2}, & \text{si } C_{v_{i-1,j}} = 1 \\ -\rho_2 h \frac{v_{i,j}^n + v_{i-1,j}^n}{2} \frac{u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1}}{2}, & \text{autrement} \end{cases}$$

Flux convectif Φ_{ue} de la face est f_{ue} de $\mathcal{V}_{i,j}$

- Si f_{ue} est coupée par une interface Γ comme dans la figure 5.3 :

$$\begin{cases} V_I^{x,1}(f_{ue}) V_I^{y,1}(f_{ue}) (\rho_1 h_1 + \rho_2 h_2), & \text{si } C_{v_{i,j}} = 1 \\ V_I^{x,1}(f_{ue}) V_I^{y,1}(f_{ue}) (\rho_2 h_1 + \rho_1 h_2), & \text{autrement} \end{cases}$$

Le terme $V_I^{x,1}(f_{ue})$ est la vitesse interpolée au point d'intersection I entre la face f_{ue} et Γ . Les distances entre le point d'intersection I et les deux sommets $v_{i,j+1}$ et $v_{i,j}$ de la face f_{ue} sont h_1 et h_2 tel que $h_1 + h_2 = h$.

- Si f_{ue} n'est pas intersectée mais que f_{vn} la face nord du volume de contrôle associé à $v_{i,j}$ est coupée par Γ (Fig. 5.4)

$$\Phi_{ue} = \begin{cases} -\rho_1 h V_I^{x,1}(f_{vn}) V_I^{x,1}(f_{vn}), & \text{si } C_{v_{i,j}} = 1 \\ -\rho_2 h V_I^{x,2}(f_{vn}) V_I^{x,1}(f_{vn}), & \text{autrement} \end{cases}$$

avec $V_I^{x,1}(f_{vn})$ la vitesse horizontale interpolée au point d'intersection I entre la face nord f_{vn} et Γ . S'il y a plusieurs intersections sur f_{vn} , l'intersection choisie est la plus proche de la face f_{ue} .

- Si ni f_{ue} , ni f_{vn} ne sont intersectées, alors le flux calculé est monophasique (les faces f_{ue} et f_{vn} sont soit dans le fluide 1 soit dans le fluide 2) et exprimé

de façon implicite :

$$\Phi_{ue} = \begin{cases} \rho_1 h \frac{u_{i,j}^n + u_{i+1,j}^n}{2} \frac{u_{i,j}^{n+1} + u_{i+1,j}^{n+1}}{2}, & \text{si } C_{v_{i,j}} = 1 \\ \rho_2 h \frac{u_{i,j}^n + u_{i+1,j}^n}{2} \frac{u_{i,j}^{n+1} + u_{i+1,j}^{n+1}}{2}, & \text{autrement} \end{cases}$$

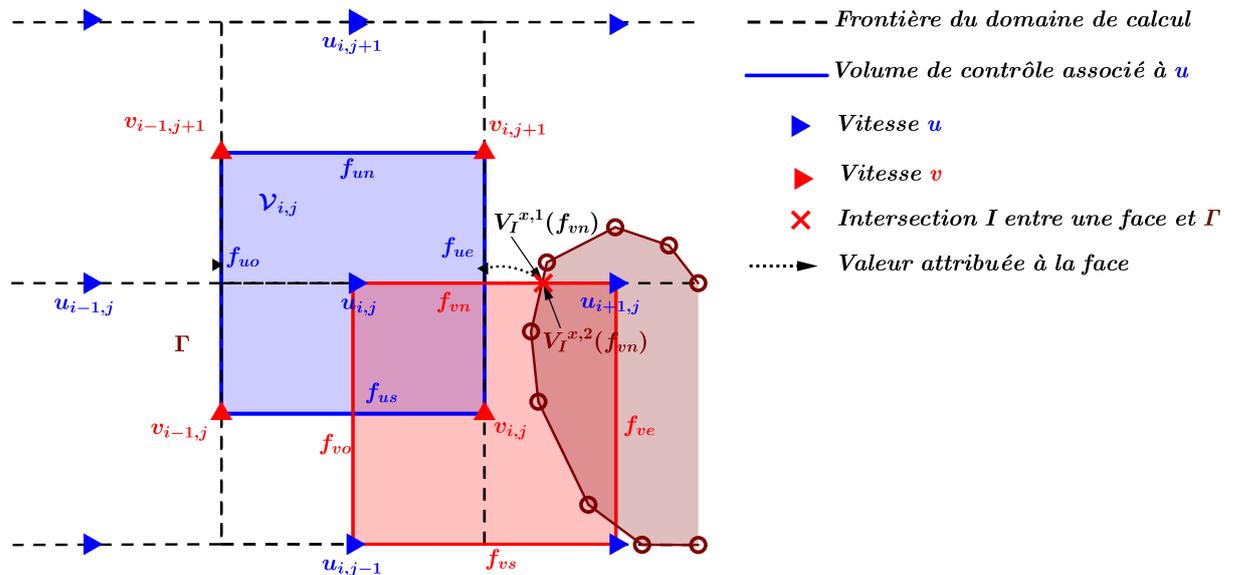


FIGURE 5.4 – Volume de contrôle composite associé à la composante $u_{i,j}$ de vitesse. Aucune des faces du volume de contrôle associé à u n'est coupée par une interface. La face nord f_{vn} de la composante $v_{i,j}$ étant coupée, la vitesse et les gradients horizontaux localisés sur l'intersection entre Γ et f_{vn} les plus proches de f_{ue} lui sont attribués.

Terme visqueux

Le terme visqueux

$$2\mu_1 \int_{\Sigma_1} \bar{\bar{D}}_1 \cdot \bar{n} d\Sigma_1 + 2\mu_2 \int_{\Sigma_2} \bar{\bar{D}}_2 \cdot \bar{n} d\Sigma_2$$

est intégré sur le volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$ associé au nœud de vitesse $u_{i,j}$ comme suit :

Flux visqueux Φ_{us} de la face sud f_{us} de $\mathcal{V}_{i,j}$

- Si f_{us} est coupée par une interface Γ (Fig. 5.3),

$$\Phi_{us} = \begin{cases} -\mu_1 h_1 \left(\partial_y V_I^{x,1}(f_{us}) + \partial_x V_I^{y,1}(f_{us}) \right) - \mu_2 h_2 \left(\partial_y V_I^{x,2}(f_{us}) + \partial_x V_I^{y,2}(f_{us}) \right), & \text{si } C_{v_{i-1,j}} = 1 \\ -\mu_2 h_1 \left(\partial_y V_I^{x,2}(f_{us}) + \partial_x V_I^{y,2}(f_{us}) \right) - \mu_1 h_2 \left(\partial_y V_I^{x,1}(f_{us}) + \partial_x V_I^{y,1}(f_{us}) \right), & \text{autrement} \end{cases}$$

Les termes $\partial_y V_I^{x,1}(f_{us})$ et $\partial_x V_I^{y,1}(f_{us})$ (respectivement $\partial_y V_I^{x,2}(f_{us})$ et $\partial_x V_I^{y,2}(f_{us})$) sont les gradients de vitesse dans les directions verticales et horizontales, interpolées à partir des marqueurs de la surface front-tracking au point d'intersection I entre la face f_{us} et Γ dans le fluide 1 (respectivement fluide 2). Les distances entre le point d'intersection I et les deux sommets $v_{i-1,j}$ et $v_{i,j}$ de la face f_{us} sont h_1 et h_2 tel que $h_1 + h_2 = h$.

- Si f_{us} n'est pas intersectée alors que f_{vo} la face ouest du volume de contrôle associé à $v_{i,j}$ est coupée :

$$\Phi_{us} = \begin{cases} -\mu_1 h (\partial_x V_I^{y,1}(f_{vo}) + \partial_y V_I^{x,1}(f_{vo})), & \text{si } C_{v_{i-1,j}} = 1 \\ -\mu_2 h (\partial_x V_I^{y,2}(f_{vo}) + \partial_y V_I^{x,2}(f_{vo})), & \text{autrement} \end{cases}$$

avec $\partial_y V_I^{x,1}(f_{vo})$ et $\partial_x V_I^{y,2}(f_{vo})$, les gradients des vitesses horizontales et verticales interpolés au point d'intersection I entre la face f_{vo} et Γ dans les fluides 1 et 2. S'il y a plusieurs intersections sur f_{vo} , l'intersection choisie est la plus proche de la face f_{us} .

- Si ni f_{us} , ni f_{vo} ne sont intersectées (figure 5.4), alors nous retombons sur un flux visqueux monophasique (les faces f_{us} et f_{vo} sont soit dans le fluide 1 soit dans le fluide 2) et exprimée de façon implicite :

$$\Phi_{us} = \begin{cases} +\mu_1 h \frac{v_{i,j}^{n+1} - v_{i-1,j}^{n+1}}{h} + \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j-1}^{n+1}}{h}, & \text{si } C_{v_{i-1,j}} = 1 \\ +\mu_2 h \frac{v_{i,j}^{n+1} - v_{i-1,j}^{n+1}}{h} + \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j-1}^{n+1}}{h}, & \text{autrement} \end{cases}$$

Flux visqueux Φ_{ue} de la face est f_{ue} de $\mathcal{V}_{i,j}$

- Si f_{ue} est coupée par une interface Γ (Fig. 5.3) :

$$\Phi_{ue} = \begin{cases} 2\mu_1 h_1 \left(\partial_x V_I^{x,1}(f_{ue}) \right) + 2\mu_2 h_2 \left(\partial_x V_I^{x,2}(f_{ue}) \right), & \text{si } C_{v_{i,j}} = 1 \\ 2\mu_2 h_1 \left(\partial_x V_I^{x,2}(f_{ue}) \right) + 2\mu_1 h_2 \left(\partial_x V_I^{x,1}(f_{ue}) \right), & \text{autrement} \end{cases}$$

Avec $C_{v_{i-1,j}}$ la couleur binaire. Le terme $\partial_x V_I^{x,1}(f_{ue})$ (respectivement $\partial_x V_I^{x,2}(f_{ue})$) est le gradient de vitesse interpolée au point d'intersection I entre la face f_{ue} et Γ dans le fluide 1 (respectivement fluide 2). Les distances entre le point d'intersection I et les deux sommets $v_{i,j+1}$ et $v_{i,j}$ de la face f_{ue} sont h_1 et h_2 tel que $h_1 + h_2 = h$.

- Si f_{ue} n'est pas intersectée alors que f_{vn} la face nord du volume de contrôle associé à $v_{i,j}$ est coupée par Γ (Fig. 5.4)

$$\Phi_{ue} = \begin{cases} 2\mu_1 h \partial_x V_I^{x,1}(f_{vn}), & \text{si } C_{v_{i,j}} = 1 \\ 2\mu_2 h \partial_x V_I^{x,2}(f_{vn}), & \text{autrement} \end{cases}$$

avec $\partial_x V_I^{x,1}(f_{vn})$ et $\partial_x V_I^{x,2}(f_{vn})$ les gradients de vitesse horizontaux interpolés au point d'intersection I entre la face nord f_{vn} et Γ dans les fluides 1 et 2. S'il y a plusieurs intersections sur f_{vn} , l'intersection choisie est la plus proche de la face f_{ue} .

- Si ni f_{ue} , ni f_{vo} ne sont intersectés, alors le flux calculé est monophasique et implicite comme vu dans le chapitre précédent :

$$\Phi_{ue} = \begin{cases} -2\mu_1 h \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i+1,j}^{n+1}}{h}, & \text{si } C_{v_{i,j}} = 1 \\ -2\mu_2 h \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i+1,j}^{n+1}}{h}, & \text{autrement} \end{cases}$$

Gradient de pression

Tout comme les termes convectifs et visqueux, la pression

$$\int_{\Sigma_1} -p_1 \bar{n} d\Sigma_1 + \int_{\Sigma_2} -p_2 \bar{n} d\Sigma_2 \quad (5.9)$$

est intégrée sur le volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$ associé au différents nœud de vitesse $u_{i,j}$ et $v_{i,j}$ en utilisant les pressions calculées à partir de la surface front-tracking. Pour la composante $u_{i,j}$ on écrit :

Flux Φ_{ue} de la face est f_{ue} de $\mathcal{V}_{i,j}$

- Si f_{ue} est coupée par une interface Γ (Fig. 5.3),

$$\Phi_{ue} = \begin{cases} - \left(h_1 p_I^{x,1}(f_{ue}) + h_2 p_I^{x,2}(f_{ue}) \right), & \text{si } C_{v_{i,j}} = 1 \\ - \left(h_1 p_I^{x,2}(f_{ue}) + h_2 p_I^{x,1}(f_{ue}) \right), & \text{autrement} \end{cases}$$

Le terme $p_I^{x,1}(f_{ue})$ (respectivement $p_I^{x,2}(f_{ue})$) est la pression interpolée au point d'intersection I entre la face f_{ue} et Γ dans le fluide 1 (respectivement

fluide 2). Les distances entre le point d'intersection I et les deux sommets $v_{i,j+1}$ et $v_{i,j}$ de la face f_{ue} sont h_1 et h_2 tel que $h_1 + h_2 = h$.

- Si f_{ue} n'est pas intersectée alors que f_{vn} la face nord du volume de contrôle associé à $v_{i,j}$ est coupée par Γ (Fig. 5.4)

$$\Phi_{ue} = \begin{cases} -hp_I^1(f_{vn}), & \text{si } C_{v_{i,j}} = 1 \\ -hp_I^2(f_{vn}), & \text{autrement} \end{cases}$$

Avec $p_I^1(f_{vn})$ et $p_I^2(f_{vn})$ les pressions interpolées au point d'intersection I entre la face nord f_{vn} et Γ dans les fluides 1 et 2. S'il y a plusieurs intersections sur f_{vn} , l'intersection choisie est la plus proche de la face f_{ue} .

- Si aucune des faces f_{ue} et f_{vo} n'est intersectée, alors le flux calculé est monophasique et implicite :

$$\Phi_{ue} = \begin{cases} hp_{i,j}^n, & \text{si } C_{v_{i,j}} = 1 \\ hp_{i,j}^n, & \text{autrement} \end{cases}$$

Flux Φ_{uo} de la face nord f_{uo} de $\mathcal{V}_{i,j}$

- Si f_{uo} est coupée par une interface Γ ,

$$\Phi_{uo} = \begin{cases} \left(h_1 p_I^1(f_{uo}) + h_2 p_I^1(f_{uo}) \right), & \text{si } C_{v_{i-1,j}} = 1 \\ \left(h_1 p_I^2(f_{uo}) + h_2 p_I^2(f_{uo}) \right), & \text{autrement} \end{cases}$$

Le terme $p_I^1(f_{uo})$ (respectivement $p_I^2(f_{uo})$) la pression interpolée au point d'intersection I entre la face f_{uo} et Γ dans le fluide 1 (respectivement fluide 2). Les distances entre le point d'intersection I et les deux sommets $v_{i-1,j+1}$ et $v_{i-1,j}$ de la face f_{uo} sont h_1 et h_2 tel que $h_1 + h_2 = h$.

- Si f_{uo} n'est pas intersectée alors que f_{vn} la face nord du volume de contrôle associé à $v_{i-1,j}$ est coupée par Γ

$$\Phi_{uo} = \begin{cases} hp_I^{x,1}(f_{vn}), & \text{si } C_{v_{i-1,j}} = 1 \\ hp_I^{x,2}(f_{vn}), & \text{autrement} \end{cases}$$

Avec $p_I^{x,1}(f_{vn})$ et $p_I^{x,2}(f_{vn})$ les pressions interpolées à partir des pressions connues sur les marqueurs de la surface front-tracking au point d'intersection I entre la face nord f_{vn} et Γ dans les fluides 1 et 2. S'il y a plusieurs intersections sur f_{vn} , l'intersection choisie est la plus proche de la face f_{uo} .

- Si ni f_{uo} , ni f_{vo} ne sont intersectées, alors le flux calculé est monophasique (les faces f_{uo} et f_{vo} sont soit dans le fluide 1 soit dans le fluide 2) et implicite comme vu dans le chapitre précédent :

$$\Phi_{uo} = \begin{cases} hp_{i-1,j}^{n+1}, & \text{si } C_{v_{i-1,j}} = 1 \\ hp_{i-1,j}^{n+1}, & \text{autrement} \end{cases}$$

Pour le gradient de pression seules les faces normales à la direction de vitesse considérée à savoir les faces f_{uo} et f_{ue} sont traitées.

Terme capillaire

Pour la discrétisation du terme capillaire, nous avons choisi d'intégrer directement le terme $\int_{\Sigma} \sigma \kappa \bar{n} d\Sigma$ sur la portion d'interface Γ intersectant un volume de contrôle $\mathcal{V}_{i,j}$.

$$\int_{\Gamma} \sigma \kappa \bar{n} d\Gamma = \sigma \sum_m \kappa_m \bar{n}_m \Delta l_m \quad (5.10)$$

5.2 Test de validation

Nous présentons dans cette partie des cas d'écoulements diphasiques dans le but de valider l'implémentation numérique et les performances de notre algorithme de résolution d'écoulement diphasique avec le modèle à deux fluides proposé dans ce chapitre. Les écoulements de Couette et Poiseuille ont été considérés dans un premier temps afin de valider l'implémentation des termes visqueux. Comme dans le chapitre précédent, le cas de la goutte statique est étudié afin de vérifier la bonne prise en compte de la tension de surface dans le modèle.

5.2.1 Écoulement de Couette diphasique instationnaire

Nous proposons de valider notre algorithme de résolution d'écoulement diphasique et plus particulièrement le terme visqueux avec l'écoulement de Couette diphasique. Deux fluides de viscosité μ_1 et μ_2 et de masse volumique ρ_1 et ρ_2 sont compris entre deux plaques planes, parallèles infinies distantes de H (voir Fig. 5.5). L'interface entre les deux fluides est positionnée à une distance $y = d$ de la plaque inférieure. L'écoulement est générée par la mise en mouvement de la plaque supérieure avec une vitesse V_0 . L'écoulement est supposé incompressible, laminaire et suivant la direction horizontale uniquement ($v = 0$). En régime stationnaire, la solution analytique de cet écoulement est donnée par :

$$u = \begin{cases} V_0 \left[y \frac{2\mu_2}{\mu_1(H-d) + \mu_2 d} \right], & \text{si } y \leq d \\ V_0 \left[y \frac{2\mu_1 y + 2d(\mu_2 - \mu_1)}{\mu_1(H-d) + \mu_2 d} \right], & \text{si } y > d \end{cases} \quad (5.11)$$

En régime instationnaire, on obtient une solution analytique plus complexe dont la démonstration est donnée en annexe A.

Pour cet écoulement de Couette, deux configurations ont été étudiées, le cas où le

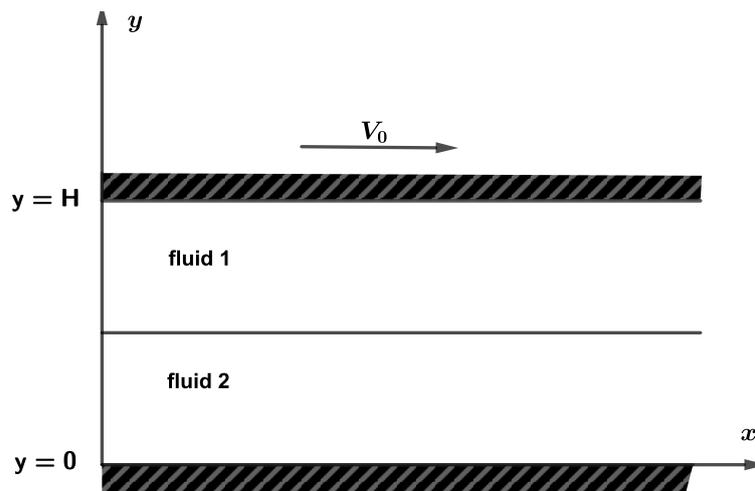


FIGURE 5.5 – Configuration initiale de l'écoulement de Couette diphasique

rapport de viscosité μ_2/μ_1 vaut 0,1 et second plus raide avec $\mu_2/\mu_1 = 0,001$. Les paramètres physiques imposés pour la simulation sont donnés dans le tableau 5.1. Des conditions aux limites périodiques sont imposées sur les frontières verticales

	ρ_1	ρ_2	μ_1	μ_2	ΔP	σ	L	H
Cas 1	1	1	10^{-5}	10^{-4}	0,02	0	0,02	0,02
Cas 2	1	1	10^{-5}	10^{-2}	0,02	0	0,02	0,02

TABLE 5.1 – Paramètres physiques utilisés pour simuler les deux configurations pour un écoulement de Couette instationnaire

et des conditions d'adhérence (Dirichlet) sur les parois horizontales.

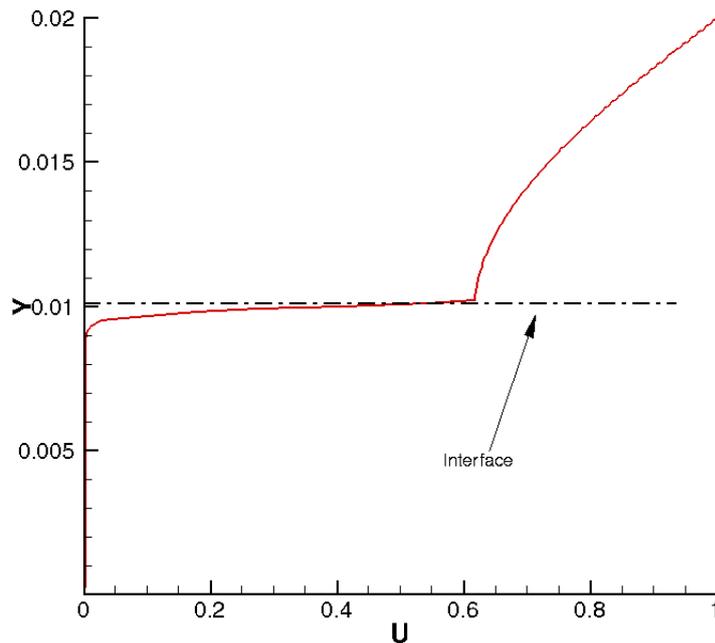


FIGURE 5.6 – Variation verticale de la composante horizontale de vitesse u pour un écoulement de Couette instationnaire à $t = 5.10^{-3} s$, $\mu_2/\mu_1 = 0.001$.

La figure 5.6 illustre la variation verticale de la composante horizontale de la vitesse u au temps $t = 5.10^{-3} s$, pour un rapport de viscosité $\mu_2/\mu_1 = 0.001$. Pour ce temps de simulation, le profil de vitesse n'est pas encore établi.

Nous avons considéré dans cette étude trois modèles distincts. La méthode couplée FTR-JUMP-VBC couplé au modèle à 2-fluides présenté dans ce chapitre a été comparé à une méthode VOF-PLIC/CSF dans un formalisme monofluide avec la viscosité de mélange du modèle obtenue soit par une moyenne arithmétique :

$$\mu = C\mu_2 + (1 - C)\mu_1$$

soit par une moyenne harmonique :

$$\mu = \frac{\mu_1\mu_2}{C\mu_2 + (1 - C)\mu_1}$$

De manière générale, la moyenne arithmétique est choisie pour le calcul de la viscosité de mélange du modèle à 1-fluide, cependant, pour la configuration de couette diphasique, le choix de la moyenne harmonique permet d'obtenir une solution exacte pour l'écoulement de Couette stationnaire. Lorsque l'écoulement de

Couette est instationnaire, la moyenne harmonique est logiquement plus précise que la moyenne arithmétique. Il est donc intéressant de comparer notre méthode au meilleur résultat possible obtenu avec une méthode VOF-PLIC via une moyenne harmonique.

Pour étudier la pertinence des modèles étudiés, nous avons défini l'erreur $\|E_u\|$ commise sur la vitesse horizontale u entre la solution numérique et la solution analytique en norme $\|\cdot\|_2$ et $\|\cdot\|_\infty$.

$$\|E_u\|_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1\dots N_y} \|u_{\text{ref}}(i) - u_{\text{calc}}(i)\|_2}{\sum_{i=1\dots N_y} \|u_{\text{ref}}(i)\|_2}} \quad (5.12a)$$

$$\|E_u\|_\infty = \frac{\max |u_{\text{ref}}(i) - u_{\text{calc}}(i)|}{\max |u_{\text{ref}}(i)|} \quad (5.12b)$$

où N_y représente le nombre de cellules de la grille eulérienne dans la direction verticale, $u_{\text{ref}}(i)$ la vitesse analytique calculée au nœud i de la grille eulérienne et $u_{\text{calc}}(i)$ la solution obtenue en i . Les tableaux ?? et ?? donnent les erreurs (5.12a) et (5.12b) pour la méthode FTR-JUMP-VBC/Modèle à 2-fluides, et la méthode VOF-PLIC/CSF avec une viscosité obtenue soit avec une moyenne arithmétique, soit avec une moyenne harmonique, pour une solution instationnaire à $t = 5.10^{-3} s$ (voir Fig. 5.6).

FTR-JUMP-VBC/Modèle 2-fluide				
h	$\ E_u\ _2$	Ordre	$\ E_u\ _\infty$	Ordre
1/9	8,46E-03		1,17E-02	
1/17	2,40E-03	2,0	3,29E-03	2,0
1/33	6,44E-04	2,0	8,72E-04	2,0
1/65	1,67E-04	2,0	2,25E-04	2,0
1/129	4,27E-05	2,0	5,76E-05	2,0
1/257	1,09E-05	2,0	1,49E-05	2,0
VOF-PLIC/CSF μ arithmétique				
h	$\ E_u\ _2$	Ordre	$\ E_u\ _\infty$	Ordre
1/9	5,44E-02		9,14E-02	
1/17	3,01E-02	0,9	5,16E-02	0,9
1/33	1,58E-02	1,0	2,73E-02	1,0
1/65	8,14E-03	1,0	1,40E-02	1,0
1/129	4,12E-03	1,0	7,12E-03	1,0
1/257	2,08E-03	1,0	3,58E-03	1,0
VOF-PLIC/CSF μ harmonique				
h	$\ E_u\ _2$	Ordre	$\ E_u\ _\infty$	Ordre
1/9	8,48E-03		1,17E-02	
1/17	2,40E-03	2,0	3,31E-03	2,0
1/33	6,45E-04	2,0	8,75E-04	2,0
1/65	1,67E-04	2,0	2,25E-04	2,0
1/129	4,27E-05	2,0	5,76E-05	2,0
1/257	1,09E-05	2,0	1,49E-05	2,0

TABLE 5.2 – Évolution des normes d’erreurs en fonction du maillage utilisé pour différents modèles dans le cas d’un écoulement de Couette diphasique instationnaire à $t = 5.10^{-3} s$: l’approche FTR-JUMP-VBC/Modèle à 2-fluides, la méthode VOF-PLIC/CSF(modèle à 1-fluide) avec la viscosité μ calculée avec une moyenne arithmétique et la méthode VOF-PLIC/CSF(modèle à 1-fluide) avec la viscosité μ calculée avec une moyenne harmonique ont été utilisées. (a) $\mu_2/\mu_1 = 0,1$ (b) $\mu_2/\mu_1 = 0,001$

FTR-JUMP-VBC/Modèle 2-fluide				
h	$\ E_u\ _2$	Ordre	$\ E_u\ _\infty$	Ordre
1/9	6,96E-03		1,24E-02	
1/17	2,99E-02	-2,3	8,83E-02	-3,1
1/33	2,24E-02	0,4	9,13E-02	-0,1
1/65	4,95E-03	2,2	2,00E-02	2,2
1/129	1,18E-03	2,1	5,22E-03	2,0
1/257	2,93E-04	2,0	1,30E-03	2,0
VOF-PLIC/CSF μ arithmétique				
h	$\ E_u\ _2$	Ordre	$\ E_u\ _\infty$	Ordre
1/9	4,05E-01		8,93E-01	
1/17	2,36E-01	0,8	6,96E-01	0,4
1/33	1,11E-01	1,1	4,18E-01	0,8
1/65	5,17E-02	1,1	2,23E-01	0,9
1/129	2,50E-02	1,1	1,14E-01	1,0
1/257	1,23E-02	1,0	5,77E-02	1,0
VOF-PLIC/CSF μ harmonique				
h	$\ E_u\ _2$	Ordre	$\ E_u\ _\infty$	Ordre
1/9	7,27E-03		1,33E-02	
1/17	2,97E-02	-2,2	8,78E-02	-3,0
1/33	2,23E-02	0,4	9,13E-02	-0,1
1/65	4,95E-03	2,2	2,00E-02	2,2
1/129	1,18E-03	2,1	5,22E-03	2,0
1/257	2,93E-04	2,0	1,30E-03	2,0

TABLE 5.3 – Évolution des normes d’erreurs en fonction du maillage utilisé pour différents modèles dans le cas d’un écoulement de Couette diphasique instationnaire à $t = 5.10^{-3} s$: l’approche FTR-JUMP-VBC/Modèle à 2-fluides, la méthode VOF-PLIC/CSF(modèle à 1-fluide) avec la viscosité μ calculée avec une moyenne arithmétique et la méthode VOF-PLIC/CSF(modèle à 1-fluide) avec la viscosité μ calculée avec une moyenne harmonique ont été utilisées, $\mu_2/\mu_1 = 0,001$

Quels que soient les rapports de viscosité considérés, la méthode VOF-PLIC/CSF avec μ arithmétique est toujours moins précise et converge avec un ordre ≈ 1 . Les méthodes FTR-JUMP-VBC/Modèle à 2-fluides et VOF-PLIC/CSF avec μ harmonique convergent toutes deux à l’ordre 2 avec des niveaux très proches voire similaires pour le plus faible rapport de viscosité. La discrétisation associée au modèle à 2-fluides permet d’obtenir une solution équivalente à celle donnée par la méthode la plus précise VOF-PLIC/CSF avec μ harmonique pour l’écoulement de Couette diphasique. Pour ce cas, il n’y pas d’influence de la méthode de suivi d’interface FTR-JUMP-VBC sur la solution car l’interface est transportée par un

champ de vitesse constant, l'interpolation est donc exacte.

5.2.2 Écoulement de Poiseuille diphasique stationnaire

Nous présentons dans cette partie l'écoulement de Poiseuille diphasique se caractérisant par un écoulement stratifié de deux fluides non miscibles compris entre deux plans parallèles distants de H . Ici, on génère le mouvement des fluides en imposant un gradient de pression entre l'entrée et la sortie du canal. Ce cas test est particulièrement intéressant car il permet de valider l'implémentation du terme visqueux. Pour un temps suffisamment long, l'écoulement est considéré comme stationnaire. En négligeant les effets de gravité et la tension de surface, on peut comparer la solution numérique stationnaire à la solution analytique définie comme suit :

$$u = \begin{cases} \frac{\Delta P}{2\mu_1} \left(y^2 + y \frac{\mu_1(d^2 - H^2) - \mu_2 d^2}{\mu_2 d - \mu_1(d - H)} \right), & \text{si } y \leq d \\ \frac{\Delta P}{2\mu_1} \left(y^2 + y \frac{(\mu_1(d^2 - H^2) - \mu_2 d^2) + H(d^2 - Hd)(\mu_2 - \mu_1)}{\mu_2 d - \mu_1(d - H)} \right), & \text{si } y > d \end{cases} \quad (5.13)$$

avec H la distance entre les deux plans horizontaux, d la position de l'interface entre les deux fluides et $\Delta P = p_{out} - p_{in}$ la différence entre les pressions à la sortie et à l'entrée du canal. L'obtention de cette solution analytique est présentée en annexe B. En terme de conditions limites, des conditions de Dirichlet sont imposées sur les parois horizontales et des conditions de Neumann homogène (écoulement établi) sur la vitesse à l'entrée et à la sortie du canal. Les paramètres physiques

ρ_1	ρ_2	μ_1	μ_2	ΔP	σ	L	H
1	1	10^{-4}	10^{-5}	0,02	0	0,02	0,02

TABLE 5.4 – Paramètres physiques utilisés pour simuler le cas de Poiseuille diphasique

utilisés pour ce cas test sont présentés dans le tableau 5.4.

Pour cet écoulement nous avons étudié les mêmes modèles que dans le cas de Couette diphasique à savoir les FTR-JUMP-VBC/Modèle à 2-fluides, VOF-PLIC/CSF avec μ arithmétique ou harmonique. Les erreurs entre les vitesses analytiques et numériques obtenues avec les trois méthodes sont présentées dans le tableau 5.5. Comme dans le cas de Couette, la méthode VOF-PLIC/CSF avec μ arithmétique est moins précise avec un ordre de convergence de 1. Les méthodes FTR-JUMP-VBC/Modèle à 2-fluides et VOF-PLIC/CSF avec μ harmonique, convergent toutes deux à l'ordre 2 avec des niveaux d'erreur identiques.

FTR-JUMP-VBC/Modèle 2-fluide				
h	$\ E_u\ _2$	Ordre	$\ E_u\ _\infty$	Ordre
1/9	1,95E-02	-	2,61E-02	-
1/17	5,49E-03	2,0	7,63E-03	1,9
1/33	1,46E-03	2,0	2,09E-03	2,0
1/65	3,76E-04	2,0	5,46E-04	2,0
1/129	9,56E-05	2,0	1,40E-04	2,0
1/257	2,41E-05	2,0	3,53E-05	2,0
VOF-PLIC/CSF avec μ Moyenne arithmétique				
h	$\ E_u\ _2$	Ordre	$\ E_u\ _\infty$	Ordre
1/9	0,10565101	-	0,141923436	-
1/17	5,93E-02	0,9	8,25E-02	0,9
1/33	3,14E-02	1,0	4,49E-02	0,9
1/65	1,62E-02	1,0	2,35E-02	1,0
1/129	8,20E-03	1,0	1,20E-02	1,0
1/257	4,13E-03	1,0	6,06E-03	1,0
VOF-PLIC/CSF avec μ Moyenne Harmonique				
h	$\ E_u\ _2$	Ordre	$\ E_u\ _\infty$	Ordre
1/9	1,95E-02	-	2,61E-02	-
1/17	5,49E-03	2,0	7,63E-03	1,9
1/33	1,46E-03	2,0	2,09E-03	2,0
1/65	3,76E-04	2,0	5,46E-04	2,0
1/129	9,56E-05	2,0	1,40E-04	2,0
1/257	2,41E-05	2,0	3,53E-05	2,0

TABLE 5.5 – Erreurs en fonction du maillage utilisé pour différents modèles dans le cas d'un écoulement de Poiseuille diphasique : l'approche FTR-JUMP-VBC/Modèle à 2-fluides, la méthode VOF-PLIC/CSF(modèle à 1-fluide) avec la viscosité μ calculée avec une moyenne arithmétique et la méthode VOF-PLIC/CSF (modèle à 1-fluide) avec la viscosité μ calculée avec une moyenne harmonique

5.2.3 Goutte statique (test de Laplace)

Nous proposons d'étudier à nouveau le cas de la goutte statique (voir Sec. 4.3.1) pour tester l'implémentation du terme capillaire ainsi que son équilibre avec le gradient de pression dans le cadre du modèle à 2-fluides présenté dans ce chapitre.

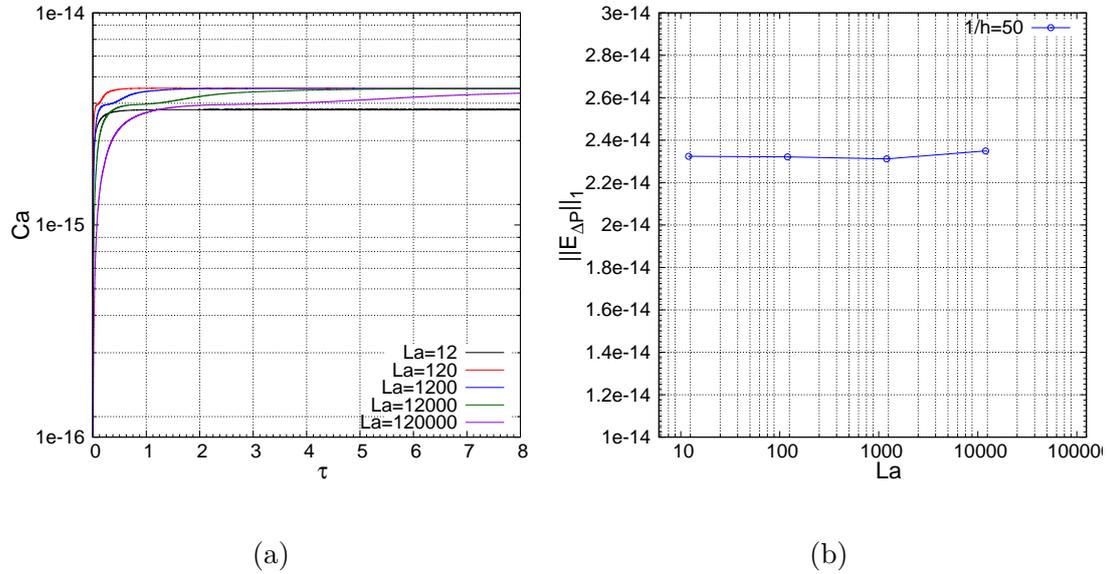


FIGURE 5.7 – (a) Évolution du nombre capillaire en fonction du temps adimensionné τ pour différents nombres de Laplace, méthode FTR-JUMP-VBC/Modèle à 2-fluides. (b) Erreur sur le saut de pression dans la bulle $\|E_{\Delta P_{max}}\|$ en fonction du nombre de Laplace.

De façon similaire à la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC présentée dans le chapitre précédent, la vitesse augmente rapidement jusqu'à $\tau = 1$ pour atteindre un palier aux alentours de $Ca = 4.10^{-15}$. Plus le nombre de Laplace augmente, plus la convergence est atteinte pour des temps longs, supérieurs à $\tau = 8$ lorsque le nombre de Laplace vaut 120000 par exemple. Quels que soient les nombres de Laplace étudiés le nombre capillaire est proche du zéro machine. L'erreur sur le saut de pression 4.28 est illustrée sur la figure 5.7b. Nous pouvons remarquer que cette erreur est indépendante du nombre de Laplace, ce qui constitue un point intéressant de cette méthode. Le profil du champ de pression présenté sur la figure 5.8 est parfaitement discontinu à la traversée de l'interface en accord avec la loi de Laplace (1.8).

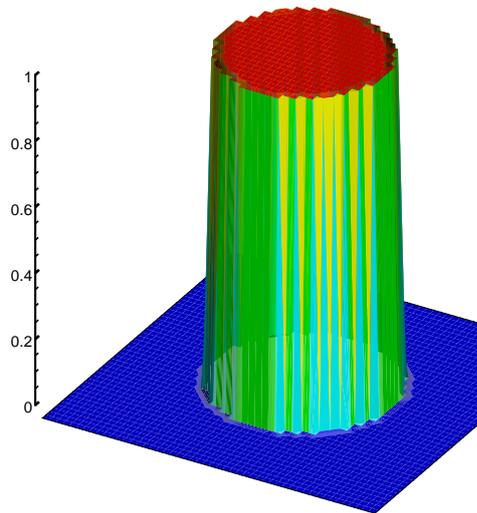


FIGURE 5.8 – Profil du champ de pression de la bulle statique normalisé par σ/R pour $R/h = 62,5$ et $La = 12000$.

5.3 Conclusions

Nous avons présenté dans ce chapitre un modèle discontinu à deux fluides pour les interfaces résolues sur grille eulérienne fixe. Le but de cette formulation était de supprimer les moyennes dans les cellules coupées par l'interface et de tirer amplement profit des apports de la méthode front-tracking mais aussi de l'approche JUMP utilisé pour calculer la vitesse des marqueurs de la surface front-tracking. Les trois cas test présentés dans cette partie, ont permis de valider le terme de tension de surface d'une part avec le cas de Laplace et le terme visqueux d'autre part grâce aux cas de Couette instationnaire et Poiseuille diphasiques. Le modèle à 2-fluides discontinu proposé ici converge à l'ordre 2 pour les cas où le terme visqueux est dominant, à l'image de la méthode VOF-PLIC dont la viscosité est calculée par une moyenne arithmétique. Par ailleurs la discrétisation du terme capillaire basée sur le calcul direct de sa formulation surfacique permet de réduire les courants parasites au niveau de la précision machine.

Conclusions générales et perspectives

L'objectif de ce travail était de poser une première pierre à la construction d'une modélisation unifiée permettant de représenter des écoulements diphasiques à phases séparées possédant une large gamme de variation d'échelles interfaciales. Pour ce faire, nous avons construit un outil numérique permettant d'étudier les grandes échelles de ces écoulements multi-échelles ainsi que les interfaces de taille intermédiaire. La méthodologie développée a consisté dans un premier temps à la construction d'une méthode de suivi d'interface permettant de gérer l'évolution de l'interface avec la plus grande précision possible. Nous avons choisi d'employer la méthode de front-tracking dans la mesure où sa représentation explicite de l'interface entre les phases, même pour des objets sous mailles, constitue un point intéressant et fondamental dans la représentation multi-échelle de notre approche et dans la vision unifiée des écoulements diphasiques multi-échelles.

Une méthode de front-tracking a ainsi été formulée et validée avec succès à l'aide de cas test académiques. Pour la première fois, une analyse complète de la précision et de la convergence de la méthode de front-tracking a été réalisée. Nous avons montré que la méthode PERM pour le calcul de la vitesse des marqueurs de la surface front-tracking associée à l'algorithme de conservation du volume basé sur le déplacement des marqueurs (VBC) permettait d'obtenir une convergence au second ordre de la méthode. De plus, avec l'utilisation de la méthode du cercle circonscrit, les courbures et normales sont calculées avec précision au second ordre. En comparaison aux techniques de suivi d'interface de la littérature, l'approche FTR-PERM-VBC développée dans ce travail est toujours plus précise avec des niveaux d'erreur jusqu'à dix fois plus petits pour le cas de la goutte placée dans un champ tourbillonnaire (serpentin). Ainsi pour un niveau de précision donnée, il est plus intéressant en terme de coût de calcul d'utiliser la méthode FTR-PERM-VBC pour un cas test considéré malgré la complexité d'implémentation de la méthode. L'utilisation de la méthode PERM pour le calcul des vitesses s'est révélée être un choix optimal dans des cas cinématiques possédant une certaine régularité du champ de vitesse à travers l'interface (sans saut de contraintes à l'interface). Cette

régularité n'étant pas systématiquement vérifiée pour des écoulements diphasiques réels où un saut des propriétés physiques à l'interface existe, nous avons développé une méthode originale de calcul des vitesses des marqueurs de la surface front-tracking prenant en compte le saut des propriétés comme la pression, les vitesses ou encore les contraintes visqueuses au niveau de l'interface. Le cas de validation d'Hadamard-Rybczynski d'une goutte/bulle sphérique mobile dans un fluide environnant a permis de montrer que la méthode JUMP n'était pas sensible au saut des propriétés physiques contrairement à la méthode PERM et à toutes les autres méthodes utilisées pour interpoler les vitesses dans les méthodes de front tracking de la littérature.

Le couplage entre la méthode de suivi d'interface et la résolution des équations de Navier-Stokes constitue une étape déterminante dans la simulation des écoulements diphasiques. Nous avons intégré dans ce contexte, la méthode de suivi d'interface de front-tracking FTR-JUMP-VBC, au modèle à 1-fluide implémentée dans le code volumes finis, FUGU, développée au sein du laboratoire MSME, résolvant les équations de Navier-Stokes incompressibles diphasiques sur une grille cartésienne structurée avec une méthode du lagrangien augmenté pour le couplage vitesse/pression. Une part importante de ce travail a été dédiée à l'amélioration du calcul du terme capillaire jouant un rôle prépondérant dans les écoulements diphasiques à phases séparées. Le calcul direct de la contribution capillaire surfacique (DCC), en opposition à la méthode CSF généralement adoptée dans le modèle à 1-fluide, a permis de réduire les niveaux des courants parasites proches du zéro machine dans le cas de la goutte statique même pour des nombres de Laplace très élevés. La méthode couplée FTR-JUMP-VBC/DCC s'est ainsi montrée performante dans des cas de validations diphasiques. Cette version de modèle d'écoulement diphasique pour les grandes échelles des interfaces (de taille supérieure à la cellule de calcul) est maintenant mature pour être utilisée sur des gammes variées d'écoulements diphasiques.

Malgré les aptitudes de la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC à simuler des problèmes diphasiques à phases séparées, la formulation monofluide reste un modèle de mélange local dans lequel l'interface est épaissie d'au moins une cellule eulérienne. De ce fait, les apports de la méthode front-tracking à travers sa représentation explicite de l'interface sont complètement noyés dans une vision moyennée. C'est donc dans ce cadre que nous avons proposé un formalisme à 2-fluides discontinu sur grille cartésienne structurée, à l'instar du modèle DNS utilisant un maillage mobile s'adaptant au mouvement de l'interface. Dans cette approche, les cellules eulériennes coupées par l'interface constituent des volumes de contrôle composites, dynamiques, sur lesquels sont effectuées les discrétisations de type volumes finis. À travers cette représentation, chaque fluide de l'écoulement est résolu de façon distincte et les sauts des propriétés physiques sont pris en compte à tra-

vers les relations de saut. De plus le couplage avec la méthode de suivi d'interface (FTR-JUM-VCP) se fait naturellement par cette approche. Sur plusieurs cas test académiques (Couette, Poiseuille, Laplace) nous avons montré que cette formulation à deux-fluides fournissait plus de précision que certaines méthodes classiques de la littérature.

Les principales perspectives de ces travaux sont l'extension en trois dimensions de la méthode. En ce qui concerne le développement de la méthode de front-tracking en 3D, celui-ci est à présent achevé et des premiers résultats de ces travaux ont été présentés dans [5]. Les principales différences entre les formulations bidimensionnelles et tridimensionnelles de la méthode concernent la gestion du maillage (non plus des éléments linéaires mais des triangles en 3D) et l'estimation des courbures et normales. En effet, en 3D, des procédures de lissage et de remaillage (smoothing et swapping), en plus d'une étape de ré-échantillonnage de l'interface (reseeding), sont nécessaires pour obtenir un maillage de qualité de l'interface. Par ailleurs, le calcul des courbures et de la normales est beaucoup plus subtil et est très sensible à la qualité du maillage interfacial. Le calcul des vitesses des marqueurs par la méthode JUMP ainsi que le couplage avec les équations de Navier-Stokes incompressibles diphasiques (formalisme monofluide) sont également en cours de développement.

Une deuxième piste de travail à court terme concerne l'exploitation du modèle à 1-fluide couplé à la méthode FTR-JUMP-VBC/DCC pour traiter des écoulements réalistes diphasiques, tant que les échelles des structures interfaciales décrites sont de tailles supérieures à celle de la maille de calcul. En particulier, des problèmes à grands nombres de Laplace comme des phénomènes de nettoyage des acier par bullage d'argon ou de chute de goutte de pluie dans l'air pourraient être abordés de façon plus précise qu'avec les approches traditionnelles VOF, Level-Set ou front-Tracking de la littérature grâce aux très faibles courants parasites de la méthode. Le modèle à 2-fluides discontinu sur une grille cartésienne structurée, présenté dans ce chapitre est toujours en cours d'investigation. Les validations de ce modèle ont été réalisées sur des cas test, certes incontournables, mais encore académiques. D'autres cas tests plus discriminants comme le cisaillement d'une nappe liquide 2D, la rupture de barrage ou même l'inversion de phase pourront être étudiés pour valider la précision et la robustesse de ce modèle. Par ailleurs, un des objectifs de nos futurs travaux sera d'ajouter le caractère anisotherme et les transferts de masse et de chaleur avec changement de phase. En effet, l'une des forces du modèle à 2-fluides et de la méthode JUMP est de fournir un formalisme qui prend en compte intrinsèquement et naturellement les sauts à l'interface.

A plus long terme, nous allons coupler le modèle d'écoulement à 2-fluides discontinu à une représentation lagrangienne pour la phase dispersée d'un fluide au sein

d'une phase porteuse. La mise en œuvre multi-échelle sera la suivante : le modèle à 2-fluides discontinu nous permettra de suivre les structures interfaciales même sous-maille. La détermination des vitesses des marqueurs pour les structures sous-mailles des interfaces ne passera plus par l'approche JUMP mais par la résolution d'équations sous-mailles de la dynamique de l'interface ([32, 19]). Cette méthode pourra ainsi décrire la dynamique de ligaments ou de rétraction de films en sous-maille. A partir du moment où un objet front-tracking sous-maille est détaché de la phase continue et qu'il est suffisamment petit (ou possède un Weber en dessous d'une valeur critique par exemple), on transformera cet objet front-tracking en objet sphérique ponctuel dont la dynamique sera suivie par un modèle lagrangien classique de type 1 ou 2-way coupling selon les concentrations et nombre de Stokes des particules dispersées. Bien sûr, le processus inverse de cascade d'échelles pourra être envisagé avec les objets lagrangiens pouvant coalescer entre eux, former des objets front-tracking sous-maille qui, eux-même, pourront redevenir des objets macroscopiques. Ce travail pourra être vu comme une généralisation en front-tracking des premiers travaux initiés par [88, 106].

Annexe A

Solution analytique de l'écoulement de couette diphasique instationnaire

Considérons un écoulement laminaire de fluides visqueux non-miscibles de viscosité μ_1 et μ_2 et de masse volumique ρ_1 et ρ_2 compris entre deux plans parallèles fixes infinies distantes de H (voir Fig. A.1). L'interface entre les deux fluides est positionnée à une distance $y = d$ de la

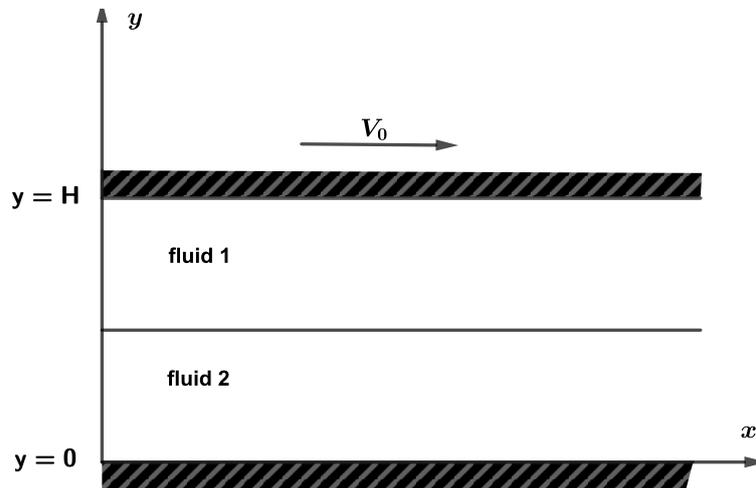


FIGURE A.1 – Configuration initiale de l'écoulement de Couette diphasique

plaque inférieure. L'écoulement est générée par la mise en mouvement de la plaque supérieure avec une vitesse V_0 . Les hypothèses suivantes peuvent être faites pour simplifier le problème :

1. Écoulement instationnaire : $\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} \neq 0$
2. Effets de pesanteur négligeables : $\bar{g} = 0$
3. Écoulement établi selon la direction horizontale \bar{e}_x : $\frac{\partial u}{\partial x} = 0$
4. Écoulement unidirectionnel : $v = 0$
5. Viscosité constante
6. Écoulement laminaire et incompressible : $\bar{\nabla} \cdot \bar{u} = 0$
7. Gradient de pression constant : $\bar{\nabla} p = 0$

Le système d'équations à résoudre dans chaque fluide est le suivant :

$$\begin{cases} \rho_1 \frac{\partial u_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_1 \frac{\partial u_1}{\partial y} \right) \\ \rho_2 \frac{\partial u_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_2 \frac{\partial u_2}{\partial y} \right) \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Avec les conditions initiales, aux limites et relations de saut suivantes :

$$\begin{cases} \mu_1 \frac{\partial u_1}{\partial y} \Big|_{y=d} = \mu_2 \frac{\partial u_2}{\partial y} \Big|_{y=d} \\ u_1 \Big|_{y=d} = u_2 \Big|_{y=d} \\ u_2(y=0) = 0 \\ u_1(y=H) = V_0 \\ u_1(t=0) = 0 \\ u_2(t=0) = 0 \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Pour la résolution de ce système, on utilise la transformée de Laplace. Soit V la transformée de Laplace de la vitesse u et s la variable de Laplace. Nous avons par exemple pour le fluide 1 :

$$\underbrace{\int_0^\infty e^{-st} \frac{\partial u_1}{\partial t} dt}_{(1)} = \underbrace{\int_0^\infty e^{-st} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu_1}{\rho_1} \frac{\partial u_1}{\partial y} \right) dt}_{(2)}$$

Le terme (1) est calculé par intégration par partie :

$$(1) \rightarrow \int_0^\infty e^{-st} \frac{du_1}{dt} dt = [e^{-st}]_0^\infty - \int_0^\infty -se^{-st} u_1 dt$$

Sachant que $\frac{\mu_1}{\rho_1} = \nu_1$, le terme (2) s'écrit :

$$(2) \rightarrow \int_0^\infty e^{-st} \frac{d}{dy} \left(\nu_1 \frac{du_1}{dy} \right) dt = \int_0^\infty \nu_1 \frac{d^2}{dy^2} (e^{-st} u_1) dt$$

Nous avons ainsi :

$$(1) + (2) \rightarrow [e^{-st}]_0^\infty - \int_0^\infty -se^{-st} u_1 dt = \int_0^\infty \nu_1 \frac{d^2}{dy^2} (e^{-st} u_1) dt$$

en posant $V = \int_0^\infty e^{-st}$, nous obtenons le système suivant :

$$\begin{cases} sV_1(y, s) - V_1(y, 0) = \nu_1 \frac{d^2 V_1}{dy^2} \\ sV_2(y, s) - V_2(y, 0) = \nu_1 \frac{d^2 V_2}{dy^2} \end{cases}$$

les conditions aux limites sont réécrites comme suit :

$$\begin{cases} \mu_1 \frac{dV_1}{dy} \Big|_{y=d} = \mu_2 \frac{dV_2}{dy} \Big|_{y=d} \\ V_1 \Big|_{y=d} = V_2 \Big|_{y=d} \\ V_2(y=0) = 0 \\ V_1(y=H) = \frac{V_0}{s} \\ V_1(t=0) = 0 \\ V_2(t=0) = 0 \end{cases}$$

Ces équations sont du second ordre à coefficients constants. Les solutions sont donc de la forme :

$$V_1(y) = A_{11} \cosh\left(\sqrt{\frac{s}{\nu_1}}y\right) + B_{21} \sinh\left(\sqrt{\frac{s}{\nu_1}}y\right) \quad (\text{A.3})$$

$$V_2(y) = A_{12} \cosh\left(\sqrt{\frac{s}{\nu_2}}y\right) + B_{22} \sinh\left(\sqrt{\frac{s}{\nu_2}}y\right) \quad (\text{A.4})$$

Posons $q_1 = \sqrt{\frac{s}{\nu_1}}$ et $q_2 = \sqrt{\frac{s}{\nu_2}}$. En intégrant les conditions limites à la solution générale (Eqs. A.3-A.4), on obtient :

$$V_2(y=0) = 0 \Leftrightarrow A_{11} \cosh(0) + B_{21} \sinh(0) \quad (\text{A.5a})$$

$$V_1(y=H) = \frac{V_0}{s} \Leftrightarrow A_{12} \cosh\left(\sqrt{\frac{s}{\nu_2}}H\right) + B_{22} \sinh\left(\sqrt{\frac{s}{\nu_2}}H\right) = \frac{V_0}{s} \quad (\text{A.5b})$$

$$V_1|_{y=d} = V_2|_{y=d} \Leftrightarrow A_{11} \cosh\left(\sqrt{\frac{s}{\nu_1}}d\right) + B_{21} \sinh\left(\sqrt{\frac{s}{\nu_1}}d\right) - A_{12} \cosh\left(\sqrt{\frac{s}{\nu_2}}d\right) + B_{22} \sinh\left(\sqrt{\frac{s}{\nu_2}}d\right) = 0 \quad (\text{A.5c})$$

$$\begin{aligned} \mu_1 \frac{\partial V_1}{\partial y}|_{y=d} = \mu_2 \frac{\partial V_2}{\partial y}|_{y=d} &\Leftrightarrow -\mu_1 A_{11} q_1 \sinh(q_1 y) - \mu_2 B_{21} q_1 \sinh(q_1 y) + \\ &\mu_1 A_{12} q_2 \sinh(q_2 y) + \mu_2 B_{22} q_2 \sinh(q_2 y) \end{aligned} \quad (\text{A.5d})$$

Il est possible de réécrire les conditions aux limites sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \cosh(q_1 d) & \sinh(q_1 d) & -\cosh(q_2 d) & -\sinh(q_2 d) \\ -\mu_1 q_1 \sinh(q_1 d) & -\mu_1 q_1 \cosh(q_1 d) & \mu_2 q_2 \sinh(q_2 d) & \mu_2 q_2 \cosh(q_2 d) \\ 0 & 0 & \cosh(q_2 H) & \sinh(q_2 H) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} \\ B_{21} \\ A_{12} \\ B_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{V_0}{s} \end{pmatrix}$$

La résolution de ce système donne :

$$A_{11} = 0$$

$$\begin{aligned} B_{21} = & \left[V_0 \mu_2 q_2 (\cosh(q_2 d)^2 - \sinh(q_2 d)^2) \right] / \\ & \left[(\cosh(q_2 H) \sinh(q_1 d) \cosh(q_2 d) \mu_2 q_2 - \cosh(q_2 H) \sinh(q_2 d) \cosh(q_1 d) \mu_1 q_1 - \right. \\ & \left. \sinh(q_2 H) \sinh(q_1 d) \sinh(q_2 d) \mu_2 q_2 + \sinh(q_2 H) \cosh(q_2 d) \cosh(q_1 d) \mu_1 q_1) s \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_{22} = & \left[-V_0 (\sinh(q_1 d) \sinh(q_2 d) \mu_2 q_2 - \cosh(q_2 d) \cosh(q_1 d) \mu_1 q_1) \right] / \\ & \left[(\cosh(q_2 H) \sinh(q_1 d) \cosh(q_2 d) \mu_2 q_2 - \cosh(q_2 H) \sinh(q_2 d) \cosh(q_1 d) \mu_1 q_1 - \right. \\ & \left. \sinh(q_2 H) \sinh(q_1 d) \sinh(q_2 d) \mu_2 q_2 + \sinh(q_2 H) \cosh(q_2 d) \cosh(q_1 d) \mu_1 q_1 - 1) s \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{12} = & -B_{22} \left[V_0 (\sinh(q_1 d) \sinh(q_2 d) \mu_2 q_2 - \sinh(q_2 d) \cosh(q_1 d) \mu_1 q_1) \right] / \\ & \left[V_0 (\sinh(q_1 d) \sinh(q_2 d) \mu_2 q_2 - \cosh(q_2 d) \cosh(q_1 d) \mu_1 q_1) \right] \end{aligned}$$

Sachant qu'il n'est pas possible d'inverser analytiquement la transformée de Laplace, nous utilisons l'algorithme de Stehfest pour retrouver les solutions instationnaires $u_1(t)$ et $u_2(t)$:

$$u(t) = \frac{\ln 2}{t} \sum_{j=1}^N C_j V \left(\frac{j \ln 2}{t} \right) \quad (\text{A.6})$$

où les coefficients C_j sont calculés comme suit :

$$C_j = (-1)^{j+N/2} \sum_{k=\text{Int}\frac{(j+1)}{2}}^{\min(N/2,j)} \frac{k^{N/2}(2k)!}{(N/2 - k)!k!(k-1)!(j-k)!(2k-j)!} \quad (\text{A.7})$$

Les cinq premiers termes de la série suffisent pour obtenir une bonne estimation de la solution u à un instant donné.

Annexe B

Solution analytique de l'écoulement de Poiseuille diphasique

Considérons un écoulement laminaire de fluides visqueux non-miscibles entre deux plans parallèles fixes distants de H dont le mouvement est généré par un gradient de pression

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{p_d - p_g}{L} = \Delta p \quad (\text{B.1})$$

dans la direction \bar{e}_x . L'interface entre les deux fluides est positionnée à une distance $y = d$ de la plaque inférieure. Les hypothèses suivantes sont faites :

1. Écoulement stationnaire : $\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = \bar{0}$
2. Effets de pesanteur négligeables : $\bar{g} = \bar{0}$
3. Écoulement établi selon la direction horizontale \bar{e}_x : $\frac{\partial u}{\partial x} = 0$
4. Écoulement unidirectionnel : $v = 0$
5. Viscosité constante
6. Écoulement laminaire et incompressible : $\bar{\nabla} \cdot \bar{u} = 0$

Le champ de vitesse résultant possède ainsi uniquement une composante dans cette même direction. Le système d'équations de Navier-Stokes s'écrit alors :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\rho_1} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\rho_1} \bar{\nabla} \cdot \left(\mu_1 \frac{\partial u_1}{\partial y} \right) &= 0 \\ -\frac{1}{\rho_2} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\rho_2} \bar{\nabla} \cdot \left(\mu_2 \frac{\partial u_2}{\partial y} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Soit après intégration de (B.2),

$$\begin{aligned} u_1(y) &= \frac{\Delta p}{2\mu_1} y^2 + C_1 y + C'_1 \\ u_2(y) &= \frac{\Delta p}{2\mu_2} y^2 + C_2 y + C'_2 \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

En ajoutant des conditions aux limites d'adhérence aux parois et des relations de saut à l'interface, nous avons :

$$u_1 = 0 \Big|_{y=0} \quad (\text{B.4})$$

$$u_2 = 0 \Big|_{y=H} \quad (\text{B.5})$$

$$u_1 = u_2 \Big|_{y=d} \quad (\text{B.6})$$

$$\mu_1 \frac{\partial u_1}{\partial y} = \mu_2 \frac{\partial u_2}{\partial y} \Big|_{y=d} \quad (\text{B.7})$$

Il est alors possible de trouver une solution analytique des champs de pression et de vitesse pour le problème de Poiseuille diphasique (B.2-B.4-B.5-B.6-B.7) en déterminant les constantes C_1 , C'_1 , C_2 et C'_2 . On peut réécrire (B.7) en utilisant l'expression (B.3) :

$$\begin{aligned}\mu_1 \frac{\partial u_1}{\partial y} &= \mu_1 \left(\frac{1}{\mu_1} \Delta p y + C_1 \right) \\ \mu_2 \frac{\partial u_2}{\partial y} &= \mu_2 \left(\frac{1}{\mu_2} \Delta p y + C_2 \right)\end{aligned}\tag{B.8}$$

$$\Delta p d + \mu_1 C_1 = \Delta p d + \mu_2 C_2\tag{B.9}$$

Soit,

$$C_1 = \frac{\mu_2}{\mu_1} C_2\tag{B.10}$$

La condition limite sur la plaque du bas (B.4) nous permet de déterminer C'_1 :

$$C'_1 = 0\tag{B.11}$$

On exprime de plus C'_2 en fonction de C_2 grâce à la condition (B.5) sur u_2 :

$$C'_2 = -\frac{1}{2\mu_2} \Delta p H^2 - C_2 H\tag{B.12}$$

En injectant l'expression des vitesses u_1 et u_2 dans (B.6), on obtient l'égalité suivante

$$\frac{\Delta P}{2\mu_2} (d^2 - H^2) + C_2 (d - H) = \frac{\Delta P d^2}{2\mu_1} + C_1 d\tag{B.13}$$

Soit en remplaçant C_1 et C'_2 par leurs valeurs respectives dans l'expression (B.13), on accède alors à l'équation :

$$C_2 = \frac{\Delta p \mu_1 (d^2 - H^2) - \mu_2 d^2}{2\mu_2 \mu_2 d - \mu_1 (d - H)}\tag{B.14}$$

L'ensemble des constantes définissant u_1 et u_2 s'écrivent :

$$\begin{aligned}C_1 &= \frac{\Delta p \mu_1 (d^2 - H^2) - \mu_2 d^2}{2\mu_1 \mu_2 d - \mu_1 (d - H)} \\ C'_1 &= 0 \\ C_2 &= \frac{\Delta p \mu_1 (d^2 - H^2) - \mu_2 d^2}{2\mu_2 \mu_2 d - \mu_1 (d - H)} \\ C'_2 &= \frac{\Delta p H}{2\mu_2} \left(\frac{(\mu_2 - \mu_1)(d^2 - Hd)}{\mu_2 d - \mu_1 (d - H)} \right)\end{aligned}\tag{B.15}$$

On peut ainsi exprimer analytiquement la vitesse de l'écoulement de Poiseuille stationnaire 2D dans chaque fluide par

$$\begin{aligned}u_1 &= \frac{\Delta P y}{2\mu_1} \left(y^2 + y \frac{\mu_1 (d^2 - H^2) - \mu_2 d^2}{\mu_2 d - \mu_1 (d - H)} \right) \\ u_2 &= \frac{\Delta P y}{2\mu_2} \left(y^2 + \frac{y(\mu_1 (d^2 - H^2) - \mu_2 d^2) + H(d^2 - Hd)(\mu_2 - \mu_1)}{\mu_2 d - \mu_1 (d - H)} \right)\end{aligned}\tag{B.16}$$

Annexe C

Article soumis à *Communications in
Computational Physics*

A two-dimensional second order conservative front-tracking method with an original marker advection approach based on jump relations

Mathilde Tavares¹, Désir-André Koffi-Bi, Eric Chénier, Stéphane Vincent

Université Paris-Est Marne-la-Vallée, Lab. Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME, UMR 8208 CNRS 5 bd Descartes, 77454 Marne-la-Vallée, France

Abstract:

A two-dimensional front-tracking method is developed for handling complex shape interfaces satisfying the volume conservation. In order to validate the proposed front-tracking method, a complete convergence study is carried out on several analytical test cases for which the interface is widely stretched and deformed. Comparisons to different existing approaches show that our front-tracking method is second order accurate in space with lower errors than existing interface tracking techniques of the literature.

We also propose an original marker advection method which takes into account the jump relations valid at interface in order to deal with the contrast of physical properties encountered in two-phase flow simulations. The conservative front-tracking method computed in this work is shown to be able to describe interfaces with high accuracy even for poorly resolved Eulerian grids.

Key words : Front-tracking, marker velocity reconstruction based on jump relations, multiphase flow, volume conservation, second order accuracy

1 Introduction

In past two decades, major progress has been achieved in fluid interface tracking when multiphase flow simulations are tackled with. Various tracking techniques have been investigated in the literature to handle these flow simulations. Depending on how the pressure and velocity variables are computed and how the interface is taken into account in the conservation equations, either explicitly with a moving interfacial mesh or indirectly by capturing the presence of the interface through an auxiliary variable, these tracking techniques can be divided in two major classes:

- On one hand, moving unstructured body fitted meshes, pure Lagrangian [17] or arbitrary Eulerian-Lagrangian methods [14, 13] are techniques that conform to the interfacial shape. They use the two-fluid flow equations for simulating multiphase flows, *i.e.* the Navier-Stokes equations in each phase and jump relations on the mesh elements of the interface [8]. Indeed, the deformations of the interface are explicitly tracked over time with deformable meshes which follow the front surface. Quite popular for fluid structure interaction problems, ALE approaches are widely used in this class of tracking methods for free surface flow problems since they avoid the fast mesh distortion known from pure Lagrangian methods. Thanks to the explicit representation of

¹mathilde.tavares@u-pem.fr

the interface, surface characteristics such as the surface tension of the material properties can be computed accurately. However, the management of the moving deformable mesh involves high complexity and limits the application of this approach to two dimensional configurations or weakly deformable interfaces in three dimensions. In the range of body fitted approaches with mesh points describing the interface, the adaptive curvilinear orthogonal grid techniques developed in Jadim code are also interesting to mention [28]. For example, they allow the accurate simulation of single droplet or bubble flows in axisymmetric coordinates.

- On the other hand, another class of approach to track interfaces, generally on fixed Eulerian meshes, consists in capturing directly the presence of the front by using an auxiliary Eulerian variable. The pioneer work of Harlow and Welch [18] deals with the tracking of Lagrangian volume parcels of fluid in order to describe the evolution of one of the two existing phases on a structured grid. In these approaches, the interface is not *a priori* known, only its presence in a given cell is reported. Among the huge amount of works devoted to these interface capturing techniques, we can cite the Volume Of Fluid (VOF) method [59], for which the interface is represented by means of a phase function. This is one of the oldest but still popular front-capturing approach as it provides naturally volume conservation of phases. Another approach that is very often used by the scientific community is the level-set method [50]. With this method, the interface is located by a signed distance function which is continuous across the interface and allows an accurate estimate of the curvature and normal at the interface. A combination of both level-set and VOF methods has been proposed by various authors [49, 10, 5] to ensure a mass conservative tracking approach while preserving the simple definition and implementation of the level-set method. Even if the research has been focused on fixed regular grids, more recent developments [6, 9, 22, 58, 32] allowed the extension of these methods to three dimensional unstructured meshes for VOF or level-set methods so that they can handle problems with strong deformations and topological changes of the interface while refining the mesh locally around interface to capture vorticity or dynamic boundary layers. The phase field approach is a last class of implicit description of the interface. It relies on the definition of a physical interfacial thickness that belongs to diffuse interface models [23, 44, 1]. Although these methods are widely used to solve complex multiphase flows, their main drawback is that the size of smaller resolved interfacial structures is controlled by the Eulerian mesh. For multiphase flows involving subgrid size bubbles, droplets or ligaments, few VOF and Level Set methods have been extended to compute the multi-scale character of the multiphase flows. Among them, we can cite [31, 29, 21, 4, 56, 27] for VOF-like methods with submesh interface description, [57, 39, 60] for adaptive mesh refinement around interfaces, [61, 51] for VOF and level set coupling with point-particle tracking of small drops and bubbles, [20] for a dual mesh level set approach for which the interface is always resolved on a very fine mesh and the Moment of Fluid technique [25] that allows a sub-mesh reconstruction of the interface by using the centroid of the phases in a given cell. Even in their most recent improvements, the main difficulty of the front capturing approaches is to maintain the sharpness of the front during the flow motion while accounting at the same time for flow structures whose characteristic size is smaller or equal to the mesh cell length. To prevent the drawbacks of previously presented front capturing techniques, another class of methods for handling interface evolutions on a fixed Eulerian mesh is Lagrangian. It consists in building a surface mesh that follows the interface. These front-tracking approaches are accurate and allows intrinsically keeping subgrid scale interfacial structures. However, they involve high complexity mesh management in two- and three-dimensional flows. Despite the difficulty of dealing with two grids, the sharpness of the front is always maintained even for under-resolved Eulerian grids making the front-tracking approach one of the most accurate methods to track interfaces and deal with capillary effects.

We focus in this paper on this last approach, the Front-Tracking (FT) method, which basically couples two non-conforming meshes:

- A specific mesh of the surface separating one phase to the rest of the flow motion is used to track explicitly the interface. This surface mesh is sliding over the Eulerian mesh, which is chosen fixed in our developments. It deforms according to the flow motion and capillary effects exerted on it.
- An Eulerian fixed mesh is considered for solving the conservation equations. A coupling between the front tracking mesh and the flow variable mesh is required. Most of the subtlety of the accuracy and the physical relevancy of the method is hidden in this step.

The FT method has been extensively developed and studied in literature. Many authors [11, 55, 40, 47, 52] have shown in their works the strength of the front-tracking compared to most popular Eulerian interface capturing methods. We can detailed the front tracking works as follows. Glimm and *al.* [16] first represents the interface by connected markers for shock waves applications and then extended the use of the front-tracking method to various flow problems [15, 11]. Unverdi and Tryggvason [55] generalized the application of the front-tracking to viscous, incompressible multiphase flows for the simulation of a rising bubble. An improvement of the capillary forces calculation in the front-tracking method was performed by Popinet and Zaleski [40] in particular by modifying the projection step of time splitting methods for incompressible two-phase flows. The simulation of homogeneous bubbly flows was also performed by Tryggvason and *al.* [53] with a front-tracking method. A complete review of the use of front-tracking method to track interfaces in multiphase flows is beyond the scope of this paper and all details can be found in [54]. We can emphasize that the front-tracking method is most generally used for applications with small interfacial scale ranges such as bubbly flows or shock waves. The main difficult aspect of front tracking is tackling with coalescence and rupture that have to be imposed with a physical length scale that is not *a priori* known.

Our main goal is to provide a detailed analysis of front tracking numerical performances in order to improve as much as possible the accuracy of the method while obtaining a second order convergence in space. This point is very important as coarsely or under resolved interfacial structures observed in multiscale multiphase flows will be described, on the Eulerian flow mesh, by few (at least one) cells and so the intrinsic accuracy of the method is of paramount importance. We propose in this work a preliminary path with an improvement of the front-tracking method. We have studied different existing solutions in order to obtain the most accurate advection of the interface as possible and we have set-up algorithms to keep the volume constant after the interface advection step. A convergence study has been performed on several test cases and our front-tracking method has been compared to other classical interface capturing and front tracking techniques of the literature. We have also devoted a part of this work to the calculation improvement of specific characteristics of the interface such as the local curvature and the normal. In multiphase flow simulations, overcoming the loss of accuracy of marker velocity calculation during the advection step of the Lagrangian interfacial mesh is of major importance as soon as the ratio of physical properties between different phases is large. An original marker advection method is then proposed, that accounts for velocity and stress jump relations at the interface. The idea is to deal with the jump of the physical properties directly in the solving step devoted to the Lagrangian interfacial mesh instead of using kinematic interpolation procedures.

This paper is structured as follows: the second section is dedicated to the improvement and validation of the front tracking method for kinematic problems. The first subsection is devoted to describing the front-tracking method with the advection step and the reseeding operations required to maintain a constant resolution of the interface. A validation test case is also proposed to show the ability of the front-tracking method to accurately locate interfaces. The second subsection discusses volume conservation algorithms used to keep the volume constant after each advection step. We have focused in the third subsection on the calculation of interfacial characteristics, namely local curvature and normal computations. Two different methods have been studied and compared to assess the most accurate one. In the fourth subsection, we have compared our proposed front-tracking method to classical interface tracking methods of the literature in order to confirm the idea that the front-tracking is the most accurate interface tracking method as previously stated by Trontin and *al.* [52] and Glimm and *al.* [11]. In

the third section, we present an original method devoted to the advection of the front-tracking markers in real multiphase flows. The jumps of physical properties such as pressure, velocity and stress are used to account for viscosity ratio at the interface and capillary forces directly in the marker advection step. The jump marker velocity calculation is validated against Hadamard-Rybczynski analytical solution. This new marker velocity estimate prevents the use of artificial interpolation procedures. Conclusions and perspectives are finally drawn in the fourth section.

2 Front-tracking method

The front-tracking method is based on the Tryggvason and *al.* work [53] for multiphase and isothermal flows. The interface consists of a chain of markers connected by segments. Contrary to the Shin and Juric description of the front [47], the connectivity between neighbouring elements is also stored in order to efficiently compute the surface tension force, namely its magnitude and its direction.

Let us introduce the notations used in this paper (see Fig. 1 for a graphical illustration). We denote by $\mathcal{D} = (\mathcal{E}, \mathcal{M}, \mathcal{T})$ a space discretization for two-dimensional problems.

- \mathcal{E} is a set of $N_{\mathcal{E}}$ elements (or segments) all joined two by two through their endpoints to produce a closed curve. Any component of \mathcal{E} is usually noted e .
- \mathcal{M} is the set of $N_{\mathcal{M}}$ points, called markers, which connect two adjacent elements. Any component of \mathcal{M} is usually noted m . A specific notation is also used to point out the link between any element $e \in \mathcal{E}$ with its two endpoints noted in that case $(m_{[e,1]}, m_{[e,2]}) \in \mathcal{M}^2$.

For all $e \in \mathcal{E}$, the neighbouring element sharing the marker $m_{[e,1]}$ (resp. $m_{[e,2]}$) is noted $e_{[1]}$ (resp. $e_{[2]}$). The local numbering of the markers is such that $m_{[e,1]}$ and $m_{[e_{[1]},2]}$ are related to a unique component in \mathcal{M} , because they stand for the same endpoint connecting the elements e and $e_{[1]}$. The same remark is applied for $m_{[e,2]}$ and $m_{[e_{[2]},1]}$. To emphasize the equivalence between the different notations, the symbol “ \equiv ” is used ($m_{[e,1]} \equiv m_{[e_{[1]},2]}$ and $m_{[e,2]} \equiv m_{[e_{[2]},1]}$). We also define:

- \mathcal{T} the set of $N_{\mathcal{T}}$ 2-tuples such that for all $e \in \mathcal{E}$ and $(m_{[e,1]}, m_{[e,2]}) \in \mathcal{M}^2$, we have $(m_{[e,1]}, m_{[e,2]}) \in \mathcal{T}$. The order of the two markers is guaranteed because, for all $e \in \mathcal{E}$, $m_{[e,2]} \equiv m_{[e_{[2]},1]}$ (the second marker of the element e is identical to the first marker of its neighbor $e_{[2]}$). By convention, we decide that the two markers $m_{[e,1]}$ and $m_{[e,2]}$ of any element $e \in \mathcal{E}$ of a closed interface are described counter-clockwise.

For any marker $m \in \mathcal{M}$, we designate by \bar{x}_m and \bar{V}_m its coordinate and velocity. Similarly, we define \bar{n}_m , the unit normal vector pointing outward to the volume delimited by the discrete closed interface and located at the marker $m \in \mathcal{M}$. The mathematical expression of the vector \bar{n}_m will be presented and discussed later in Sec. 2.3. It is worth to point out that the size and the component values of the different sets evolve as a function of time. For example, $\mathcal{E}^{(n)}$ indicates the elements set at time $t^{(n)}$.

Lastly, to clarify the vocabulary in the rest of the paper, from now on we denote by “grid(s)”, the Eulerian staggered mesh devoted to the resolution of the fluid flow equations (Navier-Stokes equations for example). The term “mesh” refers exclusively to the discretization of the Lagrangian interface which consists of elements and markers as described here-above.

In the following subsections are presented the basic features of our front-tracking method. This includes the comparison of different second order advection methods accounting for a reseeding procedure for highly stretched fronts. Since the simple advection of the interface does not guarantee the volume conservation, an original method has been developed to overcome this drawback and ensure this fundamental property for incompressible flows. Then, some attention is paid both on the calculation of the interface curvature and the direction of the surface tension force.

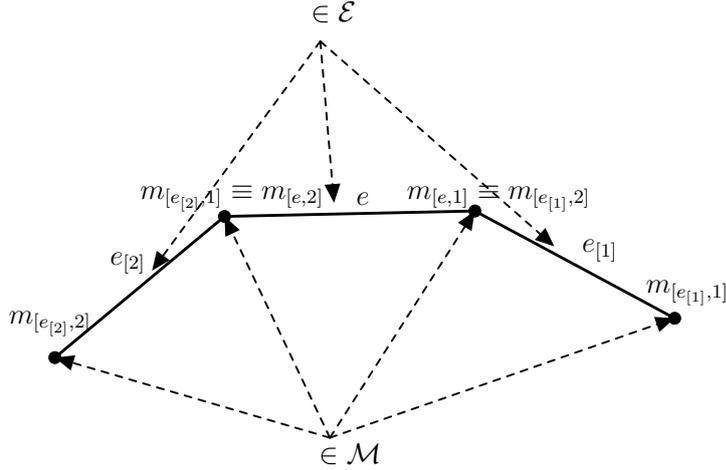


Figure 1: Discretization of the interface and notations

2.1 Base components of the front-tracking method

2.1.1 Lagrangian advection of the interface markers

The interface is advected by solving the following Lagrangian equation: $\forall m \in \mathcal{M}$,

$$\frac{d\bar{x}_m}{dt} = \bar{V}_m(t) \quad (1)$$

where $\bar{V}_m(t)$ stands for the Lagrangian velocity of marker m . A second order Runge-Kutta scheme is used for time integration: for all $m \in \mathcal{M}^{(n,n+1)}$ (same marker at $t^{(n)}$ and $t^{(n+1)}$),

$$\bar{x}_m^* = \bar{x}_m^{(n)} + \Delta t \bar{V}_m^{(n)} \quad (2a)$$

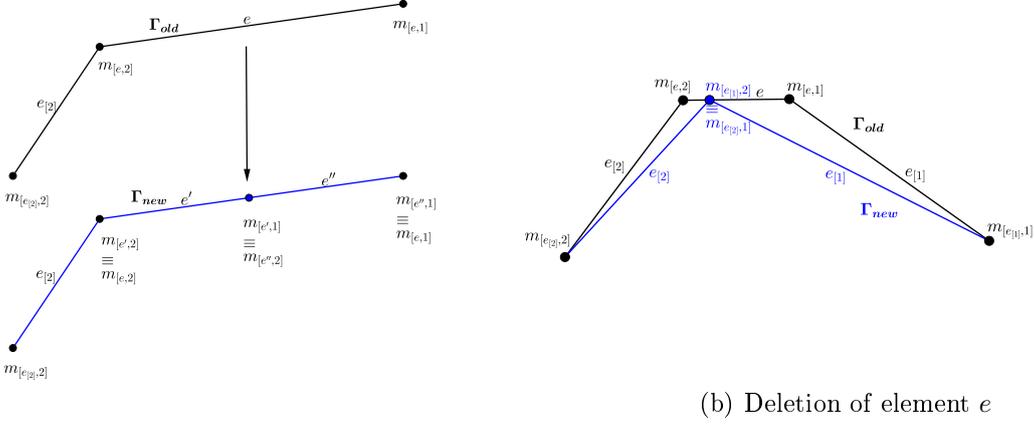
$$\bar{x}_m^{(n+1)} = \frac{1}{2} \left(\bar{x}_m^{(n)} + \bar{x}_m^* \right) + \frac{\Delta t}{2} \bar{V}_m^{(*,n+1)} \quad (2b)$$

with $\Delta t \stackrel{\text{def}}{=} t^{(n+1)} - t^{(n)}$ the time step, and $\bar{x}_m^{(n)}$ (resp. $\bar{x}_m^{(n+1)}$) the position of the marker m at $t^{(n)}$ (resp. $t^{(n+1)}$). The intermediate Lagrangian velocity $\bar{V}_m^{(*,n+1)}$ at position \bar{x}_m^* and time $t^{(n+1)}$ is calculated with a second order Adams-Bashforth extrapolation method $\bar{V}_m^{(*,n+1)} \stackrel{\text{def}}{=} 2\bar{v}^{(n)}(\bar{x}_m^*) - \bar{v}^{(n-1)}(\bar{x}_m^*)$ where $\bar{v}^{(n)}(\bar{x})$ and $\bar{v}^{(n-1)}(\bar{x})$ are the Eulerian flow velocity at times $t^{(n)}$ and $t^{(n-1)}$. Since \bar{x}_m and \bar{x}_m^* are not located at the velocity grid nodes, different interpolation procedures are investigated to get the velocities at these points (see Sec. 2.1.3 for the numerical tests). Two of them are quite common in the framework of the front-tracking methods, namely the bilinear interpolation method [34] and the Peskin technique [38]. The third method that is considered here is the Parabolic Edge Reconstruction Method (PERM) by McDermott and *al.* [33] which consists in a divergence free approximation at the nodes and cells centers of the Eulerian velocity grids. The reconstructed velocity is continuous and piecewise parabolic in the direction of the considered velocity component and piecewise linear in the transverse direction. For a given cell, the reconstructed divergence is thus bilinear and consistent with the discrete cell divergence.

2.1.2 Management of the interface elements size

In two-phase fluid flows, the interface can be highly stretched and deformed, inducing the appearance of regions with different marker densities. A too small marker density with respect to the Eulerian grid size h may lead to an overall loss of accuracy. In contrast, a too large marker density is CPU and memory consuming and may create spurious oscillations during the advection step [30]. To maintain

a good accuracy at each time step, markers are locally inserted or suppressed in order to keep the instantaneous size of each interface element almost constant. Let us note the size of any element $e \in \mathcal{E}^{(n)}$ by $h_e^{(n)}$. Basically, the interface elements are initially set to about half the Eulerian grid size ($h_e \stackrel{\text{def}}{=} h_e^{(0)} \approx h/2$, see Sec. 2.1.3) and during the advection step, they are controlled so that their length remains mainly bounded between $h_e/2$ and $2h_e$ [53].



(a) Splitting of element e

(b) Deletion of element e

Figure 2: Reseeding operation of the front, Γ_{old} represents the front before the reseeding and Γ_{new} the front after the reseeding.

At $t^{(n)}$, if the size $h_e^{(n)}$ of element $e \in \mathcal{E}^{(n)}$ is too large, the mesh is enriched: the size $N_{\mathcal{E}}$ of the sets \mathcal{E} , \mathcal{M} and \mathcal{T} is increased by one. The element e is split into two twice smaller elements (Fig. 2a), a new element e' and an element e'' which substitutes for the former element e . A new interface marker $m_{[e',1]} \equiv m_{[e',2]}$ is also introduced at the center of the original element e , $\bar{x}_{m_{[e'',2]}} \equiv \bar{x}_{m_{[e',1]}} = (\bar{x}_{m_{[e,1]}} + \bar{x}_{m_{[e,2]}})/2$, and a new 2-tuple is defined for the new element e' : $(m_{[e',1]}, m_{[e',2]}) \in \mathcal{T}$. The pointers associated with the markers and neighbors are updated:

- New Element e' : $m_{[e',2]} \equiv m_{[e,2]}$, $e'_{[1]} = e''$ and $e'_{[2]} = e_{[2]}$. Reciprocally, the first neighbor of element $e_{[2]}$ is $e_{[2][1]} = e'$.
- Element e'' , formerly element e : $m_{[e'',1]} \equiv m_{[e,1]}$, $e''_{[2]} = e'$ and $e''_{[1]} = e_{[1]}$. Reciprocally, the second neighbor of element $e_{[1]}$ is $e_{[1][2]} = e''$.

The velocity of the new marker $m_{[e',1]} \equiv m_{[e',2]}$ is approximated by a linear combination of the velocities of the adjacent markers: $\bar{V}_{m_{[e'',2]}} \equiv \bar{V}_{m_{[e',1]}} = (\bar{V}_{m_{[e,1]}} + \bar{V}_{m_{[e,2]}})/2$.

At $t^{(n)}$, the deletion of a too small element $e \in \mathcal{E}^{(n)}$ depends on the dimensionless curvatures calculated at the markers $m_{[e,1]}$ and $m_{[e,2]}$ in order to avoid the local deterioration of the interface shape. If $\kappa_{[e,1]}h_e^{(n)}$ and $\kappa_{[e,2]}h_e^{(n)}$ are less than the threshold value $\kappa_{th} = 0.1$ (see Sec. 2.3 for the curvature approximation), the two markers of the element e are merged together to form a unique marker located between the two previous ones (Fig. 2b). The coordinate of this new marker is given by the arithmetic mean of the two parents coordinates weighted by the curvatures:

$$\bar{x}_{m_{[e_{[1],2}]}} \equiv \bar{x}_{m_{[e_{[2],1}]}} = \frac{\kappa_{[e,1]}\bar{x}_{m_{[e,2]}} + \kappa_{[e,2]}\bar{x}_{m_{[e,1]}}}{\kappa_{[e,1]} + \kappa_{[e,2]}}$$

The components $e \in \mathcal{E}^{(n)}$, $m_{[e,2]} \in \mathcal{M}^{(n)}$ and $(m_{[e,1]}, m_{[e,2]}) \in \mathcal{T}^{(n)}$ are suppressed, leading to a decrease of the size of the different sets: $N_{\mathcal{E}} \leftarrow N_{\mathcal{E}} - 1$. Again, the local connectivity must be updated.

2.1.3 Test case: Circle deformation in a vortex flow

In the present section, we consider the test case by Bell *et al.* [2] which consists in the advection of a circle, initially located at $(0.5 m; 0.75 m)$ with a $0.15 m$ radius, in a vortex flow given by the velocity field $\bar{v} = u\bar{e}_x + v\bar{e}_y$ with

$$u(x, y) = -2\sin(\pi x)^2 \cos(\pi y) \sin(\pi y) \quad [u] = m/s \quad (3a)$$

$$v(x, y) = 2\sin(\pi y)^2 \cos(\pi x) \sin(\pi x) \quad [v] = m/s \quad (3b)$$

In Fig. 3 is illustrated the interface shape at times $t = 0$ and $4 s$ for an Eulerian grid $h = 1/512 m$, a time step $\Delta t = h/(2V_0) s$ with $V_0 = 1 m/s$, and a marker velocity based on the PERM interpolation method. In this simulation, the interface is widely stretched and deformed to finally give rise to a long

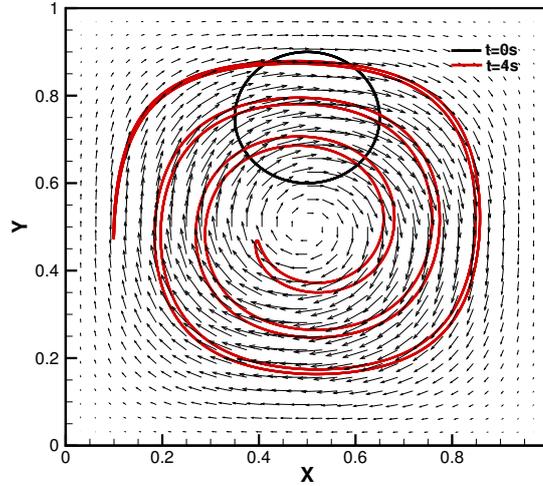


Figure 3: Circle advection by a vortex flow (Eq. 3a-3b). Initial solution in black, $t = 4 s$ in red and velocity vector field are plotted.

ligament much thinner than the Eulerian grid size h .

Since no analytical solution exists for this problem at maximum interface deformation, a reference interface $\Gamma_{h_e^{\text{ref}}}(t)$ has been computed using a $4th$ order Runge-Kutta scheme combined with an exact velocity field for advecting the markers, a time step $\Delta t = h^{\text{ref}}/2$ and an initial interface element size such that for any element $e \in \mathcal{E}^{(0)}$, $h_e^{\text{ref}} \stackrel{\text{def}}{=} h_e^{\text{ref}}(0) = h^{\text{ref}}/100$, with $h^{\text{ref}} = 1/4096$ (equivalent to a very fine Eulerian grid size). Concerning the coarse interface meshes that will be compared to the reference interface, they are in the order of the Eulerian grid size h , with an initial element size $h_e = h/2$, $\forall e \in \mathcal{E}^{(0)}$, a time step $\Delta t = h/2$, a $2nd$ order Runge-Kutta scheme and the use of different interpolation algorithms to get the velocity of the markers from the Eulerian staggered grids. The measure of the error is defined by the distance between the markers of the interface coarse mesh $\Gamma_{h_e}^{(n)}$ to the reference one $\Gamma_{h_e^{\text{ref}}}^{(n)}$ at time $t \stackrel{\text{def}}{=} n\Delta t = 4 s$ (see Fig. 3):

$$\|E_{h_e}\|_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N_{\mathcal{E}}^{(n)}} \sum_{m \in \mathcal{M}^{(n)}} \min_{p \in \Gamma_{h_e^{\text{ref}}}^{(n)}} \|\bar{x}[p] - \bar{x}_m\|_2 \quad (4)$$

$$\|E_{h_e}\|_{\infty} \stackrel{\text{def}}{=} \max_{m \in \mathcal{M}^{(n)}} \left(\min_{p \in \Gamma_{h_e^{\text{ref}}}^{(n)}} \|\bar{x}[p] - \bar{x}_m\|_2 \right) \quad (5)$$

where $\|\cdot\|_2$ is the Euclidian norm, $N_{\mathcal{G}^{(n)}}$ is the number of elements in the set $\mathcal{M}^{(n)}$, p is any point of the interface $\Gamma_{h_e^{\text{ref}}}^{(n)}$ and $\bar{x}[p]$ stands for its coordinates. We also define the convergence order of a quantity $X(h)$ between two grid or mesh sizes h_1 and h_2 by the ratio

$$\text{Order} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\log(\|X(h_1)\|_{ni} / \|X(h_2)\|_{ni})}{\log(h_1/h_2)} \quad (6)$$

with $ni = 1$ or ∞ .

Table 1 provides, for different grid sizes h and interpolation methods to approximate the marker

Interpolation scheme	PERM [33]		BILINEAR		PESKIN [38]	
$h \equiv 2h_e$	$\ E_{h_e}\ _1$	Order	$\ E_{h_e}\ _1$	Order	$\ E_{h_e}\ _1$	Order
1/16	8.8E-04	-	4.6E-03	-	7.6E-03	-
1/32	1.9E-04	2.2	1.2E-03	2.0	3.0E-03	1.3
1/64	4.7E-05	2.0	2.9E-04	2.0	7.6E-04	2.0
1/128	1.2E-05	2.0	7.3E-05	2.0	1.9E-04	2.0
1/256	2.9E-06	2.0	1.8E-05	2.0	4.8E-05	2.0
1/512	7.2E-07	2.0	4.6E-06	2.0	1.2E-05	2.0
$h \equiv 2h_e$	$\ E_{h_e}\ _\infty$	Order	$\ E_{h_e}\ _\infty$	Order	$\ E_{h_e}\ _\infty$	Order
1/16	2.6E-02	-	1.2E-02	-	2.9E-02	-
1/32	2.4E-03	3.5	4.6E-03	1.4	9.9E-03	1.6
1/64	1.2E-03	1.0	1.6E-03	1.5	3.4E-03	1.5
1/128	1.6E-04	2.9	6.4E-04	1.4	1.4E-03	1.3
1/256	3.9E-05	2.0	1.9E-04	1.8	5.4E-04	1.4
1/512	3.5E-05	0.2	5.1E-05	1.9	1.5E-04	1.9

Table 1: Error $\|E_{h_e}\|_1$ and $\|E_{h_e}\|_\infty$ (Eq. 4 and Eq. 5) and local convergence order (Eq. 6) for different grid or mesh sizes and interpolation methods.

velocity from the Eulerian grids, the errors and the local convergence order of the front-tracking method for initial element sizes $h_e = h/2$. Except for the coarsest grid size with the Peskin interpolation scheme, the three methods converge with a second order accuracy for $\|E_{h_e}\|_1$. The PERM algorithm turns out to be the most accurate interpolation method, with an error up to six to sixteen times smaller than the bilinear and Peskin interpolations, respectively. If the infinity norm $\|E_{h_e}\|_\infty$ is now considered, it is more difficult to discriminate the methods even if the PERM interpolation scheme has, overall, the lowest errors. In terms of convergence order, the Peskin and bilinear methods tends to be second order accurate. For the PERM algorithm, the local convergence order looks erratic but it is globally second order accurate if the whole grid size interval $h \in [1/512; 1/32]$ is taken into account. Generally, the PERM interpolation scheme performs better than the other methods.

The accuracy of the front-tracking method is now studied as a function of the size of the initial element size h_e , for different Eulerian grid sizes h and the PERM interpolation method (Tab. 2). Whatever the grid size, the error decreases with a second order convergence as long as $h_e \geq h/2$. Once h_e is smaller than $h/2$, no improvement is measured, or even a slight lose of accuracy is observed. Therefore, the best choice for the initial length of the interface elements is $h_e = h/2$, namely elements the size of which evolves roughly in the range $h_e(t) \in [h/4, h]$.

In this section, we showed that the PERM interpolation algorithm is the most accurate method to track the markers position thanks to the velocity staggered grids of the Eulerian field. Likewise, the best discretization choice for the initial interface is to satisfy a two-ratio between the Eulerian grid h and the front-tracking elements h_e .

In the remaining of the paper, the front tracking method based on (i) the PERM algorithm, (ii) initial interface element sizes equal to $h/2$, and (iii) the reseeding algorithm is called in a shortened

h \Downarrow	h_e \Rightarrow	$h_e = 2h$	$h_e = h$	$h_e = h/2$	$h_e = h/10$	$h_e = h/100$
1/16	$\ E_{h_e}\ _1$	1.7E-02	4.2E-03	8.8E-04	1.2E-03	1.3E-03
	Order	-	2.0	2.2	-0.2	-0.0
1/32	$\ E_{h_e}\ _1$	4.3E-03	1.5E-03	1.9E-04	3.1E-04	3.2E-04
	Order	-	1.5	3.0	-0.3	-0.0
1/64	$\ E_{h_e}\ _1$	1.3E-03	3.0E-04	4.7E-05	7.9E-05	8.1E-05
	Order	-	2.1	2.7	-0.3	-0.0
1/128	$\ E_{h_e}\ _1$	3.6E-04	5.3E-05	1.2E-05	2.0E-05	2.0E-05
	Order	-	2.7	2.2	-0.3	-0.0
1/256	$\ E_{h_e}\ _1$	7.0E-05	1.7E-05	2.9E-06	4.9E-06	5.1E-06
	Order	-	2.1	2.5	-0.3	-0.0
1/512	$\ E_{h_e}\ _1$	1.9E-05	3.4E-06	7.2E-07	1.2E-06	1.3E-06
	Order	-	2.5	2.2	-0.3	-0.0

Table 2: Accuracy of the front-tracking method versus the initial element size h_e - the local convergence order is presented for different element size h_e .

form FTR-PERM method or even simply FTR-PERM. Most of the simulations performed in the rest of the paper are carried out with this FTR-PERM method.

2.2 Volume conservation

Since the interface markers are only advected by the velocity field, the front-tracking method cannot geometrically conserve the volume delimited by the connected elements for incompressible flows as the interface is approximated by linear elements. This issue is inherent to this method, even if the advection algorithm was exact. The calculation of the volume $\mathcal{V}^{(n)}$ is straightforward. Whatever the point O of coordinate \bar{x}_O , we have

$$\mathcal{V}^{(n)} = \frac{1}{2} \left(\sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n)}} (\bar{x}_{m_1} - \bar{x}_O) \wedge (\bar{x}_{m_2} - \bar{x}_O) \right) \cdot \bar{e}_z \quad (7)$$

where $\bar{e}_z = \bar{e}_x \wedge \bar{e}_y$. Figure 4a presents the evolution of the volume error for the circle advection by a vortex flow for different grid sizes (see Fig. 3 for interface snapshots and (Eq. 3a-3b) for the velocity field) when the PERM algorithm is used for the marker velocity interpolation. We first notice that the volume variation is small, less than 1% for the coarsest grid $h = 1/16$, and it decreases with the grid refinement. Fig. 4b, which compares the evolution of the volume error for the circle advection by a vortex flow for the coarsest grid size when the bilinear, Peskin or PERM methods are used for the calculation of the markers velocity, shows that the volume variation is slightly smaller when the PERM method is used. This assessment confirms the interest of the PERM method versus the two other methods.

Despite the small volume variation induced by our front-tracking approach, it is always better to control the volume at each time step to avoid a too large volume lose or gain for long integration times or very complex incompressible flow fields. In the next subsections, two volume conservation algorithms are presented for incompressible flows and then discussed to show their respective advantages and drawbacks.

2.2.1 Homothetic Rescaling (HR) method – FTR-PERM-HR

The homothetic rescaling method is purely geometric and does not depend on the fluid flow. It consists in performing an homothety of the markers position after the advection step in order to

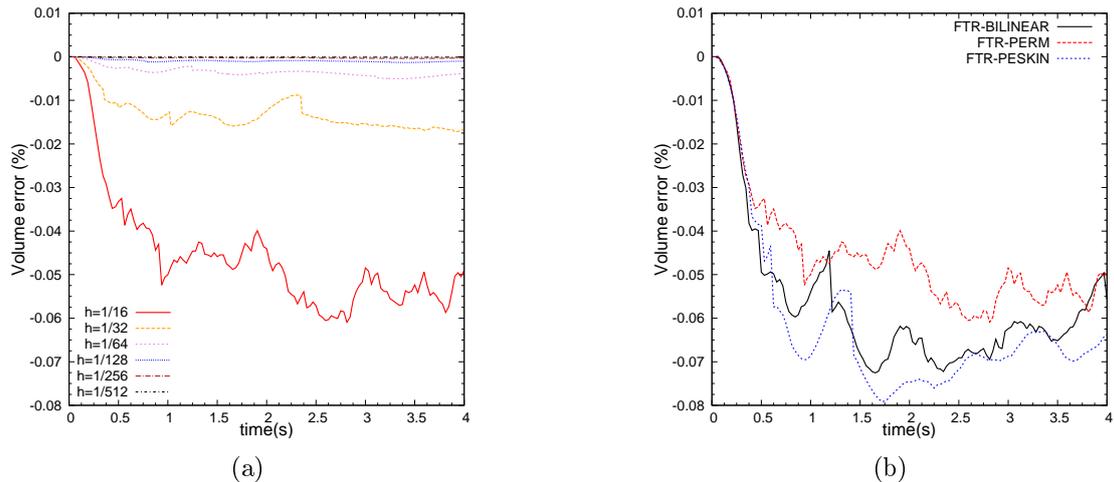


Figure 4: Evolution of the volume error for the advection of a circle in a vortex flow (Eq. 3a-3b) by the front tracking method: (a) Volume error as a function of the grid size h when the PERM method is used for the calculation of the velocity marker. (b) Volume error for the grid size $h = 1/16$ when PERM, bilinear or Peskin methods are used.

manage accurately the volume delimited by the interface. For incompressible fluid flows, the volume between two time steps must be preserved, that is $\mathcal{V}^{(n+1)} = \mathcal{V}^{(n)}$ with $\mathcal{V}^{(n)}$ the known volume at time $t^{(n)}$. Once the homothety center \bar{x}_O is chosen, the homothety coefficient $k_{\bar{x}_O}$ is expressed by:

$$k_{\bar{x}_O} = \sqrt{\frac{\mathcal{V}^{(n)}}{\mathcal{V}^{(n+1,adv)}}}$$

where $\mathcal{V}^{(n)}$ and $\mathcal{V}^{(n+1,adv)}$ are expressed by relation (7), for 2-tuples respectively defined at time $t^{(n)}$ and $t^{(n+1)}$, the end of the advection step. Here, index $^{(n+1,adv)}$ denotes a given quantity at time $n+1$ after Lagrangian advection. Then, for all $m \in \mathcal{M}^{(n,n+1)}$, the coordinate \bar{x}_m of the marker m is adjusted to satisfy the volume conservation as follows:

$$\bar{x}_m^{(n+1)} = \bar{x}_O + k_{\bar{x}_O}(\bar{x}_m^{(n+1,adv)} - \bar{x}_O) \quad (8)$$

At this stage, the location of the homothety center is still free. Obviously, its position plays an important role in the resulting interface shape. One natural choice could be to identify \bar{x}_O to the center of the volume delimited by the interface at the end of the advection step:

$$\bar{x}_O = \frac{\sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n+1)}} [(\bar{x}_{m_1} - \bar{x}_{O'}) \wedge (\bar{x}_{m_2} - \bar{x}_{O'})] \cdot \bar{e}_z (\bar{x}_{m_1} + \bar{x}_{m_2} + \bar{x}_{O'})}{\sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n+1)}} 3 [(\bar{x}_{m_1} - \bar{x}_{O'}) \wedge (\bar{x}_{m_2} - \bar{x}_{O'})] \cdot \bar{e}_z} \quad (9)$$

with $\bar{x}_{O'}$ the coordinate of any point O' and $\bar{e}_z = \bar{e}_x \wedge \bar{e}_y$. Another very simple choice is to use the centroid of the whole markers $\bar{x}_O = \sum_{m \in \mathcal{M}^{(n+1)}} \bar{x}_m / N_{\mathcal{E}}^{(n+1)}$. This latter calculation is adopted in our simulations to locate the homothety center.

The front-tracking method based on the PERM algorithm for the velocity node interpolation and the homothetic rescaling method for the volume conservation is called FTR-PERM-HR.

2.2.2 Velocity Based Correction (VBC) method – FTR-PERM-VBC

The second method differs significantly from the previous one in the sense that it is based on the fluid flow, and more specifically the markers displacement over a time step ($\approx \bar{V} \Delta t$). The first step is to

write the volume conservation (see volume calculation (7)) between the two time steps $t^{(n)}$ and $t^{(n+1)}$:

$$\sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n, n+1)}} \left((\bar{x}_{m_1}^{(n+1)} - \bar{x}_O) \wedge (\bar{x}_{m_2}^{(n+1)} - \bar{x}_O) \right) \cdot \bar{e}_z = 2\mathcal{V}^{(n)} \quad (10)$$

We can then rewrite relation (10) using the position of the markers at the time $t^{(n+1, adv)}$:

$$\sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n, n+1)}} \left(\left[(\bar{x}_{m_1}^{(n+1)} - \bar{x}_{m_1}^{(n+1, adv)}) + (\bar{x}_{m_1}^{(n+1, adv)} - \bar{x}_O) \right] \wedge \left[(\bar{x}_{m_2}^{(n+1)} - \bar{x}_{m_2}^{(n+1, adv)}) + (\bar{x}_{m_2}^{(n+1, adv)} - \bar{x}_O) \right] \right) \cdot \bar{e}_z = 2\mathcal{V}^{(n)} \quad (11)$$

At this stage, the position of the markers at $t^{(n+1)}$ must be determined in order to maintain the volume $\mathcal{V}^{(n)}$. After the advection step, each marker $m \in \mathcal{M}^{(n+1)}$ is slightly moved in the normal direction to the interface, according to the unit vector $\bar{n}_m^{(n+1)}$: for all $m \in \mathcal{M}^{(n, n+1)}$ (same marker at $t^{(n)}$ and $t^{(n+1)}$),

$$\bar{x}_m^{(n+1)} = \bar{x}_m^{(n+1, adv)} + k\bar{p}_m \quad (12)$$

with $\bar{p}_m \stackrel{\text{def}}{=} \left| (\bar{x}_m^{(n+1, adv)} - \bar{x}_m^{(n)}) \cdot \bar{n}_m^{(n+1)} \right| \bar{n}_m^{(n+1)}$. The relation (11) is then written as a function of the coefficient k and the displacement \bar{p}_m :

$$\sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n, n+1)}} \left(\left[k\bar{p}_{m_1} + (\bar{x}_{m_1}^{(n+1, adv)} - \bar{x}_O) \right] \wedge \left[k\bar{p}_{m_2} + (\bar{x}_{m_2}^{(n+1, adv)} - \bar{x}_O) \right] \right) \cdot \bar{e}_z = 2\mathcal{V}^{(n)} \quad (13)$$

The coefficient k is solution of the second order polynomial

$$\begin{aligned} & \left[k^2 \sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n, n+1)}} \bar{p}_{m_1} \wedge \bar{p}_{m_2} \right. \\ & \quad + k \sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n, n+1)}} \left((\bar{x}_{m_1}^{(n+1, adv)} - \bar{x}_O) \wedge \bar{p}_{m_2} \right) + \bar{p}_{m_1} \wedge \left((\bar{x}_{m_2}^{(n+1, adv)} - \bar{x}_O) \right) \\ & \quad \left. + \sum_{(m_1, m_2) \in \mathcal{T}^{(n, n+1)}} \left((\bar{x}_{m_1}^{(n+1, adv)} - \bar{x}_O) \wedge (\bar{x}_{m_2}^{(n+1, adv)} - \bar{x}_O) \right) \right] \cdot \bar{e}_z = 2\mathcal{V}^{(n)} \quad (14) \end{aligned}$$

The front-tracking method based on the PERM algorithm for the velocity node interpolation and the velocity based correction method for the volume conservation is called FTR-PERM-VBC.

2.2.3 Comments on the volume conservation methods

To study the influence of the volume conservation algorithms, we again consider the advection of a circle in a vortex flow defined by the velocity field given by Eqs. (3a)-(3b) (see Fig. 3). Table 3 provides, for the front-tracking method FTR-PERM, different grid sizes and volume conservation algorithms, the position error and the local convergence order. For the two proposed methods, accounting for the volume conservation does not modify substantially the accuracy of the solution on the coarsest grid: the error $\|E_{h_e}\|_1$, defined by Eq. (4), increases only from 8.8E-04 to 9.2E-04 with the FTR-PERM-HR method whereas it remains unchanged when the FTR-PERM-VBC is used. This is also valid for the refined grid size. The same comments yield also for the errors computed with the infinity-norm, $\|E_{h_e}\|_\infty$. This result is not really surprising because, although the volume is not strictly conserved in time, the front-tracking method turns out to be very accurate with a volume conservation error less than 1% when the volume conservation is deactivated (Fig. 4b). The same conclusion holds for all grids from 1/16 to 1/512.

Figure 5 presents the total computational time required for the advection of a circle in a vortex flow with respect to the grid size h for the FTR-PERM-HR and FTR-PERM-VBC methods. Whereas

FTR method	FTR-PERM		FTR-PERM-HR		FTR-PERM-VBC	
$h \equiv 2h_e$	$\ E_{h_e}\ _1$	Order	$\ E_{h_e}\ _1$	Order	$\ E_{h_e}\ _1$	Order
1/16	8.8E-04	-	9.2E-04	-	8.8E-04	-
1/32	1.9E-04	2.2	1.9E-04	2.2	1.9E-04	2.2
1/64	4.7E-05	2.0	4.7E-05	2.0	4.7E-05	2.0
1/128	1.2E-05	2.0	1.2E-05	2.0	1.2E-05	2.0
1/256	2.9E-06	2.0	2.8E-06	2.0	2.9E-06	2.0
1/512	7.2E-07	2.0	7.2E-07	2.0	7.2E-07	2.0
$h \equiv 2h_e$	$\ E_{h_e}\ _\infty$	Order	$\ E_{h_e}\ _\infty$	Order	$\ E_{h_e}\ _\infty$	Order
1/16	2.6E-02	-	2.8E-02	-	2.7E-02	-
1/32	2.4E-03	3.5	2.8E-03	3.3	2.5E-03	3.5
1/64	1.2E-03	1.0	1.3E-03	1.1	1.3E-03	0.9
1/128	1.6E-04	2.9	1.7E-04	2.9	1.7E-04	2.9
1/256	3.9E-05	2.0	3.6E-05	2.3	3.9E-05	2.1
1/512	3.5E-05	0.2	3.4E-05	0.1	3.5E-05	0.2

Table 3: Error $\|E_{h_e}\|_1$ and $\|E_{h_e}\|_\infty$ (Eq. 4 and Eq. 5) and local convergence order (Eq. 6) for different grid or mesh sizes and without (FTR-PERM) or with the activation of the volume conservation algorithms (FTR-PERM-HR and FTR-PERM-VBC).

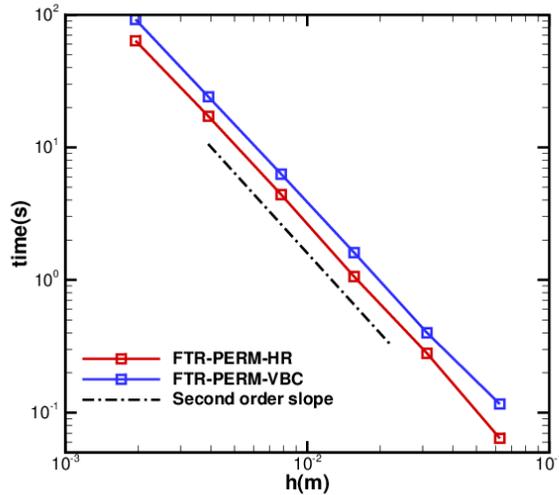


Figure 5: Required total computational time ($t = 4$ s) for the advection of a circle in a vortex flow (Eq. 3a-3b) when the volume conservation is activated. Comparison between the FTR-PERM-HR and FTR-PERM-VBC

both methods show an increasing computational time proportional to the square of the grid size h , the FTR-PERM-VBC method is slightly more expensive than the FTR-PERM-HR method.

Although both volume conservation methods seem to be similarly efficient, the homothetic rescaling method remains purely geometric, which could lead to different difficulties. For example, if a drop/bubble is close to a solid wall, the homothety may move the interface markers beyond the physical boundaries. A similar behaviour may be encountered between two drops/bubbles, which could induce an unexpected merging process. On the other hand, the velocity based correction method is less sensitive to such a drawback since the markers displacement depends on the local advection velocity. The choice of the homothety center is also a sensitive issue. If the interface is circular and the

volume center O is adopted for the homothety center, the correction is the same for all the markers. But for elongated structures where the distance between the markers and O are very different, the homothetic rescaling method may dramatically increase and/or deform the initial shape.

From the above discussion, we prefer to adopt the velocity based correction method to ensure the volume conservation for the advection of the interface, namely the FTR-PERM-VBC method.

2.3 2D topological properties of the interface

One of the challenges in the two-phase flows simulation is the evaluation of the surface tension force which corresponds to the stress jumps across the interface. The intensity of this vector is proportional to the local curvature of the interface and is directed according to the unit vector normal to the interface.

In this section, two methods are described to calculate geometrical properties of the interface required to obtain the capillary force. Their accuracy is also discussed. The first method relies on the Frenet method which expresses the curvature as the derivative of the tangential unit vector with respect to the curvilinear coordinate and then transforms an integral along a curve into a difference between values expressed at both curve endpoints. The second method consists in looking for circles passing through specific markers. Each of these methods will be compared with respect to an analytical solution.

2.3.1 Frenet based method

Let us define Δs a curve in the 2d plan, with s the curvilinear coordinate, then in the Frenet-Serret frame (\bar{t}, \bar{n}) , the equality $\partial \bar{t} / \partial s = \kappa \bar{n}$ holds. We denote p_1 and p_2 two points of Δs such that $s(p_2) > s(p_1)$, then the surface tension force along the piece $\Delta s_{p_1 p_2}$ of the curve Δs writes [47] with the Frenet based method:

$$\bar{f}_{\Delta s_{p_1 p_2}} = \int_{\Delta s_{p_1 p_2}} \left(\sigma \kappa \bar{n} + \frac{\partial \sigma}{\partial s} \bar{t} \right) ds = \int_{\Delta s_{p_1 p_2}} \frac{\partial \sigma \bar{t}}{\partial s} ds = (\sigma \bar{t})_{p_2} - (\sigma \bar{t})_{p_1}$$

where σ is the surface tension coefficient. Assuming a constant σ , we get

$$\int_{\Delta s_{p_1 p_2}} \kappa \bar{n} ds = \bar{t}_{p_2} - \bar{t}_{p_1} \quad (15)$$

To evaluate the discrete surface tension force at the marker $m \in \mathcal{M}$, a point belonging to $\Delta s_{p_1 p_2}$, we consider the two adjacent elements e and $e_{[1]}$ such that $m_{[e,1]} \equiv m_{[e_{[1]},2]} \equiv m$, and the elements center C_e and $C_{e_{[1]}}$ (Fig. 6). Let us choose the point p_2 (resp. p_1) such that its orthogonal projection

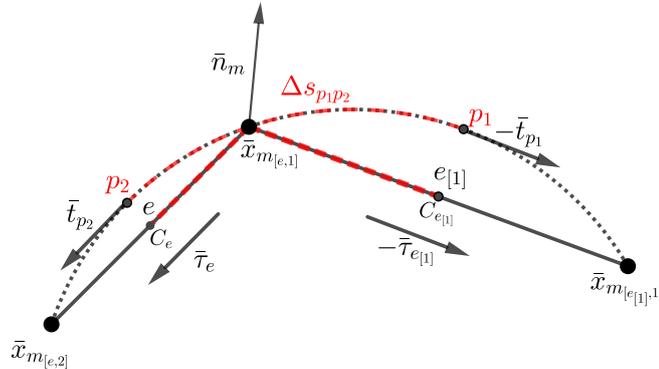


Figure 6: Notations for local curvature and normal estimate using the Frenet based method

over the element e (resp. $e_{[1]}$) is C_e (resp. $C_{e_{[1]}}$), then with notations

$$\bar{\tau}_e \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\bar{x}_{m_{[e,2]}} - \bar{x}_{m_{[e,1]}}}{h_e}, \quad \bar{\tau}_{e_{[1]}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\bar{x}_{m_{[e_{[1],2]}} - \bar{x}_{m_{[e_{[1],1]}}}{h_{e_{[1]}}}$$

we get the approximations

$$\bar{t}_{p_2} \approx \bar{\tau}_e, \quad \bar{t}_{p_1} \approx \bar{\tau}_{e_{[1]}}, \quad \int_{\Delta s_{p_1 p_2}} \kappa \bar{n} ds \approx \kappa_m \bar{n}_m \frac{h_e + h_{e_{[1]}}}{2}$$

Assuming the above approximations mimic the continuous relation (15), we obtain the estimates of the curvature κ_m and unit normal vector \bar{n}_m at the marker m :

$$\kappa_m = 2 \frac{\|\bar{\tau}_e - \bar{\tau}_{e_{[1]}}\|}{h_e + h_{e_{[1]}}}, \quad \bar{n}_m = \frac{\bar{\tau}_e - \bar{\tau}_{e_{[1]}}}{\|\bar{\tau}_e - \bar{\tau}_{e_{[1]}}\|}$$

Here, the tangential vectors $\bar{\tau}_e$ and $\bar{\tau}_{e_{[1]}}$ have been directly calculated on elements e and $e_{[1]}$. However, Febres and Legendre [12] propose a different approach for the calculation of the tangential vectors in the framework of the front-tracking method to compute the surface tension force at the interface which almost leads to the same results.

2.3.2 Circumscribed circle method

The principle of the evaluation of the geometric parameters at the marker $m \in \mathcal{M}$ is based on geometric considerations (Fig. 7). The circumscribed circle (O_m, R_m) passing through three successive markers

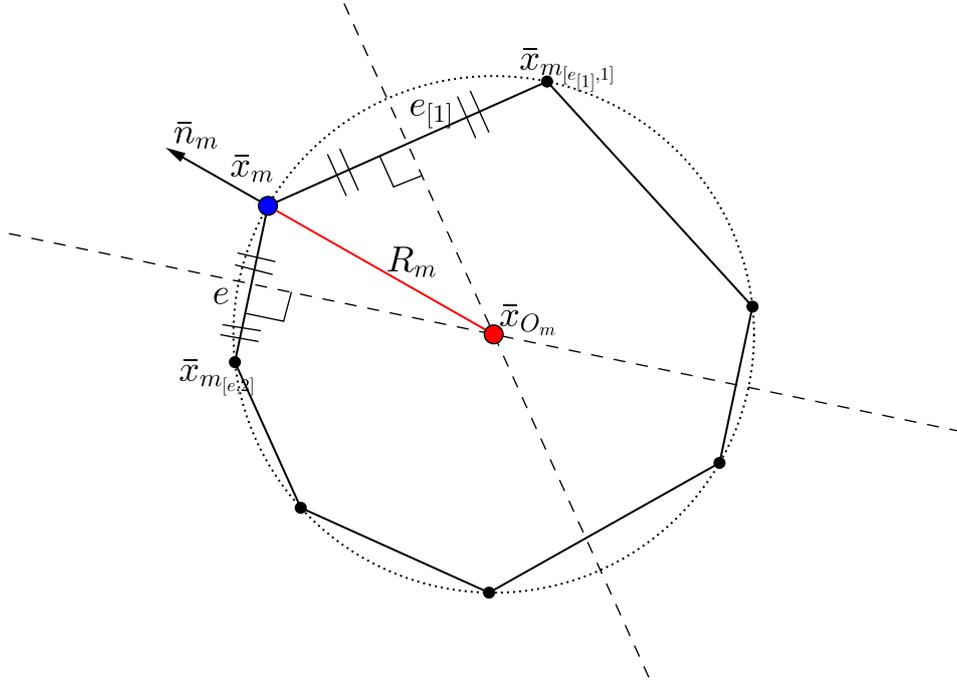


Figure 7: Lagrangian interface points used for the estimate of the curvature at each marker using the circumscribed circle method

of two adjacent elements e and $e_{[1]}$, namely $m \equiv m_{[e,1]} \equiv m_{[e_{[1],2}]}$, $m_{[e,2]}$ and $m_{[e_{[1],1}]}$ gives the estimated curvature κ_m and the unit vector normal \bar{n}_m to an approximated interface:

$$\bar{n}_m = \frac{\bar{x}_m - \bar{x}_{O_m}}{R_m} \text{sign}[(\bar{x}_m - \bar{x}_{O_m}) \cdot \bar{n}], \quad \kappa_m = \frac{\text{sign}[(\bar{x}_m - \bar{x}_{O_m}) \cdot \bar{n}]}{R_m}$$

where $R_m \stackrel{\text{def}}{=} \|\bar{x}_m - \bar{x}_{O_m}\|_2$ is the circumscribed circle radius, $\text{sign}[x]$ stands for the sign of the real value x , $\bar{n} \stackrel{\text{def}}{=} \bar{n}_e + \bar{n}_{e_{[1]}}$ is the sum of the two unit outward vectors normal to e and $e_{[1]}$, and the coordinates \bar{x}_{O_m} are solutions of the linear system:

$$\begin{aligned} (\bar{x}_{O_m} - (\bar{x}_{m_{[e_{[1],1}]} + \bar{x}_m)/2}) \cdot (\bar{x}_{m_{[e_{[1],1}]} - \bar{x}_m) &= 0 \\ (\bar{x}_{O_m} - (\bar{x}_{m_{[e,2]} - \bar{x}_m)/2}) \cdot (\bar{x}_{m_{[e,2]} - \bar{x}_m) &= 0 \end{aligned}$$

It is worth to point out that, with the circumscribed circle approach, κ_m and \bar{n}_m are always both exact as soon as the interface is circular, whatever the size of the elements.

2.3.3 Test case: static curve

To validate the curvatures and normals estimated by the Frenet based method and the circumscribed circle method, we consider an analytical function $f(x) = -x \sin(3\pi x^2/2)$ defined over the range $x \in [0, 1]$. Let us assume a space discretization $\mathcal{D} = (\mathcal{E}, \mathcal{M}, \mathcal{T})$ of the curve $\Gamma = \{M(x, f(x)); x \in [0, 1]\}$. Since Γ is an open curve, the number of markers is no longer $N_{\mathcal{E}}$, but $N_{\mathcal{E}} + 1$. For any marker $m \in \mathcal{M}$, we define $\kappa_{m_{\text{ref}}}$ and $\bar{n}_{m_{\text{ref}}}$ the exact curvature and unit normal vector pointing upward. To measure the error between the estimates and the references, two norms are introduced for the curvature

$$\|E_{\kappa}\|_1 = \frac{\sum_{m \in \mathcal{M}^*} |\kappa_{m_{\text{ref}}} - \kappa_m|}{\sum_{m \in \mathcal{M}^*} |\kappa_{m_{\text{ref}}}|}, \quad \|E_{\kappa}\|_{\infty} = \frac{\max_{m \in \mathcal{M}^*} |\kappa_{m_{\text{ref}}} - \kappa_m|}{\max_{m \in \mathcal{M}^*} |\kappa_{m_{\text{ref}}}|} \quad (16)$$

and the unit normal vector to the interface

$$\|E_{\bar{n}}\|_1 = \sum_{m \in \mathcal{M}^*} \|\bar{n}_{m_{\text{ref}}} - \bar{n}_m\|, \quad \|E_{\bar{n}}\|_{\infty} = \max_{m \in \mathcal{M}^*} \|\bar{n}_{m_{\text{ref}}} - \bar{n}_m\| \quad (17)$$

where $\mathcal{M}^* = \mathcal{M} - \{m_0; m_{N_{\mathcal{E}}}\}$, with m_0 and $m_{N_{\mathcal{E}}}$ the two markers of \mathcal{M} of abscissa $x_{[m_0]} = 0$ and $x_{[m_{N_{\mathcal{E}}}] = 1$.

In the first case, the space discretization \mathcal{D} is such that the projection of the whole elements of the set \mathcal{E} provides a uniform partition of the segment $[0; 1]$ located on the x -axis. Figure 8 illustrates the

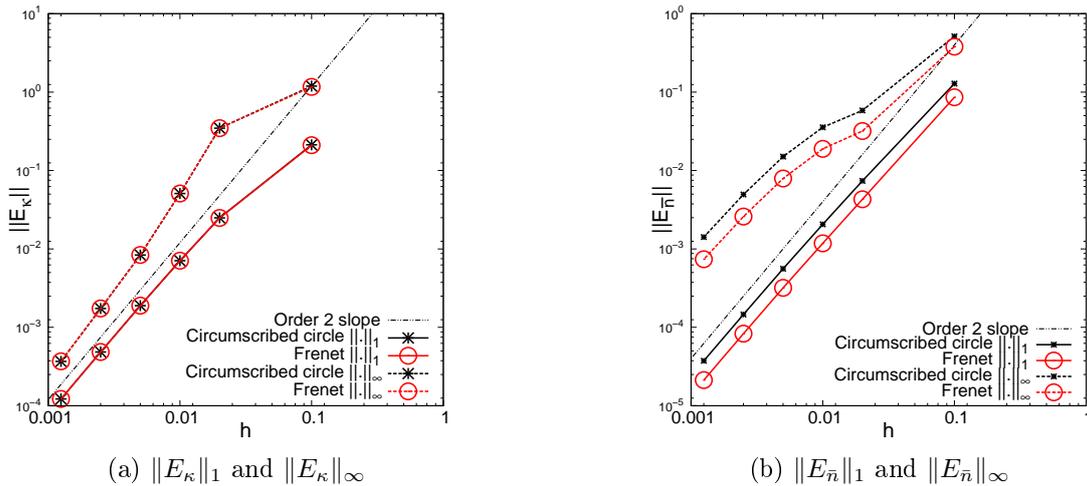


Figure 8: Convergence of the curvature and normal vector for the discrete approximation of the curve $f(x) = -x \sin(3\pi x^2/2)$, $x \in [0, 1]$, as a function of the constant grid size $h = 1/N_{\mathcal{E}}$. The sizes of the projected elements on the x -axis are all equal to h .

variations of the errors for the curvature and the normal vector, as a function of the size of the projected elements $h = 1/N_{\mathcal{E}}$. For the curvature assessment (Fig. 8a), it is impossible to discriminate between

the two methods, whatever the considered norm. For small enough h -values, both methods turn out to be second order accurate in $\|\cdot\|_1$ and $\|\cdot\|_\infty$ norms. Concerning the normal vector calculation (Fig. 8b), the Frenet based method seems to perform slightly better than the circumscribed circle method. Again, the asymptotic convergence of the errors is second order, as it was for the curvature. To end this test case, it is worth noticing that the mesh of the curve Γ is not uniform, only its projection is. The size of the elements varies discretely as $\sqrt{h^2 + (f(ih) - f((i+1)h))^2}$, with $i = 0, N_\mathcal{E} - 1$. Consequently, the sizes of two adjacent elements will be all the more close since $N_\mathcal{E}$ will increase.

In the second case, the definition of the space discretization \mathcal{D} for the curve Γ is similar to previously, except that the projection of the elements on the x -axis forms a succession of segments of size $h/2$ and $3h/2$, with $h = 1/N_\mathcal{E}$. Therefore, the average size of the elements remains h . Figure 9a shows that the method to estimate the curvature does not matter, except eventually for the coarsest

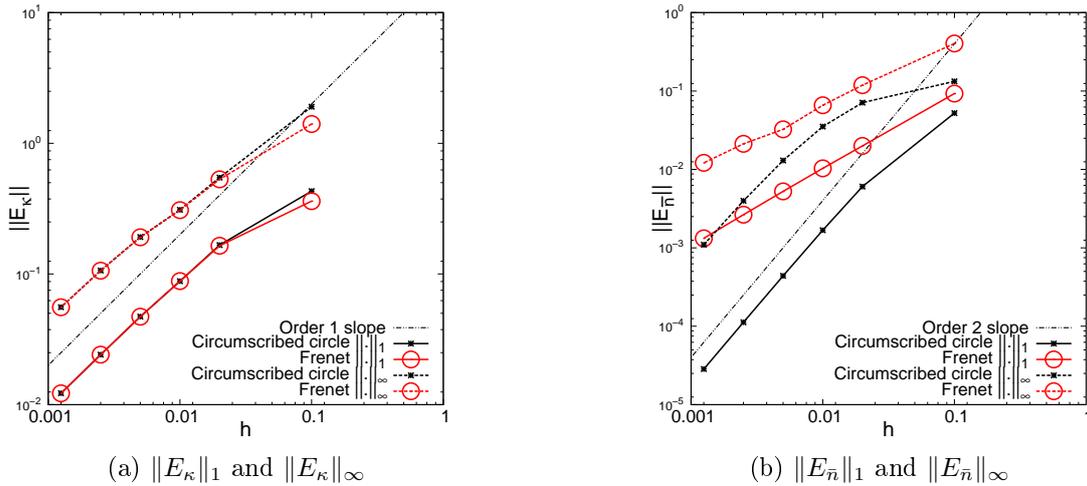


Figure 9: Convergence of errors on the curvature and normal vector for the discrete approximation of the curve $f(x) = -x \sin(3\pi x^2/2)$, $x \in [0, 1]$, as a function of the average grid size $h = 1/N_\mathcal{E}$. The sizes of the projected elements on the x -axis are successively $h/2$ and $3h/2$.

mesh where the Frenet approach is slightly better. For this kind of irregular meshes, the order of convergence is smaller than for the previous test case, since it falls from two to one, only. The major changes are highlighted on the convergence curves for the normal vector estimates (Fig. 9b). Whereas for the circumscribed circle method, the errors are slightly modified between the two test cases, the errors provided by the Frenet based method become significantly larger. With this latter method, the convergence order is then reduced to one.

The two cases indicate that the circumscribed circle method is less sensitive to the mesh discretization of the interface, especially for the calculation of the unit normal vector which seems remaining second order accurate for fine enough meshes. Concerning the curvature, the accuracy of the algorithm is first order, or even second order when the sizes of adjacent elements are close enough. Thus, accounting for the non uniform mesh used in real physical problems, the circumscribed circle method is now adopted to evaluate the surface tension forces.

2.3.4 Test case: circle deformation by a potential flow impinging a flat plane

The aim of this section is to assess the performance of the curvature calculation during the advection of an interface by the FTR-PERM-VBC method. To this end, we consider the deformation of an initial circle, of radius R_0 and center $(x_0; y_0)$, by a potential flow impinging a flat plane:

$$u(x, y) = 2\alpha(x - x_a) \quad [u] = m/s \quad (18a)$$

$$v(x, y) = -2\alpha(y - y_a) \quad [v] = m/s \quad (18b)$$

with x_a and y_a the stagnation point coordinates and α the characteristic frequency. Any point $(x(t), y(t))$ of the interface is solution of the equation

$$\left(\frac{x(t) - x_a}{a(t)}\right)^2 + \left(\frac{y(t) - y_c(t)}{b(t)}\right)^2 = 1 \quad (19)$$

with $a(t) = R_0 \exp(2\alpha t)$, $b(t) = R_0 \exp(-2\alpha t)$ and $y_c(t) = y_a + (y_0 - y_a) \exp(-2\alpha t)$. Relation (19) is the equation of an ellipse centered at $(x_a, y_c(t))$ with $a(t)$ and $b(t)$ the half major and minor axes. The following parameters are chosen $x_0 = 0 m$, $y_0 = 0.75 m$, $R_0 = 0.15 m$, $x_a = 1 m$, $y_a = 0 m$ and $\alpha = 1 s^{-1}$.

Table 4 presents the relative difference between the curvature and normal vector estimates with

		Curvature error				Normal error			
$t = 0.3 s$									
h	$\ E_\kappa\ _1$	Order	$\ E_\kappa\ _\infty$	Order	$\ E_{\bar{n}}\ _1$	Order	$\ E_{\bar{n}}\ _\infty$	Order	
1/50	4.9E-03	-	1.1E-02	-	2.2E-03	-	7.9E-03	-	
1/100	1.2E-03	2.0	2.8E-03	2.0	5.5E-04	2.0	2.0E-03	2.0	
1/200	3.1E-04	2.0	7.1E-04	2.0	1.4E-04	2.0	5.0E-04	2.0	
1/400	7.8E-05	2.0	1.8E-04	2.0	3.4E-05	2.0	1.3E-04	2.0	
1/800	1.9E-05	2.0	4.4E-05	2.0	8.5E-06	2.0	3.1E-05	2.0	
$t = 0.75 s$									
h	$\ E_\kappa\ _1$	Order	$\ E_\kappa\ _\infty$	Order	$\ E_{\bar{n}}\ _1$	Order	$\ E_{\bar{n}}\ _\infty$	Order	
1/50	3.0E-01	-	2.9E-01	-	9.5E-03	-	4.7E-01	-	
1/100	2.0E-01	0.6	2.5E-01	0.2	2.9E-03	1.7	2.2E-01	1.1	
1/200	1.8E-01	0.1	2.1E-01	0.3	7.5E-04	2.0	1.1E-01	1.0	
1/400	1.0E-01	0.8	1.5E-01	0.4	2.5E-04	1.6	3.9E-02	1.5	
1/800	6.9E-02	0.6	7.3E-02	1.1	8.1E-05	1.6	1.7E-02	1.2	

Table 4: Convergence of the errors on curvatures (Eq. 16) and normal vectors (Eq. 17) with the convergence order (see Eq. 6) for the circle deformation by a potential flow at times $t = 0.3 s$ and $t = 0.75 s$

the analytical orders of convergence. At $t = 0.3 s$, the circle is moderately deformed (Fig. 10) and the

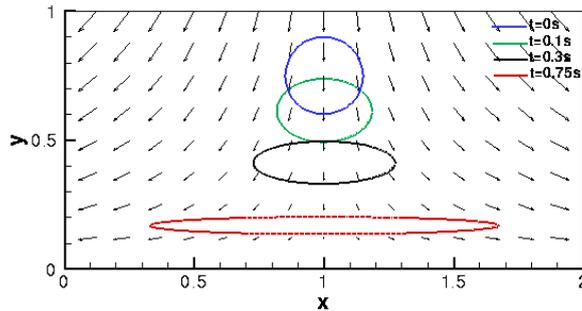


Figure 10: Deformation of a circle by a potential flow (Eq. 18): Initial circular interface (blue) and solutions at $t = 0.1 s$ (green), $t = 0.3 s$ (black) and $t = 0.75 s$ (red).

solutions are second order accurate with low error levels. For a longer time, at $t = 0.75 s$, the ellipse is much more flattened with higher curvature zones. At this time, the second order accuracy is lost and the error values are much larger, especially for the curvature approximation and the infinity norm of the normal vector. To understand the reason of these bad results, we now focus our attention on

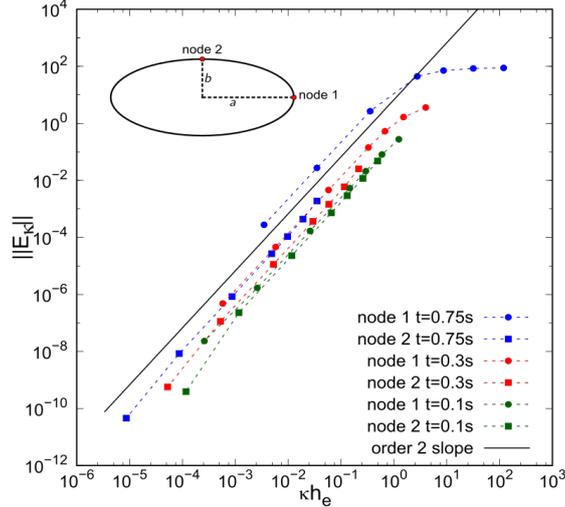


Figure 11: Relative curvature error variation for different local element sizes h_e times the local curvature κ for different ellipses defined by their flattening at different times of simulation ($t = 0.1 s$, $t = 0.3 s$ and $t = 0.75 s$) on two specific points: the node 1 is located in alignment with the major axis and the node 2 is in the alignment of the minor axis, using respectively the circumscribed circle method.

two specific points located at the extremity of the major and minor axes of the ellipse in order to consider both large and small curvatures. The relative curvature errors evaluated at these points, at times $t = 0.1 s$, $t = 0.3 s$ and $t = 0.75 s$, are drawn in Fig. 11 as a function of the dimensionless element size κh_e . This graph clearly shows that the second order accuracy is recovered if $\kappa h_e < 1$, that is if the size of the adjacent elements is at least smaller than the local radius of curvature to the curve. Furthermore, the curvature error is nearly insensitive to the curvature itself from the moment that the element size h_e is scaled by the local curvature κ .

2.4 Comparison with other classical interface tracking methods

The front-tracking method FTR-PERM-VBC developed in the previous sections is now compared to other interface tracking techniques of the literature. The analytical test case is similar to that presented in Sec. 2.1.3. It consists in the tracking of a $0.15 m$ radius circle initially located at $(0.5 m; 0.75 m)$ and advected by a time periodic vortex flow

$$u(x, y) = -2\sin(\pi x)^2 \cos(\pi y) \sin(\pi y) \cos(\pi t/T) \quad [u] = m/s \quad (20a)$$

$$v(x, y) = 2\sin(\pi y)^2 \cos(\pi x) \sin(\pi x) \cos(\pi t/T) \quad [v] = m/s \quad (20b)$$

The initial circle is then first deformed and stretched by the velocity field up to the half period $T/2$, and then the interface evolves reversely over the next half period until it recovers its initial shape at $t = T$ (Fig. 12).

To perform quantitative comparisons with other tracking methods, generally based on the advection of an indicator function, the exact volume fraction from the discrete interface is calculated. Tables 5 and 6 indicate the average volume fraction errors

$$\|E_C\|_1 = \sum_{i,j} h^2 |C^i(i, j) - C^f(i, j)| \quad (21)$$

at the end of the time period for $T = 2 s$ and $T = 8 s$, for different interface tracking methods of the literature, with $C^f(i, j)$ and $C^i(i, j)$ the final and initial volume fraction values at cell (i, j) . Whatever the T -period, the FTR-PERM-VBC method provides always the most accurate volume fraction with

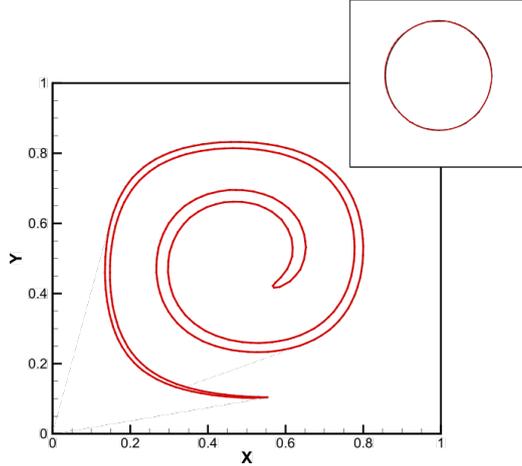


Figure 12: Circle deformation by a periodic vortex flow for $h = 1/32$ and $T = 8 s$, at times $t = T/2$ (main figure), $t = 0$ and $t = T$ (upper right figure). An enlargement of the interface at $t = 0$ and $t = T$ is provided in Fig. 13a.

Methods	h=1/32	Order	h=1/64	Order	h=1/128
ELVIRA [46]	2.52E-03	1.96	6.46E-04	2.16	1.45E-04
Quadratic fit continuity [46]	1.09E-03	1.96	2.80E-04	2.29	5.72E-05
Quadratic fit/EI-LE [46]	1.88E-03	2.09	4.42E-04	2.24	9.36E-05
Rider-Kothe/Puckett [42]	2.36E-03	2.01	5.85E-04	2.16	1.31E-04
Stream/Puckett [19]	2.37E-03	2.07	5.65E-04	2.10	1.32E-04
FTR-FRONTIER [11]	1.03E-03	2.11	2.39E-04	1.32	9.54E-05
2D conservative FTR [7]	5.67E-03	1.68	1.77E-03	1.26	7.43E-04
FTR-PERM-VBC	2.26E-04	2.05	5.45E-05	1.98	1.38E-05

Table 5: Average errors on the volume fraction (Eq. 21) and convergence order (Eq. 4) for several tracking techniques of the literature – Reversed circle deformation by a vortex flow (Eq. 20) for $T = 2 s$.

an error often at least one decade smaller than the other approaches. With the grid refinement, our method turns out to be nearly second order accurate. The accuracy of our tracking method is also graphically confirmed by comparing, for the coarse grid $h = 1/32$, the discrepancy between the interface at the end of the time period $t = T = 8 s$ and at the initial time (Figs. 13a-13d).

In this paragraph, the efficiency of the FTR-PERM-VBC method is studied for the reversed vortex flow, over a complete time period $T = 8 s$, and compared to the Stream/Youngs [19] and DS-CLVOF [49] methods. Due to the lack of data in these references, the computation times of the Stream/Youngs and DS-CLVOF methods have been estimated equal to the usual VOF-PLIC and LSET-WENO methods we developed some years ago (see Tab. 7 for details). These choices are justified by the following comments: (i) the Stream/Youngs method is based on the VOF-PLIC scheme and (ii) the computational time required for the DS-CLVOF method is essentially driven by the level-set part of the algorithm. All calculations are single-threaded and performed on a Linux system with a Intel Xeon CPU E7-8890 V4 2.2GHz.

Figure 14a gives, for the FTR-PERM-VBC, Stream/Youngs (VOF-PLIC) and DS-CLVOF (LSET-WENO) methods, the CPU time required to track the interface from the initial time to $t = T = 8 s$, as a function of the grid size h . The Stream/Youngs (VOF-PLIC) method reveals to be the cheaper scheme, whatever the grid size. For the coarse grids, the FTR-PERM-VBC method is more expensive than DS-CLVOF (LSET-WENO) method. However, the computational cost of the FTR-PERM-VBC method grows quadratically with $1/h$, whereas the cost of the two other methods are nearly $\mathcal{O}(1/h^3)$.

Methods	h=1/32	Order	h=1/64	Order	h=1/128
DS-CLSVOF [49]	5.45E-02	2.38	1.05E-02	2.59	1.74E-03
DS-CLSMOF [24]	2.92E-02	2.41	5.51E-03	2.01	1.37E-03
Stream/Youngs [19]	3.61E-02	1.85	1.00E-02	2.21	2.16E-03
Rider-Kothe/Puckett [42]	4.78E-02	2.78	6.96E-03	2.27	1.44E-03
Stream/Puckett [19]	3.72E-02	2.45	6.79E-03	2.52	1.18E-03
MMCUSL [37]	1.04E-02	2.95	1.34E-03	1.94	3.49E-04
THINC/LS [41]	2.85E-02	3.07	3.39E-03	2.32	6.79E-04
LFRM [48]	-	-	1.23E-02	1.91	3.28E-03
FTR-PERM-VBC	1.14E-03	1.66	3.59E-04	1.77	1.05E-04

Table 6: Average errors on the volume fraction (Eq. 21) and convergence order (Eq. 4) for several tracking techniques of the literature – Reversed circle deformation by a vortex flow (Eq. 20) for $T = 8 s$.

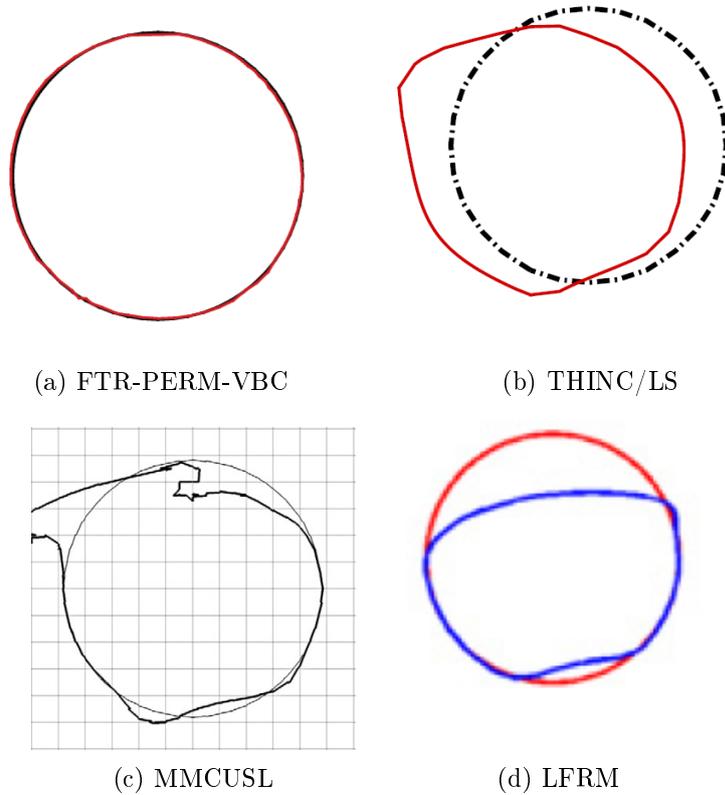
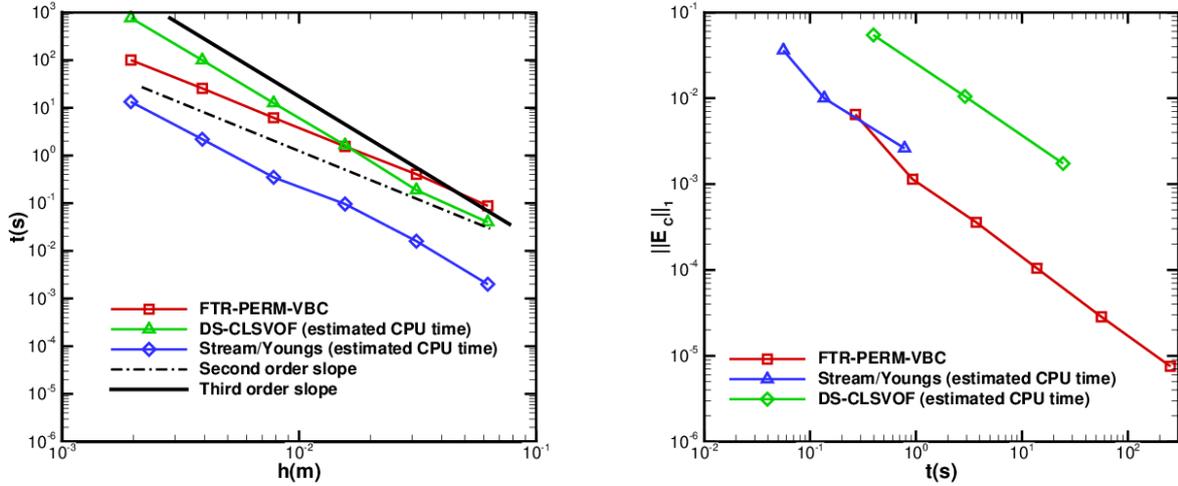


Figure 13: Comparison of the initial and final shape of the reversed circle deformation by a vortex flow for the FTR-PERM-VBC and different tracking methods of the literature, $h = 1/32$ and $T = 8 s$. Methods: (a) FTR-PERM-VBC (b) Coupled THINC and level set method (THINC/LS) [41] (c) Mass and momentum conserving unsplit semi-Lagrangian (MMCUSL) [37] (d) The Local Front Reconstruction Method (LFRM) with the resolution factor $nc = 2$ i.e the ratio between the reconstruction grid and the Eulerian grid resolution [48].

Thus, the computational cost of the FTR-PERM-VBC method becomes all the more competitive that the grid becomes finer.

The efficiency of a numerical method links both the computation cost and the accuracy of the numerical solution. Figure 14b shows the volume fraction error (Eq. 21) as a function of the estimated CPU time for the FTR-PERM-VBC, Stream/Youngs (VOF-PLIC) and DS-CLSVOF (LSET-WENO) methods. Whereas the computation times are always estimates (see here-above), the errors for the



(a) Computational times vs the Eulerian grid size h (b) Average errors on the volume fraction as a function of the total computational time

Figure 14: Calculation of the reversed circle in a vortex flow (Eq. 20a-20b) over the period $T = 8$ s for the FTR-PERM-VBC, Stream/Youngs (VOF-PLIC) and the DS-CLSVOF (LSET-WENO) methods.

Stream/Youngs and DS-CLSVOF methods are respectively extracted from [19] and [49] (and also reported in Tab. 6). The Stream/Youngs (VOF-PLIC) seems to be the most efficient method when a

Method	Abbreviation	Reference
Volume of Fluid method with PLIC reconstruction	VOF-PLIC	[59, 45]
Level-Set with conservative WENO scheme	LSET-WENO	[36, 35]
Hybrid method of particle/Level-Set coupling	LSET-PART	[52]
Front-tracking without connectivity level contour reconstruction method (and volume conservation every 100 iterations)	FTR-LCRM-VC	[47]
Front-tracking method with PERM reconstruction for velocity nodes calculation (and volume conservation)	FTR-PERM-VBC	Present method

Table 7: Different methods used for comparison tests

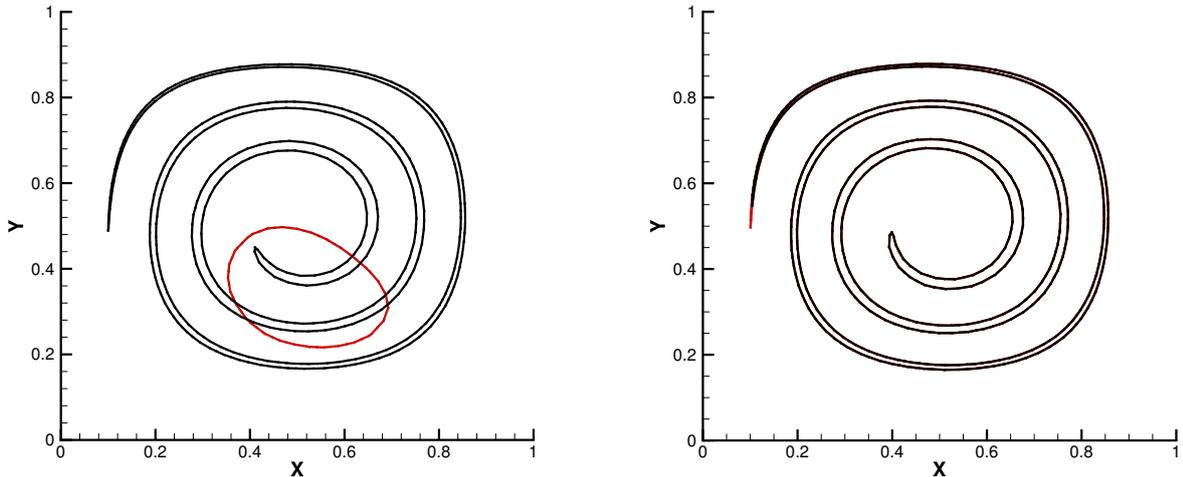
rough solution is simply expected. As soon as a better precision is searched, the FTR-PERM-VBC method becomes the less expensive approach in comparison with the DS-CLSVOF (LSET-WENO) and Stream/Youngs (VOF-PLIC) methods. We can also notice that the CPU time increases linearly with the decrease of the average errors on volume fraction for the FTR-PERM-VBC and the DS-CLSVOF (LSET-WENO) approaches.

Since the Lagrangian front tracking methods are usually considered as the most accurate schemes, the FTR-PERM and FTR-LCRM (resp. FTR-PERM-VBC and FTR-LCRM-VC) methods without (resp. with) the volume conservation algorithms are compared on the steady vortex flow at $t = 4$ s (see Eqs. 3a-3b in Sec. 2.1.3). Table 8 sums up the different results. Contrary to the FTR-LCRM method, which loses a lot of accuracy in its volume conservative version FTR-LCRM-VC, the FTR-PERM and FTR-PERM-VBC methods provide identical results. Likewise, although the FTR-LCRM approach is second order accurate beyond $h = 1/32$ ($h = 1/128$ for FTR-LCRM-VC), the errors remain at

h	FTR-PERM(-VBC)		FTR-LCRM		FTR-LCRM-VC	
	$\ E_{h_e}\ _1$	Order	$\ E_{h_e}\ _1$	Order	$\ E_{h_e}\ _1$	Order
1/16	8.8E-04	-	7.7E-03	-	3.3E-02	-
1/32	1.9E-04	2.2	3.0E-03	1.3	3.1E-02	0.1
1/64	4.7E-05	2.0	7.6E-04	2.0	2.4E-02	0.4
1/128	1.2E-05	2.0	1.9E-04	2.0	1.7E-02	0.5
1/256	2.9E-06	2.0	4.8E-05	2.0	4.4E-03	1.9
1/512	7.2E-07	2.0	1.2E-05	2.0	1.1E-03	2.0

Table 8: Average error on the position (Eq. 4) and convergence order (Eq. 6) for the FTR-PERM(-VBC) or FTR-LCRM(-VC) methods (Tab. 7) - Circle deformation by a steady vortex flow (Eqs. 3a-3b)

least one order of magnitude larger than those achieved with FTR-PERM-VBC. The huge worsening of the error when the volume conservation is accounted for in the FTR-LCRM method, namely the FTR-LCRM-VC method, is illustrated by the drawing of the interface shapes of the solution for a coarse grid (Fig. 15a). This illustration clearly indicates that the volume conservation totally destroys



(a) FTR-LCRM (black line) and FTR-LCRM-VC (red line) (b) FTR-PERM (black line) and FTR-PERM-VBC (red line)

Figure 15: Circle deformation by a steady vortex flow (Eqs. 3a-3b) at $t = 4 s$, $h = 1/32$. The red (resp. black) interface is obtained with (resp. without) the volume conservation algorithm.

the interface shape for the FTR-LCRM method. In contrast, the volume conservative version FTR-PERM-VBC of our front-tracking method FTR-PERM does not significantly alter the shape of the ligament, except at its extremity where some differences can be exhibited (Fig. 15b).

The last test compares the ability of the different methods presented in Tab. 7 to conserve the volume as a function of time for the steady vortex flow (Fig. 16). Since the solutions computed by the FTR-PERM-VBC and FTR-LCRM-VC methods are, by construction, conservative, they are omitted from this study. The FTR-PERM method is the most accurate with a volume variation less than 0.1%. In the whole, the volume is rather well preserved for the front-tracking methods. By decreasing accuracy, the FTR-LCRM, LSET-PART, VOF-PLIC and LSET-WENO methods create volume variations of about 1%, 4%, 10% to $\approx 90\%$ of the initial value.

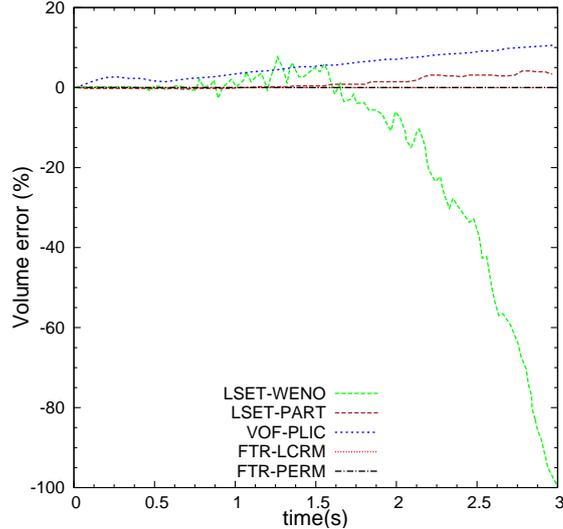


Figure 16: Evolution of the volume error for the advection of a circle in a vortex flow (Eqs. 3a-3b) by different front-tracking methods, $h = 1/64$

To conclude this comparison section, we showed that our front-tracking method FTR-PERM-VBC (i) is very accurate, (ii) converges with a second order slope to the exact solution, (iii) is not degraded by the volume conservation algorithm, (iv) provides always the most accurate results with reasonable CPU times compared to other existing methods of the literature.

3 Interface velocity reconstruction for two-phase flows

The validations performed in the previous sections show the ability of our method to track efficiently interfaces, even for largely stretched and deformed shapes, while keeping the volume constant. We also showed that the most accurate algorithm to calculate the marker velocity from the Eulerian field turns out to be the PERM method. However, the PERM method as well as the bilinear or Peskin methods assume some regularity of the velocity field across the interface, what is clearly questionable for two-phase flows where velocity derivatives are discontinuous due to the jump relations. To overcome this issue, an original velocity reconstruction method based on the physical jump at the interface has been developed and is presented below.

3.1 Reconstruction algorithm

3.1.1 Jump relations

Let us consider an incompressible and immiscible two fluid flow, labeled 1 and 2, separated by an interface Γ , of surface tension σ (Fig. 17).

By assuming a zero interface thickness, the velocity vector \bar{v} must be continuous across interface Γ , whereas the stress force applied by the fluid flow on both sides of the interface, $\bar{\mathcal{S}} \cdot \bar{n} \equiv (-p\bar{\mathcal{I}} + \mu(\bar{\nabla}\bar{v} + (\bar{\nabla}\bar{v})^t)) \cdot \bar{n}$, is discontinuous [8]. For each point belonging to the interface Σ , we have

$$\bar{v}_1 = \bar{v}_2 \quad (22a)$$

$$\bar{n} \cdot (\bar{\mathcal{S}}_1 - \bar{\mathcal{S}}_2) \cdot \bar{n} = \sigma(\bar{\nabla} \cdot \bar{n}) \quad (22b)$$

$$\bar{t} \cdot (\bar{\mathcal{S}}_1 - \bar{\mathcal{S}}_2) \cdot \bar{n} = (\bar{\nabla}\sigma) \cdot \bar{t} \quad (22c)$$

with \bar{n} the unit outward normal vector of the fluid domain 2 and \bar{t} the tangential unit vector to the interface Γ . For three-dimensional problems, Eq. (22c) is a vectorial relation with two components.

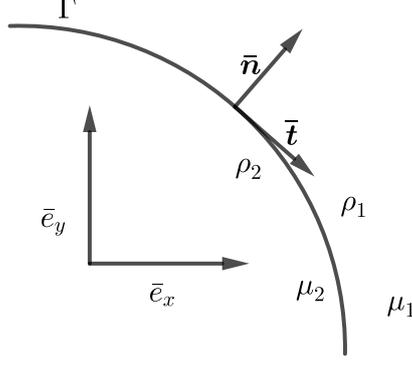


Figure 17: Sketch of a two-fluid interface Γ in a Cartesian coordinate system (x,y) . Vectors \bar{t} and \bar{n} are respectively tangent and normal to the interface, the normal pointing toward fluid 1.

Using the Cartesian coordinate system in the standard basis (\bar{e}_x, \bar{e}_y) to express the normal and tangential unit vectors to the interface $\bar{n} = n_x \bar{e}_x + n_y \bar{e}_y$ and $\bar{t} = n_y \bar{e}_x - n_x \bar{e}_y$, and assuming an uniform surface tension ($(\bar{\nabla}\sigma) \cdot \bar{t} = 0$), jump relations (22a–22c) can be reformulated as follows:

$$[v_x]_2^1 = 0, \quad [v_y]_2^1 = 0 \quad (23a)$$

$$\left[-p + 2\mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} n_x^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) n_x n_y + \frac{\partial v_y}{\partial y} n_y^2 \right) \right]_2^1 = \sigma \kappa \quad (23b)$$

$$\left[\mu \left(\left(\frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{\partial v_y}{\partial y} \right) n_x n_y + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) (n_y^2 - n_x^2) \right) \right]_2^1 = 0 \quad (23c)$$

with $\kappa \equiv \bar{\nabla} \cdot \bar{n}$ the local curvature of the interface and $[X]_2^1 \equiv X_1 - X_2$ denoting the jump of the quantity X across the interface. The principle of our velocity reconstruction method is to evaluate the Lagrangian interface mesh node velocity \bar{V}_m , and also the velocity gradients, at node m thanks to the jump conditions (23a)–(23c). Once they are obtained, the interface is advected with these calculated velocities and the different algorithms described in Sec. 2.1 are applied.

The key points of our velocity reconstruction method at the interface node m rely on velocity and pressure approximations based on the staggered grids used for solving the fluid flow equations. These approximations are then introduced into the jump relations (23a)–(23c) to form a set of two algebraic equations whose unknowns are the velocity components of the considered interface node. The different steps to get the marker node velocity are now described.

3.1.2 Linear approximation function for the velocity components

The construction of linear approximation functions for the velocity components in each of the two fluid domains is now detailed thanks to an example. Let us note $V_m^{x,1}$ the unknown horizontal velocity component of the fluid domain 1, expressed at any interface marker $m \in \mathcal{M}$, with coordinates \bar{x}_m . To get a local continuous approximation $\tilde{v}^{x,1}(\bar{x})$, a linear interpolation polynomial on a triangular element is constructed using two other Eulerian grid nodes $n_2^{x,1}$ and $n_3^{x,1}$ (Fig. 18). Their coordinates are $\bar{x}_2^{x,1}$ and $\bar{x}_3^{x,1}$ and the related velocities are $v_2^{x,1}$ and $v_3^{x,1}$. They belong to the horizontal velocity components of the fluid domain 1 (Fig. 18). Therefore, the linear approximation of the horizontal component of the velocity simply writes

$$\tilde{v}^{x,1}(\bar{x}) = V_m^{x,1} \psi_m^{x,1}(\bar{x}) + v_2^{x,1} \psi_2^{x,1}(\bar{x}) + v_3^{x,1} \psi_3^{x,1}(\bar{x})$$

The functions $\psi_\alpha^{x,1}(\bar{x})$ are the usual Lagrangian linear polynomials such that $\psi_\alpha^{x,1}(\bar{x}_\beta^{x,1}) = \delta_{\alpha,\beta}$, for $(\alpha, \beta) \in \{m, 2, 3\} \times \{m, 2, 3\}$, with the Kronecker delta $\delta_{\alpha,\beta} = 0$ if $\alpha \neq \beta$ and $\delta_{\alpha,\alpha} = 1$. The variables $v_k^{x,1}$, $k = 2, 3$, are the known horizontal velocities on the horizontal Eulerian grid and $V_m^{x,1}$ is the unknown horizontal velocity of the interface marker m for fluid 1. The choice of the two additional nodes

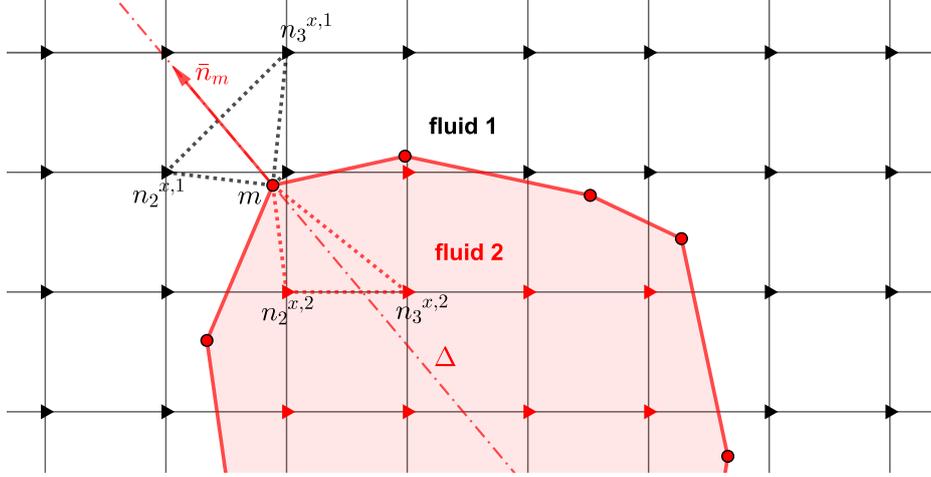


Figure 18: Notations for the calculation of the velocity at any marker $m \in \mathcal{M}$: red (resp. black) triangular symbols are the horizontal velocity nodes of the Eulerian grid belonging to the fluid 2 (resp. 1). The red (resp. black) dotted triangle indicates the support on which the horizontal velocity function is linearly approximated for the fluid 2 (resp. 1).

$n_2^{x,1}$ and $n_3^{x,1}$ of the triangle must fulfill some requirements: they must be located (i) in fluid domain 1 and on the horizontal staggered grid, (ii) on either side of the straight line $\Delta = \{\bar{x}_m + \xi \bar{n}_m; \xi \in \mathcal{R}\}$ with \bar{n}_m the unit normal vector to the interface at m , (iii) close to m and (iv) so that the triangle of vertices m , $n_2^{x,1}$ and $n_3^{x,1}$ is as equilateral as possible. This last condition is measured by the quality Q of the triangle element which is defined by twice the ratio of the radii between the inscribed and circumscribed circles [43]. For the equilateral triangle, $Q = 1$, and the quality is considered acceptable if $Q \geq 0.1$. The set of triangles $S^{x,1}$ satisfying the conditions (i)-(iv), with $Q \geq 0.1$, gathers the whole set of potential candidates to use for having an accurate linear approximation of the component of the velocity in a given fluid domain. Extra conditions will be later added to select, among all the candidates, the best triangle, for each velocity component in each fluid domain, when the linear system stemming from the jump conditions will be set up.

3.1.3 Pressure approximations at the interface node

Contrary to the velocity which remains still an unknown variable at this stage, the two pressures in the two fluid domains at any interface node $m \in \mathcal{M}$ are directly approximated using the Eulerian nodes of the pressure grid. For each fluid domain, for example fluid 1, this is performed by selecting two grid nodes $n_2^{p,1}$ and $n_3^{p,1}$, at coordinates $\bar{x}_2^{p,1}$ and $\bar{x}_3^{p,1}$ and located (i) in the correct fluid domain on the pressure staggered grid (domain 1 in this example), (ii) on either side of the straight line $\Delta = \{\bar{x}_m + \xi \bar{n}_m; \xi \in \mathcal{R}\}$ and (iii) closest to the interface node m . Let us note p_2^1 and p_3^1 the pressures at $n_2^{p,1}$ and $n_3^{p,1}$. Then the pressure p_m^1 at the marker m is simply equal to the interpolated pressure at the intersection point n_I^1 whose coordinate is \bar{x}_I^1 , located at the intersection between $\Delta = \{\bar{x}_m + \xi \bar{n}_m; \xi \in \mathcal{R}\}$ and $(n_2^{p,1} n_3^{p,1})$, namely

$$p_m^1 = \frac{\|\bar{x}_2^{p,1} - \bar{x}_I^1\| p_3^1 + \|\bar{x}_3^{p,1} - \bar{x}_I^1\| p_2^1}{\|\bar{x}_3^{p,1} - \bar{x}_2^{p,1}\|}$$

Fig. 19 illustrates the pressure approximations at m with the representation of all the grid pressure nodes used for the calculation.

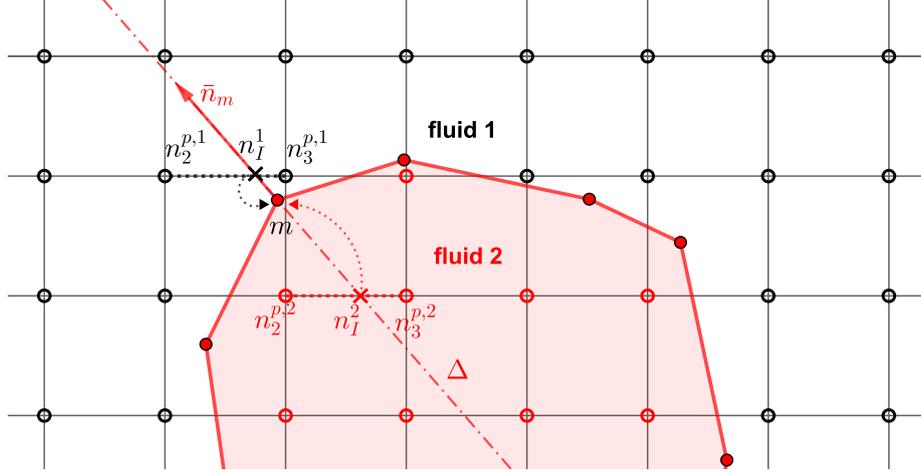


Figure 19: Notations for the calculation of the pressure at any marker $m \in \mathcal{M}$: empty red (resp. black) open circular symbols are the pressure nodes of the Eulerian grid belonging to the fluid 2 (resp. 1). The two symbols connected by the red (resp. black) dotted line are used to interpolate the pressure at the \times symbol, and then at the marker position m , for the fluid 2 (resp. 1).

3.1.4 Reconstruction of the velocity at the interface marker m

In this section, the jump relations (23a)–(23c) are enforced by using the linear approximations of the velocity components and the pressure approximations. The first condition (23a) is easily satisfied by imposing the equality $V_m^x \stackrel{\text{def}}{=} V_m^{x,1} = V_m^{x,2}$ and $V_m^y \stackrel{\text{def}}{=} V_m^{y,1} = V_m^{y,2}$. Let $\psi_i^{x,k}(\bar{x})$ (resp. $\psi_i^{y,k}(\bar{x})$), $i \in \{m, 2, 3\}$, the i^{th} linear Lagrangian polynomial on the triangle be defined by nodes m , $n_2^{x,k}$ and $n_3^{x,k}$ (resp. m , $n_2^{y,k}$ and $n_3^{y,k}$), in the fluid domain k . With similar notations, $v_i^{x,k}$ (resp. $v_i^{y,k}$) is the horizontal (resp. vertical) velocity component on the Eulerian grid at nodes $n_i^{x,k}$ (resp. $n_i^{y,k}$), $i = 2, 3$, located in the fluid domain k . Substituting the linear interpolations and the pressure approximations into the jump relations (23b)–(23c), we get the following linear system:

$$A(1,1)V_m^x + A(1,2)V_m^y = B(1) \quad (24a)$$

$$A(2,1)V_m^x + A(2,2)V_m^y = B(2) \quad (24b)$$

with

$$A(1,1) = 2 \left(\sum_{k=1}^2 (-1)^k \mu_k \left(n_x^2 \partial_x \psi_m^{x,k} + n_x n_y \partial_y \psi_m^{x,k} \right) \right)$$

$$A(1,2) = 2 \left(\sum_{k=1}^2 (-1)^k \mu_k \left(n_x n_y \partial_x \psi_m^{y,k} + n_y^2 \partial_y \psi_m^{y,k} \right) \right)$$

$$A(2,1) = \left(\sum_{k=1}^2 (-1)^k \mu_k \left(n_x n_y \partial_x \psi_m^{x,k} + \frac{n_y^2 - n_x^2}{2} \partial_y \psi_m^{x,k} \right) \right)$$

$$A(2,2) = \left(\sum_{k=1}^2 (-1)^k \mu_k \left(-n_x n_y \partial_y \psi_m^{y,k} + \frac{n_y^2 - n_x^2}{2} \partial_x \psi_m^{y,k} \right) \right)$$

$$B(1) = - \sum_{k=1}^2 (-1)^k \left(-p_m^k + 2\mu_k \sum_{i=2}^3 \left(n_x^2 v_i^{x,k} \partial_x \psi_i^{x,k} + n_x n_y \left(v_i^{y,k} \partial_x \psi_i^{y,k} + v_i^{x,k} \partial_y \psi_i^{x,k} \right) + n_y^2 v_i^{y,k} \partial_y \psi_i^{y,k} \right) \right) - \sigma \kappa$$

$$B(2) = - \sum_{k=1}^2 (-1)^k \mu_k \sum_{i=2}^3 \left(n_x n_y \left(v_i^{x,k} \partial_x \psi_i^{x,k} - v_i^{y,k} \partial_y \psi_i^{y,k} \right) + \frac{n_y^2 - n_x^2}{2} \left(v_i^{x,k} \partial_y \psi_i^{x,k} + v_i^{y,k} \partial_x \psi_i^{y,k} \right) \right)$$

As described in Sec. 3.1.2, four triangle sets $S^{x,1}$, $S^{y,1}$, $S^{x,2}$ and $S^{y,2}$ have been defined to gather the potential candidates for the linear approximations, for x - and y -velocity components and the two fluid domains. The four finally retained triangles, each one of them belonging to the different sets $S^{x,1}$, $S^{y,1}$, $S^{x,2}$ and $S^{y,2}$, are determined by identifying the combination which provides the smallest condition number for the linear system (24a-24b), $\text{cond}(A) = \lambda_M/\lambda_m$, with λ_M and λ_m the maximal and minimal singular values of A (eigenvalues of $A^t A$).

3.2 Validation: Hadamard-Rybczynski fluid flow solution

To assess the accuracy of the velocity reconstruction method, we consider the Hadamard-Rybczynski solution which consists in a spherical drop or bubble (fluid 2) moving in another fluid labelled 1 by buoyancy in the gravity field $\bar{g} = -g\bar{e}_y$. We assume that the flow is steady, incompressible and governed by the Stokes equations. The sphere is non-deformable with a fixed radius $r = a$, the surface tension is constant and the jump conditions (23a)–(23c) must be fulfilled. To preserve the sphericity of the interface, the pressure in Eq. (23b) is the hydrostatic pressure. The Stokes equations are solved in the reference frame of the sphere, with spherical coordinates (r, θ, Φ) . Since the flow is axi-symmetric with respect to the vertical direction ($\theta = 0$), all the azimuthal derivatives are zero as well as the azimuthal component of the velocity. The length, velocity and pressure are respectively scaled by a , $ga^2(\rho_1 - \rho_2)/\mu_1$ and $\rho_1 ga$. Then, the dimensionless velocity and pressure of fluid k writes:

$$v_{r,k}(r, \theta) = -2 \cos \theta \left(\frac{A_k}{r^3} + \frac{B_k}{r} + C_k + D_k r^2 \right) \quad (26a)$$

$$v_{\theta,k}(r, \theta) = \sin \theta \left(\frac{-A_k}{r^3} + \frac{B_k}{r} + 2C_k + 4D_k r^2 \right) \quad (26b)$$

$$p_k(r, \theta) = p_{0,k} - \frac{\rho_k}{\rho_1} r \cos \theta - \frac{\mu_k}{\mu_1} \left(1 - \frac{\rho_2}{\rho_1} \right) \left(\frac{2B_k}{r^2} + 20D_k r \right) \cos \theta \quad (26c)$$

with $p_{0,2} - p_{0,1} = 2\sigma/(\rho_1 ga^2)$. The expressions for the surrounding fluid 1 write

$$A_1 = \frac{\mu_2}{4(\mu_1 + \mu_2)} V, \quad B_1 = -\frac{2\mu_1 + 3\mu_2}{4(\mu_1 + \mu_2)}, \quad C_1 = \frac{V}{2}, \quad D_1 = 0$$

whereas those for fluid 2 making up the drop or bubble give

$$A_2 = 0, \quad B_2 = 0, \quad C_2 = -\frac{\mu_1}{4(\mu_1 + \mu_2)} V, \quad D_2 = \frac{\mu_1}{4(\mu_1 + \mu_2)} V$$

with

$$V = \frac{1}{3} \left(\frac{\mu_1 + \mu_2}{\mu_1 + 3\mu_2/2} \right)$$

the dimensionless buoyancy velocity.

Calculations were carried out with two fluid couples spanning the viscosity ratio from 0.01 to 100, the density ratio from 0.001 to 1000 and the surface tension from 0.022 to 0.075 N/m (Tab. 9).

Fluids	Air/water	Air/Oil	Oil/air	Water/air
μ_2/μ_1	0.01	0.1	10	100
ρ_2/ρ_1	0.001	0.0015	680	1000
$\sigma(N/m)$	0.075	0.022	0.022	0.075

Table 9: Physical characteristics for the Hadamard-Rybczynski flow

The streamlines drawn in Fig. 20 for the Water/air couple ($\mu_2/\mu_1 = 100$) show two large symmetrical eddies inside the drop as well as the deviation of the outer flow around the drop. The isobars are also

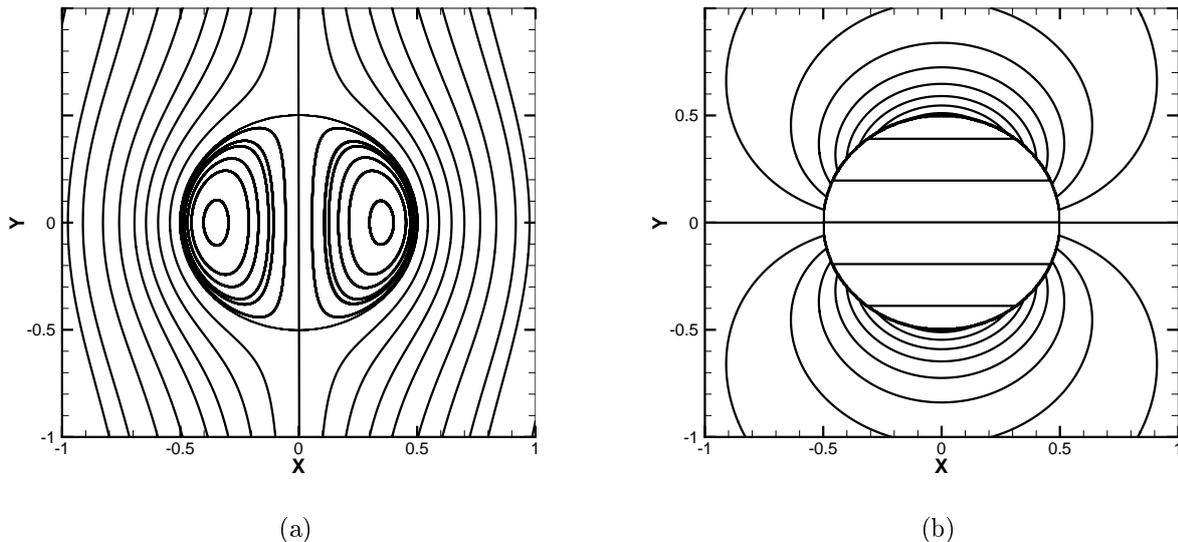


Figure 20: Streamlines (a) and pressure isobars (b) for the Hadamard-Rybczynski solution - Water/air couple (Tab. 9), \mathbf{x} - \mathbf{y} plane for Stokes flow, viscosity ratio $\mu_2/\mu_1 = 100$

plotted, proving linear variation inside fluid 2 and more complex behaviour outside the drop/bubble with downstream overpressure and underpressure upstream.

Since the analytical velocity is known, it is straightforward to compare the numerically obtained velocities to the exact solution at the interface markers. Table 10 gives the relative error on velocity norm calculation as a function of the grid size h ($h_e = h/2$)

$$\|E\|_1 = \frac{\sum_{m \in \mathcal{M}} \|\|\tilde{V}_m\| - \|\bar{v}(\bar{x}_m)\|\|}{\sum_{m \in \mathcal{M}} \|\bar{v}(\bar{x}_m)\|} \quad (27)$$

using either the PERM method, well adapted to track fronts in an homogeneous fluid domain, or the so-called JUMP method designed to take into account the stress discontinuities at the interface between two immiscible fluids. The results indicate that both velocity reconstruction methods provide convergent solutions. However, the convergence order of the velocity jump based method is one order better than that calculated from the PERM algorithm. When the viscosity ratio is less than one, the relative errors are mostly small. Except for the coarsest interface mesh, the JUMP method is more accurate, till one order of magnitude lower for the finest mesh. For viscosity ratios larger than one, the error obtained with the PERM algorithm get dramatically worse, all the more since this ratio increases. This error remains very high, about 20% for the finest grid when $\mu_2/\mu_1 = 100$. On the other hand, those computed with our method turns out to be completely insensitive to μ_2/μ_1 , decreasing from $\approx 10\%$ to $\approx 0.02\%$ with the refinement of the grid size.

This test case clearly indicates that the velocity jump based method is much more adapted to the interface velocity calculation than the PERM method when two-phase flows are considered with large fluid property contrasts.

4 Conclusions and perspectives

In two-dimensions, a front-tracking method has been formulated and validated against various kinematic test cases with success. For the first time, a complete accuracy and convergence analysis of front-tracking methods has been investigated. Among the different algorithms considered in the present work, it appears that using the PERM method [33] for markers advection, together with velocity based

		$\mu_2/\mu_1 = 0.1$				$\mu_2/\mu_1 = 0.01$			
$h = 2h_e$	PERM		JUMP		PERM		JUMP		
	$\ E\ _1$	Order	$\ E\ _1$	Order	$\ E\ _1$	Order	$\ E\ _1$	Order	
1/16	5.1E-02		1.2E-01		5.6E-02		1.2E-01		
1/32	3.1E-02	0.7	2.6E-02	2.2	3.4E-02	0.7	2.7E-02	2.2	
1/64	1.3E-02	1.2	9.7E-03	1.4	1.5E-02	1.2	1.3E-02	1.1	
1/128	7.5E-03	0.9	2.2E-03	2.1	8.2E-03	0.9	2.8E-03	2.2	
1/256	3.6E-03	1.0	6.0E-04	1.9	4.0E-03	1.0	7.2E-04	1.9	
1/512	1.9E-03	0.9	1.6E-04	1.9	2.1E-03	0.9	1.9E-04	1.9	

		$\mu_2/\mu_1 = 10$				$\mu_2/\mu_1 = 100$			
$h = 2h_e$	PERM		JUMP		PERM		JUMP		
	$\ E\ _1$	Order	$\ E\ _1$	Order	$\ E\ _1$	Order	$\ E\ _1$	Order	
1/16	5.6E-01		1.1E-01		6.0E+00		1.3E-01		
1/32	3.1E-01	0.9	4.1E-02	1.5	3.4E+00	0.8	4.5E-02	1.5	
1/64	1.4E-01	1.2	1.1E-02	1.9	1.5E+00	1.2	1.2E-02	1.9	
1/128	7.5E-02	0.9	2.3E-03	2.2	8.3E-01	0.9	2.8E-03	2.1	
1/256	3.6E-02	1.0	6.7E-04	1.8	4.0E-01	1.0	8.3E-04	1.8	
1/512	1.9E-02	0.9	1.6E-04	2.0	2.1E-01	0.9	2.0E-04	2.1	

Table 10: Relative velocity errors at the interface (Eq. 27) and convergence order (Eq. 6) as a function of the grid size h for the Hadamard-Rybczynski fluid flow solution. Different viscosity ratios (μ_2/μ_1) have been considered (Tab. 9).

volume conservation and circumscribed circle curvature and normal calculation, provides a second order convergence in space of the method whatever the test case considered, as soon as the size of the Lagrangian surface mesh elements is at least twice smaller than the local curvature radius of the interface. Compared to previously published front capturing VOF and Level Set techniques or Level Contour front-tracking method, our FTR-PERM-VBC approach performs always better, with error levels at least 10 times smaller than other methods on interface position for a circle stretched in vortex flow. In addition, our method requires less CPU time than the other interface tracking methods considered in this paper to reach a given accuracy.

In a second part of the paper, real multiphase flows have been considered with viscosity ratios different than one at the interface, together with surface tension effects. In these problems, the velocity gradients are no more continuous across interface. We have proposed a new interface velocity reconstruction based on the use of the jump relations valid at the interface. By using the analytical solution of Hadamard-Rybczynski, we have been able to demonstrate that even the second order PERM approach was wrong or less accurate compared to the jump relation based velocity interpolation of the markers, as soon as the viscosity ratio at the interface was far from 1. These new results are very encouraging for future simulations of real two-phase flows with front-tracking methods.

Ongoing works and perspectives are the extension of the method to three dimensions. The main differences between two- and three-dimensional formulations of the method concern mesh management and curvature/normal estimates. Indeed, in 3D, on one hand, smoothing and swapping procedures are required to ensure a good quality of the interfacial mesh. On the other hand, the curvature and normal calculations are much more subtle and very sensitive to mesh properties. These works have been first presented in [3]. To finish with, in two-dimensions, the coupling between the front tracking method using jump relations for marker velocities and the Navier-Stokes discretization is under investigation. Our main idea is to suppress all density and viscosity averages in the cells cut by the interface (one-fluid model of [26]) and use directly the marker velocities and gradients in the finite volume fluxes coming

from the momentum equation approximation.

5 Acknowledgements

This work was granted access to the HPC resources of IDRIS, CINES and CCRT under the allocation A0032b06115 proposed by GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif). All the numerical methods presented in the present work are part of home made code FUGU, developed in MSME laboratory of Marne-La-Vallée University. FUGU code is patented as digital work by SATT Ile de France and UPEM University under n°IDDN . FR . 001 . 480009 . 000 .S.P. 2017 . 000 . 10000.

References

- [1] J. W. Barrett, H. Garcke, and R. Nurnberg. Phase field models versus parametric front tracking methods: Are they accurate and computationally efficient? *Communications in Computational Physics*, 15(2):506–555, 2014.
- [2] J. Bell, P. Colella, and H. Glaz. A second-order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 85(2):257 – 283, 1989.
- [3] D.A. Koffi Bi, M. Tavares, E. Chénier, and S. Vincent. A review of geometrical interface properties for 3D Front-Tracking methods. *5th Turbulence and Interactions conference, Les Trois-Ilets, West French Indies, France*, 2018.
- [4] F. Bierbrauer and S.P. Zhu. A numerical model for multiphase flow based on the GMPPS formulation. Part I: Kinematics. *Computers and Fluids*, 36:1199–1212, 2007.
- [5] V. Le Chenadec and H. Pitsch. A monotonicity preserving conservative sharp interface flow solver for high density ratio two–phase flows. *Journal of Computational Physics*, 249:185–203, 2013.
- [6] G. Compère, E. Marchandise, and J.-F. Remacle. Transient adaptivity applied to two-phase incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 227:1923–1942, 2008.
- [7] M. De-kang. Towards front-tracking based on conservation in two space dimensions ii, tracking discontinuities in capturing fashion. *Journal of Computational Physics*, 226(2):1550 – 1588, 2007.
- [8] J.M. Delhaye. Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. Local instant formulation. *International Journal of Multiphase Flow*, 1(3):395 – 409, 1974.
- [9] F. Denner and B. G.M. van Wachem. Compressive VOF method with skewness correction to capture sharp interfaces on arbitrary meshes. *Journal of Computational Physics*, 279:127 – 144, 2014.
- [10] O. Desjardins, V. Moureau, and H. Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics*, 227:8395–8416, 2008.
- [11] J. Du, B. Fix, J. Glimm, X. Jia, X. Li, Y. Li, and L. Wu. A simple package for front tracking. *Journal of Computational Physics*, 213(2):613 – 628, 2006.
- [12] M. Febres and D. Legendre. Enhancement of a 2D front-tracking algorithm with a non-uniform distribution of Lagrangian markers. *Journal of Computational Physics*, 358:173 – 200, 2018.
- [13] S. Ganesan and L. Tobiska. An accurate finite element scheme with moving meshes for computing 3D-axisymmetric interface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 57(2):119–138, 2008.

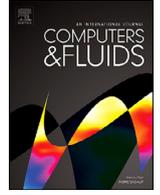
- [14] S. Ganesan and L. Tobiska. Arbitrary Lagrangian-Eulerian finite-element method for computation of two-phase flows with soluble surfactants. *Journal of Computational Physics*, 231(9):3685 – 3702, 2012.
- [15] J. Glimm, M.J. Graham, J. Grove, X.L. Li, T.M. Smith, D. Tan, F. Tangerman, and Q. Zhang. Front tracking in two and three dimensions. *Computers & Mathematics with Applications*, 35(7):1 – 11, 1998. Advanced Computing on Intel Architectures.
- [16] J. Glimm, J. Grove, B. Lindquist, O. A. McBryan, and G. Tryggvason. The bifurcation of tracked scalar waves. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 9(1):61–79, 1988.
- [17] N. Grenier, M. Antuono, A. Colagrossi, D. Le Touzé, and B. Alessandrini. An Hamiltonian interface SPH formulation for multi-fluid and free surface flows. *Journal of Computational Physics*, 228(22):8380 – 8393, 2009.
- [18] F.H. Harlow and J.E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow with fluid with free surface. *Physics of Fluids*, 8:2182–2189, 1965.
- [19] Dalton J.E. Harvie and David F. Fletcher. A new Volume of Fluid advection algorithm: The stream scheme. *Journal of Computational Physics*, 162(1):1 – 32, 2000.
- [20] M. Herrmann. On simulating primary atomization using the refined level set grid method. *Atomization and Sprays*, 21:283–301, 2011.
- [21] E. Ishii, T. Ishikawa, and Y. Tanabe. Hybrid particle/grid method for predicting motion of micro- and macro-free surfaces. *Journal of Fluid Engineering*, 128:921–930, 2006.
- [22] C. B. Ivey and P. Moin. Conservative and bounded volume-of-fluid advection on unstructured grids. *Journal of Computational Physics*, 350:387 – 419, 2017.
- [23] D. Jamet, O. Lebaigue, N. Coutris, and J.M. Delhayé. The second gradient method for the Direct Numerical Simulation of liquid - vapor flows with phase change. *Journal of Computational Physics*, 169(2):624 – 651, 2001.
- [24] M. Jemison, E. Loch, M. Sussman, M. Shashkov, M. Arienti, M. Ohta, and Y. Wang. A coupled Level Set-Moment of Fluid Method for incompressible two-phase flows. *Journal of Scientific Computing*, 54(2):454–491, Feb 2013.
- [25] M. Jemison, M. Sussman, and M. Shashkov. Filament capturing with the Multimaterial Moment-of-Fluid method. *Journal of Computational Physics*, 285:149–172, 2015.
- [26] I. Kataoka. Local instant formulation of two-phase flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(5):745–758, 1986.
- [27] F. Kummer and T. Warburton. Patch-recovery filters for curvature in Discontinuous Galerkin-based Level-Set methods. *Communications in Computational Physics*, 19(2):329–353, 2016.
- [28] D. Legendre and J. Magnaudet. The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 368:81 – 126, 1998.
- [29] J. Liu, S. Koshisuka, and Y. Oka. A hybrid particle-mesh method for viscous, incompressible, multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 202:65–93, 2005.
- [30] M. S. Longuet-Higgins and E. D. Cokelet. The deformation of steep surface waves on water. I. A numerical method of computation. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 350(1660):1–26, 1976.

- [31] J. Lopez, J. Hernandez, P. Gomez, and F. Faura. An improved PLIC–VOF method for tracking thin fluid structures in incompressible two–phase flows. *Journal of Computational Physics*, 208:51–74, 2005.
- [32] X. Lv, Q. Zou, D.E. Reeve, and Y. Zhao. A preconditioned implicit free-surface capture scheme for large density ratio on tetrahedral grids. *Communications in Computational Physics*, 11(1):215–248, 2012.
- [33] R. McDermott and S.B. Pope. The parabolic edge reconstruction method (PERM) for Lagrangian particle advection. *Journal of Computational Physics*, 227(11):5447 – 5491, 2008.
- [34] J. O’Rourke. *Computational Geometry in C*. Cambridge University Press, Cambridge, 2 edition, 10 1998.
- [35] S. Osher and R. Fedkiw. Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results. *Journal of Computational Physics*, 169(2):463 – 502, 2001.
- [36] S. Osher and J. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1):12 – 49, 1988.
- [37] M. Owkes and O. Desjardins. A mass and momentum conserving unsplit semi-Lagrangian framework for simulating multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 332:21 – 46, 2017.
- [38] C. Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of Computational Physics*, 25(3):220 – 252, 1977.
- [39] S. Popinet. An accurate adaptive solver for surface–tension–driven interfacial flows. *Journal of Computational Physics*, 228:5838–5866, 2009.
- [40] S. Popinet and S. Zaleski. A front–tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30:775–793, 1999.
- [41] L. Qian, Y. Wei, and F. Xiao. Coupled THINC and level set method: A conservative interface capturing scheme with high-order surface representations. *Journal of Computational Physics*, 373:284 – 303, 2018.
- [42] W. J. Rider and D. B. Kothe. Reconstructing volume tracking. *Journal of Computational Physics*, 141(2):112–152, 1998.
- [43] I. Roghair, M. Van Sint Annaland, and J.A.M. Kuipers. An improved Front-Tracking technique for the simulation of mass transfer in dense bubbly flows. *Chemical Engineering Science*, 152:351 – 369, 2016.
- [44] L. Scarbolo, D. Molin, P. Perlekar, M. Sbragaglia, A. Soldati, and F. Toschi. Unified framework for a side-by-side comparison of different multicomponent algorithms: Lattice Boltzmann vs. phase field model. *Journal of Computational Physics*, 234:263 – 279, 2013.
- [45] R. Scardovelli and S. Zaleski. Direct Numerical Simulation of Free-Surface and Interfacial Flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31:567–603, January 1999.
- [46] R. Scardovelli and S. Zaleski. Interface reconstruction with least-square fit and split Eulerian-Lagrangian advection. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 41(3):251–274, 2003.
- [47] S. Shin and D. Juric. Modeling Three-Dimensional Multiphase Flow Using a Level Contour Reconstruction Method for Front Tracking without Connectivity. *Journal of Computational Physics*, 180(2):427 – 470, 2002.

- [48] S. Shin, I. Yoon, and D. Juric. The Local Front Reconstruction Method for direct simulation of two- and three-dimensional multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 230(17):6605 – 6646, 2011.
- [49] M. Sussman and E. G. 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, 2000.
- [50] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. *Journal of Computational Physics*, 114(1):146 – 159, 1994.
- [51] G. Tomar, D. Fuster, S. Zaleski, and S. Popinet. Multiscale simulations of primary atomization using Gerris. *Computers and Fluids*, 39:1864–1874, 2010.
- [52] 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, 2012.
- [53] 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, 2001.
- [54] G. Tryggvason, R. Scardovelli, and S. Zaleski. *Direct numerical simulations of gas-liquid multiphase flows*. Cambridge University Press, 2011.
- [55] S. O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100(1):25 – 37, 1992.
- [56] S. Vincent, G. Balmigère, J.-P. Caltagirone, and E. Meillot. Eulerian–Lagrangian multiscale methods for solving scalar equations - Application to incompressible two–phase flows. *Journal of Computational Physics*, 229:73–106, 2010.
- [57] S. Vincent and J.-P. Caltagirone. A one–cell local multigrid method for solving unsteady incompressible multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 163:172–215, 2000.
- [58] B. Xie and F. Xiao. Toward efficient and accurate interface capturing on arbitrary hybrid unstructured grids: The THINC method with quadratic surface representation and gaussian quadrature. *Journal of Computational Physics*, 349:415 – 440, 2017.
- [59] D. Youngs. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical methods for fluid dynamics*, 24(2):273–285, 1982.
- [60] D. Zuzio and J.-L. Estivalezes. An efficient block parallel AMR method for two phase interfacial flow simulations. *Computers and Fluids*, 44:339–357, 2011.
- [61] D. Zuzio, J.-L. Estivalezes, and B. Di Pierro. An improved multiscale Eulerian-Lagrangian method for simulation of atomization process. *Computers and Fluids*, 176:285–301, 2018.

Annexe D

Article publié dans **Computers and
Fluids**



A priori filtering and LES modeling of turbulent two-phase flows application to phase separation



S. Vincent^{a,*}, M. Tavares^a, S. Fleau^b, S. Mimouni^b, M. Ould-Rouiss^a, J.-L. Estivalezes^c

^a Université Paris-Est Marne-La-Vallée, Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle (MSME), UMR CNRS 8208, F-77454, Marne-La-Vallée, France

^b Electricité de France, R&D division, F-78400 Chatou, France

^c ONERA, The French Aerospace Lab, F-31055 Toulouse, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 18 July 2016

Revised 13 October 2016

Accepted 20 October 2016

Available online 29 October 2016

Keywords:

Phase inversion

Two-phase flows

A priori filtering

LES modeling

One-fluid model

Multi-field approach

ABSTRACT

The Large Eddy Simulation (LES) of two-phase flows with resolved scale interfaces is investigated through the *a priori* filtering of Direct Numerical Simulations (DNS) of one-fluid and multifield models. A phase inversion benchmark [1–4] is considered highlighting many coalescence and interface rupture events in a kind of atomization process. The order of magnitude of specific two-phase subgrid LES terms is first considered with the two modeling approaches. Then, different existing models such as Smagorinsky [5], Wall-Adapting Local Eddy-viscosity (WALE) model [6], Bardina [7], Mixed [8] and Approximate Deconvolution Model (ADM) [9] are used to account for two-phase subgrid effects. These models are compared to filtered DNS results. The main conclusion concerning *a priori* LES filtering is that the inertia term is not predominant in two-phase flows with fragmentation and rupture of interface. This conclusion is different from that of the studies of [3, 10–13]. Concerning LES models, functional modeling do not correlate to filtered DNS results whereas structural approaches do. Bardina and ADM are clearly the good LES framework to consider for two-phase flows with resolved scale interfaces. ADM is clearly better than Bardina in our study.

© 2016 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Turbulent two-phase flows occur in many academic and applied fluid mechanics problems such as boiling crisis in nuclear plants, chemical reactors, material coating by plasma projection, bubbles in pipes, wave breaking, oil extraction in porous media, powder and fluidized beds processes, fuel injection in engines to cite a few. Exhaustive presentation of various turbulent multi-phase flows is given for example in [14]. As soon as turbulence and interface interact in a non linear way with macroscopic interfacial deformations inducing ligaments, coalescence or rupture, the experimental characterization of these flows is difficult due to the heterogeneous character of the multi-phase medium. Modeling and numerical simulation thus represent an interesting way to study the physical processes that control these flows.

Various models are available in literature to tackle with two-phase flows. For dispersed flows, when a scale separation can be assumed between the carrier fluid and the dispersed phase, *i.e.* droplets or bubbles, Eulerian-Eulerian or Eulerian-Lagrangian models exist [16] in which the continuous phase, also called the carrier

fluid, is treated with the classical fluid mechanics equations and the dispersed phase is taken into account through an Eulerian concentration variable or discrete Lagrangian positions and velocities. Specific source terms are added to the mass and momentum equations in order to represent the interaction effects between both phases. When the characteristic size of the interfacial structures is comparable to the macroscopic size of the problem or to the local mesh size, the previous scale separation models are no more valid.

The present work is concentrated on two-phase flow problems involving a wide range of interfacial structures that can be large and small at the same time, depending on the zone of the flow that is considered. Among others, examples are the primary atomization of a liquid jet or sheet [17–19] or the liquid-liquid phase separation [1–3,15] presented in Fig. 1. As a starting point, we consider here multi-scale two-phase flows with separate phases in unsteady and turbulent regime. It is assumed that no scale separation exists between large interfacial structures and small turbulent scales. For large Reynolds numbers, performing a Direct Numerical Simulation (DNS) of the flow, *i.e.* a simulation with numerical time and space scales that are smaller than the physical characteristics of turbulence and interface, is almost impossible as it would require computer resources not available even on the most powerful parallel computers. As a consequence, for a

* Corresponding author.

E-mail address: stephane.vincent@u-pem.fr (S. Vincent).

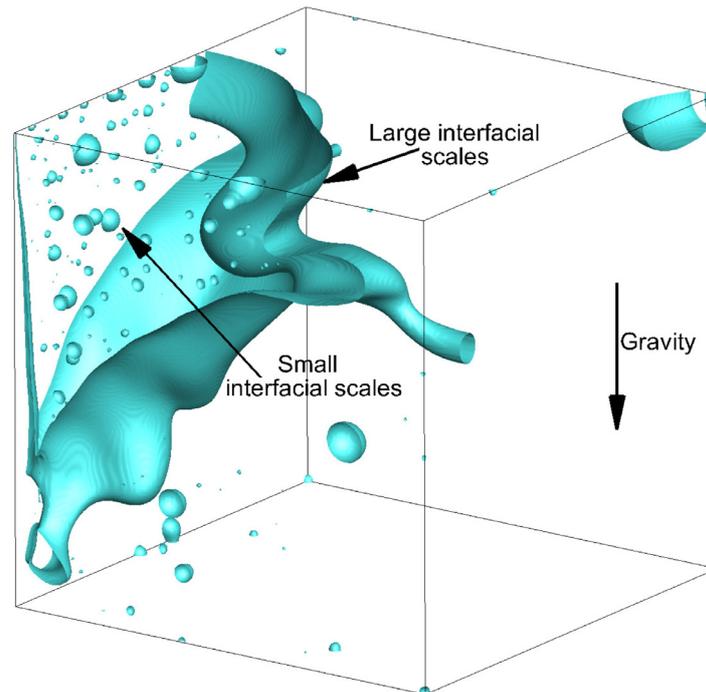


Fig. 1. Example of multi-scale interfacial character of phase separation for a liquid-liquid two-phase system. The interface is plotted in blue and the black lines represent the wall of the cubic box. Following [2,3,15], $Re=7000$ and $We=11$. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

kind of mesoscopic modeling issue, it has to be assumed that all the interfacial scales will be resolved whereas turbulence will be modeled by means of a Large Eddy Simulation (LES) approach [20]. This way, relatively large grids and time steps could be considered that give access to deterministic and unsteady simulations on meshes coarser than with a DNS. However, two basic points have to be specified to lead our mesoscopic representation of the turbulence-interface interaction: on one hand, the choice of models that allow the solving of deformable interfaces between non miscible fluids and on the other hand, the LES filtering of these models in the framework of two-phase flows. These two points are the main theme of our work. On a general point of view, one can address the following remarks in order to build a LES two-phase flow modeling with resolved scale interfaces:

- concerning the modeling of two-phase flows with separated phases and non miscible fluids, the most widely used model in the literature is the single fluid or one-fluid model (OFM) [21–23]. This Eulerian model is based on the use of a regular kernel of control volumes on which the interface is located by means of an auxiliary Eulerian variable. This variable can be the local Volume fraction of one phase in the other phase, *i.e.* the Volume Of Fluid (VOF) [24], the signed distance function to the interface, *i.e.* the Level Set approach [25], or the VOF function resulting from the projection of a Lagrangian tracking of the interface, *i.e.* the Front Tracking method [26]. In these three approaches, the standard incompressible Navier–Stokes equations are considered, with an additive specific capillary source term that accounts for the normal jump of constraints at the interface. In the VOF and Level Set, an additional advection equation of the interface is solved in an Eulerian way while a Lagrangian interface marker equation is considered with the Front Tracking. The one-fluid model allows the representation of two-phase flows with separated fluids and deformable interfaces. Another class of models can be considered to have the same kind of two-phase flow representation. It is called

the multi-field approach (MFA) [27–29] or segregated phase modeling [23]. This type of two-phase flow modeling was initially designed for a dispersed phase that is represented through an Eulerian variable such as the local concentration of the dispersed phase in the surrounding carrier fluid. However, this Euler–Euler model can be extended to large scale and resolved interfaces by introducing a sharpening equation together with the transport of the dispersed phase concentration [27,29]. This sharpening equation is coupled with mass and momentum equations in order to ensure mass conservation to almost zero computer error. The obtained multi-field model allows simulating large scale interfaces in a similar approach as phase field models [30], with an interface that is given a prescribed thickness of several grid cells. The OFM and MFA will be considered in the present article to discriminate the modeling strategy that is most suited for the simulation of turbulent two-phase flows with large interfaces.

- regarding the LES modeling of turbulence, this is an area of fluid mechanics that has been widely studied and developed for single-phase flows past twenty years [20,31]. For cons, the LES of two-phase flows with large scale interfaces remains an understudied area. Among the few existing references, it is worth mentioning the work on LES formulation for the one-fluid model and subsequent *a priori* LES filtering of DNS simulations for the estimate of new specific two-phase contributions in the mass, momentum and VOF advection equations [2,3,10–13,32]. Two main conclusions arise from these studies: new subgrid terms have to be modeled when the LES of two-phase flows is undertaken and the magnitude of these subgrid terms strongly varies depending on the considered physical configuration so that none of these subgrid terms can be neglected *a priori*, except perhaps the viscous subgrid term. Concerning the modeling of the two-phase LES subgrid terms, most advanced works have been devoted to the inertial and capillary terms with formulations based on Smagorinsky or deconvolution like approaches [12,33]. None of these LES

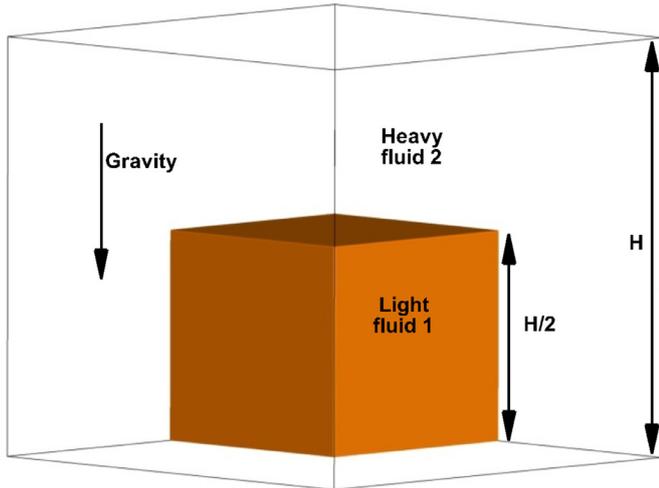


Fig. 2. Definition sketch for the phase inversion benchmark in a closed box [2,3,15].

models have clearly demonstrated that it was possible to perform a LES of resolved scale interfaces with success, except perhaps [12] for the atomization of a fuel jet. In addition, no LES model have been proposed for the viscous, advection or mass conservation subgrid terms.

If one refers to the previous literature review, it can be noted that there is a real need to make a comprehensive and systematic *a priori* study of the two-phase LES subgrid terms appearing in the one-fluid and even more multi-field formalisms. In addition, representative models have to be proposed for all subgrid terms and validated against DNS of turbulent two-phase flows. These two lines of research are the main goal of the present work. The article is structured as follows. In the next section, the OFM and MFA are shortly presented with associated numerical methods. A phase inversion benchmark configuration is also proposed for the LES modeling of two-phase flows with multi-scale interfaces. Section 3 is devoted to *a priori* LES filtering of OFM and MFA as well as comparison of subgrid term magnitude and classification. LES models for two-phase subgrid terms of OFM and MFA is proposed in Section 4. These models are compared and discussed regarding DNS of phase inversion. Conclusions and perspectives are finally drawn in Section 5.

2. Modeling and simulation of phase inversion

2.1. Phase inversion benchmark

Various configurations of phase inversion benchmark have previously been proposed and used for *a priori* LES filtering, comparison of interface tracking methods, characterization of multi-scale interfacial flow and comparison of DNS two-phase flow codes [2–4,15,33,34]. A previous configurations was chosen here for its turbulent regime and large range of interfacial scales. The initial condition of the problem is described in Fig. 2. An initial cubic blob of light liquid, referred to as fluid 1, is placed in the bottom part of a cubic box filled with a heavier liquid, referred to as fluid 2. The size of the box is (H, H, H) , while the size of the blob of light fluid is $(H/2, H/2, H/2)$, with $H = 1m$. All outer walls are considered as free-slip impermeable walls. The gravity is oriented along the vertical axis and its magnitude is $-9.81m.s^{-2}$. The interest of the present configuration lies in simplicity of initial and final flow configurations, *i.e.* all light fluid is inside a cubic blob initially and all light fluid is in the top part of the cavity at long times. Another advantage is that phase inversion naturally

provides multiple coalescence, break-up and fragmentation events in a kind of atomization process, while not depending on complex initial or forcing conditions such as those encountered in real turbulent two-phase flow configurations [17,35]. The characteristics of fluid 1 and 2 are $\rho_1 = 900 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_2 = 1000 \text{ kg m}^{-3}$, $\mu_1 = 0.1 \text{ Pa s}$ and $\mu_2 = 0.001 \text{ Pa s}$. The constant surface tension coefficient is chosen equal to 0.45 N m^{-1} .

The fluids and flow properties that control the phase inversion dynamics can be expressed in terms of Atwood, Reynolds and Weber numbers. These numbers are defined as

$$At = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1 + \rho_2}, \quad (1)$$

$$Re_1 = \frac{\rho_1 H U_g}{\mu_1} \text{ and } Re_2 = \frac{\rho_2 H U_g}{\mu_2}, \quad (2)$$

$$We_1 = \frac{\rho_1 H U_g^2}{\sigma} \text{ and } We_2 = \frac{\rho_2 H U_g^2}{\sigma}, \quad (3)$$

where the gravitational velocity U_g is obtained as the balance between the pressure forces on the light fluid and the net gravity force on this fluid [3,4]. It reads

$$U_g = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1} \sqrt{\frac{gH}{2}} = At^{1/2} \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_1} \sqrt{\frac{gH}{2}} \quad (4)$$

Based on U_g and a characteristic space scale of $H/2$, the characteristic time scale is

$$t_c = \frac{H}{2U_g} = At^{-1/2} \frac{\rho_1}{(\rho_1 + \rho_2)} \sqrt{\frac{H}{2g}}. \quad (5)$$

The characteristic parameters of phase inversion are $At = 0.053$, $U_g = 0.246m.s^{-1}$, $Re_1 = 2.214 \cdot 10^3$, $Re_2 = 2.460 \cdot 10^5$, $We_1 = 1.210 \cdot 10^2$, $We_2 = 1.345 \cdot 10^2$, and $t_c = 2.032s$. An example of simulation with these parameters is illustrated in Fig. 3 for a 512^3 grid with a one-fluid model. Due to large Reynolds and Weber numbers, the flow is first dominated by inertial effects induced initially by gravity forces with negligible capillary forces. For larger times, inertia decreases and surface tension forces become predominant. It is observed that initially the light fluid blob goes to the top of the cavity while being subjected to large interface deformation with rupture of ligaments into droplets. In a second step, a kind of atomization process occurs with the phase separation being active inducing coalescence of many droplets with the top layer of light fluid.

2.2. One-fluid model (OFM)

2.2.1. A single velocity formulation for two-phase flows

As is now well established, incompressible two-phase flows involving fluid-fluid interfaces and Newtonian fluids can be modeled by a single set of incompressible Navier–Stokes equations with variable density and viscosity and possibly extra interfacial forces (*e.g.* the capillary force), together with the transport equation of the phase function C . The resulting model takes implicitly into account the mass and momentum jump relations at the interface [22,36], whereas the continuity of the fluid-fluid and fluid-solid interfaces are taken into account by the C equation. The entire set of equations reads:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (6)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u})] + \mathbf{F}_{st}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = 0, \quad (8)$$

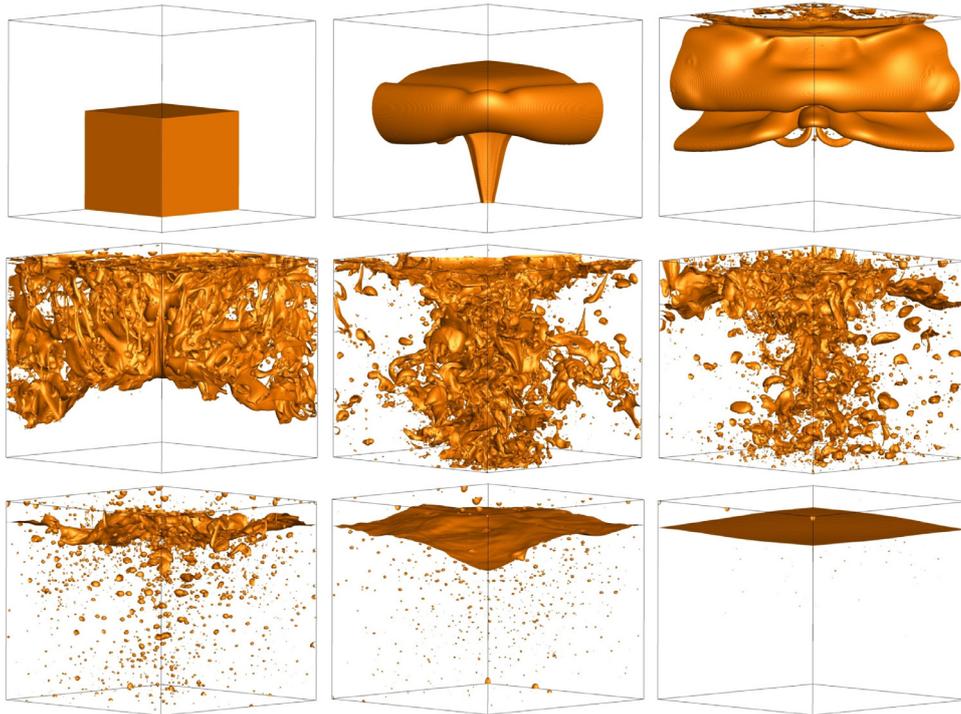


Fig. 3. Simulation of a phase inversion in a closed box with a one-fluid model - The interface between the two liquids is plotted in orange - from left to right and top to bottom, the dimensionless time is 0, 0.246, 0.492, 0.738, 0.984, 1.329, 1.969, 3.396 and 15.305.

where p is the pressure, \mathbf{F}_{st} is the interfacial force per unit volume and ρ and μ are the local density and viscosity of the two-phase medium, respectively. In the rest of the article, the viscous stress tensor will be referred to as $\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + \nabla^t\mathbf{u})$. Motion of the interface in a given velocity field \mathbf{u} is considered in Eq. (8) through the VOF function C . In the present work, it is chosen instead to use the signed distance function to the interface ϕ , that satisfies the following equation:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\phi = 0 \quad (9)$$

Capillary effects are inserted in the source term \mathbf{F}_{st} in the form $\mathbf{F}_{st} = \sigma\kappa\mathbf{n}_i\delta_i$, where σ denotes the surface tension, κ is the local mean curvature of the interface, i.e. $\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n} = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla C}{\|\nabla C\|}\right)$, \mathbf{n}_i is the unit vector normal to the interface and δ_i is the interface Dirac function [37], such that $\mathbf{n}_i\delta_i = \nabla C$.

The above OFM is almost identical to the classical incompressible Navier–Stokes equations, except that it involves an extra interfacial force and the local properties ρ and μ of the equivalent fluid depend on C , as does the capillary force. Localizing the interface requires solving the additional advection equation for the Level Set ϕ such that $\phi = 0$ at the interface and $\phi > 0$ (resp. < 0) in fluid 2 (resp. 1). In this case, C is defined as the Heaviside function $C = H(\phi)$ [25]. It is assumed that all space and time scales present in the flow are resolved, so that no turbulence model is required.

2.2.2. Numerical methods

The in-house computational fluid dynamics library developed at ONERA called DyJeAT (Dynamic of Jet ATomization) is used. Velocity/pressure coupling is ensured with classical projection methods [38,39] on a staggered grid. The Ghost Fluid method [25,40] is implemented to deal with surface tension forces as well as density and viscosity jumps. Instead of inserting a surface tension volume force in the momentum equations as was proposed by [37], with the Ghost fluid method, the jump relations are

directly used in prediction and projection steps so as to handle density and viscosity contrasts at the interface as well as capillary effects. In the LES formalism, the delta formulation of [37] is kept only to provide an interpretation of the under resolved capillary forces. The Level Set approach is also used for tracking interfaces, as previously specified. To avoid singularities in the ϕ field, the fifth order conservative WENO [41] scheme is applied to discretize space advection terms together with a 3rd order Runge–Kutta TVD scheme for time derivatives [42]. When the Level Set advection is solved, high velocity gradients can generate artificial spreading or stretching of ϕ which then no longer remains a distance function. A redistancing algorithm [43] is thus considered to restore the distance property of ϕ , i.e. $\|\nabla\phi\| = 1$. Details of implementation and validation can be found in [19,44,45].

2.3. Multi-field approach (MFA)

2.3.1. A two-velocity model for two-phase flows

The two-fluid model of Ishii [46] is used for a two-phase flow. Initially, the Ishii Eulerian model for two-phase flows was considering the interaction between a carrier fluid (field 1) and a dispersed phase (field 2) under scale separation assumption. In our approach, the density, the viscosity and the local velocity are defined for each field as for Ishii model. However, field $k = 1$ corresponds to the first fluid and $k = 2$ to another fluid that is immiscible inside field 1. This study is restricted to incompressible and isothermal cases with a constant density in each field. The following governing equations are solved for each field k :

$$\frac{\partial\alpha_k\rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k\mathbf{u}_k\rho_k) = 0, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\alpha_k\rho_k\mathbf{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k\rho_k\mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) &= -\alpha_k\nabla p_k \\ &+ \alpha_k\rho_k\mathbf{g} + \nabla \cdot [\alpha_k\mu_k\mathbf{S}_k] + \mathbf{F}_{st,k} + \mathbf{F}_{d,k}, \end{aligned} \quad (11)$$

With α_k the local volume fraction of field k , \mathbf{S}_k the viscous stress tensor of field k , i.e. $S_{ij,k} = \frac{\partial u_{i,k}}{\partial x_{j,k}} + \frac{\partial u_{j,k}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_{i,k}}{\partial x_i} \delta_{ij}$ and $\mathbf{F}_{d,k}$ a volume force ensuring the coupling between the continuous fields through a drag force. This drag force is crucial since it allows coupling the velocity of the two continuous fields at the interface. Thus, a new drag force expression has been developed to deal with large interfaces within the MFA. Details can be found in [29,47]. The modeling of large interfaces and surface tension forces with the Ishii model is based on a volumetric formulation [27,29,48] taken from [37]. It reads $\mathbf{F}_{st,k} = \alpha_k \sigma \kappa_k \mathbf{n}_{i,k} \delta_i$ with $\kappa_k = -\nabla \cdot \mathbf{n}_k = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha_k}{\|\nabla \alpha_k\|} \right)$ and $\mathbf{n}_{i,k} \delta_i = \nabla \alpha_k$.

2.3.2. Numerical methods

The code NEPTUNE_CFD is based on an Eulerian approach with a finite volume discretization. In the code NEPTUNE_CFD, the assumption of a common pressure for all fields is made. The solver SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) is used [49] with a collocated arrangement for all variables. An iterative coupling of the equations is implemented to ensure mass conservation. Details are given in [29,50].

By nature, the Ishii model is diffuse as it represents the interaction between two phases (or fields) through a mixed Eulerian representation of the different fluids in a given volume. Here, the idea is to tackle with sharp interfaces, even if the MFA is *a priori* not adapted to a discontinuous representation of a two-phase flow. In order to limit the interface smearing induced by the resolution of the two-fluid equations, an interface sharpening equation, initially proposed by [51] and adapted to the two-fluid formulation, is solved for each continuous field [50]:

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k [1 - \alpha_k] \mathbf{n}_{i,k}) = \epsilon \nabla^2 \alpha_k \quad (12)$$

With $\mathbf{n}_{i,k}$ the interface normal vector pointing outside phase k . The value of ϵ is chosen equal to half the space step Δx while the time step of the interface sharpening equation is taken equal to $\Delta x/32$. With these parameters, the obtained final interface thickness is always equal to 5 cells whatever the initial interface diffusion [27,52].

3. Model comparison on macroscopic quantities

Several macroscopic quantities characterizing the evolution of the flow field are of primary interest to check whether the two models describe the same two-phase motion. These quantities can be expected to be *a priori* essentially independent of the choice of the model and interface tracking techniques used in the computations. In all of what follows, we use the characteristic or color function C that is defined with respect to fluid 2, so that $C = 1$ in fluid 2 and $C = 0$ in fluid 1. Among these physically relevant quantities and in agreement with previous work on the phase inversion benchmark [3,4], we select:

- the domain integrals of potential energies $E_{p,2} = \int_{\Omega} C \rho_2 g y dV$ and $E_{p,1} = \int_{\Omega} (1 - C) \rho_1 g y dV$ in fluid 1 and 2 (with $g = \|\mathbf{g}\|$) and the domain integrals of kinetic energies $E_{k,2} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} C \rho_2 \mathbf{u}^2 dV$ and $E_{k,1} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (1 - C) \rho_1 \mathbf{u}^2 dV$ will also be stored at each time step. They will help monitoring the conversion of potential energy into kinetic energy. they provide a sort of characterization of the stratification inside the fluids. Due to the simple topology of the interface in the initial and final stages, it can be shown that $E_{p,1} = \rho_1 g \frac{H^4}{32}$ and $E_{p,2} = \rho_2 g \frac{31H^4}{32}$ for $t = 0$ and $E_{p,1} = \rho_1 g \frac{15H^4}{128}$ and $E_{p,2} = \rho_2 g \frac{49H^4}{128}$ for $t \rightarrow \infty$. The typical magnitude of the kinetic energy in both fluids may be estimated by using the gravitational velocity U_g , yielding $E_{k,1} = O(\frac{1}{16} \rho_1 H^3 U_g^2)$ and $E_{k,2} = O(\frac{1}{16} \rho_2 H^3 U_g^2)$.

Table 1

Parameters used to define the dimensionless variables for phase inversion benchmark.

Parameter	Value	Unit
$t^* = \frac{t}{t_c} = \frac{t U_g}{H} = \frac{t(\rho_2 - \rho_1)}{\rho_1} \sqrt{\frac{g}{2H}}$	$\frac{t}{2.032}$	-
$\frac{15\rho_1 g H^4}{128}$ the potential energy in fluid 1 for $t \rightarrow \infty$	1035	J
$\frac{49\rho_2 g H^4}{128}$ the potential energy in fluid 2 for $t \rightarrow \infty$	3755	J
$E_{cin,1}^* = \frac{E_{cin,1}}{1/16 \rho_1 U_g^2 H^3}$	$\frac{E_{cin,1}}{3.4063}$	-
$E_{cin,2}^* = \frac{E_{cin,2}}{1/16 \rho_2 U_g^2 H^3}$	$\frac{E_{cin,2}}{3.7847}$	-
Maximum of enstrophy in fluid 1 (one-fluid model)	56.72	$\text{m}^3 \text{s}^{-2}$
Maximum of enstrophy in fluid 2 (one-fluid model)	224.03	$\text{m}^3 \text{s}^{-2}$

- the time evolution of the volume integral of the enstrophy in both fluids will also be recorded. This quantity is defined as $E_{r,1} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (1 - C) \mathbf{w}^2 dV$ and $E_{r,2} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} C \mathbf{w}^2 dV$, respectively, $\mathbf{w} = \nabla \times \mathbf{u}$ denoting the vorticity.

The simulated values are made dimensionless by using the previous reference estimates of time as well as potential and kinetic energies. For enstrophy, the time maximum of the value obtained with the one fluid model is used, as was proposed in [4]. A synthesis of the dimensionless parameters is given in Table 1. The results are presented in Fig. 4. For potential and kinetic energies in fluid 1 and 2, it is observed that the two models are in rather good agreement. They capture the same time evolution with peak of energies being located at the same instants. For intermediate times, when droplet generation is maximum, some discrepancies are noticed. They are due to the different interface tracking techniques and also to single velocity field representation of the two-phase flow by the OFM, compared to two-velocity description brought by the MFA. Concerning enstrophy in fluid 1 and 2, the OFM brings two to three times larger magnitudes than MFA. The peak of enstrophy is located at the same dimensionless time for both models, i.e. $t^* \approx 2.5$ in fluid 1 and $t^* \approx 4$ in fluid 2. The major differences observed concerning enstrophy were also reported in [4] concerning the comparison of different codes on different grids (up to 2048^3 mesh). It was demonstrated that on a vorticity point of view, a 512^3 grid is not enough to perform a real DNS for the phase inversion benchmark whereas potential and kinetic energies can be assumed converged. In the rest of the work, it will be considered that a 512^3 grid simulation is enough for performing a DNS of the phase separation benchmark and provide a representative simulation of this complex two-phase flow, illustrated in Fig. 3. If different information is not specified, all the results presented in the following sections are investigated with the OFM and MFA on a 512^3 regular Cartesian mesh.

4. A priori filtering of turbulent two-phase flows

In the present section, we discuss the filtering of the motion equations formulated for two-phase flows. By filtering, one must understand the application of the Large Eddy Simulation filter to flow variables and subsequent conservation equations. Thanks to the phase function C indicating phase k , a low-pass frequency filtering operator G defining the spatial filtering of a given variable Ψ is written as the convolution product of G with Ψ as $\bar{\Psi} = G \Psi$. The phase-weighted filtering of the velocity \mathbf{u} , i.e. called Favre average, is also defined as $\tilde{\mathbf{u}} = \frac{\rho \mathbf{u}}{\bar{\rho}}$ for the OFM whereas it reads $\tilde{\mathbf{u}}_k = \frac{\overline{\alpha_k \mathbf{u}_k}}{\alpha_k}$ for the MFA. It is assumed here that the commutation between the spatial filter and the derivative is satisfied, as in single-phase LES modeling [20,53]. This assumption is reasonable

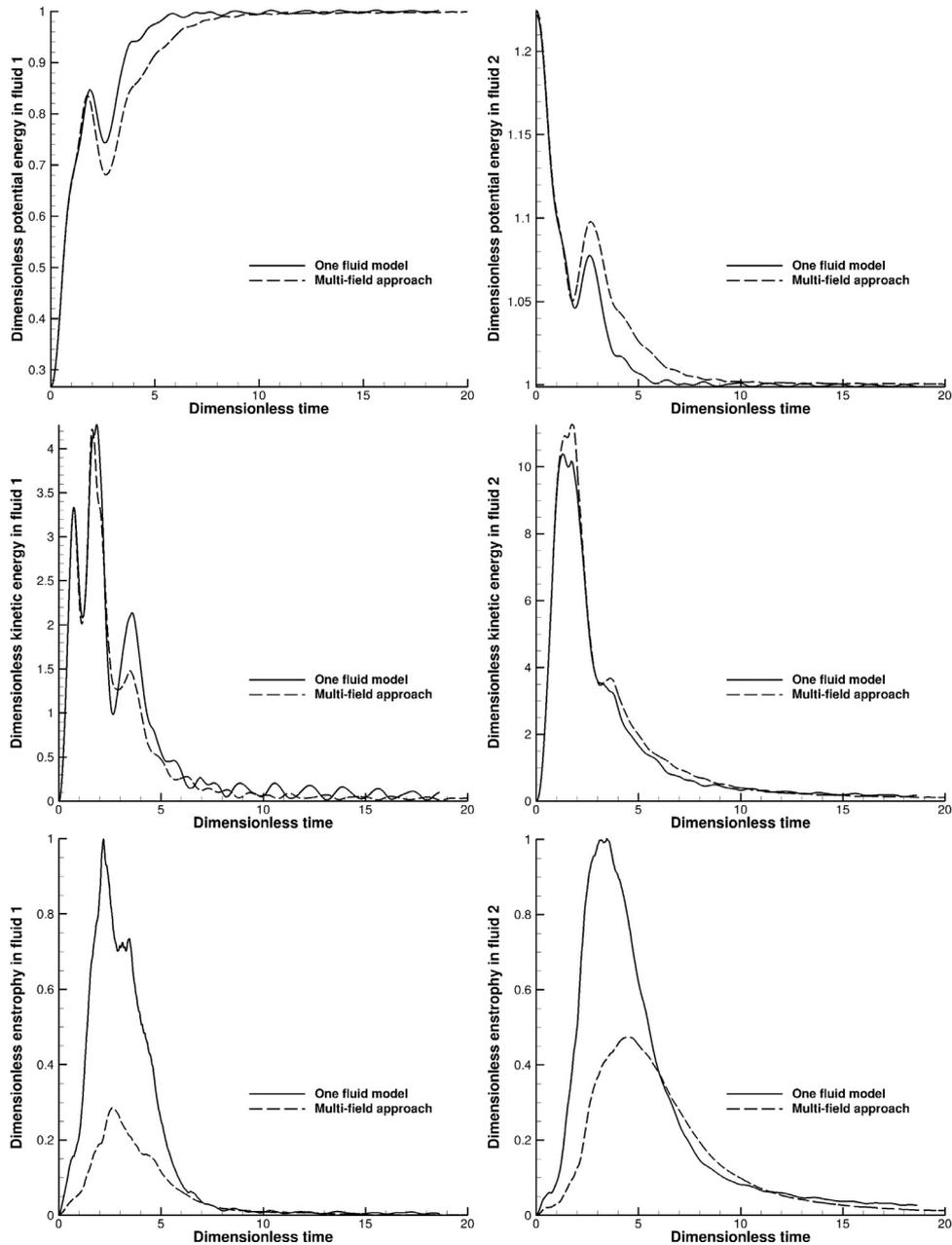


Fig. 4. Time evolution of macroscopic quantities for one-fluid and multi-field models.

as the commutation error depends more on the topology of the mesh than on the characteristic of the flow [54,55]. In our simulation, the mesh is regular and isotropic so that commutation errors should be negligible.

By applying the filtering operators to the one fluid and multi-field models, specific subgrid terms appear in the LES formalism of two-phase flow with resolved scale interfaces. These subgrid terms have previously been discussed in [3,10,11,32,56] for the OFM and in [57] for the MFA. These two-phase LES terms are associated respectively to acceleration, inertia, viscous effects and interface presence. Their presence is due to the filtering and averaging operations of the mass and momentum equations. The common terms for the OFM and MFA are presented in Table 2. The formulations are written as they should be estimated by *a priori* filtering. In fact, for the sake of simplicity, for all $\overline{\nabla \Psi}$ like terms, the commutation between the filtering and derivation operations has been assumed, such that it has been considered that for any variable

Ψ , $\overline{\nabla \Psi} = \nabla \overline{\Psi}$. For OFM, the filtered curvature of the interface $\hat{\kappa}$ is equal to $-\nabla \cdot \left(\frac{\overline{\nabla C}}{\|\overline{\nabla C}\|} \right)$ according to the filtering of Brackbill CSF force [37]. An equivalent expression is used for the filtered curvature $\hat{\kappa}_k$ of phase k with the MFA which is $-\nabla \cdot \left(\frac{\overline{\nabla \alpha_k}}{\|\nabla \alpha_k\|} \right)$. For the MFA, as was demonstrated by [57], two others subgrid terms exist associated to pressure gradient and drag force. They are not considered in the present work as they do not exist in the OFM. For more details, the reader is referred to [57]. It can be observed that 5 subgrid LES terms exist with the standard filter whereas less terms appear with a Favre average, *i.e.* 4 for the OFM and 2 for the MFA. It has to be kept in mind that the subgrid terms τ_c , τ_d , τ_{st} and τ_{ia} appear in the mass, momentum and interface tracking equations as extra terms, as soon as a real LES simulation is investigated. For example, if τ_{ia} is not zero, the flow is no more divergence free in the cells cut by the interface, even if no phase

Table 2

Two-phase LES subgrid terms obtained with one-fluid and multi-field models by *a priori* filtering.

Subgrid term	Filter $\bar{\cdot}$	Favre average $\overline{\cdot}$
One-fluid model		
Time derivative τ_t	$\overline{\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \bar{\rho} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t}}$	$(\rho_2 - \rho_1) \bar{\mathbf{u}} \tau_{ia}$
Convection τ_c	$\overline{\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \bar{\rho} \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}}}$	$\overline{\bar{\rho} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \bar{\rho} \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}}}$
Diffusion τ_d	$\overline{\nabla \cdot [2\mu \mathbf{S}] - \nabla \cdot [2\bar{\mu} \bar{\mathbf{S}}]}$	$\overline{\nabla \cdot [2\mu \mathbf{S}] - \nabla \cdot [2\bar{\mu} \bar{\mathbf{S}}]}$
Surface tension τ_{st}	$\overline{\sigma (\kappa \nabla C - \hat{\kappa} \nabla C)}$	$\overline{\sigma (\kappa \nabla C - \hat{\kappa} \nabla C)}$
Interface advection τ_{ia}	$\overline{\mathbf{u} \cdot \nabla C - \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla C}$	$\overline{\mathbf{u} \cdot \nabla C - \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla C}$
Multi-field model		
Time derivative τ_t	$\rho_k \left(\frac{\partial \alpha_k \mathbf{u}_k}{\partial t} - \frac{\partial \bar{\alpha}_k \bar{\mathbf{u}}_k}{\partial t} \right)$	-
Convection τ_c	$\rho_k \left(\nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) - \nabla \cdot (\bar{\alpha}_k \bar{\mathbf{u}}_k \otimes \bar{\mathbf{u}}_k) \right)$	$\rho_k \left(\nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) - \nabla \cdot (\bar{\alpha}_k \bar{\mathbf{u}}_k \otimes \bar{\mathbf{u}}_k) \right)$
Diffusion τ_d	$\mu_k \left(\nabla \cdot [\alpha_k \mathbf{S}_k] - \nabla \cdot [\bar{\alpha}_k \bar{\mathbf{S}}_k] \right)$	-
Surface tension τ_{st}	$\sigma \left(\alpha_k \kappa_k \nabla \alpha_k - \bar{\alpha}_k \hat{\kappa}_k \nabla \bar{\alpha}_k \right)$	$\sigma \left(\alpha_k \kappa_k \nabla \alpha_k - \bar{\alpha}_k \hat{\kappa}_k \nabla \bar{\alpha}_k \right)$
Interface advection τ_{ia}	$\rho_k \left(\nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{u}_k) - \nabla \cdot (\bar{\alpha}_k \bar{\mathbf{u}}_k) \right)$	-

Table 3

Relative magnitude (in %) of the vertical component of two-phase LES subgrid terms obtained with one-fluid and multi-field models after *a priori* filtering. The terms are made dimensionless by the magnitude of the vertical component of the largest resolved DNS term, *i.e.* the convective contribution. The width of the low-pass filtering operator G is 2 cells in each direction.

Subgrid term	Filter $\bar{\cdot}$	Favre average $\overline{\cdot}$
One-fluid model		
τ_c	7.54	3.01
τ_d	1.19	0.14
τ_{st}	37.81	37.81
τ_{ia}	10.29	9.61
Multi-field model		
τ_c	2.24	0.86
τ_d	0.14	-
τ_{st}	5.29	5.29
τ_{ia}	1.07	-

change is considered. In the present work, the time derivative subgrid term τ_t has not been considered. Indeed, its *a priori* filtering would require to store at least two successive fields of the 512^3 DNS simulations. This was not achieved due to its numerical cost.

The first interesting issue is the estimate of the relative order of magnitude of the specific two-phase subgrid LES terms which appear in mass, momentum and interface advection equations. An *a priori* filtering of the DNS results have been provided for τ_c , τ_d , τ_{st} and τ_{ia} at the enstrophy peak, *i.e.* for $t^* \approx 3$. The averaged magnitude of the subgrid terms is normalized by the maximum, at each time step, of the filtered resolved contributions of the flow (inertia for the momentum equation and advection for the phase function equation). The width of the low-pass filtering operator G is 2 cells in each direction. From a global point of view, the magnitude of the vertical component of the subgrid terms is larger than the contributions in the x and y directions. In the z-direction or gravity direction, the flow is strongly anisotropic. This is induced by the key phenomenon of the phase separation, *i.e.* the buoyancy force. Moreover, it was observed that the magnitude of the subgrid terms is almost the same in the x and y directions. In the rest of this section, only the vertical component of the subgrid terms will be considered. According to Table 3, a classification of LES subgrid terms can be deduced:

- contrary to what could be intuitively expected, the inertial or convective subgrid term τ_c is not the predominant term. With the OFM, its averaged magnitude is 7.5% the filtered resolved convective term with the top hat filtering and 3% with the Favre average. Concerning the MFA, the averaged estimated values of the subgrid convective term are 2.2% with filter $\bar{\cdot}$ and 0.9% with the Favre average. This term cannot be neglected in LES modeling of resolved scale two-phase flows. For both OFM and MFA, using a Favre average reduces the order of magnitude of the subgrid contribution by a factor of 2.
- concerning the subgrid viscous contribution τ_d , it is clearly the lower one, compared to convective, surface tension and interface advection, with both the OFM and MFA modeling approaches. This conclusion was previously given by [2,3,10,13] for various physical configurations. Its order of magnitude is two-times less than the filtered resolved convective terms. This term could be discarded in future LES modeling of two-phase flows.
- the capillary subgrid contribution τ_{st} is larger than τ_c , τ_d and τ_{ia} . This conclusion is different from what was obtained for example by [11] for an isolated bubble interacting with a Homogeneous Isotropic Turbulence (HIT). This is mainly due to the fact that in our phase separation problem, a kind of atomization process is observed for $t^* = 3$. In our configuration, many droplets are generated. They are poorly resolved on the 512^3 grid with only a few grid cells (3 to 6) over a droplet diameter. This resolution effect is measured by the magnitude of τ_{st} . Indeed, as soon as the poorly resolved interfacial structures are filtered, the corresponding subgrid terms associated to interface, *i.e.* the surface tension contribution here, becomes significant compared to the filtered convective DNS terms. The same behavior arises for OFM and MFA. As a conclusion, for dispersed flows without scale separation, the subgrid surface tension LES term cannot be neglected. This is the predominant filtered effect. Contrary to what was noticed for the subgrid convective contribution, using a Favre average does not allow to decrease the magnitude of τ_{st} as this term is the same with both filtering approaches. This term is highly dependent on the interfacial structure and the associated fluid properties. The Favre average uses the density in the filtering operations. In the present work, no particular attention has been paid to the local anisotropy of the interface. This way, when a given quantity is filtered in a cell cut by the interface, the density used can be ρ_1 , ρ_2 or an isotropic average of the two. It has been demonstrated by [58] that for resolved scale two-phase flows, anisotropic filters should be used in order to build correct LES models in an heterogeneous medium such as the phase separation flow.
- the interface advection subgrid term is more important with OFM than with MFA. The diffuse character of the interface in MFA is certainly responsible for the lower order of magnitude of τ_{ia} with MFA compared to OFM. As for τ_{st} , using a Favre average instead of filter $\bar{\cdot}$ does not decrease the magnitude of the interface advection subgrid term. In fact, the Favre average reduces the importance of the subgrid terms as soon as the filtering is applied to the velocity field. This effect does not hold when filtering interface depending terms. The subgrid term τ_{ia} is clearly not negligible with OFM while it could be discarded with MFA.

On a general point of view, the magnitude of the two-phase LES subgrid terms is lower with MFA than with OFM. This is a direct consequence of the diffuse character of the two-fluid model. In the OFM, every change of interfacial position is directly correlated to velocity and volume fraction gradients so that the subgrid terms τ_c , τ_{st} and τ_{ia} are always significant in the phase inversion problem when the fragmentation mechanisms are observed. In Table 4, the width of the low-pass filtering operator G is changed from

Table 4

Effect of width of the low-pass filtering operator G on the relative magnitude (in %) of the vertical component of two-phase LES subgrid terms obtained with one-fluid model after *a priori* filtering. The terms are made dimensionless by the magnitude of the vertical component of the largest resolved DNS term, i.e. the convective contribution.

Subgrid term	Filter $\bar{\cdot}$ with 2 cells width	Filter $\bar{\cdot}$ with 4 cells width
τ_c	7.54	13.24
τ_d	1.19	1.96
τ_{st}	37.81	44.18
τ_{ia}	10.29	16.17

Table 5

Effect of the DNS mesh size on the relative magnitude (in %) of the vertical component of two-phase LES subgrid terms obtained with one-fluid model after *a priori* filtering. The terms are made dimensionless by the magnitude of the vertical component of the largest resolved DNS term, i.e. the convective contribution. The width of the low-pass filtering operator G is 2 cells in each direction.

Subgrid term	128 ³ DNS mesh	256 ³ DNS mesh	512 ³ DNS mesh
Filter $\bar{\cdot}$			
τ_c	14.73	10.03	7.54
τ_d	0.68	0.75	1.19
τ_{st}	16.72	19.54	37.81
τ_{ia}	23.43	16.60	10.29
Favre average $\bar{\cdot}$			
τ_c	8.99	4.49	3.01
τ_d	0.18	0.14	0.14
τ_{st}	16.72	19.54	37.81
τ_{ia}	22.41	15.43	9.41

2 cells width to 4 cells. The effect of this change on the relative magnitude (in %) of two-phase LES subgrid terms is considered with OFM. As was previously observed in *a priori* filtering works [3,10], the larger the compact support of the filter, the higher the magnitude of the subgrid terms is. This is particularly noticeable for τ_c and τ_{ia} .

To finish with *a priori filtering* of DNS results, three simulations are investigated with OFM on 128³, 256³ and 512³ grids. Even if with the two coarser grids, we are not really able to perform true "DNS", the main goal here is to estimate the effect of implicit LES, i.e. under resolved DNS, on two-phase subgrid contributions. The results are reported in Table 5. With top hat filter $\bar{\cdot}$, refining the mesh size reduces the magnitude of the convective and interface advection subgrid terms, whereas the diffusive viscous and surface tension contributions increase. These observations are intuitive for τ_c and τ_{ia} , not for τ_d and τ_{st} . In fact, the filtering effect on velocity decreases with the local mesh size. This is a classical tendency that is observed in single phase flows. This effect is recovered for two-phase flows and resolved scale interfaces as in the present phase separation problem, the flow is isothermal without phase change and so the velocity field is continuous across interface. On a kinematic point of view, the problem is continuous and an isotropic filtering is well adapted for LES filtering. On the contrary, when filtered volume fraction terms are put into play, such as in τ_{st} , the behavior of the subgrid term magnitude according to grid refinement is totally different. Indeed, the more you refine, the more small structures you resolve. As a consequence, the magnitude of the subgrid term is increased as more interfacial structures of larger curvature are obtained. In this case, using a phase-conditioned filter [58] should perhaps be more suited to decrease the filtering effect when refining the simulation mesh. Concerning the viscous term, it can be assumed almost constant over all grids. A clear explanation is not straightforward. The same tendencies are observed all subgrid terms with the Favre average. The same conclusions hold.

5. LES modeling of turbulent two-phase flows

5.1. Large Eddy Simulation (LES) models for two-phase flows involving resolved scale interfaces

The understanding and characterization of the coupling between turbulence and fluid interfaces is a difficult task. As we reported in the introduction section, few experimental [59,60] and numerical works [2,12,13,33,61–63] exists to investigate the formulation of LES models for two-phase flows involving resolved scale interfaces. A synthesis of literature works is proposed in Table 6. Among the few existing publications, it can be observed that none of the authors have studied all the subgrid terms for a same two-phase problem. In addition, none of the authors have considered τ_d , that is always assumed negligible. The goal of the present section is to contribute, for a given phase inversion benchmark problem, to the evaluation of LES models for all two-phase subgrid terms that have been formulated in Section 4, except the time subgrid term τ_t .

Based on single-phase LES [20], functional models are first considered for two-phase LES subgrid terms. By nature, these functional models have been designed for inertial (or convective) terms. They rely on an energy cascade assumption and a dissipation modeling of turbulence at small scale. In this way, they can only be applied to subgrid terms τ_c and τ_{ia} as follows:

- the Smagorinsky model [5] is first considered for its simplicity and robust behavior. For the convective term, we classically obtain

$$\tau_c = -2\nabla \cdot (C_s \bar{\Delta})^2 \|\bar{\mathbf{S}}\| \bar{\mathbf{f}} \bar{\mathbf{S}} \quad (13)$$

By analogy, the interfacial subgrid term is written as

$$\tau_{ia} = -2\nabla \cdot (C_s \bar{\Delta})^2 \|\bar{\mathbf{S}}\| \bar{\nabla} C \quad (14)$$

With this approach, a subgrid scale LES viscosity can be defined as $\nu_s = (C_s \bar{\Delta})^2 \|\bar{\mathbf{S}}\|$. The Smagorinsky constant C_s is generally chosen between 0.1 and 0.24.

- The Wall-Adapting Local Eddy-Viscosity (Wale) model [6] which is a modification of the Smagorinsky model in order to better predict turbulence behavior near solid boundaries. In particular, this model recovers the expected asymptotic values of the subgrid viscosity near the wall. It reads

$$\tau_c = -2\nabla \cdot (\nu_w \bar{\mathbf{f}} \bar{\mathbf{S}}) \quad (15)$$

$$\tau_{ia} = -2\nabla \cdot (\nu_w \bar{\nabla} C) \quad (16)$$

with $\nu_w = (C_w \bar{\Delta})^2 \left\| \frac{(\bar{\mathbf{z}} : \bar{\mathbf{z}})^{3/2}}{(\bar{\mathbf{S}} : \bar{\mathbf{S}})^{5/2} + (\bar{\mathbf{z}} : \bar{\mathbf{z}})^{5/4}} \right\|$ and C_w in the range 0.55 – 0.6. In addition,

$$\bar{\mathbf{z}} = \bar{\mathbf{S}} \bar{\mathbf{S}} + \bar{\Omega} \bar{\Omega} - \frac{1}{3} (\bar{\mathbf{S}} : \bar{\mathbf{S}} - \bar{\Omega} : \bar{\Omega}) \bar{\mathbf{I}} \quad (17)$$

with $\bar{\Omega}$ the rotation tensor defined as

$$\bar{\Omega} = \frac{1}{2} (\nabla \bar{\mathbf{u}} - \nabla^t \bar{\mathbf{u}}) \quad (18)$$

In all LES models, \bar{f} is 1 for the OFM whereas $\bar{f} = \bar{\alpha}_k$ for MFA. In addition, for this last model, a k index have to be added in all LES expressions for velocity depending terms. To finish with, terms based on \bar{C} have to be switched into terms depending on $\bar{\alpha}_k$.

A second class of LES approaches can be used to design models for two-phase subgrid terms. It is called structural analysis [20]. The main interest of the structural LES is that it does not rely on an explicit understanding and formulation of the coupling

Table 6
Literature review of LES models that have been formulated for two-phase subgrid LES terms.

Physical case	τ_t	τ_c	τ_d	τ_{st}	τ_{ia}
THI interacting with a 2D droplet [10]	–	Smagorinsky [5] Wale [6], Bardina [7] Mixed [8]	–	–	–
THI interacting with a 3D droplet [11]	Bardina [7]	Bardina [7]	–	–	Bardina [7]
Liquid jet atomization [12]	–	Smagorinsky Lilly [5]	–	–	Smagorinsky Lilly [5]
Phase inversion in a 3D cavity [11]	–	–	–	ADM [9]	–

between resolved and filtered scales of turbulence (and interfaces in the case of two-phase flows). The objectives and strategy of these approaches are to approximate the inverse of the LES filter and to build models with same mathematical structure as the subgrid term. A very interesting aspect with these formulations is that they use only the resolved filtered variables. Once G^{-1} and the filtered variables are known, the real unknowns can be reconstructed, as well as the subgrid contributions. Two main structural approaches have been selected:

- The Bardina model [7] considers a scale similarity which is to assume that the statistical structure of subgrid terms is similar to the terms evaluated from the smaller resolved scales. With this assumption, the filtering of a product is simply the product of filtered variables, i.e. $\overline{ab} = \overline{a}\overline{b}$. After some manipulations, the two-phase subgrid LES terms read for the OFM:

$$\tau_c = C_b \left(\overline{\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}} - \overline{\rho} \overline{\mathbf{u}} \cdot \overline{\nabla \mathbf{u}} \right) \quad (19)$$

$$\tau_d = C_b \overline{\nabla \cdot [2\mu \mathbf{S}]} - \nabla \cdot [2\overline{\mu \mathbf{S}}] \quad (20)$$

$$\tau_{st} = C_b \sigma \left(\overline{\overline{\kappa} \overline{\nabla C}} - \overline{\overline{\kappa}} \overline{\nabla C} \right) \quad (21)$$

$$\tau_{ia} = C_b \overline{\mathbf{u}} \cdot \overline{\nabla C} - \overline{\mathbf{u}} \cdot \overline{\nabla C} \quad (22)$$

with $\overline{\overline{\kappa}} = -\nabla \cdot \left(\frac{\overline{\nabla C}}{\|\overline{\nabla C}\|} \right)$. For the MFA, it reads:

$$\tau_c = C_b \rho_k \left(\overline{\nabla \cdot (\overline{\alpha_k} \overline{\mathbf{u}_k} \otimes \overline{\mathbf{u}_k})} - \nabla \cdot (\overline{\alpha_k} \overline{\mathbf{u}_k} \otimes \overline{\mathbf{u}_k}) \right) \quad (23)$$

$$\tau_d = C_b \mu_k \left(\overline{\nabla \cdot [\overline{\alpha_k} \overline{\mathbf{S}_k}]} - \nabla \cdot [\overline{\alpha_k} \overline{\mathbf{S}_k}] \right) \quad (24)$$

$$\tau_{st} = C_b \sigma \left(\overline{\overline{\alpha_k} \overline{\hat{\kappa}_k} \overline{\nabla \alpha_k}} - \overline{\overline{\alpha_k} \overline{\hat{\kappa}_k}} \overline{\nabla \alpha_k} \right) \quad (25)$$

$$\tau_{ia} = C_b \rho_k \left(\overline{\nabla \cdot (\overline{\alpha_k} \overline{\mathbf{u}_k})} - \nabla \cdot (\overline{\alpha_k} \overline{\mathbf{u}_k}) \right) \quad (26)$$

with $\overline{\overline{\hat{\kappa}_k}} = -\nabla \cdot \left(\frac{\overline{\nabla \alpha_k}}{\|\overline{\nabla \alpha_k}\|} \right)$. The Bardina constant C_b is adjustable. A value of 1 has been used here.

- The Approximate Deconvolution Model (ADM) [9] is a general framework for building models that respect the mathematical structure of the subgrid terms. First, an approximation of the inverse G^{-1} is build with a given order of accuracy, in a kind of Taylor expansion. Based on G^{-1} , reconstructed unfiltered

variables are build and used directly in the native structure of the subgrid LES terms as follows for the OFM:

$$\tau_c = C_a \left(\overline{\rho \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u}^*} - \overline{\rho} \overline{\mathbf{u}^*} \cdot \overline{\nabla \mathbf{u}^*} \right) \quad (27)$$

$$\tau_d = C_a \overline{\nabla \cdot [2\mu \mathbf{S}^*]} - \nabla \cdot [2\overline{\mu \mathbf{S}^*}] \quad (28)$$

$$\tau_{st} = C_a \sigma \left(\overline{\overline{\kappa}^* \overline{\nabla C}^*} - \overline{\overline{\kappa}^*} \overline{\nabla C}^* \right) \quad (29)$$

$$\tau_{ia} = C_a \overline{\mathbf{u}^*} \cdot \overline{\nabla C}^* - \overline{\mathbf{u}^*} \cdot \overline{\nabla C}^* \quad (30)$$

And for the MFA:

$$\tau_c = C_a \rho_k \left(\overline{\nabla \cdot (\alpha_k^* \mathbf{u}_k^* \otimes \mathbf{u}_k^*)} - \nabla \cdot (\overline{\alpha_k^*} \overline{\mathbf{u}_k^*} \otimes \overline{\mathbf{u}_k^*}) \right) \quad (31)$$

$$\tau_d = C_a \mu_k \left(\overline{\nabla \cdot [\alpha_k^* \mathbf{S}_k^*]} - \nabla \cdot [\overline{\alpha_k^*} \overline{\mathbf{S}_k^*}] \right) \quad (32)$$

$$\tau_{st} = C_a \sigma \left(\overline{\overline{\alpha_k^*} \overline{\hat{\kappa}_k^*} \overline{\nabla \alpha_k^*}} - \overline{\overline{\alpha_k^*} \overline{\hat{\kappa}_k^*}} \overline{\nabla \alpha_k^*} \right) \quad (33)$$

$$\tau_{ia} = C_a \rho_k \left(\overline{\nabla \cdot (\alpha_k^* \mathbf{u}_k^*)} - \nabla \cdot (\overline{\alpha_k^*} \overline{\mathbf{u}_k^*}) \right) \quad (34)$$

with $\mathbf{u}^* \approx G_7^{-1} \mathbf{u}$, $C^* \approx G_7^{-1} C$ and $\alpha_k^* \approx G_7^{-1} \alpha_k$. The approximate inverse filter of order k is such that

$$G_k^{-1} = \sum_{l=0,k} (1-G)^l \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \gamma^* &= G^{-1} \overline{\gamma} \approx \sum_{l=0,k} (1-G)^l \overline{\gamma} \approx \overline{\gamma} + (\overline{\gamma} - \overline{\overline{\gamma}}) \\ &+ (\overline{\overline{\gamma}} - \overline{\overline{\overline{\gamma}}}) + \dots \end{aligned} \quad (36)$$

We have used a 7th order of approximation for G^{-1} , instead of a classical 5th order found in literature [9,33], because we have observed better accuracy of modeled subgrid terms compared to filtered DNS terms. For higher orders, no significant improvements have been found. These results are presented in the next section. It has to be stressed that the Bardina model is no more than the ADM model of 2nd order.

The last type of model that has been considered is the mixed Smagorinsky-Bardina model [8]. It combines the positivity property of the functional model with the structural representativeness of the Bardina model. Due to the intrinsic construction of the

functional part of the model, it can only be applied to convective and interfacial subgrid terms. It reads for the OFM:

$$\tau_c = \frac{1}{2} \bar{f} \left[\nabla \cdot (-2(C_s \bar{\Delta})^2 \|\bar{\mathbf{S}}\| \bar{\mathbf{S}}) + C_b \left(\overline{\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}} - \bar{\rho} \cdot \overline{\nabla \mathbf{u}} \right) \right] \quad (37)$$

$$\tau_{ia} = \frac{1}{2} \bar{f} \left[\nabla \cdot (-2(C_s \bar{\Delta})^2 \|\bar{\mathbf{S}}\| \overline{\nabla C}) + C_b \left(\overline{\mathbf{u} \cdot \nabla C} - \bar{\mathbf{u}} \cdot \overline{\nabla C} \right) \right] \quad (38)$$

And for the MFA:

$$\tau_c = \frac{1}{2} \left[\nabla \cdot (-2(C_s \bar{\Delta})^2 \|\bar{\mathbf{S}}_k\| \overline{\alpha_k \bar{\mathbf{S}}_k}) + C_b \rho_k \left(\overline{\nabla \cdot (\overline{\alpha_k \mathbf{u}_k} \otimes \bar{\mathbf{u}}_k)} - \nabla \cdot (\overline{\alpha_k \bar{\mathbf{u}}_k} \otimes \bar{\mathbf{u}}_k) \right) \right] \quad (39)$$

$$\tau_{ia} = \frac{1}{2} \left[\nabla \cdot (-2(C_s \bar{\Delta})^2 \|\bar{\mathbf{S}}_k\| \overline{\nabla \alpha_k}) + C_b \rho_k \left(\overline{\nabla \cdot (\overline{\alpha_k \mathbf{u}_k})} - \nabla \cdot (\overline{\alpha_k \bar{\mathbf{u}}_k}) \right) \right] \quad (40)$$

5.2. Evaluation of LES models for two-phase subgrid terms

Thanks to DNS simulations, the two-phase LES subgrid terms can be directly calculated by applying filter G to the various variables of the phase separation problem. Moreover, the various LES models applied to τ_c , τ_d , τ_{st} and τ_{ia} can also be calculated with the DNS results. The main objective of the present section is to evaluate the representativeness of LES models presented in the previous section compared to filtered DNS subgrid terms. Results are presented in Fig. 5 in terms of correlation between a given model (Smagorinsky, Wale, Bardina, Mixed, ADM), for a given subgrid LES term, i.e. τ_c , τ_d , τ_{st} and τ_c , and the filtered DNS of a corresponding subgrid term. The evaluation of LES models is provided for both OFM and MFA. On a general point of view, it is observed that compared to OFM, the models applied to MFA involve less dispersion of the correlation between LES models and filtered DNS. Indeed, the phase average α_k is present in all terms for MFA. It tends to eliminate the LES modeling far from the interfacial zone and it damps the gradients or filtering operations in the interfacial zone. On the contrary, in the OFM, all values of the models are *a priori* sharper and present everywhere, including zones far from the interface. In this case, a larger dispersion of correlation between LES models and filtered DNS subgrid terms is induced. If attention is now paid to the quality of models for a given subgrid term, several observations arise:

- only structural models are able to model all subgrid terms. Indeed, functional based models such as Smagorinsky, Wale or Mixed do rely on a physical interpretation of the behavior and interaction of under-resolved scales with large scales of turbulence (energy cascade of Kolmogorov, dissipative effect of small scale turbulent structures, ...). They are mainly based on interpretation of kinetic energy and inertial effects in turbulent flows. However, they do not consider the multi-scale character of interfaces when two-phase flows are dealt with. They so can only be applied to advection or inertial terms in conservation equations. This is the reason why functional LES approaches are not possible to be investigated for τ_d and τ_{st} . If we pretend to perform real LES simulations accounting for all two-phase subgrid terms, using functional models seems to be inappropriate as they do not apply for all subgrid terms. This discussion is valid for both OFM and MFA.
- for the inertial and interfacial terms, all LES models can be compared. It is observed that for both one-fluid and multi-field approaches, the Smagorinsky and Wale models are not representative of filtered DNS terms. The Mixed model is better as it incorporates a contribution from the Bardina model that is working pretty well. The ADM approach is clearly the best

Table 7

Average relative error (in %) of the modeled two-phase LES subgrid terms compared to the filtered DNS subgrid terms. Both one-fluid and multi-field models are considered. Filter $\bar{\cdot}$ is applied to DNS, with a width of the low-pass filtering operator G equal to 2 cells in each direction.

Subgrid term	Smagorinsky	Wale	Bardina	Mixed	ADM
One-fluid model					
τ_c	93	108	40	64	17
τ_d	–	–	72	–	32
τ_{st}	–	–	54	–	24
τ_{ia}	105	88	62	78	58
Multi-field model					
τ_c	100	100	25	59	9
τ_d	–	–	43	–	20
τ_{st}	–	–	44	–	21
τ_{ia}	100	100	28	59	11

for all terms and all modeling approaches (OFM and MFA). The functional based models involve a lot of dispersion and they do not respect the $y = x$ slope that should be obtained if a perfect correlation between LES models and filtered DNS will be reached. The interesting point here is that ADM based models (and also Bardina but with poorer results) are working for all subgrid terms and all two-phase flow modeling approaches (OFM and MFA). The average percentage error that is obtained for all models, all subgrid terms and all two-phase flow models is given in Table 7. It can be clearly inferred that Smagorinsky and Wale model are not suitable for two-phase subgrid terms, even concerning inertia. The representativeness of Mixed model is better than Smagorinsky, as it incorporates a part of Bardina modeling. The Bardina model is performing quite nicely for all subgrid terms. It behaves less well for τ_d and τ_{ia} when OFM is considered whereas its quality is worse for τ_d and τ_{st} with regard to MFA. It could be imagined to play on the Bardina constant C_b so as to improve the performance of this model and to get closer to $y = x$ curve on the correlation plots. Finally, the ADM model is the best for all subgrid terms and all two-phase flow modeling approaches. The maximum error with MFA is at least 20% whereas this error is in the range 17 to 32% for OFM, with a peak of error of 58% for τ_{ia} .

If true LES were simulated, the use of LES models for convective subgrid terms will be equivalent to add a turbulent viscosity in the viscous term of the momentum equations. It is interesting to evaluate the equivalent turbulent viscosity resulting from the use of a given LES model, compared to the equivalent viscosity that the filtering of the DNS provides when the two-phase convective LES subgrid term is considered. Classically [10,20], we can write the turbulent viscosity μ_t for the OFM as follows:

$$\mu_t = \frac{\tau_c : \overline{\nabla \mathbf{u}}}{\bar{\mathbf{S}} : \overline{\nabla \mathbf{u}}} \quad (41)$$

And for the MFA:

$$\mu_t = \alpha_1 \frac{\tau_{c,1} : \overline{\nabla \mathbf{u}_1}}{\bar{\mathbf{S}}_1 : \overline{\nabla \mathbf{u}_1}} + \alpha_2 \frac{\tau_{c,2} : \overline{\nabla \mathbf{u}_2}}{\bar{\mathbf{S}}_2 : \overline{\nabla \mathbf{u}_2}} \quad (42)$$

Equivalent LES turbulent viscosities compared to equivalent filtered DNS one are plotted in Figs. 6 and 7. For OFM, the instantaneous turbulent viscosities are extracted in a vertical slice starting from point (0.6, 0.6, 0) whereas for MFA, the strating of the slice is (0.8, 0.8, 0). A time $t^* \approx 3$ is considered for the peak of enstrophy. The instantaneous simulations of OFM and MFA at a given time are not exhibiting the same interfacial and flow structures. The slices for turbulent viscosities have been chosen in order to cut different times the interface. If we focus on the equivalent DNS viscosity that we should obtain with LES models, we observe that negative values are obtained. This have

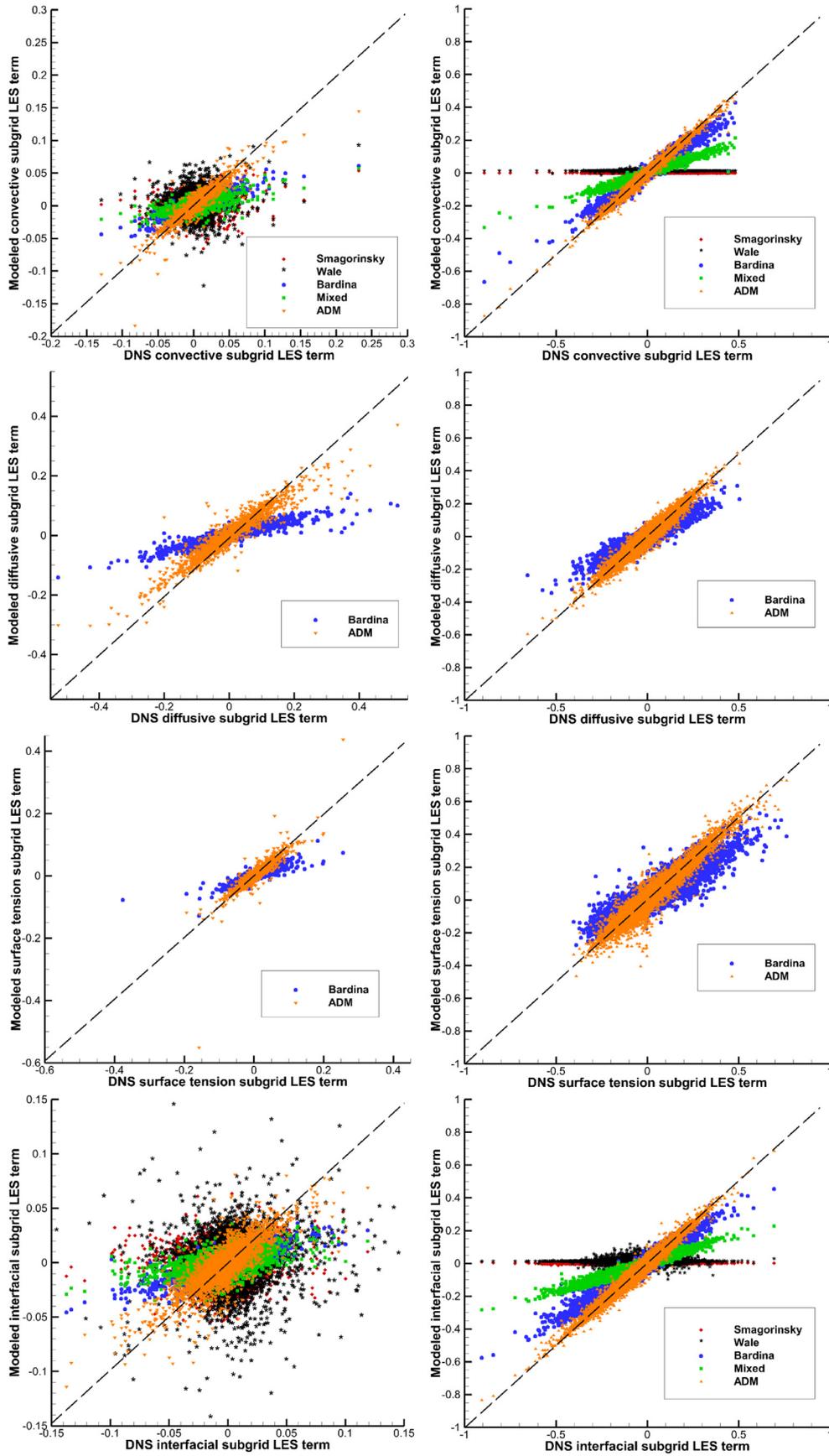


Fig. 5. Spatial correlation of two-phase LES subgrid terms - The modeled terms are plotted according to the filtered DNS subgrid terms. A perfect modeling would be on the $y=x$ line. Five LES models are considered: Smagorinsky [5], WALE [6], Bardina [7], Mixed model [8] and ADM [9]. Left column is for the one-fluid model whereas right column is for the multi-field approach.

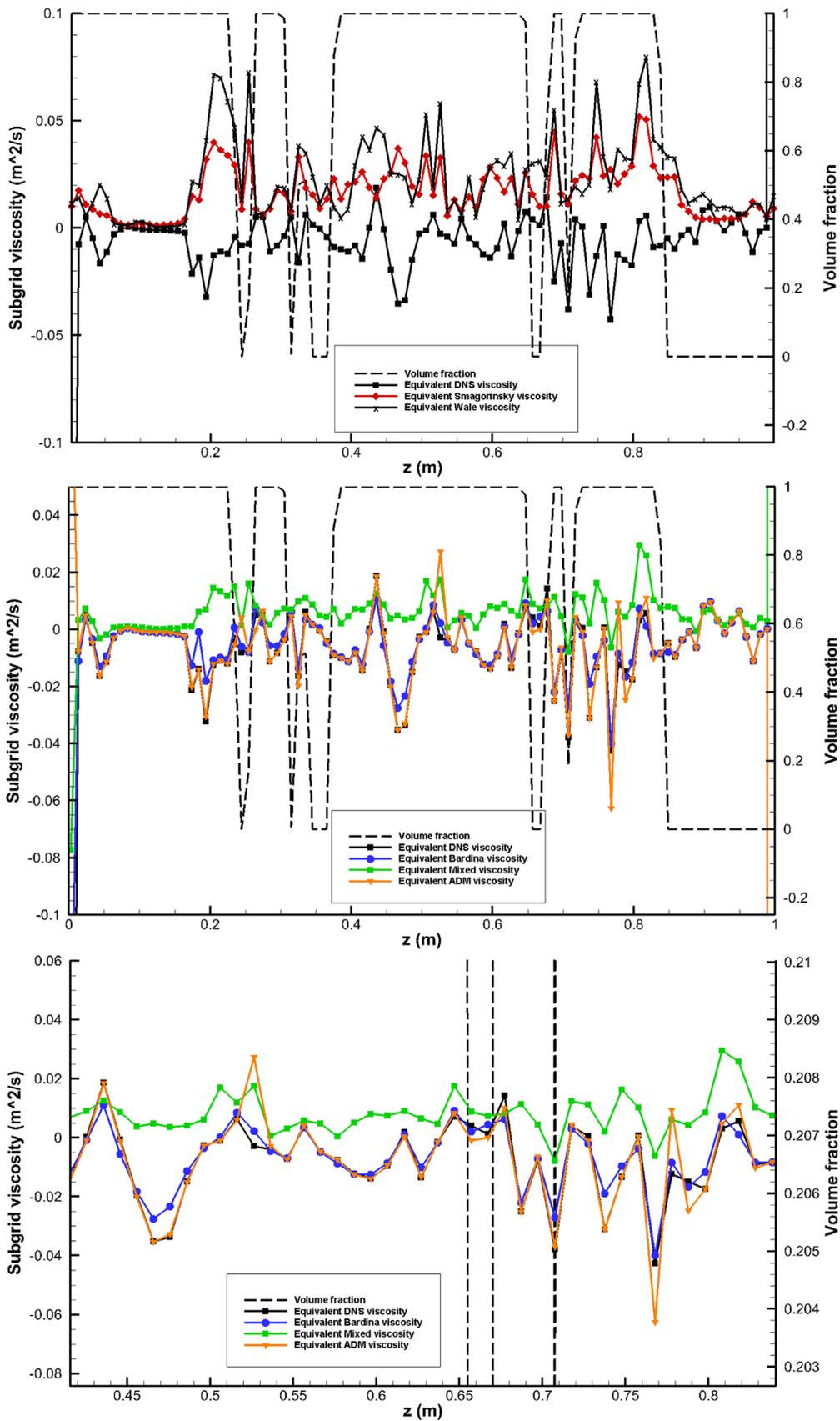


Fig. 6. Comparison of equivalent turbulent viscosities obtained with DNS and LES OFM models, i.e. Smagorinsky [5], WALE [6], Bardina [7], Mixed model [8] and ADM [9]. The bottom line is a zoom on the middle plot. The results are plotted in a vertical line centered on $[x = 0.6, y = 0.6]$. The volume fraction is also plotted to locate interface position as $C = 0.5$.

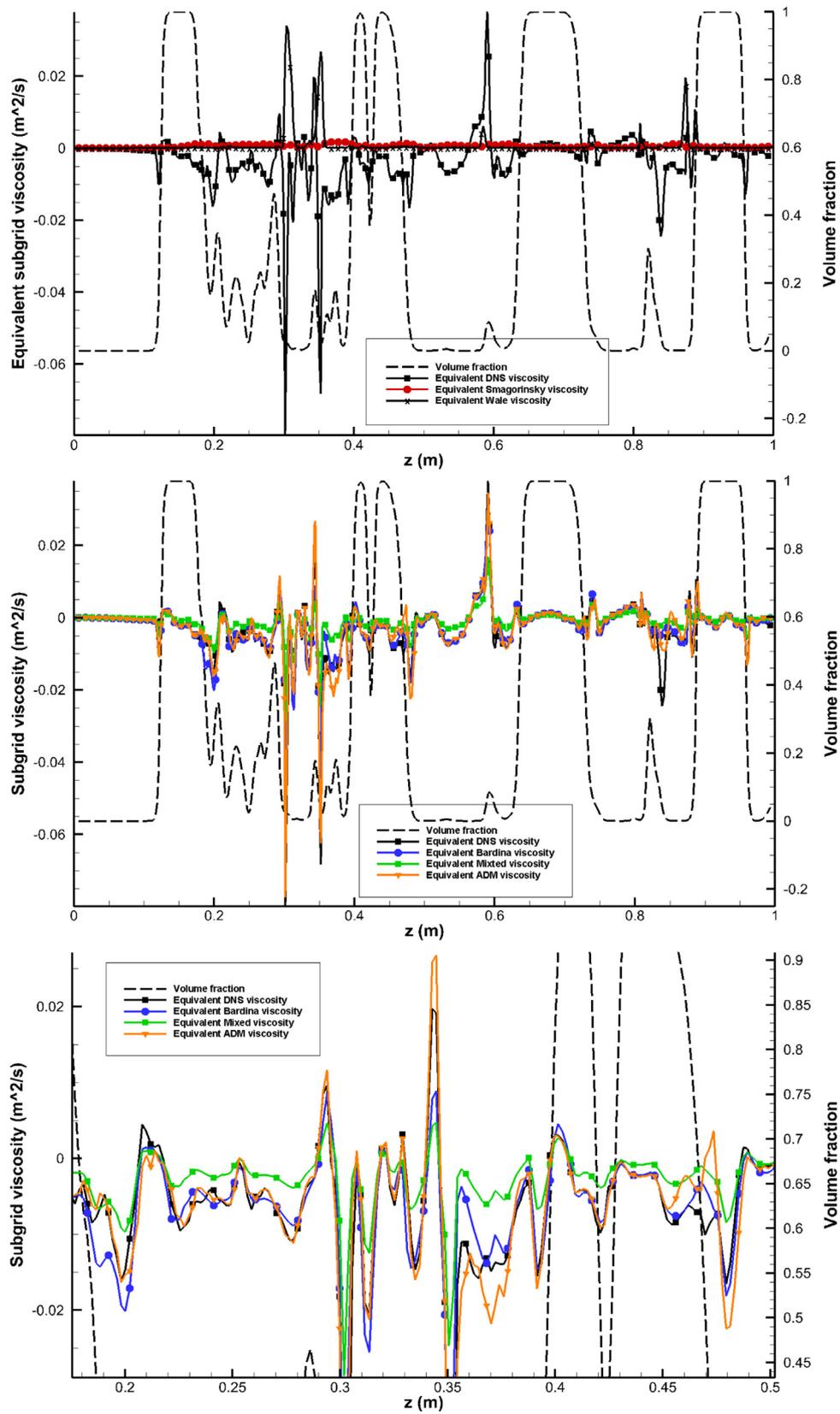


Fig. 7. Comparison of equivalent turbulent viscosities obtained with DNS and LES MFA models, i.e. Smagorinsky [5], WALE [6], Bardina [7], Mixed model [8] and ADM [9]. The bottom line is a zoom on the middle plot. The results are plotted in a vertical line centered on $[x = 0.8, y = 0.8]$. The volume fraction is also plotted to locate interface position as $C = 0.5$.

previously been reported by [10,11]. This important feature of the effect of inertial subgrid term cannot be represented by functional LES approaches as they are intrinsically built on positive terms. This is illustrated in the top right and bottom plots of Figs. 6 and 7. This way, Smagorinsky and Wale models are again discriminated against structural ones. If we now compare Bardina, ADM and Mixed models, we notice that the first two are much better as expected. Concerning equivalent turbulent viscosities, we observe that ADM is globally nearer to DNS than Bardina, even if locally, Bardina can exhibit closer values to DNS reference.

To conclude on LES modeling of two-phase subgrid LES terms, it has been demonstrated that the structural approaches are the correct way of building models. The ADM formalism allows to recover the negative values of equivalent turbulent viscosities in the good zones of the flow and they respect the behavior of filtered DNS subgrid terms with less than 30% discrepancy (50% for τ_{ia}). We have to keep in mind that ADM modeling allows to reconstruct the fields between the explicit filter that we have and the implicit filter brought by the simulation mesh. In real LES, an additive relaxation term will have to be incorporated in the momentum equations [9] in order to obtain the effect of under-resolved scales smaller than the implicit filter size.

6. Summary, conclusion and future work

Based on direct numerical simulation of two-phase flow with resolved scale interfaces, i.e. a phase inversion problem, *a priori* filtering of two-phase subgrid LES terms has been investigated. The one-fluid model and multi-field approaches were considered and filtered. In addition, different LES models taken from the turbulent single-phase flow literature were utilized to propose functional and structural LES models for two-phase LES subgrid terms. The order of magnitude of all *a priori* filtered subgrid terms and LES models for these terms were compared to filtered DNS values for the first time on a same two-phase problem. The formulation of LES models for all subgrid terms was also proposed and discussed for the first time, in particular for a multi-field approach.

For the first time, the filtered LES formulation of one-fluid and multi-field approaches were compared in a same work and on a common phase inversion test problem with resolved scale interfaces and multi-scale interface topologies (kind of atomization process). An important result of the present study is to observe that the filtered LES subgrid terms obtained by both OFM and MFA can be (or not) modeled by the same models.

Concerning *a priori* filtering, the main conclusion is that the inertia term is not predominant in two-phase flows with fragmentation and rupture of interface that exhibit a kind of atomization process. This conclusion is different from that of the studies of [3,10–13]. As soon as small-scale interfacial structures are generated, correlation terms induced by the curvature in the subgrid surface tension terms or between the local interface presence and the velocity are predominant against inertial terms. The diffusive viscous term is always small in our phase inversion problem, whatever the two-phase flow model or the kind of filtering.

Five different LES models applied to two-phase subgrid LES terms have been compared against filtered DNS results. Two classes of models have been considered, the functional (Smagorinsky, Wale) and the structural (Bardina, ADM) approaches. A combined functional-structural model, called Mixed Bardina-Smagorinsky, have also been investigated. Conclusion are clear for both OFM and MFA: functional LES modeling do not correlate to filtered DNS results whereas structural approaches do. Bardina and ADM are clearly the good LES framework to consider for two-phase flows with resolved scale interfaces. ADM is clearly better than Bardina in our study. It has to be noticed that we do not have triggered the Bardina constant to try to improve the

Bardina results. This could be useful to try to get closer to ADM. The improvement of Bardina, if possible, would be a nice point as ADM of 7th is clearly more CPU time consuming. The Mixed approach, as expected, is better than functional models and worse than structural LES techniques. For the first time, we have been able to demonstrate that a common LES framework could be used for modeling all two-phase subgrid terms with resolved scale interfaces, i.e. the approximate deconvolution method. The main interest of structural approaches is their capability of representing negative equivalent turbulent viscosities whereas functional models are generating intrinsically positive viscosities. We have shown that filtered equivalent DNS viscosities are clearly negative in specific zones of the flow, not only near the interface. This negative feature is expected from LES models.

Future works will be oriented in two ways:

- performing *a priori* LES filtering and model comparisons on finer DNS meshes. A 2048³ grid is under consideration for phase inversion. The same analysis will be used on other two-phase flows with separated phases, such as the atomization of a liquid sheet in a HIT flow [44]. The idea is to control the turbulence forcing and to vary the properties of the fluid and interface properties to try to extract general conclusions on LES modeling frameworks for two-phase flows.
- investigating real ADM LES with both OFM and MFA. A coarse LES grid will be used in this case. The idea is to see if compared to DNS, the LES are able to capture the main features of the flow. The other important point is to compare implicit LES, i.e. LES without explicit modeling of the subgrid terms, and ADM models for all two-phase subgrid terms. In particular, the role of the introduction of a relaxation term [9] in the momentum equations will be discussed and evaluated compared to subgrid LES contributions. The starting test problem could be the phase inversion benchmark, for which different Re and We can be chosen in order to adjust inertial and capillary effects compared to viscous and gravity contributions. The interest of this case is that DNS can be generated and used for LES comparisons.

Acknowledgments

The authors are grateful for access to the computational facilities of the French CINES (National computing center for higher education) and CCRT (National computing center of CEA) under project number x20152b6115 and x20162b6115. The Agence Nationale de la Recherche (ANR) through the MODEMI project is associated to this work. Thank EDF for the financial support it has given to this work.

References

- [1] Vincent S, Caltagirone J-P, Jamet D. Test case n°15: phase inversion in a closed box (pn, pe). *Multiphase Sci Technol* 2004;6:101–4.
- [2] Larocque J, Vincent S, Lubin P, Lacanette D, Caltagirone J-P. Parametric study of LES subgrid terms in a turbulent phase separation flow. *Int J Heat Fluid Flow* 2010;31:536–44.
- [3] Vincent S, Lacanette D, Larocque J, Toutant A, Lubin P, Sagaut P. Direct numerical simulation of phase separation and *a priori* two-phase LES filtering. *Comput Fluids* 2008;37:898–906.
- [4] Vincent S, Osmar L, Estivaleres J-L, Zaleski S, Auguste F, Aniszewski W, et al. A phase inversion benchmark for multiscale multiphase flows. under correction in *J Comput Phys* 2016.
- [5] Smagorinsky J. General circulation experiments with the primitive equations. i: the basics experiment. *Month Weather Rev* 1963;91:99–165.
- [6] Nicoud F, Ducros F. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow Turb Comb* 1999;62:183–200.
- [7] Bardina J, Ferziger J, Reynolds W. Improved subgrid scale models for large eddy simulation. *AIAA Paper* 1980;80:1357.
- [8] Bardina J, Ferziger J, Reynolds W. Improved turbulence models based on large eddy simulation of homogeneous, incompressible, turbulent flows. Report TF-19. Thermosciences Division, Det Mechanical Engineering, Stanford University; 1983.

- [9] Adams N, Stolz S. A subgrid-scale deconvolution approach for shock capturing. *J Comput Phys* 2002;178:391–426.
- [10] Labourasse E, Lacanette D, Toutant A, Lubin P, Vincent S, Lebaigue O, et al. Towards large eddy simulation of isothermal two-phase flows: governing equations and *a priori* tests. *Int J Multiphase Flow* 2007;33:1–39.
- [11] Toutant A, Labourasse E, Lebaigue O, Simonin O. Dns of the interaction between a deformable buoyant bubble and a spatially decaying turbulence: *a priori* tests for les two-phase flow modelling. *Comput Fluids* 2008;37:877–86.
- [12] Chesnel J, Reveillon J, Demoulin F, Menard T. Subgrid modeling of liquid atomization. 6th international conference on multiphase flow, Leipzig, Germany; 2007.
- [13] Liovic P, Lakehal D. Interface-turbulence interactions in large-scale bubbling processes. *Int J Heat Fluid Flow* 2006;28:127–44.
- [14] Crowe C. Multiphase flow handbook. CRC Press, Taylor and Francis; 2005.
- [15] Vincent S, Caltagirone J-P, Jamet D. Test-case n°15: phase inversion in a closed box (pc). *Multiphase Sci Technol* 2004;16:101–4.
- [16] Kleinstreuer C. Two-phase flow: theory and applications. Taylor and Francis; 2003.
- [17] Lebas R, Ménard T, Beau P, Berlemont A, Demoulin F. Numerical simulation of primary break-up and atomization: DNS and modelling study. *Int J Multiphase Flow* 2009;35:247–60.
- [18] Zuzio D, Estivaleres J-L, Villedieu P, Blanchard G. Numerical simulation of primary and secondary atomization. *C R Mécanique* 2013;341:15–25.
- [19] Trontin P, Vincent S, Estivaleres J-L, Caltagirone J-P. Direct numerical simulation of a freely decaying turbulent interfacial flow. *Int J Multiphase Flow* 2010;36:891–907.
- [20] Sagaut P. Large eddy simulation for incompressible flows - an introduction. Springer Verlag; 1998.
- [21] Kataoka I. Local instant formulation of two-phase flow. *Int J Multiphase Flow* 1986;12:745–58.
- [22] Scardovelli R, Zaleski S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annu Rev Fluid Mech* 1999;31:567–603.
- [23] Prosperetti A, Tryggvason G. Computational methods for multiphase flows. Cambridge University Press; 2007.
- [24] Hirt C, Nichols B. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J Comput Phys* 1981;39:201–25.
- [25] Osher S, Fedkiw R. Level set methods: an overview and some recent results. *J Comput Phys* 2001;169:463–502.
- [26] Tryggvason G, Scardovelli R, Zaleski S. Direct numerical simulations of gas-liquid multiphase flows. Cambridge University Press 2011.
- [27] Denèfle R, Mimouni S, Caltagirone J-P, Vincent S. Multifield hybrid approach for two-phase flow modeling - part 1: adiabatic flows. *Comput Fluids* 2015;113:106–11.
- [28] Fleau S, Mimouni S, Mèrigoux N, Vincent S. Simulations of two-phase flows with a multifield approach. In: Proceedings of computational heat transfer conference CHT-15, May 2015, New Brunswick, USA; 2015.
- [29] Fleau S, Mimouni S, Mèrigoux N, Vincent S. Validation of a multifield approach for the simulations of two-phase flows. *Comput Thermal Sci* 2016;7:1–17.
- [30] Jacqmin D. Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling. *J Comput Phys* 1999;155:96–127.
- [31] Sagaut P, Cambon C. Homogeneous turbulence dynamics. Cambridge University Press 2008.
- [32] Liovic P, Lakehal D. Multi-physics treatment in the vicinity of arbitrarily deformable gas-liquid interfaces. *J Comput Phys* 2007;222:504–35.
- [33] Aniszewski W, Boguslawski A, Marek M, Tyliczszak A. A new approach to sub-grid surface tension for les of two-phase flows. *J Comput Phys* 2012;231:7368–79.
- [34] Aniszewski W, Ménard T, Marek M. Volume of fluid (VOF) type advection methods in two-phase flow: a comparative study. *Comput Fluids* 2014;97:52–73.
- [35] Tomar G, Fuster D, Zaleski S, Popinet S. Multiscale simulations of primary atomization. *Comput Fluids* 2010;39:1864–74.
- [36] Delhaye J. Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. local instant formulation. *Int J Multiphase Flow* 1974;1:395–409.
- [37] Brackbill J, Kothe D, Zemach C. A continuum method for modeling surface tension. *J Comput Phys* 1992;100:335–54.
- [38] Chorin A. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math Comput* 1968;22:745–62.
- [39] Temam R. Sur l'approximation de la solution des équations de navier-stokes par la méthode des pas fractionnaires. *Arch Ration Mech Anal* 1969;33:377–85.
- [40] Fedkiw R, Aslam T, Merriman B, Osher S. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterials flows (the ghost fluid method). *J Comput Phys* 1999;152:457–92.
- [41] Shu C-W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. NASA (as NASA/CR-97-206253 report); 1997.
- [42] Shu C, Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *J Comput Phys* 1988;77:439–71.
- [43] Sussman M, Fatemi E, Smereka P, Osher S. Improved level set method for incompressible two-phase flows. *Comput Fluids* 1998;27:663–80.
- [44] Trontin P, Vincent S, Estivaleres J-L, Caltagirone J-P. Detailed comparisons of front-capturing methods for turbulent two-phase flow simulations. *Int J Numer Meth Fluids* 2008;56:1543–9.
- [45] Zuzio D, Estivaleres J-L. An efficient block parallel AMR method for two phase flow simulations. *Comput Fluids* 2011;44:339–57.
- [46] Ishii M. Thermo-fluid dynamics, theory of two-phase flow.. Eyrolles; 1975.
- [47] Mimouni S, Denèfle R, Fleau S, Vincent S. Multifield approach and interface locating method for two-phase flows in nuclear power plant. SimHydro 2014: modelling of rapid transitory flows, 11–13 June, Sophia-Antipolis; 2014.
- [48] Bartosiewicz Y. A first assessment of the NEPTUNE_CFD code: instabilities in a stratified flow comparison between the vof method and a two-field approach. *Int J Heat and Fluid Flow* 2008;29:460–78.
- [49] Patankar S, Spalding D. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *Int J Heat Mass Transf* 1975;15:1787–806.
- [50] Fleau S, Mimouni S, Vincent S. Conservative implementation of the interface sharpening equation within a multifield approach. under correction in *Comput Fluids* 2015.
- [51] Olsson E, Kreiss G. A conservative level set method for two phase flow. *J Comput Phys* 2005;210:225–46.
- [52] Strubelj L. Numerical simulations of stratified two-phase flows with two-fluid model and interface sharpening. Ph.D. thesis. University of Ljubljana; 2009.
- [53] Vasilyev O, Lund T, Moin P, Aksellvoll K. A general class of commutative filters for les in complex geometries. *J Comput Phys* 1998;146:82–104.
- [54] Dakhoui Y, Bedford K. Improved averaging method for turbulent flow simulation. part 1: theoretical development and application to burger's transport equation. *Int J Numer Meth Fluids* 1986;6:49–64.
- [55] Dakhoui Y, Bedford K. Improved averaging method for turbulent flow simulation. part 2: calculation and verification. *Int J Numer Meth Fluids* 1986;6:65–82.
- [56] Tavares M, Vincent S, Ould-Rouiss M, Estivaleres J-L. *A priori* study for the modeling of LES subgrid scale terms. In: Proceedings of the 4th Turbulence and Interactions conference TI2015, November 2015, Cargèse, France, Springer; 2016.
- [57] Fleau S, Vincent S, Mimouni S. LES modeling with a multifield approach. In: Proceedings of the 4th Turbulence and Interactions conference TI2015, November 2015, Cargèse, France, Springer; 2016.
- [58] Sagaut P, Germano M. On the filtering paradigm for les of flows with discontinuities. *J Turbulence* 2005;6:1–9.
- [59] Lacanette D, Gosset A, Vincent S, Buchlin J-M, Arquies E. Macroscopic analysis of gas-jet wiping: numerical simulation and experimental approach. *Phys Fluid* 2006;18:042103:1–15.
- [60] Larocque J, Rivière N, Vincent S, Reungoat D, Fauré J-P, Héliot J-P, et al. Macroscopic analysis of a turbulent round liquid jet impinging on an air/water interface in a confined medium. *Phys Fluid* 2009;21:065110:1–21.
- [61] Calmet I, Magnaudet J. High-schmidt number mass transfer through turbulent gas-liquid interfaces. *Int J Heat Fluid Flow* 1998;19:522–32.
- [62] Calmet I, Magnaudet J. Statistical structure of high-reynolds-number turbulence close to the free surface of an open-channel flow. *J Fluid Mech* 2003;474:355–78.
- [63] Calmet I, Magnaudet J. Large-eddy simulation of high-schmidt-number mass transfer in a turbulent channel flow. *Phys Fluids* 1997;9:438–55.

Bibliographie

- [1] T. Abadie, J. Aubin, and D. Legendre. On the combined effects of surface tension force calculation and interface advection on spurious currents within Volume of Fluid and Level Set frameworks. *Journal of Computational Physics*, 297 :611 – 636, 2015.
- [2] W. Aniszewski, A. Boguslawski, M. Marek, and A. Tyliczszak. A new approach to sub-grid surface tension for LES of two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 231 :7368–7379, 2012.
- [3] J.-L. Barrat and J.-P. Hansen. *Basic concepts for simple and complex liquids*. Cambridge University Press, 2003.
- [4] J. Bell, P. Colella, and H. Glaz. A second-order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 85(2) :257 – 283, 1989.
- [5] D.A. Koffi Bi, M. Tavares, E. Chénier, and S. Vincent. A review of geometrical interface properties for 3D Front-Tracking methods. *5th Turbulence and Interactions conference, Les Trois-Ilets, West French Indies, France*, 2018.
- [6] F. Bierbrauer and S.P. Zhu. A numerical model for multiphase flow based on the GMPPS formulation. Part I : Kinematics. *Computers and Fluids*, 36 :1199–1212, 2007.
- [7] J.U Brackbill, D.B Kothe, and C Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2) :335–354, 1992.
- [8] J. Breil. *Modélisation du remplissage en propergol de moteur à propulsion solide*. PhD thesis, Université de Bordeaux 1, 2001.
- [9] C.E. Brennen. *Fundamentals of Multiphase Flows*. Cambridge University Press, 2005.
- [10] J. P. Caltagirone and J. Breil. Sur une méthode de projection vectorielle pour la résolution des équations de Navier-Stokes. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics-Physics-Astronomy*, 327(11) :1179 – 1184, 1999.
- [11] V. Le Chenadec and H. Pitsch. A 3D Unsplit Forward/Backward Volume-of-Fluid approach and coupling to the Level Set method. *Journal of Computational Physics*, 233 :10–33, 2013.
- [12] V. Le Chenadec and H. Pitsch. A monotonicity preserving conservative sharp interface flow solver for high density ratio two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 249 :185–203, 2013.
- [13] A. J. Chorin. Flame advection and propagation algorithms. *Journal of Computational Physics*, 35(1) :1 – 11, 1980.
- [14] A.J. Chorin. The numerical solution of the Navier-Stokes equations for an incompressible fluid. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 73(6) :928–931, 11 1967.
- [15] G. Compère, E. Marchandise, and J.-F. Remacle. Transient adaptivity applied to two-phase incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 227 :1923–1942, 2008.
- [16] F. Couderc. *Développement d’un code de calcul pour la simulation d’écoulements de fluides non miscibles*. PhD thesis, Ecole nationale supérieure de l’aéronautique et de l’espace, 2007.

- [17] M. De-kang. Towards front-tracking based on conservation in two space dimensions ii, tracking discontinuities in capturing fashion. *Journal of Computational Physics*, 226(2) :1550 – 1588, 2007.
- [18] J.M. Delhaye. Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. Local instant formulation. *International Journal of Multiphase Flow*, 1(3) :395 – 409, 1974.
- [19] O. Desjardins, V. Moureau, and H. Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics*, 227 :8395–8416, 2008.
- [20] J. Du, B. Fix, J. Glimm, X. Jia, X. Li, Y. Li, and L. Wu. A simple package for front tracking. *Journal of Computational Physics*, 213(2) :613 – 628, 2006.
- [21] enseeiht. Mumps : a parallel sparse direct solver, Avril 2019. <http://mumps.enseeiht.fr/>.
- [22] M. Febres and D. Legendre. Enhancement of a 2D front-tracking algorithm with a non-uniform distribution of Lagrangian markers. *Journal of Computational Physics*, 358 :173 – 200, 2018.
- [23] R. P. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A Non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the Ghost Fluid method). *Journal of Computational Physics*, 152(2) :457 – 492, 1999.
- [24] S. Fleau, S. Mimouni, N. M erigoux, and S. Vincent. Validation of a multifield approach for the simulations of two-phase flows. *Computational Thermal Sciences*, 7 :441–457, 2015.
- [25] M. Fortin and R. Glowinski. *M ethodes de lagrangien augment e. Application   la r solution num rique de probl mes aux limites*. Dunod, Paris, 1982.
- [26] M. Fulgosi, D. Lakehal, S. Banerjee, and V. De Angelis. Direct numerical simulation of turbulence in a sheared air–water flow with a deformable interface. *Journal of Fluid Mechanics*, 482 :319–345, 2003.
- [27] S. Ganesan and L. Tobiska. An accurate finite element scheme with moving meshes for computing 3D-axisymmetric interface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 57(2) :119–138, 2008.
- [28] S. Ganesan and L. Tobiska. Arbitrary Lagrangian-Eulerian finite-element method for computation of two-phase flows with soluble surfactants. *Journal of Computational Physics*, 231(9) :3685 – 3702, 2012.
- [29] J. Glimm, J. Grove, B. Lindquist, O. A. McBryan, and G. Tryggvason. The bifurcation of tracked scalar waves. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 9(1) :61–79, 1988.
- [30] F.H. Harlow and J.E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow with fluid with free surface. *Physics of Fluids*, 8 :2182–2189, 1965.
- [31] Dalton J.E. Harvie and David F. Fletcher. A new Volume of Fluid advection algorithm : The stream scheme. *Journal of Computational Physics*, 162(1) :1 – 32, 2000.
- [32] M. Herrmann. On simulating primary atomization using the refined level set grid method. *Atomization and Sprays*, 21 :283–301, 2011.
- [33] C. Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows, Volume I : Fundamentals of numerical discretization*. John Wiley and Sons, Chichester, 1989.
- [34] 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, 1981.
- [35] S. Hysing, S. Turek, D. Kuzmin, N. Parolini, E. Burman, S. Ganesan, and L.Tobiska. Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 60 :1259–1288, aug 2009.

- [36] E. Ishii, T. Ishikawa, and Y. Tanabe. Hybrid particle/grid method for predicting motion of micro- and macro-free surfaces. *Journal of Fluid Engineering*, 128 :921–930, 2006.
- [37] M. Ishii. *Thermo-fluid dynamic, theory of two-phase*. Eyrolles, 1975.
- [38] M. Jemison, E. Loch, M. Sussman, M. Shashkov, M. Arienti, M. Ohta, and Y. Wang. A coupled Level Set-Moment of Fluid Method for incompressible two-phase flows. *Journal of Scientific Computing*, 54(2) :454–491, Feb 2013.
- [39] M. Jemison, M. Sussman, and M. Shashkov. Filament capturing with the Multimaterial Moment-of-Fluid method. *Journal of Computational Physics*, 285 :149–172, 2015.
- [40] I. Kataoka. Local instant formulation of two-phase flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(5) :745–758, 1986.
- [41] E. Labourasse, D. Lacanette, A. Toutant, P. Lubin, S. Vincent, O. Lebaigue, J.-P. Caltagirone, and P. Sagaut. Towards Large Eddy Simulation of isothermal two-phase flows : governing equations and a priori tests. *International Journal of Multiphase Flow*, 33 :1–39, 2007.
- [42] J. Larocque. *Modélisation et simulation numérique d’écoulements turbulents dans les mélanges liquides gaz*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, spécialité mécanique, 2008.
- [43] J. Larocque, N. Rivière, S. Vincent, D. Reungoat, J.-P. Fauré, J.-P. Hélot, J.-P. Caltagirone, and M. Moreau. Macroscopic analysis of a turbulent round liquid jet impinging on an air/water interface in a confined medium. *Physics of Fluids*, 21 :065110, 2009.
- [44] R. Lebas, T. Ménard, 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 :247–260, 2009.
- [45] D. Legendre and J. Magnaudet. The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 368 :81 – 126, 1998.
- [46] P. Liovic and D. Lakehal. Interface–turbulence interactions in large–scale bubbling processes. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 28 :127–144, 2007.
- [47] J. Liu, S. Koshisuka, and Y. Oka. A hybrid particle–mesh method for viscous, incompressible, multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 202 :65–93, 2005.
- [48] M. S. Longuet-Higgins and E. D. Cokelet. The deformation of steep surface waves on water. I. A numerical method of computation. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 350(1660) :1–26, 1976.
- [49] J. Lopez, J. Hernandez, P. Gomez, and F. Faura. An improved PLIC–VOF method for tracking thin fluid structures in incompressible two–phase flows. *Journal of Computational Physics*, 208 :51–74, 2005.
- [50] J. Magnaudet. *Méthodes numériques pour les problèmes d’interfaces*. Cours de l’Ecole de printemps de Mécanique des Fluides Numérique, 25-31 mai, Lalonde Les Maures, 1997.
- [51] R. McDermott and S.B. Pope. The parabolic edge reconstruction method (PERM) for Lagrangian particle advection. *Journal of Computational Physics*, 227(11) :5447 – 5491, 2008.
- [52] S. Mimouni. *Modélisation physique et simulation numérique des écoulements diphasiques liquide–vapeur*. PhD thesis, Université Paris–Est, Ecole doctorale Science, Ingénierie, Environnement, 2019.
- [53] S. Mimouni, S. Fleau, and S. Vincent. CFD calculations of flow pattern maps and LES of multiphase flows. *Nuclear Engineering and Design*, 321 :118–131, 2017.

- [54] W. F. Noh and P. Woodward. *SLIC (Simple Line Interface Calculation)*, *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, Twente University, Enschede*, volume 59 of *Lecture Notes in Physics*. Springer Berlin Heidelberg, 1976.
- [55] C. J. Ogayar, R. J. Segura, and F. R. Feito. Point in solid strategies. *Computers & Graphics*, 29(4) :616 – 624, 2005.
- [56] J. O’Rourke. *Computational Geometry in C* :. Cambridge University Press, Cambridge, 2 edition, 10 1998.
- [57] S. Osher and R. Fedkiw. Level Set Methods : An Overview and Some Recent Results. *Journal of Computational Physics*, 169(2) :463 – 502, 2001.
- [58] S. Osher and J. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1) :12 – 49, 1988.
- [59] S. Osher and J. A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1) :12 – 49, 1988.
- [60] L. Osmar, S. Vincent, J.-P. Caltagirone, D. Réungoat, and G. Mermaz-Rollet. Convective heat transfer of an impinging oil jet between a two-phase flow and a hot surface. *Atomization and Sprays*, 22 :185–205, 2012.
- [61] M. Owkes and O. Desjardins. A mass and momentum conserving unsplit semi-Lagrangian framework for simulating multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 332 :21 – 46, 2017.
- [62] B. J. Parker and D. L. Youngs. *Two and three dimensional Eulerian simulation of fluid flow with material interfaces*. Atomic Weapons Establishment, 1992.
- [63] S. V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow, Series in computational methods in mechanics and thermal sciences*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- [64] C. Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of Computational Physics*, 25(3) :220 – 252, 1977.
- [65] C. Peskin and D. McQueen. A three-dimensional computational method for blood flow in the heart I. Immersed elastic fibers in a viscous incompressible fluid. *Journal of Computational Physics*, 81(2) :372 – 405, 1989.
- [66] C. Peskin and B. Printz. Improved Volume Conservation in the Computation of Flows with Immersed Elastic Boundaries. *Journal of Computational Physics*, 105(1) :33 – 46, 1993.
- [67] 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, 2010.
- [68] J. E. Pilliod. *An analysis of piecewise linear interface reconstruction algorithms for volume-of-fluids methods*. 1992.
- [69] J. E. Pilliod and E. G. Puckett. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *Journal of Computational Physics*, 199(2) :465 – 502, 2004.
- [70] S. Popinet. *Stabilité et formation de jets dans les bulles cavitantes : développement d’une méthode de chaîne de marqueurs adaptée au traitement numérique des équations de Navier-Stokes avec surfaces libres*. PhD thesis, Université Paris 6, 2000.
- [71] S. Popinet. An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. *Journal of Computational Physics*, 228 :5838–5866, 2009.

- [72] S. Popinet and S. Zaleski. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30 :775–793, 1999.
- [73] E. G. Puckett. A volume-of-fluid interface tracking algorithm with applications to computing shock wave refraction. *Proceedings of the Fourth International Symposium on Computational Fluid Dynamics*, pages 933 – 938, 1991.
- [74] E.G. Puckett and J.S. Saltzman. A 3D adaptive mesh refinement algorithm for multimaterial gas dynamics. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 60(1) :84 – 93, 1992.
- [75] L. Qian, Y. Wei, and F. Xiao. Coupled THINC and level set method : A conservative interface capturing scheme with high-order surface representations. *Journal of Computational Physics*, 373 :284 – 303, 2018.
- [76] M. E. Weber R. Clift, J. R. Grace. *Bubbles, Drops and Particles*. Academic Press, 1978.
- [77] W. J. Rider and D. B. Kothe. Reconstructing volume tracking. *Journal of Computational Physics*, 141(2) :112–152, 1998.
- [78] I. Roghair, M. Van Sint Annaland, and J.A.M. Kuipers. An improved Front-Tracking technique for the simulation of mass transfer in dense bubbly flows. *Chemical Engineering Science*, 152 :351 – 369, 2016.
- [79] A. Sarthou. *Méthodes de domaines fictifs d'ordre élevé pour les équations elliptiques et de Navier-Stokes : application au couplage fluide-structure*. PhD thesis, Université de Bordeaux 1, 2009.
- [80] R. Scardovelli and S. Zaleski. Direct Numerical Simulation of Free-Surface and Interfacial Flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31 :567–603, January 1999.
- [81] R. Scardovelli and S. Zaleski. Interface reconstruction with least-square fit and split Eulerian-Lagrangian advection. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 41(3) :251–274, 2003.
- [82] S. Shin and D. Juric. Modeling Three-Dimensional Multiphase Flow Using a Level Contour Reconstruction Method for Front Tracking without Connectivity. *Journal of Computational Physics*, 180(2) :427 – 470, 2002.
- [83] S. Shin, I. Yoon, and D. Juric. The Local Front Reconstruction Method for direct simulation of two- and three-dimensional multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 230(17) :6605 – 6646, 2011.
- [84] Seungwon Shin, S.I. Abdel-Khalik, Virginie Daru, and Damir Juric. Accurate representation of surface tension using the level contour reconstruction method. *Journal of Computational Physics*, 203(2) :493 – 516, 2005.
- [85] M. Sussman and E. G. 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, 2000.
- [86] M. Sussman and E. G. 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, 2000.
- [87] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. *Journal of Computational Physics*, 114(1) :146 – 159, 1994.
- [88] G. Tomar, D. Fuster, S. Zaleski, and S. Popinet. Multiscale simulations of primary atomization using Gerris. *Computers and Fluids*, 39 :1864–1874, 2010.

- [89] A. Toutant, E. Labourasse, O. Lebaigue, and O. Simonin. DNS of the interaction between a deformable buoyant bubble and a spatially decaying turbulence : a priori tests for LES two-phase flows modelling. *Computers and Fluids*, 37 :877–886, 2008.
- [90] The Optical Trek. Pic a :high speed imaging : Bag formation, Avril 2019. <https://myopticaltrek.wordpress.com/ljicf/>.
- [91] 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, 2012.
- [92] 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, 2001.
- [93] G. Tryggvason, R. Scardovelli, and S. Zaleski. *Direct numerical simulations of gas-liquid multiphase flows*. Cambridge University Press, 2011.
- [94] P.G Tucker and Z. Pan. A cartesian cut cell method for incompressible viscous flow. *Applied Mathematical Modelling*, 24(8–9) :591 – 606, 2000.
- [95] S. O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100(1) :25 – 37, 1992.
- [96] S. Vincent, G. Balmigère, J.-P. Caltagirone, and E. Meillot. Eulerian–Lagrangian multiscale methods for solving scalar equations - Application to incompressible two–phase flows. *Journal of Computational Physics*, 229 :73–106, 2010.
- [97] S. Vincent, C. Le Bot, F. Sarret, E. Meillot, J.-P. Caltagirone, and L. Bianchi. Penalty and Eulerian–Lagrangian vof methods for impact and solidification of metal droplets plasma spray process. *Computers and Fluids*, 113 :32–41, 2015.
- [98] S. Vincent and J.-P. Caltagirone. A one–cell local multigrid method for solving unsteady incompressible multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 163 :172–215, 2000.
- [99] S. Vincent, J. P. Caltagirone, P. Lubin, and T. N. Randrianarivelo. An adaptative augmented Lagrangian method for three-dimensional multimaterial flows. *Computers and Fluids*, 33(10) :1273 – 1289, 2004.
- [100] S. Vincent, J. Larocque, D. Lacanette, A. Toutant, P. Lubin, and P. Sagaut. Numerical simulation of phase separation and a priori two-phase LES filtering. *Computers and Fluids*, 37 :898–906, 2008.
- [101] S. Vincent, M. Tavares, S. Fleau, S. Mimouni, M. Ould-Rouiss, and J.-L. Estivalezes. A priori filtering and LES modeling of turbulent two-phase flows, Application to phase separation. *Computers and Fluids*, 176 :245 – 259, 2018.
- [102] K. Voronetska. *Simulation numérique directe des écoulements à phases dispersées*. PhD thesis, Université de Bordeaux 1, 2012.
- [103] D. W. R. Wallace and C. D. Wirick. Large air–sea gas fluxes associated with breaking waves. *Nature*, 356 :694–696, 1992.
- [104] D. Youngs. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical methods for fluid dynamics*, 24(2) :273–285, 1982.
- [105] D. Zuzio and J.-L. Estivalezes. An efficient block parallel AMR method for two phase interfacial flow simulations. *Computers and Fluids*, 44 :339–357, 2011.
- [106] D. Zuzio, J.-L. Estivalezes, and B. Di Pierro. An improved multiscale Eulerian-Lagrangian method for simulation of atomization process. *Computers and Fluids*, 176 :285–301, 2018.