



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité :

Dynamique des fluides

Présentée et soutenue par :

M. ANTOINE MORENTE

le mardi 31 octobre 2017

Titre :

Développement d'une méthode de pénalisation pour la simulation
d'écoulements liquide-bulles

Ecole doctorale :

Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :

Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (I.M.F.T.)

Directeur(s) de Thèse :

M. DOMINIQUE LEGENDRE

M. JEROME LAVIEVILLE

Rapporteurs :

M. FRANÇOIS XAVIER DEMOULIN, UNIVERSITE DE ROUEN

M. STÉPHANE VINCENT, UNIVERSITE PARIS 12

Membre(s) du jury :

M. FRANÇOIS XAVIER DEMOULIN, UNIVERSITE DE ROUEN, Président

M. CRISTIAN MARCHIOLI, UNIVERSITE D'UDINE, Membre

M. DAMIEN COLOMBET, UNIVERSITE GRENOBLE ALPES, Membre

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été réalisé dans le cadre d'un dispositif CIFRE, avec une collaboration entre EDF R&D à Chatou et l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse. En premier lieu, je tiens à remercier EDF de m'avoir offert un environnement et un encadrement permettant la bonne conduite de travaux de recherche, un doctorant peut difficilement souhaiter mieux. Je remercie l'ensemble des personnes m'ayant accueilli chaleureusement à l'IMFT lors de mes passages dans la merveilleuse ville de Toulouse.

Ma première attention s'adresse à mes directeurs de thèse, Jérôme et Dominique, et salue leur patience au cours de ces années passées ensemble. Cette aventure commune, malgré les moments de doute, s'achève positivement, et tout compte fait, « a vaincre sans péril on triomphe sans gloire ». Je remercie François-Xavier Démoulin et Stéphane Vincent d'avoir accepté de rapporter ce travail. Je remercie également Cristian Marchioli venu spécialement d'Italie, Damien Colombet et Jean-Luc Estivalezes d'avoir accepté de faire partie de ce jury.

Un merci particulier à l'équipe des anciens 'experts' du feu groupe I81 et des nouveaux du groupe I8A : Jérôme, son alter ego Jay-Lav (ou Gé-Lav), Nikolaï alias 'Nick', Mathieu 'El Gringo de Perros-Guirec', Laurent sobrement appelé 'La Saumure', Stéphane 'SM' également connu comme 'King Congre' et sa chemise rose en particulier, le Goéland alsacien ou monégasque, Béber, Cyril 'L'ours', Shai, Marc et le fameux Perudo. Votre domaine d'expertise est si grand qu'il couvre tous les champs de compétences imaginables : rugby, football, baby-foot, barbecue, paella, œnologie, poulet aux morilles, pêche au homard et ses modes de cuisson, humour douteux mais efficace. Merci également à Céline, Ingrid, Clémentine, l'autre Mathieu, Kreshna, Chantal, Eliane, Thibault, Valentin, Jean, Daria, Benjamin, Solène, Paul et merci à ceux que j'ai involontairement oublié.

Je tiens en particulier à consacrer quelques lignes exclusivement à trois individus que j'ai eu la chance de côtoyer au quotidien, au bureau comme Au Bureau, les concernés comprendront. En premier lieu Sophie 'Cersei' Dallet, mon associée et complice depuis notre arrivée dans ce fameux bureau 218 situé avant la salle café. A lire ces lignes, je t'imagine te plaindre de ce surnom à ma grande satisfaction. Merci pour ces années ensemble, pour ces sorties au cinéma, au restaurant, malgré tes blagues d'un niveau très faible. Merci à Will Benguigui, dont j'ai partagé le

bureau à la fin de l'aventure. Je salue sa grande modestie au baby-foot. Personne ne partage autant que toi mon léger penchant pour la cuisine au sein de cette entreprise. Merci pour ce moment, ou plutôt ces moments. Enfin, Sarah, malheureusement les règles de bienséance régissant la section remerciements de tous les mémoires de thèse existants m'empêchent de livrer ton surnom ici. Je salue particulièrement ton véhicule motorisé d'une propreté irréprochable qui m'a plusieurs fois permis de réduire (relativement) la durée de cette longue marche quotidienne jusqu'à la gare RER.

Enfin merci à ma famille à la Réunion (et ailleurs) pour le soutien au cours de ces dernières années, merci à mes parents Antonio et Isabelle, mes frères et soeurs Manuel, Anna et Émilie.

Construction d'une méthode de pénalisation pour la simulation d'écoulements liquide-bulles

Résumé

Ce travail est dédié au développement d'une méthode numérique pour la simulation des écoulements liquide-bulles. La présence des bulles dans l'écoulement visqueux et incompressible est prise en compte via une méthode de pénalisation. Dans cette représentation Euler-Lagrange, les bulles supposées indéformables et parfaitement sphériques sont assimilées à des objets pénalisés interagissant avec le fluide. Une méthode VOF (Volume Of Fluid) est employée pour le suivi de la fonction de phase. Une adaptation de la discrétisation des équations de Navier-Stokes est proposée afin d'imposer la condition de glissement à l'interface entre le liquide et les bulles. Une méthode de couplage entre le mouvement des bulles et l'action du liquide est proposée. La stratégie de validation est la suivante. Dans un premier temps, une série de cas-tests est proposée; les objets pénalisés sont supposés en non-interaction avec le fluide. L'étude permet d'exhiber la convergence et la précision de la méthode numérique. Dans un second temps le couplage est testé via deux types de configurations de validation. Le couplage est d'abord testé en configuration de bulle isolée, pour une bulle en ascension dans un liquide au repos pour les Reynolds $Re_b = 17$ and $Re_b = 71$. Les résultats sont comparés avec la théorie établie par la corrélation de Mei pour les bulles sphériques propres décrivant intégralement la dynamique de la bulle. Enfin, des simulations en configurations de nuage de bulles sont présentées, pour des populations mono- et bidisperses dans un domaine entièrement périodique pour des taux de vide s'établissant entre 1% et 15%. Les statistiques fournies par les simulations caractérisant l'agitation induite par les bulles sont comparées à des résultats expérimentaux. Pour les simulations de nuages de bulles bidisperses, de nouveaux résultats sont présentés.

Mots-clés

bulle sphérique, écoulements à bulles, représentation Euler-Lagrange, méthode de pénalisation, nuage de bulles.

A penalization method for the simulation of bubbly flows

Abstract

This work is devoted to the development of a numerical method for the simulation of two-phase liquid-bubble flows. We use a volume penalization method to take into account bubbles in viscous incompressible flows. The chosen Euler-Lagrange framework involves spherical and non-deformable bubbles represented as moving penalized obstacles interacting with the fluid. A VOF (Volume Of Fluid) method is used to track the phase function while a discretization of the penalized conservation equations is realized to impose slip conditions at the liquid-bubble interface. A coupling method devised from the penalized momentum equations is proposed. The validation process is set as following. First, the fluid is supposed non-acting on the bubbles; several test-cases are presented; we consider configurations with different penalized obstacles shapes (curved channel, inclined channel), the obstacles are either static or dynamic; in each configuration an analytical solution is known. The results show the compliance and the quality of our numerical closures by exposing the convergence order of the method. In order to verify the accuracy of the coupling method, numerical simulations of a 1mm diameter single bubble rising in a quiescent liquid are performed for $Re_b = 17$ and $Re_b = 71$. Results are compared with theory established by using Mei correlation for clean spherical bubbles describing the whole dynamics of the rising bubble. Finally, simulations of bubble swarms, in mono- and bidisperse configurations have been carried out in a fully periodic box with moderate void fractions ranging from 1% to 15%. The statistics provided by the simulations characterizing the bubble-induced agitation are compared to experimental results. For the bidisperse bubble swarm configuration, new results are presented.

Keywords

spherical bubble, bubbly flows, Euler-Lagrange frame, penalization method, swarm of bubbles.

Nomenclature

Lettres romaines

Symbole	Description	Unité
C_M	Coefficient de masse ajoutée	-
C_d	Coefficient de traînée	-
C_l	Coefficient de portance	-
C	Fonction couleur	-
\mathbf{g}	Accélération de la gravité	m/s ²
K	Paramètre de pénalisation	-
N_b	Nombre de bulles	-
N_l	Nombre de grandes bulles	-
N_s	Nombre de petites bulles	-
N_c	Nombre de collisions	-
R_c	Paramètre de restitution d'énergie des collisions	-
R, r_i	Rayon de la bulle	m
t_c	Temps à la collision	s
\mathbf{x}_{bi}	Position de la bulle	m
\mathbf{u}_b	Vitesse lagrangienne de la bulle	m/s
V, \mathbf{u}	Vitesse du fluide	m/s
P	Pression du fluide	Pa

Lettres grecques

Symbole	Description	Unité
α_{IJ}	Fraction surfacique	-
α_I	Fraction volumique	-
α	Taux de vide	-
α_s	Taux de vide associé aux petites bulles	-
α_l	Taux de vide associé aux grandes bulles	-
Δt	Pas de temps	s

μ_f	Viscosité dynamique du fluide	Pa.s
μ_p	Viscosité de pénalisation	Pa.s
ν_f	Viscosité cinématique du fluide	m ² /s
Ω_b	Domaine occupé par la bulle	-
Ω_f	Domaine occupé par le fluide	-
Ω_I	Cellule d'indice I	-
ρ_f	Masse volumique du fluide	kg/m ³
ρ_b	Masse volumique de la bulle	kg/m ³
Σ	Interface liquide-bulles	-
τ	Paramètre de couplage	-

Nombres sans dimension

Symbole	Description	Unité
Re	Nombre de Reynolds	-

Acronymes

Symbole	Description	Unité
PTS	Pressurized Thermal Shock	-
DNB	Departure from Nucleate Boiling	-
DNS	Direct Numerical Simulation	-
PDF	Probabilty density function	-
VOF	Volume Of Fluid	-
CMF	Correction des flux de masse	-
CD	Correction de la divergence	-
CS	Correction de la contrainte de cisaillement	-
CPG	Correction du gradient de pression	-

Table des matières

Nomenclature	vi
Introduction	1
1 Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles	9
1.1 Calcul de la fonction VOF	11
1.1.1 Méthode 1 : méthode Mass Conserving Level-Set (MCLS)	12
1.1.2 Méthode 2 : calcul de la fonction VOF par une méthode d'intégration	15
1.1.3 Comparaison des performances des deux méthodes	20
1.1.4 Critère de conservativité : correction des fractions volumiques	22
1.2 Caractérisation de l'interface : calcul des fractions surfaciques et des normales à l'interface	24
1.2.1 Calcul bidimensionnel des fractions surfaciques	28
1.2.2 Calcul tridimensionnel des fractions surfaciques	33
1.2.3 Calcul des normales à l'interface liquide-bulle	38
1.3 Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement	38
1.3.1 Avancée en temps des bulles	39
1.3.2 Traitement de la périodicité pour le suivi des bulles	39
1.3.3 Interaction bulle-bulle et bulle-paroi	42
1.3.3.1 Traitement des collisions bulles-bulles	42
1.3.3.2 Traitement des collisions bulles-parois	47
1.3.4 Algorithme collisionnel général	49
1.3.4.1 Algorithme collisionnel général	51
1.3.4.2 Parallélisme du suivi Lagrangien	57
1.3.4.3 Validation de l'algorithme collisionnel général	59
1.4 Conclusions	65
2 Résolution des équations de Navier-Stokes dans NEPTUNE_CFD et formulation du couplage liquide-bulles	67
2.1 Introduction	68
2.2 Formulation initiale des équations de conservation	68
2.3 Formulation du problème de pénalisation	69
2.4 Position des variables	70

2.5	Le solveur de NEPTUNE CFD	71
2.6	Conditions limites	72
2.6.1	Conditions d'entrée/sortie	72
2.6.2	Conditions de symétrie	72
2.6.3	Conditions de périodicité	72
2.7	Condition de glissement à l'interface	72
2.7.1	Formalisme de discrétisation	72
2.7.2	Formulation de la divergence	74
2.7.3	Calcul des flux de masse	75
2.7.4	Calcul des flux visqueux	77
2.7.5	Correction du gradient de pression	79
2.8	Modifications supplémentaires apportées à la méthode générale	80
2.8.1	Régularisation de la pression dans le domaine pénalisé	80
2.8.2	Régularisation des champs de vitesse et de pression en présence de conditions aux limites périodiques	81
2.9	Formulation du couplage liquide-bulles	82
2.9.1	Position du problème	82
2.9.2	<i>Version 1</i> - Version initiale	82
2.9.3	<i>Version 2</i> - Formalisme diphasique	86
2.9.4	Choix de la méthode de couplage	87
2.9.5	Introduction d'une viscosité de pénalisation μ_p	87
2.10	Conclusions	89
3	Validation numérique de la méthode	90
3.1	Introduction	90
3.2	Stratégie de validation	91
3.3	Configuration d'objets pénalisés statiques	93
3.3.1	Écoulement dans un canal courbe	93
3.3.2	Écoulement potentiel autour d'un cylindre	97
3.3.3	Écoulement d'un fluide visqueux autour d'un cylindre avec glissement	102
3.4	Configurations d'objets pénalisés mobiles	107
3.4.1	Écoulement en canal incliné avec parois défilantes	107
3.4.2	Bulle sphérique en mouvement relatif nul et homogène dans le fluide	113
3.5	Conclusions	118
4	Validation of the method in a single bubble configuration	119
4.1	Introduction	119
4.2	Dynamics of a rising spherical bubble	122
4.3	Simulation strategy	123
4.4	Simulations results	124
4.4.1	Initial accelerations	125
4.4.2	Terminal velocities	127
4.4.3	Discussion : selection of the penalization viscosity	128

4.4.4	Velocity fields	130
4.4.5	Maximal vorticity	134
4.4.6	Wake profiles	135
4.5	Conclusions	138
5	Validation of the numerical method on swarm of bubble configurations	140
5.1	Introduction	140
5.2	Preliminary study	141
5.2.1	Influence of the mesh refinement on the simulations results .	141
5.2.2	Influence of the containment e	
5.2.3	Influence of the penalization viscosity μ_p	146
5.3	Simulations of monodisperse bubble swarms	147
5.4	Simulations of bidisperse bubble swarms	153
5.4.1	Isolated influence of the radius disparity	154
5.4.2	Influence of the void fraction ratio between large and small bubbles	157
5.5	Conclusions	164
	Conclusions et perspectives	166

Table des figures

1	Schéma de fonctionnement d'une centrale de type REP (issu de Wikipedia).	1
2	Configuration verticale d'écoulement : (a) écoulement à bulles, (b) écoulement à poches, (c) écoulement à poches fractionnées, (d) écoulement annulaire à poches liquides, (e) écoulement annulaire. Image issue du site doc.modelica.org.	2
3	Recouvrement de la surface du combustible par un film de vapeur et de petites bulles.	3
4	Correspondance entre configuration locale réelle et simulation par modèle moyenné eulérien. À droite, simulation avec NEPTUNE_CFD d'un panache de bulles d'air dans un domaine initialement rempli d'eau.	5
1.1	Représentation de $N_b = 5$ bulles suivies dans l'écoulement par leurs positions (marqueurs rouges) sur une grille eulérienne.	10
1.2	Fractions volumiques pour un quart de bulle sphérique sur une grille 4x4.	12
1.3	Représentation d'interfaces à partir de fonctions implicites, bleu : cercle/ellipse, magenta : vague.	16
1.4	Subdivision d'un cercle en arcs de cercle, chacun d'entre eux étant définis par une équation [Bnà et al. (2015)].	17
1.5	Sous-grille de 3x3 points d'une maille carrée de dimension h_0 . [Bnà et al. (2015)].	18
1.6	En considérant une formulation explicite $y = g(x)$, l'intégrande est la ligne joignant les points intersections (x_1, y_0) et (x_{i1}, y_1) et le sommet (x_2, y_1) [Bnà et al. (2015)].	19
1.7	Contours de la fonction couleur pour une sphère (gauche) et une ellipsoïde (droite) par la Méthode 2, grille 80^3	20
1.8	Fonction couleur calculée par la Méthode 2 pour des inclusions 2D : cercle (gauche) et ellipse (droite). Le contour de la fonction couleur est représenté par une courbe blanche, grille 80^2	20
1.9	Tracé de la fonction F sur $[0,1]$	23
1.10	Trois configurations d'interface possibles (a), (b) et (c) correspondent à une même fraction volumique.	24
1.11	Configuration initiale de la cellule de centre x_k séparée des cellules voisines de centres x_w, x_n, x_e et x_s par les faces F_{wk}, F_{nk}, F_{ek} et F_{sk}	25

1.12	Fractions volumiques aux faces de la cellule k . On a trivialement pour les faces non traversées par l'interface $\alpha_{wk} = \alpha_{nk} = 1$	26
1.13	Construction de la normale à l'interface à partir des fractions surfaciques.	26
1.14	Révaluation fictive de la forme de la cellule de centre x_k traversée par l'interface : $F_{ek} \rightarrow F'_{ek}$ et $F_{sk} \rightarrow F'_{sk}$. La face fictive F_b correspond à l'interface liquide-bulle.	27
1.15	Configuration du problème : deux cellules de centres x_i et x_j toutes deux traversées par l'interface Σ	28
1.16	Approximation de la l'interface originelle courbe Σ par une fonction affine par morceaux Σ'	29
1.17	Notations de l'étude et représentation de l'interface par une fonction affine par morceaux.	30
1.18	(a) Représentation initiale de l'interface par une fonction affine par morceaux. (b) Approximation réalisée : l'interface est représentée par une fonction affine.	31
1.19	Quatre configurations d'interface possibles. Le calcul de l'aire dépend des formes géométriques obtenues : (1) Triangle (Ω_I) - Trapèze (Ω_J), (2) Trapèze - Trapèze, (3) Triangle - Trapèze + Rectangle, (4) Trapèze - Trapèze + Rectangle.	32
1.20	Calcul de la fraction surfacique de bulle. Le point P_i correspond à l'intersection entre l'interface Σ et de la droite d'équation $x = d$, $d \in \mathbb{R}$. Le point S est le sommet situé dans le domaine occupé par la bulle.	33
1.21	La face F_{IJ} admet une intersection (aire rouge) avec l'interface Σ de surface s_{IJ}	34
1.22	Configuration à l'étude : maillage cartésien de dimension caractéristique h_0 ; le domaine de calcul contient une bulle sphérique de rayon r	34
1.23	Le plan en rouge contient tous les sommets vérifiant $x = x_4$	36
1.24	Pseudo-grille cartésienne composée de toutes les faces contenues dans le plan d'équation $x = x_4$. Selon cette vue du problème, le calcul des fractions surfaciques correspond à un calcul de fractions volumiques 2D.	36
1.25	La bulle B_i franchit la paroi (violet) affectée d'une condition limite de périodicité et est réintroduite à gauche comme la bulle B'_i image de B_i par la translation $(T_x, T_y = 0)$	37
1.26	Configuration à l'étude : le centre de la bulle B_i se situe hors du domaine de calcul.	40
1.27	Translations possibles de la bulle B_i si $x_{b_i} \geq x_N$ ou $y_{b_i} \geq y_N$	41
1.28	Mise à jour de la position de la bulle d'après la translation \vec{T}	42
1.29	Modèle soft-sphere : sphères en intersection se recouvrant sur une distance D	43
1.30	Modèle de sphère rigide : la distance de D est minimale lors du contact entre les sphères.	43

1.31	La bordure extérieure bleue est le cercle de rayon $r + \Delta x$. Le nouveau point de collision entre les deux cercles assure un éloignement relatif des interfaces initiales.	44
1.32	Collision entre deux bulles sphériques. Seules les vitesses normales (bleu) sont modifiées lors de la collision.	45
1.33	Bulles en collision ; (a) collision classique ; (b) augmentation artificielle du rayon.	47
1.34	Configurations étudiées : (a) paroi latérale gauche ; (b) parois sur les bords latéraux.	47
1.35	(a) phase d'approche de la bulle, (b) contact à la paroi, (c) rebond à la paroi.	49
1.36	Avancée d'une paire de bulle (i, j) jusqu'à la collision.	52
1.37	Le critère de collision ne permet pas de détecter le recouvrement des bulles à $t = t_{n+1}$ à partir de leurs positions à $t = t_n$	53
1.38	La position de la bulle en rouge minimise la distance d_{ij}	54
1.39	Avancée d'une bulle jusqu'à sa position de contact à la paroi.	55
1.40	(a) La prochaine collision correspondant à collision de la bulle 4 avec la paroi à t_{c_1} est détectée. (b) Avancée des bulles pour un pas de temps Δt_{c_1} . La prochaine collision correspond à la collision des bulles 1 et 2 à t_{c_2}	56
1.41	(c) Avancée d'une bulle pour un pas de temps Δt_{c_2} . Pas de collision détectée entre t_{c_2} et t_{n+1} . (d) Avancée des bulles pour un pas de temps $\Delta t_{N_c+1} = t_{n+1} - t_{N_c}$	57
1.42	Représentation de $N_b = 6$ bulles, $N_P = 6$. Chaque bulle est uniquement définie sur le domaine à laquelle elle appartient. Les liaisons en pointillés désignent les collisions potentielles entre bulles associées à deux processus différents.	58
1.43	Représentation de $N_b = 6$ bulles, $N_P = 6$. Chaque processus « voit » l'intégralité des bulles du domaine Ω . Les liaisons en pointillés désignent les collisions potentielles entre bulles associées à deux processus différents.	59
1.44	Configuration initiale de simulation : répartition homogène des inclusions, $N_b = 64$	61
1.45	Disposition des bulles dans le domaine périodique à $N_c = 1250000$	62
1.46	Comparaison des distributions des composantes des vitesses de bulle et leur loi normale associée.	63
1.47	Disposition des bulles dans le domaine périodique à $N_c = 1250000$	64
1.48	Comparaison des distributions des composantes des vitesses de bulle et leur loi normale associée.	65
2.1	Définition des sous-domaines de Ω sur la grille Eulérienne et valeurs des fonctions couleurs associées.	70
2.2	Positionnement des variables sur un volume de contrôle Ω_I d'un maillage colocalisé.	71
2.3	Localisation des variables sur la cellule Ω_I	74

2.4	Passage de (a) à (b) : pseudo-réévaluation de la forme d'une cellule traversée par l'interface conduisant à la nouvelle formulation de la contrainte de divergence.	75
2.5	Étant donné la position du centre de masse x_F dans le domaine pénalisé, une vitesse non-nulle ne peut être calculée à cette position. Une croix orange est située sur le vecteur tel qu'il devrait être défini à la face).	76
2.6	Calcul de la vitesse au sommet x_V	76
2.7	Calcul des flux de masse à partir des vitesses aux sommets. Les vitesses intervenant dans le calcul sont entourées en orange; (a) deux sommets non-pénalisés, (b) un sommet unique non-pénalisé.	77
2.8	Calcul de la vitesse de diffusion entre les cellules Ω_I et Ω_J . (a) La vitesse tangentielle à l'interface (rouge) est obtenue par projection de la vitesse fluide sur l'interface Σ , le déplacement normal de l'interface (bleu) est donné par la vitesse de la cellule pénalisée. (b) La vitesse à l'interface \mathbf{u}_Σ (magenta) est ensuite calculée à partir de ces composantes; la vitesse à la face $\mathbf{u}_{D,IJ}$ (orange) est ensuite calculée à partir de \mathbf{u}_I et \mathbf{u}_J	79
2.9	Reconstruction du gradient de pression sur la maille fluide I.	80
2.10	Bulle en translation dans un fluide au repos pour $Re = 10$. (Gauche) champ de pression non-régularisé; (droite) diffusion de la pression autour de la bulle vers l'intérieur de la bulle.	81
2.11	Effect de la viscosité interne de la bulle sur le champ de vitesse interne à la bulle; A gauche : $\mu_p = 1$, A droite $\mu_p = 100$. Les contours du module de la vitesse sont tracés en blanc, les contours de la fonction couleur sont tracés en violet.	88
2.12	Représentation en 2D d'une bulle sur un maillage régulier. Les cellules en rouges sont entièrement pénalisées, les faces les liant marquées d'un point vont être affectées de la viscosité μ_p	88
3.1	Sketch of the inclined channel configuration.	94
3.2	Champ de pression à $t = t_f$ et ses contours associés.	95
3.3	Champ de vitesse à $t = t_f$ et ses contours associés.	95
3.4	Zoom sur le champ de vitesse près de l'interface; (a) : (NCR) simulation. (b) : (CR) simulation.	96
3.5	Etude de convergence pour $P, (V_x, V_y)$ en norme L_1 (écoulement dans un canal courbe.	97
3.6	Représentation de la configuration à l'étude.	98
3.7	Lignes de courant autour de l'obstacle cylindre pour le niveau de raffinement R6.	98
3.8	Profils de pression transversale ($x = 0$, gauche) et longitudinale ($y = 0$, droite) pour 5 niveaux de raffinement R1, R2, R3, R4 et R5.	100
3.9	Profils de vitesse transversale ($x = 0$, gauche) et longitudinale ($y = 0$, droite) pour 5 niveaux de raffinement R1, R2, R3, R4 et R5.	100

3.10	Étude de convergence pour $P, (V_x, V_y)$ en norme L_1 (écoulement potentiel autour d'un cylindre).	101
3.11	Champs de vitesse et contours associés à $t = t_f$: (a) NCR, (b) CR.	102
3.12	Champs de pression et contours associés à $t = t_f$: (a) NCR, (b) CR.	102
3.13	Configuration étudiée : cas-test d'écoulement autour d'un cylindre.	103
3.14	(a) Maillage adapté à l'obstacle cylindrique, (b) grille cartésienne utilisée pour la simulation.	104
3.15	Profils de pression longitudinale ($y = 0$, gauche) et transversale ($x = 0$, droite).	105
3.16	Profils de vitesse longitudinale ($y = 0$, gauche) et transversale ($x = 0$, droite).	105
3.17	Champs de vitesse et leurs contours associés : (a) NCR, (b) CR, (c) cas avec maillage adapté à la forme de l'obstacle.	107
3.18	Schéma de la configuration du canal incliné.	108
3.19	Initialisation du champ de vitesse à $t = 0$.	108
3.20	Champs de vecteurs vitesses à $t = t_f$, grille 20×40 , Gauche : (CR); Droite : (NCR).	110
3.21	Simulation sur un maillage de 20×40 éléments. (a) : profils de pression normalisée et (b) : profils de vitesse normalisée en travers du canal incliné.	111
3.22	Évolution de l'erreur en norme L_1 de la pression P et des composantes de vitesse V_x et V_y (grille 40×80) : (a) : CR; (b) : (NCR).	112
3.23	Étude de convergence des champs $P, (V_x, V_y)$ en norme L_1 (écoulement en canal incliné).	112
3.24	(a) Initial sketch of the configuration, (b) Extracted plane.	113
3.25	Directions utilisées pour l'établissement des profils.	114
3.26	Profils de vitesse et de pression selon les directions D_1, D_2 et D_3 .	115
3.27	Champ de vitesse à la fin de la simulation $t = t_f$ (Gauche : (CR), Droite : (NCR)) : (a) plan YZ, (b) plan XZ et (c) plan XY.	117
3.28	Étude de convergence pour $P, (V_x, V_y, V_z)$ en norme L_1 (bulle en mouvement homogène et relatif nul dans un fluide).	118
4.1	Graphical correlation proposed by Grace [Grace (1973)].	121
4.2	Initial configuration of the study : the bubble is located at the bottom of the tank.	123
4.3	Mesh refinements selected for the study : (a) 4, (b) 8 and (c) 16 cells in the radius of the bubble.	124
4.4	Rising velocities for $Re_b = 17$. The fitting solution is marked with the symbol *.	125
4.5	Rising velocities for $Re_b = 71$. The fitting solution is marked with the symbol *.	126
4.6	Influence of μ_p on the initial acceleration a_0 .	128
4.7	Influence of μ_p on the terminal velocity \mathbf{u}_{bT} .	129
4.8	Influence of μ_p on the CPU Time.	130
4.9	Rising velocity fields, $Re_b = 17$, left : 8 cells in the radius, right : 16 cells in the radius, simulation times : (a) $t = t_1$, (b) $t = t_2$, (c) $t = t_3$.	132

4.10	Rising velocity fields, $Re_b = 71$, left : 8 cells in the radius, right : 16 cells in the radius, simulation times : (a) $t = t_1$, (b) $t = t_2$, (c) $t = t_3$	133
4.11	Normalized vorticity $\Omega_{max}R/\mathbf{u}_{bT}$ for $Re = 17$ and $Re = 71$	134
4.12	Streamlines of the velocity magnitude : (a) $Re_b = 17$, (b) $Re_b = 71$	135
4.13	New configuration of the study : the initial domain has been doubled in the vertical direction.	136
4.14	Configuration for the wake comparison.	136
4.15	Profile of the rise velocity in the wake of the bubble, $X = 0$: (a) $Re = 17$, (b) $Re = 71$	137
4.16	Profile of the rise velocity in the wake of the bubble, $X = R$: (a) $Re = 17$, (b) $Re = 71$	137
4.17	Profile of the rise velocity in the wake of the bubble, $X = 2R/3$: (a) $Re = 17$, (b) $Re = 71$	138
5.1	Normalized PDFs of liquid (left) and bubble (right) velocity component fluctuations.	142
5.2	Computational domains used for the study of the containment effect (a) D_1 (b) D_2 , (c) D_3	144
5.3	Normalized PDFs of vertical and horizontal liquid (left) and bubble (right) velocity fluctuations.	145
5.4	Normalized PDFs of vertical and horizontal components of the liquid velocity for $\mu_p = 0.1, 1$ and 10	146
5.5	Normalized PDFs of vertical and horizontal components of the bubble velocity for $\mu_p = 0.1, 1$ and 10	147
5.6	Streamlines of the velocity field corresponding to the void fractions : from (a), (b), (c), (d), (e) to (f) : $\alpha = 2.5\%, 5\%, 7.5\%, 10\%, 12.5\%$ and 15%	149
5.7	Average bubble velocity u_{b_z} normalized by the velocity V_0 of a single rising bubble as a function of the gas volume fraction α . Legend : red squares, present work ; \bullet \blacktriangledown ∇ Riboux et al. (2010), \circ Zenit et al. (2001) ; Δ Garnier et al. (2002).	150
5.8	Variance v^2 of the bubble velocity against the void fraction α for the three bubble diameters ($d_b = 1.6mm, 2.1mm, 2.5mm$) given by the experiments and the present work ($d_b = 1mm$). Legend : red squares, present work ; \bullet \blacktriangledown ∇ Riboux et al. (2010).	151
5.9	Normalized PDFs of vertical (left) and horizontal (right) bubble velocity fluctuations.	152
5.10	Normalized centred PDFs of the horizontal bubble velocity fluctuations.	152
5.11	Normalized PDFs of vertical (left) and horizontal (right) liquid velocity fluctuations.	153
5.12	Streamlines of the velocity field corresponding to the void fractions : (a), (b), (c): $\alpha = 5\%, 10\%$ and 15%	155
5.13	Normalized PDFs of vertical and horizontal liquid (left) and bubble (right) velocity fluctuations.	156

5.14	Streamlines of the velocity field corresponding to the ratios : (a) $Ra = 1/3$, (b) $Ra = 1$, (c): $Ra = 3$, $\alpha = 2.5\%$; (d) $Ra = 1/3$, (e) $Ra = 1$, (f): $Ra = 3$, $\alpha = 5\%$; (g) $Ra = 1/3$, (h) $Ra = 1$, (i): $Ra = 3$, $\alpha = 10\%$	158
5.15	Normalized PDFs of horizontal (left) and vertical (right) bubble velocity fluctuations.	160
5.16	Normalized PDFs of horizontal (left) and vertical (right) fluid velocity fluctuations.	162
5.17	Normalized average rising velocity, (a) : small bubbles and (b) : large bubbles.	163
5.18	Variance of the rising velocity, (a) : small bubbles and (b) : large bubbles.	164

Liste des tableaux

1.9	Tableau comparatif des performances en précision et temps de calcul des deux méthodes VOF.	21
2.10	Paramètres numériques de simulation.	81
3.11	Paramètres numériques de simulation (écoulement en canal courbe).	95
3.12	Paramètres numériques de simulation (écoulement potentiel autour d'un cylindre).	99
3.13	Paramètres numériques de simulation (écoulement autour d'un cylindre pour $Re = 1$).	103
3.14	Paramètres numériques de simulation (écoulement en canal incliné).	109
3.15	Paramètres numériques de simulation (bulle en mouvement homogène à vitesse relative nulle avec le fluide).	114
3.16	Evolution de l'erreur L_2 sur la vitesse; maillage de 200^3 éléments.	116
4.17	Set of numerical parameters for the simulations.	124
4.18	Initial accelerations (ms^{-2}) of the bubbles. F_4, F_8, F_{16} refers to 4, 8 and 16 cells in the radius of the bubble. Values in bold corresponds to the closest acceleration to $2g$	127
4.19	Terminal velocities (cms^{-1}) of the bubbles. F_4, F_8, F_{16} refers to 4, 8 and 16 cells in the radius of the bubble. Values in bold corresponds to the closest velocities to the terminal velocity given by Mei correlation : $\mathbf{u}_{bT} = 8.90\text{cms}^{-1}$ for $Re = 17$, $\mathbf{u}_{bT} = 15.60\text{cms}^{-1}$ for $Re = 71$	127
5.20	Evolution of the final CPU time for $\mu_p = 0.1, 1$ and 10	147
5.21	Set of numerical parameters for the simulation.	148

Introduction

Les réacteurs à eau pressurisée ou REP (PWR pour *Pressurized Water Reactor* en anglais) équipent en 2017 une large majorité des réacteurs des centrales nucléaires dans le monde (deux tiers en terme de puissance de fonctionnement), en particulier en France où chacun des 58 réacteurs est équipé de cette technologie. Le cœur du réacteur, constitué d'environ une centaine d'assemblages de crayons de combustible composés de pastilles d'uranium enrichi, produit de la chaleur du fait de l'énergie libérée par la fission des atomes d'uranium. Un fluide caloporteur, liquide ou gazeux, transporte la chaleur hors du cœur du réacteur pour ensuite actionner une turbine (turboalternateur) permettant la production d'électricité. Un schéma de fonctionnement d'une centrale est proposé (Figure 1).

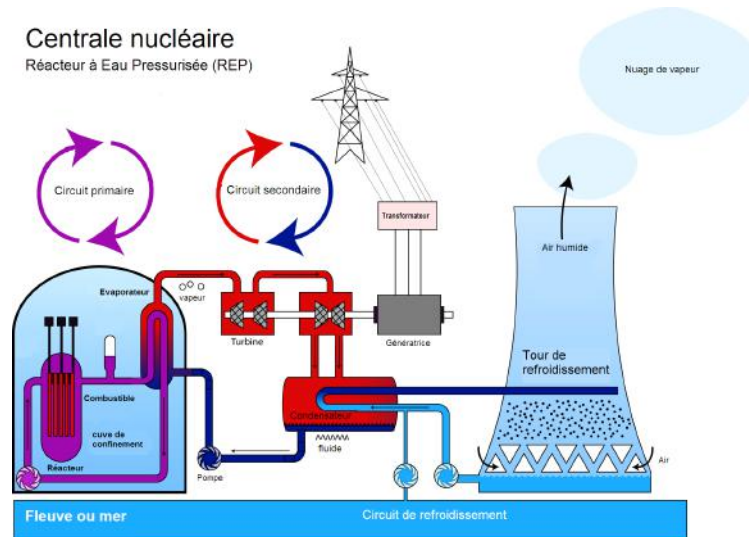


FIGURE 1: Schéma de fonctionnement d'une centrale de type REP (issu de Wikipedia).

Le cycle de transformation de l'énergie est structuré selon trois circuits étanches les uns par rapport aux autres :

1. *Le circuit primaire.* Une grande quantité de chaleur est produite par la fission des atomes d'uranium. La température du fluide caloporteur (quasi-exclusivement de l'eau) circulant dans le cœur du réacteur augmente à 320°C . Cette eau (qui réfrigère le cœur du réacteur) est maintenue sous haute pression (environ 150 bar) pour rester sous forme liquide et ainsi empêcher son ébullition. Ce circuit fermé est appelé circuit primaire.

2. *Le circuit secondaire.* Le circuit primaire communique avec un deuxième circuit fermé, appelé circuit secondaire. Le transfert d'énergie entre les deux circuits se fait par l'intermédiaire d'un générateur de vapeur. Dans les générateurs de

vapeur, l'eau chaude du circuit primaire chauffe l'eau du circuit secondaire qui se transforme en vapeur. La pression de cette vapeur fait tourner une turbine couplée à un alternateur. L'alternateur transforme l'énergie générée par la turbine en courant électrique alternatif. Un transformateur élève la tension du courant électrique produit par l'alternateur pour faciliter son transport vers les lignes de très haute tension.

3. Le circuit de refroidissement (circuit tertiaire). La vapeur du circuit secondaire en sortie de turbine est à nouveau transformée en eau grâce à un condenseur dans lequel circule de l'eau provenant d'une source froide (mer ou fleuve). L'eau de ce troisième circuit peut alors être refroidie au contact de l'air circulant dans de grandes tours (aéroréfrigérants).

Dans le cadre de l'exploitation de ces réacteurs, la thermohydraulique joue un rôle particulièrement important dans les études de conception et de sûreté relatives au fonctionnement des principaux composants des centrales, tant en régime nominal qu'en situations potentiellement dangereuses, telles que la crise d'ébullition (*Departure from Nucleate Boiling*, DNB), l'accident PTS (*Pressurized Thermal Shock*) ou encore la rupture des tubes des générateurs de vapeurs. Une description complète de ces situations accidentelles est fournie dans un rapport [IAEA (2003)] de l'IAEA (International Atomic Energy Agency). Un grand nombre des problématiques soulevées par ces études concerne des écoulements diphasiques de type eau-vapeur dans une large gamme de régimes : écoulements à bulles, à poches, annulaires (Figure 2).

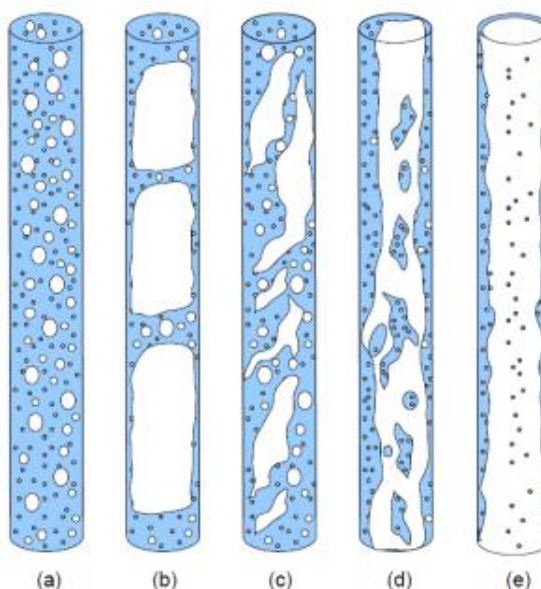


FIGURE 2: Configuration verticale d'écoulement : (a) écoulement à bulles, (b) écoulement à poches, (c) écoulement à poches fractionnées, (d) écoulement annulaire à poches liquides, (e) écoulement annulaire. Image issue du site doc.modelica.org.

A titre d'illustration, considérons la configuration DNB. Un des principaux mécanismes (décrits par [Hewitt (1978)]) à l'origine de ce phénomène est la formation d'un film continu de vapeur à la surface de la gaine du combustible. Le recouvrement de la paroi par des bulles puis par des poches de vapeur empêche le contact avec le liquide (Figure 3). S'ensuit une dégradation de l'échange de chaleur entre la paroi chauffante et le fluide caloporteur environnant entraînant une montée en température de la paroi pouvant potentiellement menacer son intégrité. Ce phénomène peut conduire à la rupture des gaines de crayon de combustible et de ce fait, de nombreuses études lui sont consacrées. Logiquement, la compréhension et la prédiction de ce phénomène requiert a priori une connaissance précise du comportement des bulles près la paroi.

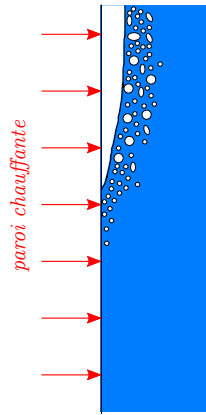


FIGURE 3: Recouvrement de la surface du combustible par un film de vapeur et de petites bulles.

Si les codes de calculs industriels sont aujourd'hui adaptés pour les échelles « système » (code CATHARE [Barre and Bernard (1990)]) et « composant » (codes THYC, FLICA, GENEPI [Aubry et al. (1989); Langlais (1999); Toumi et al. (2000)]), le développement et la validation d'outils CFD-3D à des échelles plus fines sont plus récents. Depuis 2001, dans le cadre du projet NEPTUNE [Guelfi et al. (2007)], EDF et CEA co-développent (avec le soutien de l'IRSN et d'AREVA-NP) la nouvelle génération d'outils de simulation en thermohydraulique nucléaire diphasique eau-vapeur. Le code NEPTUNE_CFD [Méchitoua et al. (2003)] permet aujourd'hui la simulation d'écoulements bouillants eau-vapeur, pour des phases continues ou dispersées. Cependant, la compréhension des écoulements à bulles est toujours à l'étude. Ces écoulements mettent en jeu une physique particulière qui n'est pas encore modélisée de manière satisfaisante. Les écoulements à bulles sont des écoulements poly-dispersés, sur une gamme continue de diamètre, ce qui pose l'importance de pouvoir traiter des « inclusions » ayant des caractéristiques très différentes. De plus, de par leur nature physique, les bulles peuvent se fragmenter et s'agglomérer [Kamp et al. (2001)] et également changer de diamètre par échange de masse et de chaleur avec la phase liquide ; elles peuvent également être créées

par nucléation (ou ébullition [Kurul and Podowski (1990)]). Il est donc important de mieux connaître les lois d'évolution pour une bulle donnée [Clift et al. (2005)], ainsi que de savoir ensuite exprimer de façon statistique des effets moyens, soit par des approches adaptées au traitement de ces termes (approches Lagrangiennes instantanées ou simulation directe diphasique) ou par des lois de fermeture dont les limites de validité doivent être bien cernées. Une autre caractéristique spécifique des écoulements à bulles, soit une difficulté supplémentaire, est que les bulles sont très sensibles et réactives à l'existence de zones à plus faible pression (par exemple des tourbillons instantanés [Climent (1996)]) dans l'écoulement de la phase porteuse continue, ce qui rend la modélisation du transport et de la convection des bulles par un écoulement turbulent beaucoup plus difficile que celui des particules solides. De nombreux travaux de modélisation et de simulations présentent des conclusions divergentes sur la structure même de la turbulence diphasique [Chahed and Masbernat (1998)].

La complexité de la physique des écoulements à bulles n'est pas suffisamment restituée dans les modèles Eulériens utilisés pour réaliser des simulations. En conséquence, la prédiction des écoulements à bulles par la simulation numérique demeure insatisfaisante. En particulier, la validité de certaines lois de fermeture sur le transfert de quantité de mouvement, l'interaction liquide-bulle et l'agitation induite sont l'objet de critiques. Les corrélations utilisées dans les modèles Eulériens sont établies à partir de mesures expérimentales réalisées loin des conditions de très haute pression et température des composants des centrales REP. Afin d'améliorer les modèles Eulériens utilisés pour réaliser ces simulations liquide-bulles, il paraît donc intéressant de se focaliser sur une description plus locale de l'écoulement, c'est-à-dire une configuration dans laquelle l'interface des bulles intervient explicitement dans la résolution du champ fluide ou du champ de la phase dispersée. Dans cette configuration locale, il s'agit alors d'extraire des informations significatives telles que des statistiques sur l'écoulement : vitesses moyennes de bulles, du fluide, fonctions de distributions, fonctions d'autocorrélations Lagrangiennes, spectre de turbulence... Ces mesures statistiques peuvent être alors utilisées pour améliorer les corrélations existantes, les critiquer, ou en établir de nouvelles. Ces mesures peuvent également simplement servir à améliorer la compréhension de certains phénomènes locaux. Cette volonté d'établir une correspondance entre des mesures locales sur l'écoulement et des grandeurs moyennées utilisées dans les modèles de NEPTUNE_CFD est l'idée directrice de cette thèse. Cette idée est illustrée sur la Figure 4. Les travaux récents de [Roghair et al. (2011)] illustrent ce principe de remontée d'échelle (UPSCALING). Ces travaux établissent par la simulation numérique une nouvelle corrélation de la force de traînée dans des configurations de nuages de bulles, pour des nombres de Reynolds élevés.

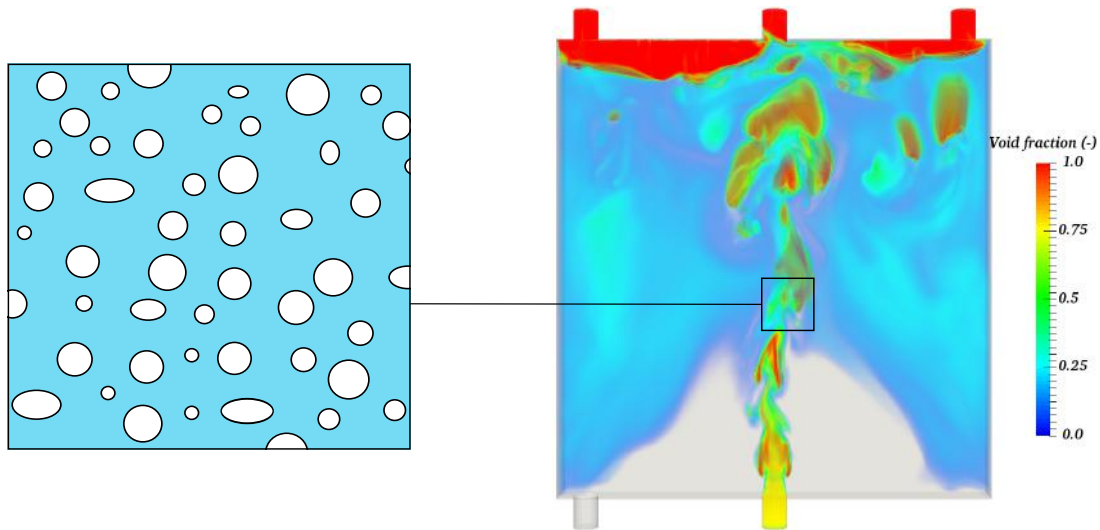


FIGURE 4: Correspondance entre configuration locale réelle et simulation par modèle moyenné eulérien. À droite, simulation avec NEPTUNE_CFD d'un panache de bulles d'air dans un domaine initialement rempli d'eau.

Plusieurs méthodes numériques pour la simulation d'écoulement à bulles ont été développées ces dernières années. L'approche body-fitted de McLaughlin [McLaughlin (1996)] permet une imposition très simple de la condition limite à la surface de la bulle. Cette approche fournit une description locale de l'écoulement autour de la bulle très précise, pour des Reynolds élevés, mais elle est très difficilement extensible à des simulations multi-bulles. Les approches DNS (Direct Numerical Simulation) pour la simulation des écoulements à bulles apparaissent comme un outil efficace. La méthode Front-Tracking [Tryggvason et al. (2001); Unverdi and Tryggvason (1992)] fait office de référence parmi les approches de simulations. Elle se base sur l'utilisation d'une grille Eulérienne : des marqueurs Lagrangiens distribués à la surface des bulles permettent le suivi de l'interface des bulles. Cette approche se base sur un formalisme à un fluide avec condition de saut. Les approches VOF (Volume Of Fluid, [Hirt and Nichols (1981)]) reposent également sur l'utilisation d'un fluide pour décrire les deux phases. Les approches Level-Set [Sussman et al. (1994)] sont rapidement devenues populaires du fait de leur simplicité d'implémentation. Une revue complète de l'ensemble de ces méthodes est fournie par [Tryggvason et al. (2011)]. La variation notable entre toutes les approches DNS concerne la représentation et le traitement numérique de l'interface des bulles. Deux inconvénients majeurs découlent de ce type d'approche. Une première contrainte concerne la limitation sur le nombre de Reynolds. Les DNS d'écoulements à bulles sont souvent limitées à des nombre de Reynolds modérés ($Re = O(10-100)$) pour des bulles sphériques [Tryggvason et al. (2001); Yin and Koch (2008)] du fait du développement de la couche limite qui décroît selon $Re^{-1/2}$. Un deuxième inconvénient bien connu concerne le coût en ressources des approches DNS.

Des approches alternatives ont été explorées pour simplifier les développements numériques. Les nouvelles voies d'investigation concernent la représentation des bulles et de leur interface dans l'écoulement, ainsi que la méthode numérique employée pour la résolution du fluide au voisinage des interfaces, ces deux éléments étant fortement liés. Initialement proposée par [Peskin (1972, 1977)] pour la simulation d'écoulements sanguins dans un coeur en pulsation, les méthodes IBM (*Immersed Boundary Methods*) connaissent un intérêt croissant du fait de la facilité de leur implémentation basée sur l'utilisation de grilles cartésiennes. Ces méthodes ont été rapidement étendues à la simulation d'écoulements particuliers. En particulier, [Uhlmann (2005)] présente une variété de simulations avec l'approche IBM, parmi la sédimentation de 1000 particules sphériques. Les approches IBM se distinguent en deux catégories : l'approche discrète et l'approche continue. L'approche discrète consiste à utiliser les cellules contenant l'interface entre deux milieux afin d'imposer la condition limite voulue. Dans les cellules traversées par l'interface les opérateurs différentiels des équations de Navier-Stokes (par exemple) sont localement modifiées afin de préserver les lois de conservation au voisinage de l'interface. [Kim and Choi (2006)] propose une approche de type IBM discrète pour la simulation d'écoulements autour d'objets mobiles. Dans l'approche continue [Peskin (1972, 1977); Uhlmann (2005)], des distributions de Dirac régularisées sont utilisées pour la réalisation du transfert des quantités entre le fluide et des marqueurs distribués à la surface de l'interface. Cette approche plus souple que l'approche discrète ne requiert pas le repérage systématique des caractéristiques géométriques d'une cellule (face, sommet, centre).

Dans cette famille de méthode numérique, nous portons un intérêt particulier aux méthodes de pénalisation. Initialement introduites par [Caltagirone and Arquis (1984, 1986)], leurs premières applications ont été dédiées à l'étude d'écoulements en milieu poreux. Un terme dit de pénalisation est ajouté aux équations initiales pour imposer une contrainte sur une des grandeurs physiques à l'étude (vitesse, vorticité, température) dans un sous-domaine du domaine de calcul. Un formalisme diphasique peut ainsi se réduire à un formalisme monophasique. Une étude détaillée de la convergence de cette méthode est établie par [Angot et al. (1999)]. Une extension récente de ces méthodes habituellement utilisées pour des simulations d'écoulements autour d'objets fixes concerne désormais les écoulements à inclusions mobiles et offre de très bons résultats [Sarhou et al. (2008); Vincent et al. (2014)].

Objectifs et stratégie de développement de la méthode numérique

Nous souhaitons donc développer une approche intermédiaire entre les simulations diphasiques de type DNS avec suivi d'interface, trop coûteuses et non représentatives (nombre de Reynolds trop faible), et les simulations Lagrangiennes classiques qui nécessitent a minima la connaissance des forces instantanées locales appliquées aux bulles, ce que nous ne maîtrisons que dans des cas idéaux. Nous

Introduction

réalisons les hypothèses de simplifications suivantes :

- sphéricité des bulles ;
- indéformabilité des bulles ;
- proscription des effets de transfert de masse ;
- proscription des effets de coalescence (les interactions sont régies par un modèle de collisions interparticulaire élastique) et de fragmentation.

Ce choix de cadre d'étude se justifie par le fait que dans certaines configurations industrielles à hautes pression et température, la taille des bulles est très petite, de l'ordre du millimètre : les effets de tension de surface sont dominants réduisant ainsi la déformabilité des bulles. Nous développons dans cette thèse une approche numérique basée sur l'utilisation d'une méthode de pénalisation pour le suivi des bulles dans l'écoulement. La représentation de l'interface est réalisée via l'utilisation d'une méthode VOF [Bnà et al. (2015)]. Une adaptation de la discrétisation des équations de Navier-Stokes est proposée en vue d'imposer une condition de glissement à l'interface. L'outil numérique ainsi construit devra à terme être capable de nous fournir l'ensemble des caractéristiques locales de l'écoulement : forces exercées, vitesses fluide et particules, taux de collisions, fonctions de distributions...

Organisation du mémoire

Ce travail de thèse est dédié la construction dans un formalisme Euler-Lagrange d'une nouvelle méthode numérique permettant des simulations de nuages de bulles dans une représentation locale de l'écoulement. Le manuscrit s'organise en 5 chapitres :

- Le Chapitre 1 s'articule en deux parties. La première partie est dédiée à la description du calcul des éléments géométriques permettant une caractérisation locale de l'interface liquide-bulle sur la grille eulérienne. La deuxième partie est dédiée à la réalisation du suivi Lagrangien des bulles en mouvement dans le domaine de calcul. Les modalités de déplacement des bulles y sont présentées, à savoir la relation régissant leur avancée en temps, leurs interactions avec les conditions aux limites du domaine et le traitement des collisions. L'algorithme régissant dynamiquement la succession de tous ces événements au cours de la simulation est également présenté.

- Le Chapitre 2 décrit le formalisme modifié des équations de Navier-Stokes selon l'approche de pénalisation. La discrétisation initiale des opérateurs différentiels des équations de Navier-Stokes n'assure pas une condition de glissement à l'interface liquide-bulle. Les modifications apportées à l'algorithme général de résolution en vue d'imposer cette condition sont détaillées. Nous présentons une méthode de couplage régissant le mouvement des bulles dans l'écoulement du fait de l'action des forces hydrodynamiques agissant sur celles-ci.

- Nous initions dans le Chapitre 3 la validation de la méthode numérique. Ce premier volet est dédié à l'examen des contributions des modifications (détaillées dans le chapitre précédent) à l'imposition de la condition de glissement à l'interface. Les objets pénalisés considérés ne sont pas couplés à l'action du fluide. Plusieurs cas-tests sont présentés, établissant l'ordre de convergence et la précision de la méthode numérique.

- Le Chapitre 4 poursuit la validation de la méthode. La validité du couplage liquide-bulles est étudiée pour une configuration de bulle sphérique isolée dans un liquide au repos.

- Le Chapitre 5 s'articule en deux parties. La première partie est dédiée à la validation de la méthode numérique dans une configuration de type nuage de bulles. Nous nous intéressons en particulier à l'agitation induite par les bulles. Les résultats fournis par les simulations sont comparés aux résultats d'une étude expérimentale. La deuxième partie est dédiée à la présentation des résultats fournis par simulations bidisperses.

Remarque : les Chapitres 1 , 2 et 3 sont rédigés en français, les deux derniers Chapitres 4 et 5 sont rédigés en anglais.

Chapitre 1

Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles

Contents

1.1	Calcul de la fonction VOF	11
1.1.1	Méthode 1 : méthode Mass Conserving Level-Set (MCLS)	12
1.1.2	Méthode 2 : calcul de la fonction VOF par une méthode d'intégration	15
1.1.3	Comparaison des performances des deux méthodes	20
1.1.4	Critère de conservativité : correction des fractions volumiques	22
1.2	Caractérisation de l'interface : calcul des fractions surfaciques et des normales à l'interface	24
1.2.1	Calcul bidimensionnel des fractions surfaciques	28
1.2.2	Calcul tridimensionnel des fractions surfaciques	33
1.2.3	Calcul des normales à l'interface liquide-bulle	38
1.3	Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement	38
1.3.1	Avancée en temps des bulles	39
1.3.2	Traitement de la périodicité pour le suivi des bulles	39
1.3.3	Interaction bulle-bulle et bulle-paroi	42
1.3.4	Algorithme collisionnel général	49
1.4	Conclusions	65

Ce chapitre est dédié à la description de la caractérisation de l'interface et du suivi des bulles dans le domaine de calcul. Nous y établissons les pré-requis nécessaires à la construction de la méthode numérique générale. Nous présentons en premier lieu l'approche VOF retenue pour réaliser le suivi de l'interface, choix faisant suite à une comparaison des performances de deux méthodes issues de la littérature. Afin de caractériser rigoureusement l'interface dans chaque cellule du domaine de calcul, nous introduisons et présentons des grandeurs géométriques supplémentaires : les fractions surfaciques. Leur calcul en représentation bi- et tri-dimensionnelle est présenté. La deuxième partie du chapitre décrit les aspects Lagrangiens de la méthode régissant le suivi des bulles dans le domaine de calcul. Nous présentons la relation déterminant leur avancée en temps, et nous précisons leurs interactions éventuelles avec les conditions limites du domaine de calcul (paroi, périodicité), ainsi que leurs interactions entre elles correspondant à des collisions. Enfin, nous détaillons l'algorithme général de suivi des bulles, traitant

Chapitre 1. Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles

rigoureusement l'ensemble des collisions intervenant lors de la simulation.

Nous rappelons le formalisme Euler-Lagrange adopté. Le domaine fluide est noté Ω_f , le domaine occupé par les bulles Ω_b et l'interface liquide-bulles est notée Σ . Pour un domaine $\Omega = \Omega_f \cup \Omega_p \cup \Sigma$ constitué de fluide en mouvement et de N_b bulles, on note :

- $\{\mathbf{x}_{b_1}, \mathbf{x}_{b_2}, \dots, \mathbf{x}_{b_{N_b}}\}$ l'ensemble des vecteurs positions des bulles dans le domaine ;
- $\{\mathbf{u}_{b_1}, \mathbf{u}_{b_2}, \dots, \mathbf{u}_{b_{N_b}}\}$ l'ensemble des vecteurs vitesses des bulles associé.

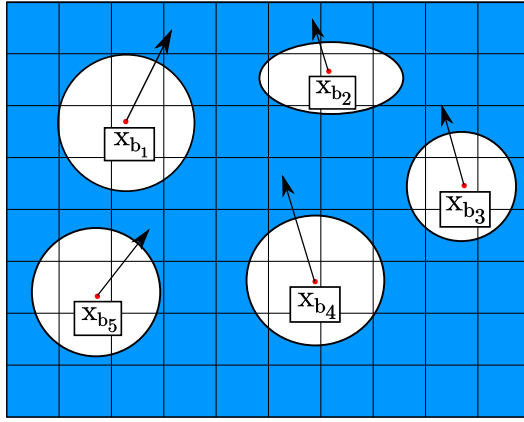


FIGURE 1.1: Représentation de $N_b = 5$ bulles suivies dans l'écoulement par leurs positions (marqueurs rouges) sur une grille eulérienne.

Les bulles sont supposées de forme contrôlée et indéformables ; connaissant la position de leur centre (x_0, y_0, z_0) dans le domaine de calcul, leur interface est déterminée par une equation implicite $F(x, y, z) = 0$, pour une sphère de rayon r_0 ou une ellipsoïde de demi-axes de longueur a, b et c :

$$F(x, y, z) = \begin{cases} (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 - r_0^2 = 0 & \text{pour une sphère} \\ \frac{(x - x_0)^2}{a} + \frac{(y - y_0)^2}{b} + \frac{(z - z_0)^2}{c} - 1 = 0 & \text{pour une ellipsoïde} \end{cases}$$

Les inclusions étant mobiles dans l'écoulement, cette représentation de l'interface doit a priori intégrer la variable en temps t , la formulation établie ci-dessus n'étant valable qu'à un pas de temps donné de simulation. Cette dépendance au temps est établie à travers les positions des centres de masse des bulles $(x_0(t), y_0(t), z_0(t))$, grandeurs dont nous disposons à chaque itération en temps. Plus généralement la fonction implicite $F(x, y, z)$ peut s'écrire :

1.1. Calcul de la fonction VOF

$$F(x, y, z, t) = \begin{cases} (x - x_0(t))^2 + (y - y_0(t))^2 + (z - z_0(t))^2 - r_0^2 = 0 & \text{pour une sphère} \\ \frac{(x - x_0(t))^2}{a} + \frac{(y - y_0(t))^2}{b} + \frac{(z - z_0(t))^2}{c} - 1 = 0 & \text{pour une ellipsoïde} \end{cases}$$

Plusieurs choix de méthodes numériques s'offrent alors pour traiter la présence d'interfaces dans l'écoulement. Les simulations visées mettent en scène de nombreuses bulles dans le domaine de calcul, nous souhaitons donc privilégier une approche peu coûteuse. Les classes de méthodes basées sur l'utilisation de marqueurs Lagrangiens (Front-Tracking) ou de maillages adaptatifs, malgré leur précision, sont trop coûteuses en ressources de calcul et n'apparaissent donc pas comme des candidates naturelles. Le choix s'est porté sur une méthode VOF [Hirt and Nichols (1981)]. Deux méthodes ont été implémentées et testées dans NEPTUNE-CFD : [van der Pijl et al. (2005) et Bnà et al. (2015)]. Notre choix s'est porté sur ces méthodes car leur développement intègre une représentation analytique d'interface par une fonction implicite, ce qui nous permet d'exploiter au mieux l'hypothèse sur les formes des bulles (sphériques ou ellipsoïdales) et leur indéformabilité : les bulles sont et demeurent sphériques ou ellipsoïdales dans l'écoulement.

1.1 Calcul de la fonction VOF

Le choix de la méthode numérique de suivi d'interface conditionne les choix de discrétisation des équations de Navier-Stokes réalisés en vue d'imposer la condition de glissement à l'interface. La réalisation de cette discrétisation est basée sur l'utilisation de grandeurs locales caractérisant l'interface ; la méthode VOF fournit comme grandeur d'intérêt la fraction volumique fluide C (ou taux de présence) définie sur chaque volume de contrôle comme le ratio de volume fluide sur le volume de la cellule. Pour une cellule intégralement contenue dans la bulle, $C = 1$; pour une cellule intégralement contenue dans le domaine liquide, $C = 0$, pour une cellule contenant l'interface $0 < C < 1$.

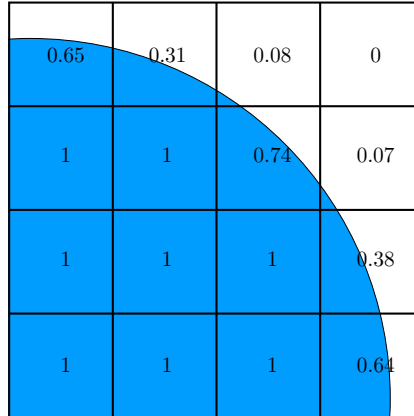


FIGURE 1.2: Fractions volumiques pour un quart de bulle sphérique sur une grille 4x4.

Malgré l'utilisation de maillages cartésiens, simplifiant le développement de la méthode numérique, et la forme contrôlée des bulles (sphères ou ellipsoïdes), la fonction C ne peut être déterminée sur le domaine de calcul explicitement et de manière exacte pour des maillages tridimensionnels. Nous cherchons donc à obtenir la meilleure approximation possible de la fonction couleur C . Nous présentons dans les sous-sections suivantes les deux méthodes numériques employées au cours de cette thèse pour calculer la fonction couleur, ces méthodes ont été intégrées dans le code NEPTUNE_CFD.

1.1.1 Méthode 1 : méthode Mass Conserving Level-Set (MCLS)

[van der Pijl et al. (2005)] propose une méthode Level-Set conservative pour la simulation d'écoulements à bulles. Les méthodes Level-Set ne garantissent pas naturellement la conservativité en masse. Cette propriété de conservativité est obtenue par utilisation d'une méthode VOF pour le traitement de l'advection de l'interface. Cette méthode nommée MCLS (Mass Conserving Level-Set Method) est similaire aux approches CLSVOF (Coupled Level-Set Volume of Fluid).

Dans cette section, nous optons pour les mêmes notations que celles employées par l'auteur, la fonction VOF C est notée Ψ ou f , la fonction Level-Set est notée Φ .

La méthode est basée sur une relation explicite entre la fonction VOF Ψ et la fonction Level-Set Φ obtenue en supposant l'interface linéaire par morceaux sur chaque cellule. Elle s'écrit :

$$\Psi = f(\Phi, \nabla\Phi)$$

1.1. Calcul de la fonction VOF

La mise en œuvre numérique de la méthode peut se résumer en trois étapes :

1. le volume relatif de fluide dans chaque cellule (fonction VOF) est calculé à partir de la fonction Level-Set $\Phi : \Psi^n = f(\Phi, \nabla\Phi)$;
2. la fonction VOF est advectée en assurant le critère de conservativité d'un pas de temps n à $n + 1$;
3. à partir de la fonction VOF Ψ^{n+1} établie à $n + 1$, des corrections sont apportées à Φ^{n+1} afin d'assurer $f(\Phi^{n+1}, \nabla\Phi^{n+1}) = \Psi^{n+1}$.

L'étape 2 correspond à la résolution d'une équation de transport de type :

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\Psi = 0 \quad (1.1)$$

Cette résolution suppose un coût supplémentaire en ressources de calcul. Pour contourner cet inconvénient, nous optons pour une méthode d'advection d'interface simplifiée. Au lieu de calculer la fonction VOF Φ^{n+1} à l'itération $n + 1$ en résolvant l'équation d'advection 1.1, les centres de bulle (x_0, y_0, z_0) sont déplacés d'une itération n à $n + 1$ d'après la relation décrite en 1.3.1. La fonction VOF Φ^{n+1} est alors calculée à chaque itération à partir de la position du centre de masse de la bulle. Les étapes 2. et 3. décrites précédemment sont donc obsolètes au regard de ce choix numérique ; seul le calcul de la fonction VOF est d'intérêt pour la construction de la méthode (étape 1.).

Nous présentons brièvement la méthode détaillée dans [van der Pijl et al. (2005)]. Les fonctions Level-Set et VOF sont respectivement notées $\Phi(\mathbf{x})$ et $\Psi(\mathbf{x}_k)$, avec $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^3$ et k l'indice de la cellule. La fonction VOF dans une cellule Ω_k est définie selon la méthodologie Level-Set par :

$$\Psi(\mathbf{x}_k) = \frac{1}{\text{vol}(\Omega_k)} \int_{\Omega_k} H(\Phi) \, d\Omega$$

où H est la fonction d'Heaviside et Ω_k une maille cubique de dimensions Δx , Δy et Δz . En supposant que \mathbf{x}_k corresponde au centre de la cellule k , la linéarisation de Φ autour de \mathbf{x}_k s'écrit φ :

$$\varphi(\mathbf{y}; \Phi, \nabla\Phi, \mathbf{x}_k) = \Phi_k + \left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}, \frac{\partial\Phi}{\partial y}, \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right)_k^t \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{x}_k)$$

Cette linéarisation de Φ_k est utilisée pour déterminer une approximation de Ψ :

$$\Psi(\mathbf{x}_k) \approx f(\Phi_k, \nabla\Phi_k)$$

L'objectif est de déterminer f . Pour simplifier l'analyse du problème, on considère un cube unitaire obtenu par transformation du volume Ω_k ; ses coordonnées selon cette transformation sont $(\zeta, \nu, \eta) \in (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})^3$. La linéarisation s'écrit :

Chapitre 1. Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles

$$\varphi(\mathbf{y}; \Phi, \nabla\Phi, \mathbf{x}_k) = \Phi_k + D_\xi\xi + D_\eta\eta + D_\zeta\zeta$$

Les axes sont choisis tels que :

$$D_\xi \geq D_\eta \geq D_\zeta \geq 0$$

Ce choix limite le nombre de topologies possibles de l'interface dans le cube. On peut ainsi écrire :

$$\begin{aligned} D_\xi &= \max\left(|\Delta x \left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_k|, |\Delta y \left(\frac{\partial\Phi}{\partial y}\right)_k|, |\Delta z \left(\frac{\partial\Phi}{\partial z}\right)_k|\right), \\ D_\zeta &= \min\left(|\Delta x \left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_k|, |\Delta y \left(\frac{\partial\Phi}{\partial y}\right)_k|, |\Delta z \left(\frac{\partial\Phi}{\partial z}\right)_k|\right), \\ D_\eta &= |\Delta x \left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_k| + |\Delta y \left(\frac{\partial\Phi}{\partial y}\right)_k| + |\Delta z \left(\frac{\partial\Phi}{\partial z}\right)_k| - D_\xi - D_\zeta \end{aligned} \quad (1.2)$$

L'approximation de f fait intervenir l'évaluation de la fonction Level-Set aux points A, B, C, D et E :

$$\begin{aligned} \Phi_A &= \Phi_k + \frac{1}{2}D_\xi + \frac{1}{2}D_\eta + \frac{1}{2}D_\zeta \\ \Phi_B &= \Phi_k + \frac{1}{2}D_\xi + \frac{1}{2}D_\eta - \frac{1}{2}D_\zeta \\ \Phi_C &= \Phi_k + \frac{1}{2}D_\xi - \frac{1}{2}D_\eta + \frac{1}{2}D_\zeta \\ \Phi_D &= \Phi_k - \frac{1}{2}D_\xi + \frac{1}{2}D_\eta + \frac{1}{2}D_\zeta \\ \Phi_E &= \Phi_k + \frac{1}{2}D_\xi - \frac{1}{2}D_\eta - \frac{1}{2}D_\zeta \end{aligned} \quad (1.3)$$

Finalement, la fonction f s'écrit :

$$f = \frac{A}{6D_\xi D_\eta D_\zeta} \quad \Phi \leq 0 \quad (1.4)$$

et

$$f = 1 - f(-\Phi, \nabla\Phi) \quad \Phi > 0 \quad (1.5)$$

où

$$\begin{aligned} A &= \max(\Phi_A, 0)^3 - \max(\Phi_B, 0)^3 - \\ &\quad \max(\Phi_C, 0)^3 - \max(\Phi_D, 0)^3 + \\ &\quad \max(\Phi_E, 0)^3 \end{aligned} \quad (1.6)$$

Des problèmes numériques surviennent lorsque le dénominateur de l'équation 1.4 tend vers 0. Ceci intervient lorsque un des critères suivants est vérifié :

1.1. Calcul de la fonction VOF

$$\begin{cases} D_\zeta = 0 \text{ ou} \\ D_\zeta = 0 \wedge D_\eta = 0 \text{ ou} \\ D_\zeta = 0 \wedge D_\eta = 0 \wedge D_\xi = 0 \end{cases}$$

Ces configurations limites sont traitées spécifiquement :

$$\begin{aligned} \lim_{D_\zeta \rightarrow 0} f &= \frac{\max(\Phi_A|_{D_\zeta=0}, 0)^2 - \max(\Phi_C|_{D_\zeta=0}, 0)^2}{2D_\xi D_\eta} \quad \Phi \leq 0 \\ \lim_{D_\eta \rightarrow 0} \lim_{D_\zeta \rightarrow 0} f &= \frac{\max(\Phi_A|_{D_\eta=0, D_\zeta=0}, 0)^2}{D_\xi} \quad \Phi \leq 0 \\ \lim_{D_\xi \rightarrow 0} \lim_{D_\eta \rightarrow 0} \lim_{D_\zeta \rightarrow 0} f &= \begin{cases} 0 & \Phi < 0 \\ \frac{1}{2} & \Phi = 0 \\ 1 & \Phi > 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Remarque. Le calcul des fractions volumiques sur chaque cellule du domaine de calcul est effectué à partir des grandeurs D_ξ , D_ζ et D_η définies en 1.2. Ces grandeurs sont déterminées d'après le gradient de la fonction Level-Set, qui s'obtient de manière exacte pour une sphère :

$$\begin{aligned} \Phi(x, y, z) &= (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 - r_0^2 \\ \nabla \Phi &= \begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \Phi}{\partial y} \\ \frac{\partial \Phi}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2(x - x_0) \\ 2(y - y_0) \\ 2(z - z_0) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

La fonction Level-Set est alors évaluée en chaque cellule à partir des centres des cellules $\mathbf{x}_k = (x_k, y_k, z_k)$. Les valeurs $\Phi_A, \Phi_B, \Phi_C, \Phi_D, \Phi_E$ sont ensuite obtenues en 1.3 à partir des composantes du gradient. La méthode fournit donc de manière directe et explicite une approximation de la fonction couleur Ψ , c'est-à-dire sans processus itératif ou récursif pouvant engendrer des coûts conséquents en ressources de calcul.

1.1.2 Méthode 2 : calcul de la fonction VOF par une méthode d'intégration

Nous présentons dans cette section une méthode VOF basée sur l'intégration d'une fonction implicite représentant l'interface [Bnà et al. (2015)].

Afin de valider efficacement des résultats obtenus par simulation en les confrontant à des prédictions théoriques, il est essentiel d'initialiser avec grande précision les grandeurs d'intérêt de l'étude, comme par exemple le champ de vitesse, la position de l'interface ou les fractions volumiques. Une imprécision relative dans leur

Chapitre 1. Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles

évaluation initiale peut introduire un biais dans l'étude. Une méthode VOF d'initialisation des fractions volumiques pour des interfaces définies par des fonctions implicites est proposée par [Bnà et al. (2015)]. Les tests présentés attestent de la très haute précision de la méthode, dans des configurations bi- et tridimensionnelles.

Nous proposons dans cette thèse une extension du cadre d'utilisation « classique » de cette méthode VOF, c'est-à-dire au delà de l'étape initialisation de la fonction couleur. La méthode est utilisée à chaque itération en temps pour calculer la fonction VOF, pour chaque bulle (donnée d'une position et d'un rayon) dans le domaine de calcul. L'approche développée se base sur une représentation analytique de l'interface, i.e. la position de l'interface est définie par une fonction implicite. Cette fonction peut représenter de nombreuses configurations d'interfaces (Figure 1.3) :

- interface entre une inclusion et le fluide : bulle représentée par une sphère ou une ellipsoïde
- interface entre deux fluides : perturbation à la surface approchée par une vague sinusoidale d'équation $G(x, y) = H \sin(2\pi x/\lambda) - y = 0$, où H désigne l'amplitude et λ la longueur d'onde.

$G(x, y) = H \sin(2\pi x/\lambda) - y = 0$, où H désigne l'amplitude et λ la longueur d'onde.

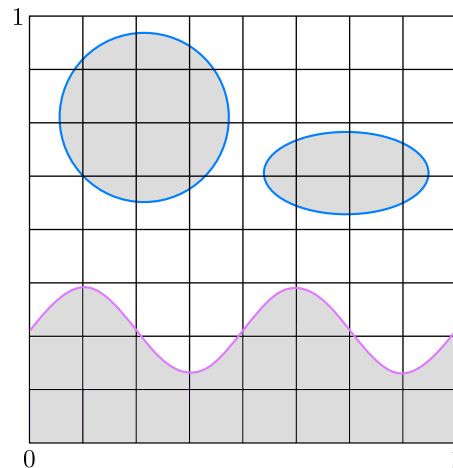


FIGURE 1.3: Représentation d'interfaces à partir de fonctions implicites, bleu : cercle/ellipse, magenta : vague.

L'intégration d'une équation décrivant l'interface sur une cellule donnée est réalisée à partir d'une formulation explicite de l'équation. Cette formulation diffère selon la forme de l'interface considérée. Dans le cadre du développement de notre méthode, les inclusions d'intérêt sont les cercles (ou sphères en 3D). Une subdi-

1.1. Calcul de la fonction VOF

vision du cercle en plusieurs arcs, chacun doté de leur propre équation explicite (Figure 1.4), est alors requise afin de procéder à l'intégration.

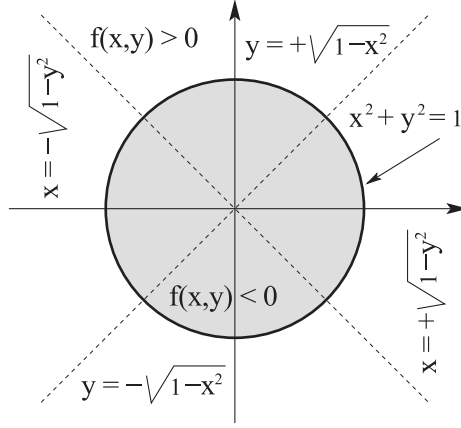


FIGURE 1.4: Subdivision d'un cercle en arcs de cercle, chacun d'entre eux étant définis par une équation [Bnà et al. (2015)].

En considérant un maillage cartésien, pour une maille carrée de dimension h_0 , l'algorithme (version 2D) de calcul des fractions volumiques par intégration se compose des étapes suivantes :

- o **Détection de l'interface dans la cellule.** En premier lieu, on cherche à calculer une grandeur caractéristique f_h de la fonction implicite. L'intersection avec l'interface \mathbf{x}_l est déterminée par un algorithme de recherche d'un zéro d'une fonction. La fonction implicite est ensuite évaluée dans une sous-grille 3x3 de la cellule (Figure 1.5) ; le point sur les bords de la cellule le plus distant des points de la sous-grille est à une distance $h_b = h_0/4$, la grandeur caractéristique f_h est donc définie comme :

$$f_h = \max (|f(\mathbf{x}_l + h_b \mathbf{n})|, |f(\mathbf{x}_l - h_b \mathbf{n})|)$$

Si les 9 valeurs f_j sont de même signe et vérifient $|f_j| > f_h$:

- si $f_j > 0$ la cellule est vide et $C = 0$
- si $f_j < 0$ la cellule est pleine et $C = 1$

Sinon la cellule est analysée.

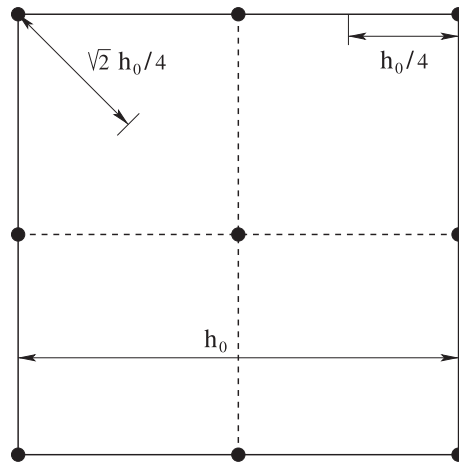


FIGURE 1.5: Sous-grille de 3x3 points d'une maille carrée de dimension h_0 . [Bnà et al. (2015)].

- o **Calcul des pré-requis à l'intégration.** Dans le troisième cas mentionné ci-dessus, i.e. $0 < C < 1$, il est nécessaire de déterminer les limites d'intégration pour le calcul des fractions volumiques.
 1. Une direction privilégiée est déterminée en fonction des composantes du gradient de la fonction implicite évaluée dans la cellule. Une coordonnée primaire associée à cette direction et une variable dépendante sont ainsi établies et on a alors la relation $y = y(x)$ ou $x = x(y)$.
 2. À partir de cette relation explicite, des algorithmes de recherche du zéro d'une fonction et des algorithmes de recherche de minimum sont utilisés pour déterminer les intersections de l'interface et des bords de la cellule. La cellule est alors divisée en rectangles contenant ou non l'interface (un rectangle contenant l'interface dans la Figure 1.6).

1.1. Calcul de la fonction VOF

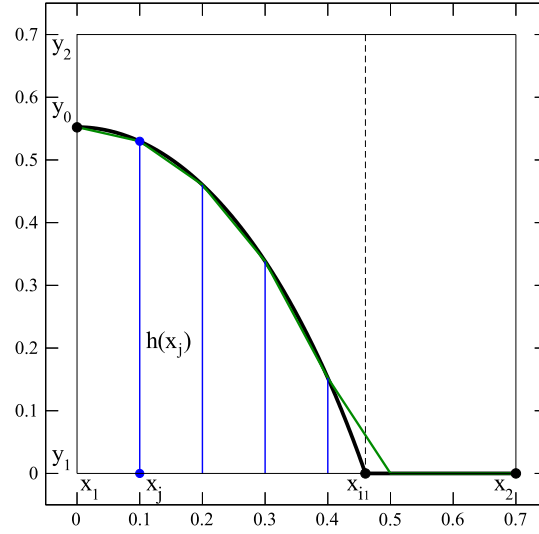


FIGURE 1.6: En considérant une formulation explicite $y = g(x)$, l'intégrande est la ligne joignant les points intersections (x_1, y_0) et (x_{i1}, y_1) et le sommet (x_2, y_1) [Bnà et al. (2015)].

- o **Intégration numérique.** L'intégration numérique est réalisée dans chaque rectangle de manière indépendante par une méthode de Gauss-Legendre. Sur la Figure 1.6, pour une cellule carrée de dimension h_0 , avec $y = g(x)$ et $h(x) = \min(h_0, \max(g(x) - y_1, 0))$

$$C = \frac{1}{h_0} \int_{x_1}^{x_2} h(x) dx = \frac{1}{h_0} \int_{x_1}^{x_{i1}} h(x) dx \simeq \frac{x_{i1} - x_1}{2h_0^2} \sum_{j=1}^{n_i} \omega_j h(x_j)$$

où les nœuds x_j vérifient $x_j = ((x_{i1} + x_1) + (x_{i1} - x_1)\xi_j)/2$, ω_j et ξ_j sont les coefficients et les nœuds pour une intégration par méthode de Gauss-Legendre avec n_i points. Les hauteurs $h(x_j)$ sont calculées par une méthode de recherche de zéro d'une fonction.

Conclusion. A partir de la position d'une inclusion et de ses dimensions caractéristiques (rayon(s), ...), la fonction VOF associée à cette inclusion est calculée sur le domaine selon une des deux méthodes présentées (Figure 1.7 et 1.8).

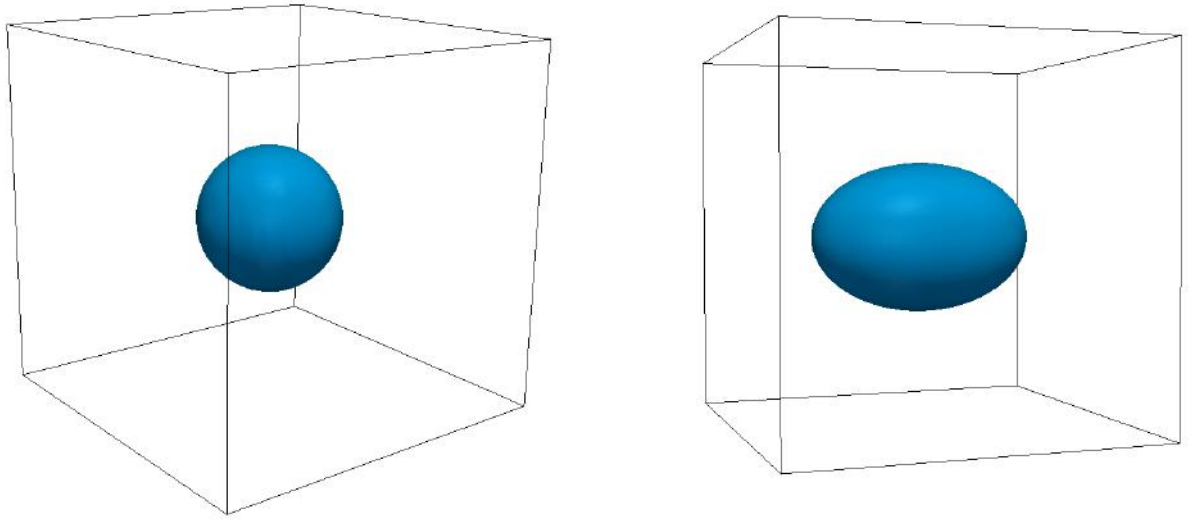


FIGURE 1.7: Contours de la fonction couleur pour une sphère (gauche) et une ellipsoïde (droite) par la Méthode 2, grille 80^3 .

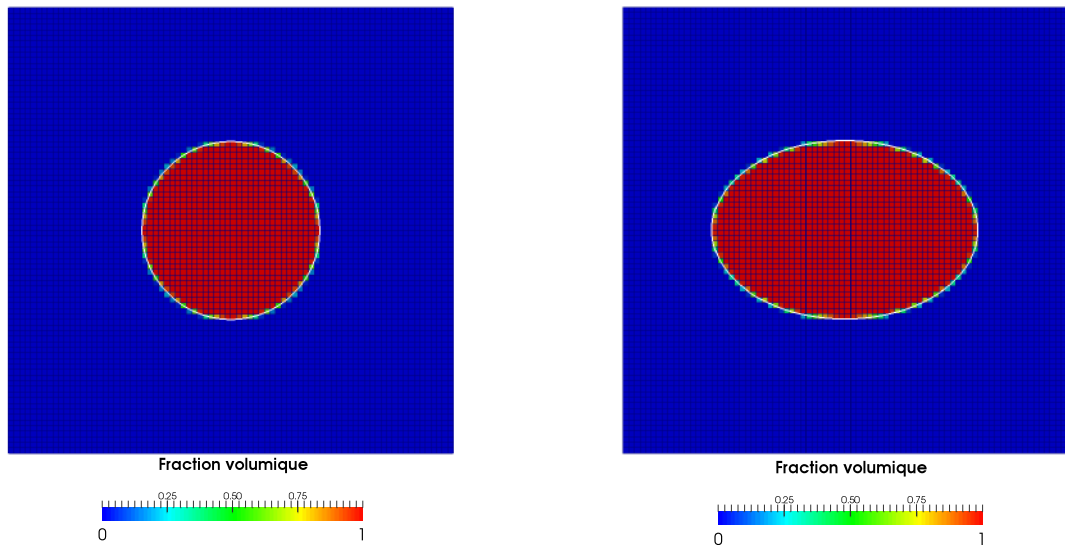


FIGURE 1.8: Fonction couleur calculée par la Méthode 2 pour des inclusions 2D : cercle (gauche) et ellipse (droite). Le contour de la fonction couleur est représenté par une courbe blanche, grille 80^2 .

1.1.3 Comparaison des performances des deux méthodes

Dans cette section nous justifions le choix la méthode VOF sélectionnée pour la réalisation des simulations. Les deux méthodes présentés précédemment (Méthode 1 et Méthode 2) ont été choisies car exploitant au mieux l'hypothèse sur la forme

1.1. Calcul de la fonction VOF

(sphérique ou ellipsoïdale) des bulles, les deux approches se basant sur une représentation analytique de l'interface décrite par une fonction implicite. Les méthodes ont été intégrées dans le code NEPTUNE_CFD.

La Méthode 1 fournit une approximation de la fonction couleur selon une formulation explicite et « directe », la Méthode 2 fournit la fonction couleur par intégration et requiert l'utilisation d'algorithmes relativement coûteux en ressources de calcul (recherche des zéros d'une fonction, algorithmes de minimisation) pour déterminer les limites de l'intégration. A priori, la Méthode 1 est moins coûteuse en ressources, et la Méthode 2 offre une meilleure précision des fractions volumiques.

Étude comparative. Considérons une sphere de rayon $R = 0.2m$ positionnée au centre d'un domaine cubique de dimensions $1 \times 1 \times 1m$; le maillage est constitué de cellules cubiques de dimension h_0 . Nous cherchons à mesurer la précision et la rapidité du calcul des fractions volumiques selon les deux méthodes. L'erreur volumique en norme L_1 s'écrit :

$$\epsilon_1 = \frac{|V_{th} - V_{n1}|}{V_{th}}, \quad \epsilon_2 = \frac{|V_{th} - V_{n2}|}{V_{th}}, \quad V_{n1} = h_0^3 \sum_{i=1}^N C_1, \quad V_{n2} = h_0^3 \sum_{i=1}^N C_2$$

avec C_1 fonction couleur obtenue par la Méthode 1, C_2 fonction couleur obtenue par la Méthode 2, V_{n1} et V_{n2} les volumes calculés respectifs, V_{th} le volume théorique de la sphere et N le nombre de mailles.

Les erreurs sont quantifiées en réalisant les calculs pour une itération en temps sur quatre maillages de taille 20^3 , 40^3 , 80^3 et 160^3 , ce qui correspond à un nombre moyen de mailles par rayon respectivement de 4, 8, 16 et 32. Les temps CPU t_{c1} , t_{c2} sont également calculés pour chacune des deux méthodes. Les résultats sont consignés dans le tableau 1.9.

		20^3	40^3	80^3	160^3
Erreur	ϵ_1	$3.4 * 1.0^{-3}$	$4.3 * 1.0^{-4}$	$5.4 * 1.0^{-5}$	$6.7 * 1.0^{-6}$
	ϵ_2	$4.5 * 1.0^{-16}$	$2.4 * 1.0^{-17}$	$3.1 * 1.0^{-18}$	$3.9 * 1.0^{-19}$
CPU (ms)	t_{c1}	14.09	111.68	871.20	7170.95
	t_{c2}	30.29	184.80	1317.76	10085.75

TABLE 1.9: Tableau comparatif des performances en précision et temps de calcul des deux méthodes VOF.

Conclusion. Les résultats obtenus (Tableau 1.9) attestent de la plus grande précision de la Méthode 2 (quasiment à l'erreur machine pour le maillage le moins

fin), l'écart entre les temps CPU n'étant pas considérable entre les deux méthodes, la Méthode 2 fait office de meilleur candidat pour le développement de notre outil de simulation.

1.1.4 Critère de conservativité : correction des fractions volumiques

D'un point de vue algorithmique, la méthode VOF choisie est appliquée séparément à chaque inclusion dans le domaine de calcul. Lorsque le nombre d'inclusions $P > 1$, il est nécessaire d'introduire une deuxième mesure d'erreur ϵ_g qui intègre dans son calcul l'ensemble des inclusions du domaine ; cette erreur est alors évaluée en norme L_1 sur la totalité du volume de la phase dispersée dans l'écoulement :

$$\epsilon_g = \frac{\left| \sum_{i=1}^P V_{i_{th}} - \sum_{i=1}^P V_{i_n} \right|}{\sum_{i=1}^P V_{i_{th}}}, \quad V_{i_n} = h_0^3 \sum_{n=1}^N C_n$$

avec $V_{i_{th}}$ le volume théorique de la i -ème inclusion, V_{i_n} le volume calculé associé à la i -ème inclusion, h_0 la dimension de maille et N le nombre de mailles.

En considérant un nombre d'inclusions conséquent, l'erreur globale de volume ϵ_g se dégrade sensiblement. Pour pallier à ce défaut, et de manière générale être en mesure de contrôler le volume total de la phase dispersée dans l'écoulement, nous réalisons une correction des fractions volumiques en vue de respecter le critère de conservativité, c'est-à-dire ni perte ni gain de volume pendant la simulation. La méthode de correction se base sur l'estimation de défaut (ou d'excédent) de volume établie à partir du volume global (connu) ; le défaut est compensé (ou l'excédent retiré) en redistribuant le volume manquant (ou excédant) sur les mailles contenant l'interface.

Le volume de chaque inclusion est connu, à chaque instant de la simulation on a donc :

$$V_{G_{th}} = \sum_{i=1}^P V_{i_{th}}$$

Dans chaque maille d'indice k , nous introduisons la fraction volumique théorique $C_{k_{th}}$ qui admet la décomposition suivante :

$$C_{k_{th}} = C_k + \underbrace{F(C_k) \epsilon_c}_{\text{terme correctif}} \quad (1.7)$$

C_k désigne la valeur de la fonction couleur calculée numériquement ; le terme correctif se compose de la fonction F , qui vérifie $F(0) = 0$ et $F(1) = 1$, et ϵ_c désigne le paramètre correctif.

On choisit la fonction F telle que pour $x \in [0, 1]$:

1.1. Calcul de la fonction VOF

$$F(x) = x - x^2$$

Cette fonction (Figure 1.9) détermine la distribution du terme correctif sur les mailles contenant l'interface. Sur une maille donnée, si la fonction couleur C vaut 0 ou 1, alors F est nulle et les fractions volumiques restent inchangées. Sinon, la fonction F atteint son maximum en 0.5 et présente une symétrie autour de ce point.

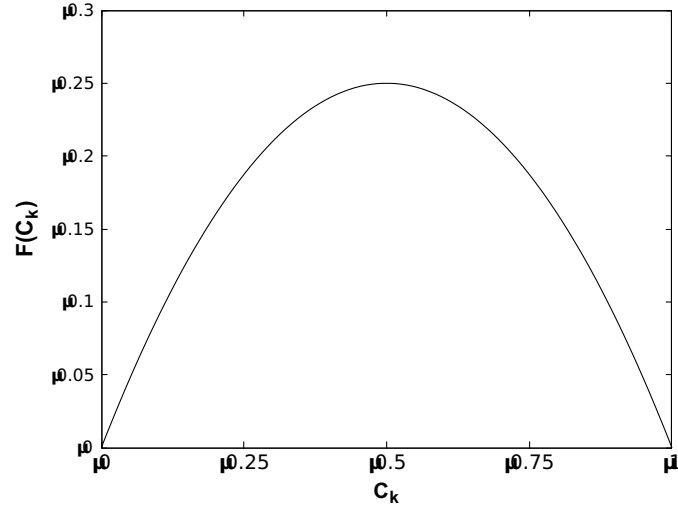


FIGURE 1.9: Tracé de la fonction F sur $[0,1]$.

Nous cherchons à exprimer le paramètre constant ϵ_c en fonction des grandeurs connues. En développant 1.7 :

$$h_0^3 \sum_{k=1}^N C_{k_{th}} = h_0^3 \sum_{k=1}^N C_k + h_0^3 \sum_{k=1}^N (C_k - C_k^2) \epsilon_c$$

Or :

$$V_{G_{th}} = \sum_{i=1}^P V_{i_{th}} = h_0^3 \sum_{k=1}^N C_{k_{th}}$$

Ainsi :

$$\epsilon_c = \frac{V_{G_{th}} - h_0^3 \sum_{k=1}^N C_k}{h_0^3 \sum_{k=1}^N (C_k - C_k^2)} \quad (1.8)$$

La méthode générale de calcul-correction des fractions volumiques peut se résumer en trois étapes :

- o Calcul par la Méthode 2 de la fonction couleur associée à chaque inclusion et sommation des contributions en chaque cellule du domaine de calcul ;

- o A partir des fractions volumiques de l'ensemble des inclusions ainsi obtenues, calcul du paramètre global de correction ϵ_c d'après 1.8;
- o Correction des fractions volumiques à partir de la relation 1.7.

1.2 Caractérisation de l'interface : calcul des fractions surfaciques et des normales à l'interface

Nous avons établi dans la sous-section précédente la méthode de calcul-corrrection de la fonction VOF. La donnée des fractions volumiques dans le domaine de calcul ne suffit pas à caractériser précisément l'interface liquide-bulle. Dans une cellule donnée, une même fraction volumique peut correspondre à de nombreuses configurations (position, orientation) de l'interface (Figure 1.10).

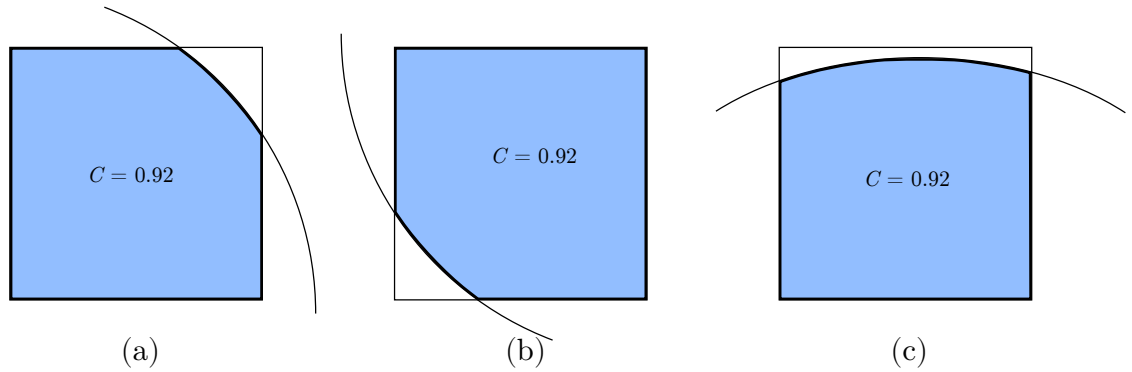


FIGURE 1.10: Trois configurations d'interface possibles (a), (b) et (c) correspondent à une même fraction volumique.

Nous cherchons à introduire une donnée géométrique supplémentaire caractérisant la présence de l'interface dans une cellule. La méthode numérique de résolution des équations de Navier-Stokes intègre explicitement dans sa formulation l'ensemble de ces grandeurs définissant l'interface. La stratégie de représentation des bulles dans l'écoulement et la méthode numérique de résolution sont donc fortement liées. Le choix de la grandeur géométrique à calculer est réalisé en vue d'une stratégie de discrétisation pré-établie.

Nous proposons le calcul des fractions surfaciques fluides notées α_F définies comme le ratio de volume fluide occupant une face d'indice F (pour deux cellules voisines d'indices respectifs i et j nous admettrons également la notation α_{ij}). Pour une face non traversée par l'interface, $\alpha_F = 1$ dans le domaine fluide et $\alpha_F = 0$ dans le domaine occupé par la bulle; si la face est traversée par l'interface $0 \leq \alpha_F \leq 1$. Cette donnée locale associée à chaque face permet une pseudo-réévaluation de la forme des mailles traversées par l'interface (Figure 1.14).

1.2. Caractérisation de l'interface : calcul des fractions surfaciques et des normales à l'interface

Nous détaillons le procédé de réévaluation de la forme d'une maille à partir de la donnée des fractions surfaciques. Considérons une cellule carrée (Figure 1.11) de dimension unitaire et de centre x_k ; les cellules voisines (ouest, nord, est et sud) de centres respectifs x_w , x_n , x_e et x_s possèdent une face commune avec la maille d'indice k , ces faces sont notées respectivement F_{wk} , F_{nk} , F_{ek} et F_{sk} et leurs normales \mathbf{n}_{wk} , \mathbf{n}_{nk} , \mathbf{n}_{ek} et \mathbf{n}_{sk} .

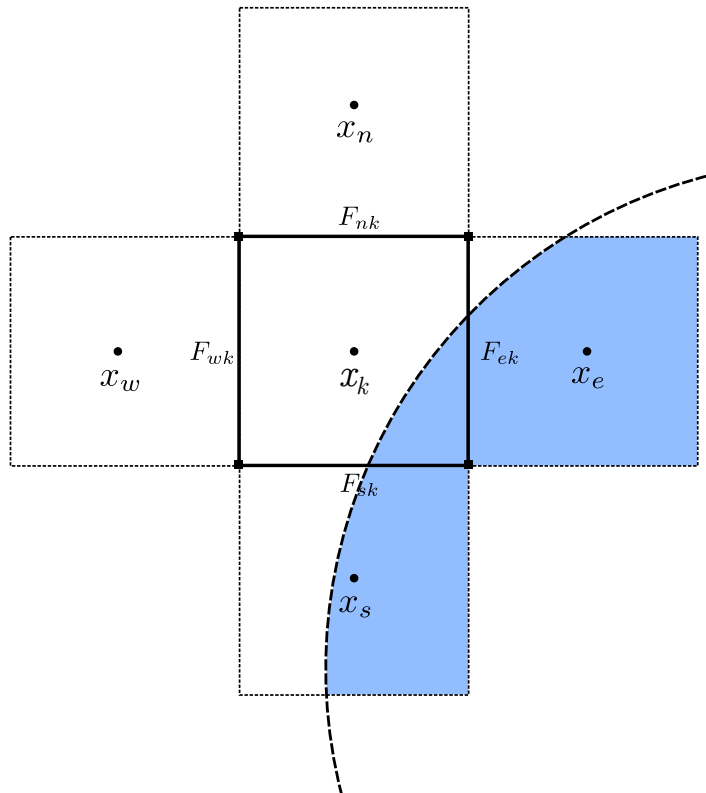


FIGURE 1.11: Configuration initiale de la cellule de centre x_k séparée des cellules voisines de centres x_w , x_n , x_e et x_s par les faces F_{wk} , F_{nk} , F_{ek} et F_{sk} .

Le procédé de réévaluation se résume en deux étapes :

Étape 1. Pour chaque face F_{wk} , F_{nk} , F_{ek} et F_{sk} de la cellule d'indice k nous calculons les fractions surfaciques α_{wk} , α_{nk} , α_{ek} et α_{sk} (détail de la méthode numérique dans les sous-sections suivantes).

Étape 2. La cellule k étant carrée, les normales à ses faces vérifient la relation suivante :

$$\mathbf{n}_{wk} + \mathbf{n}_{nk} + \mathbf{n}_{ek} + \mathbf{n}_{sk} = 0$$

$$\sum_{i \in V_k} \mathbf{n}_{ik} = 0 \quad (1.9)$$

Les fractions surfaciques déterminées à l'étape précédente sont introduites

dans la relation précédente. On obtient :

$$\begin{aligned} \sum_{i \in V_k} \alpha_{ik} \mathbf{n}_{ik} + \sum_{i \in V_k} (1 - \alpha_{ik}) \mathbf{n}_{ik} &= 0 \\ \sum_{i \in V_k} \alpha_{ik} \mathbf{n}_{ik} &= - \sum_{i \in V_k} (1 - \alpha_{ik}) \mathbf{n}_{ik} \end{aligned} \quad (1.10)$$

Notons n_p la normale à l'interface. Elle se construit géométriquement tel qu'illustré sur les Figures 1.12 et 1.13. Formellement, cette relation s'écrit :

$$\mathbf{n}_p = - \sum_{i \in V_k} (1 - \alpha_{ik}) \mathbf{n}_{ik} \quad (1.11)$$

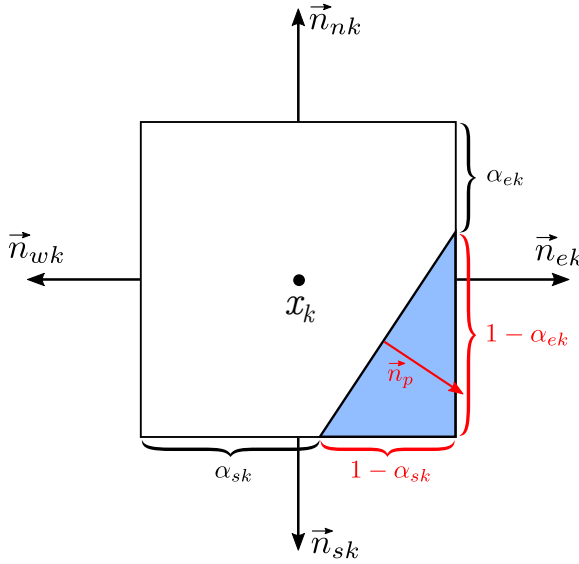


FIGURE 1.12: Fractions volumiques aux faces de la cellule k . On a trivialement pour les faces non traversées par l'interface $\alpha_{wk} = \alpha_{nk} = 1$.

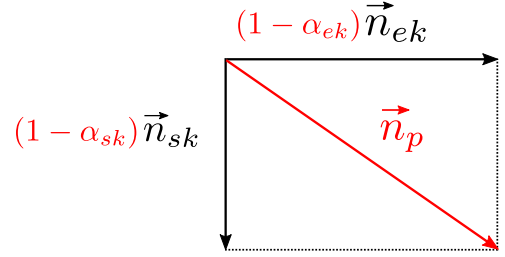


FIGURE 1.13: Construction de la normale à l'interface à partir des fractions surfaciques.

En substituant cette relation dans 1.10 on obtient :

$$\sum_{i \in V_k} \alpha_{ik} \mathbf{n}_{ik} = \mathbf{n}_p \quad (1.12)$$

Le calcul des fractions surfaciques définit directement la normale à l'interface dans une cellule donnée. Cette relation permet d'introduire « artificiellement » une face supplémentaire représentant l'interface. Cette face ne constitue pas un nouveau segment de la frontière propre à la maille comme dans le cas de méthodes d'adaptation de maillages. Les cellules demeurent carrées ou cubiques; la face supplémentaire est implicitement caractérisée par sa normale \mathbf{n}_p .

1.2. Caractérisation de l'interface : calcul des fractions surfaciques et des normales à l'interface

Conclusion. La réévaluation « artificielle » de la forme d'une maille Ω_k traversée par l'interface (Figure 1.14) correspond aux transformations géométriques suivantes :

$$\begin{aligned} F_{wk} &\rightarrow F'_{wk} \\ F_{nk} &\rightarrow F'_{nk} \\ F_{ek} &\rightarrow F'_{ek} \\ F_{sk} &\rightarrow F'_{sk} \end{aligned} \quad (1.13)$$

où F'_{wk} , F'_{nk} , F'_{ek} et F'_{sk} désignent les transformées des faces F_{wk} , F_{nk} , F_{ek} et F_{sk} telles que :

$$\begin{aligned} \alpha_{wk} &= |F'_{wk}| \\ \alpha_{nk} &= |F'_{nk}| \\ \alpha_{ek} &= |F'_{ek}| \\ \alpha_{sk} &= |F'_{sk}| \end{aligned} \quad (1.14)$$

A ces transformations vient s'ajouter l'introduction d'une face supplémentaire représentant l'interface de normale \mathbf{n}_p .

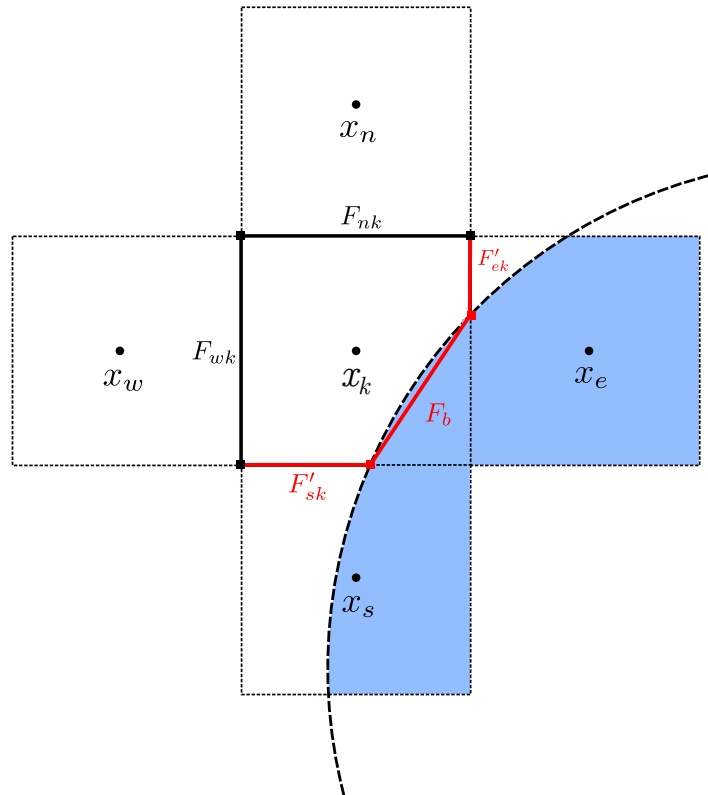


FIGURE 1.14: Réévaluation fictive de la forme de la cellule de centre x_k traversée par l'interface : $F_{ek} \rightarrow F'_{ek}$ et $F_{sk} \rightarrow F'_{sk}$. La face fictive F_b correspond à l'interface liquide-bulle.

La stratégie numérique proposée pour le calcul des fractions surfaciques diffère selon la dimension de la représentation des inclusions : la géométrie du problème n'est pas la même considérant des cercles en approche bi-dimensionnelle ou des sphères en approche tri-dimensionnelle. Nous proposons un traitement géométrique spécifique pour chacune de ces approches. En approche 2D, nous proposons une approximation du calcul de ces fractions ; en approche 3D, la méthode proposée permet un calcul exact des fractions. Nous présentons dans les sous-sections suivantes la mise en œuvre numérique du calcul des fractions surfaciques.

1.2.1 Calcul bidimensionnel des fractions surfaciques

Nous présentons dans cette sous-section la méthode mise en œuvre pour calculer les fractions surfaciques (fluides ou de bulle) en représentation bidimensionnelle. Considérons un maillage cartésien avec des mailles de dimension h_0 .

Considérons deux cellules voisines d'indices I et J dont la face commune est traversée par l'interface (Figure 1.11). Nous cherchons à calculer la grandeur b_{IJ} , longueur du segment fluide sur la face. Notons α_I et α_J les fractions volumiques fluides des cellules d'indice I et J . Nous proposons une méthode de calcul de b_{IJ} basée uniquement sur l'utilisation des fractions volumiques fluides α_I et α_J . Notons \mathcal{A} l'application qui associe à un couple de fractions volumiques (α_I, α_J) la longueur du segment b_{IJ} .

$$\mathcal{A}(\alpha_I, \alpha_J) = b_{IJ} \quad (1.15)$$

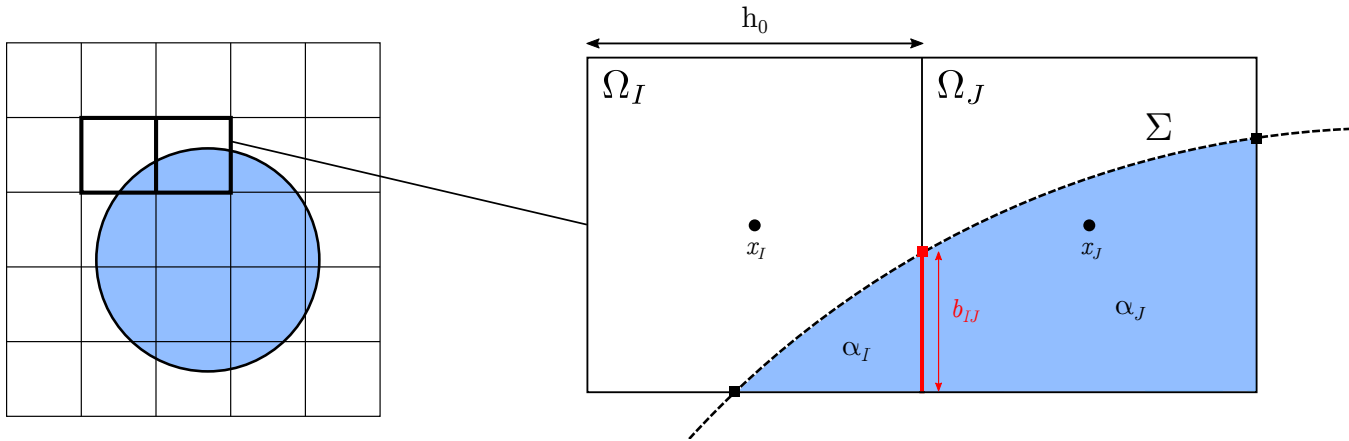


FIGURE 1.15: Configuration du problème : deux cellules de centres x_i et x_j toutes deux traversées par l'interface Σ .

Le calcul des normales décrit dans la section précédente impose a priori l'approximation de l'interface initiale courbe Σ par Σ' comme décrit dans la Figure

1.2. Caractérisation de l'interface : calcul des fractions surfaciques et des normales à l'interface

1.16. L'interface est définie sur chacune des cellules comme la droite correspondant à une fonction affine passant par les deux points d'intersection des faces avec l'interface. L'interface approchée Σ' est donc définie comme une fonction affine par morceaux composée de la réunion des segments de droite sur chaque cellule traversée par l'interface. Nous introduisons un repère (Figure 1.17) dont les axes coïncident avec la face IJ et une face orthogonale à celle-ci, l'origine du repère est située sur le sommet de la face dans le domaine Ω_b .

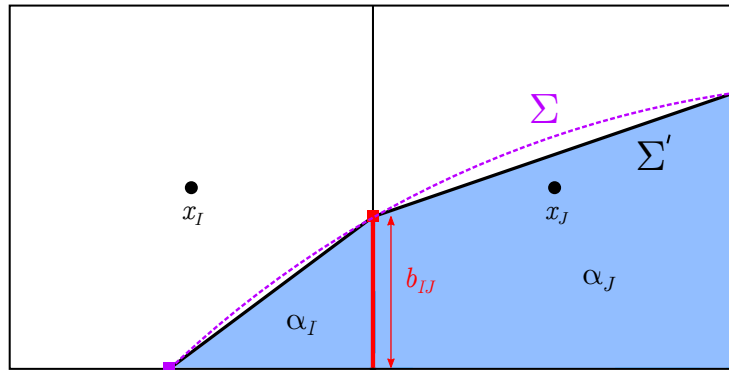


FIGURE 1.16: Approximation de la l'interface originelle courbe Σ par une fonction affine par morceaux Σ' .

Remarque. L'approximation d'interface (Figure 1.16) se traduit par une disparition de la courbure de l'interface. Elle se justifie par la tendance de l'interface sur une cellule donnée à être assimilée à une droite lorsque h_0 est petit.

L'interface est définie comme une fonction affine par morceaux dont l'équation s'écrit :

$$y(x) = \begin{cases} a_I x + b_{IJ} & \text{sur } \Omega_I \\ a_J x + b_{IJ} & \text{sur } \Omega_J \end{cases} \quad (1.16)$$

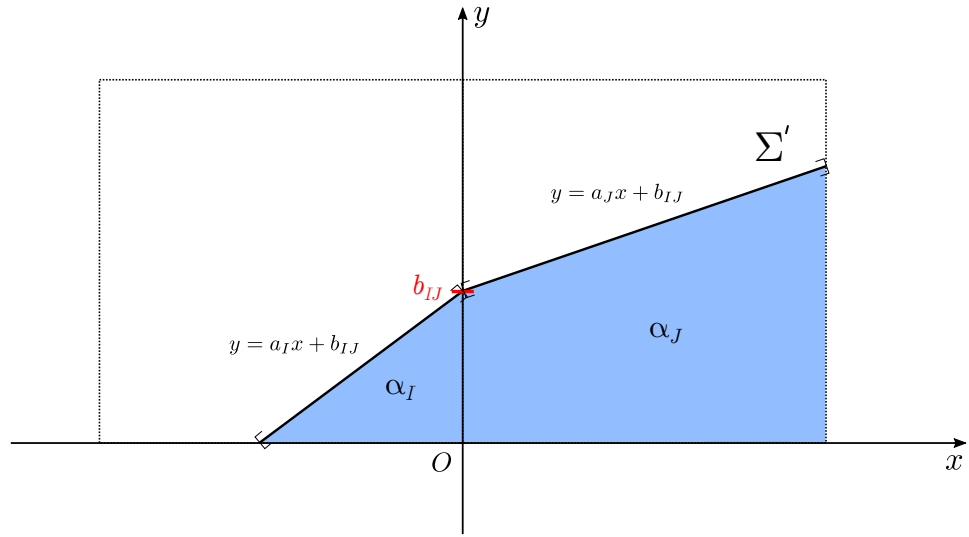


FIGURE 1.17: Notations de l'étude et représentation de l'interface par une fonction affine par morceaux.

Nous cherchons à calculer b_{IJ} . La méthode consiste dans un premier temps à exprimer les fractions volumiques (donnée d'entrée connue) α_I et α_J en fonction (\mathcal{F}_I et \mathcal{F}_J) des pentes a_I et a_J et de la longueur b_{IJ} :

$$\begin{aligned} \alpha_I &= \mathcal{F}_I(a_I, b_{IJ}) \\ \alpha_J &= \mathcal{F}_J(a_J, b_{IJ}) \end{aligned} \quad (1.17)$$

Les pentes sont ensuite formulées comme fonction (\mathcal{F}'_I et \mathcal{F}'_J) des fractions volumiques α_I et α_J et de la longueur b_{IJ} :

$$\begin{aligned} a_I &= \mathcal{F}'_I(\alpha_I, b_{IJ}) \\ a_J &= \mathcal{F}'_J(\alpha_J, b_{IJ}) \end{aligned} \quad (1.18)$$

Nous réalisons une hypothèse de continuité des pentes à la face (Figure 1.18.(a)) :

$$a_I = a_J = a_{IJ}$$

avec a_{IJ} pente de la droite intersectant l'axe (Oy) pour une ordonnée associée b'_{IJ} , approximation de b_{IJ} .

1.2. Caractérisation de l'interface : calcul des fractions surfaciques et des normales à l'interface

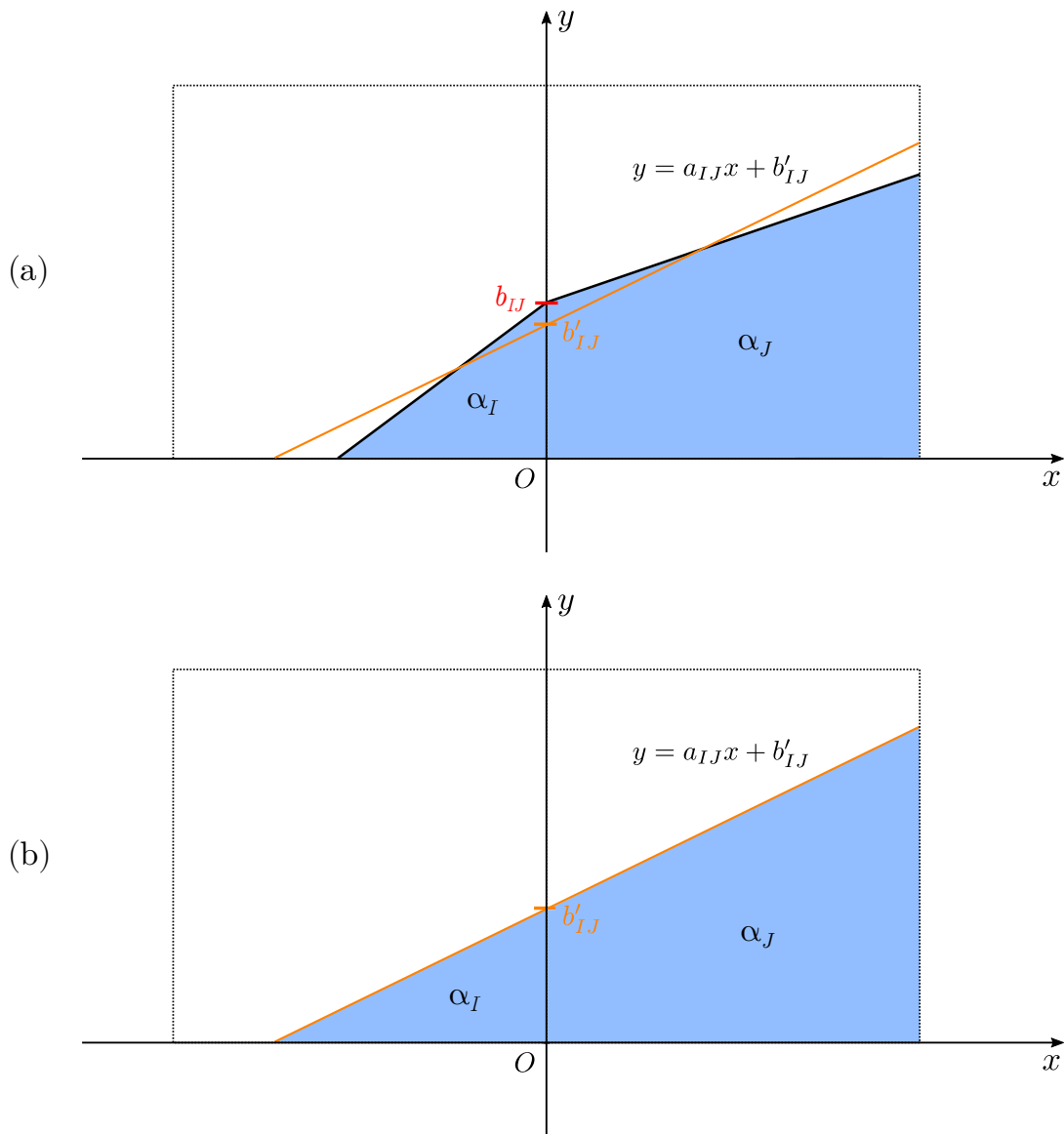


FIGURE 1.18: (a) Représentation initiale de l'interface par une fonction affine par morceaux. (b) Approximation réalisée : l'interface est représentée par une fonction affine.

L'approximation réalisée préserve les surfaces (Figure 1.18.(b)) : le changement de configuration de l'interface ne se traduit pas par une modification des grandeurs α_I et α_J . La relation 1.17 garantit :

$$\begin{aligned}\alpha_I &= \mathcal{F}_I(a_{IJ}, b'_{IJ}) \\ \alpha_J &= \mathcal{F}_J(a_{IJ}, b'_{IJ})\end{aligned}$$

Finalement, la grandeur b'_{IJ} est déterminée à partir de la relation 1.17 dont on déduit l'équation d'inconnue b'_{IJ} :

Chapitre 1. Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles

$$\mathcal{F}'_I(\alpha_I, b'_{IJ}) - \mathcal{F}'_J(\alpha_J, b'_{IJ}) = 0 \quad (1.19)$$

On dénombre quatre configurations d'interface au total (Figure 1.19). Chacune de ces configurations mène à une résolution différente de 1.19. Le détail de ce calcul figure dans l'annexe.

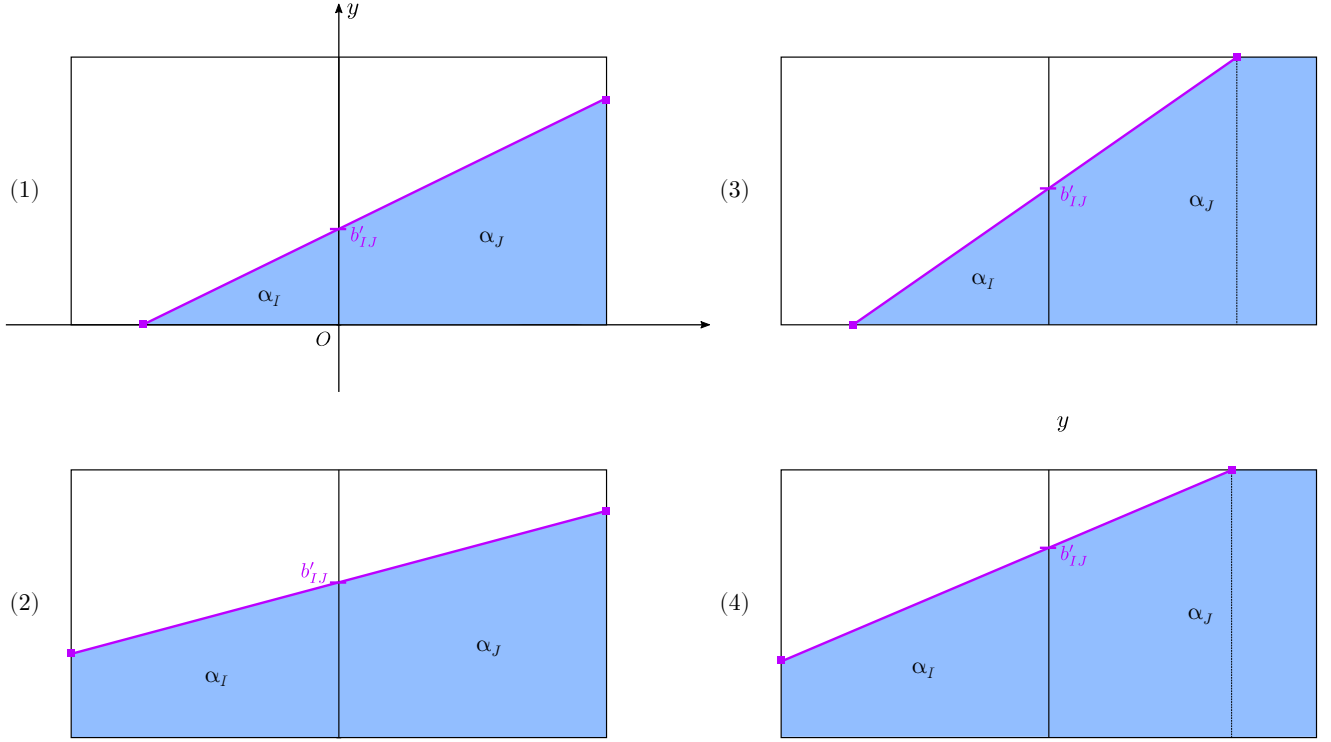


FIGURE 1.19: Quatre configurations d'interface possibles. Le calcul de l'aire dépend des formes géométriques obtenues : (1) Triangle (Ω_I) - Trapèze (Ω_J), (2) Trapèze - Trapèze, (3) Triangle - Trapèze + Rectangle, (4) Trapèze - Trapèze + Rectangle.

La résolution de 1.19 fournit la longueur b'_{IJ} . La fraction surfacique de bulle $0 \leq \alpha_{IJ} \leq 1$ est définie comme la longueur b'_{IJ} rapportée à la dimension de la cellule :

$$\alpha_{IJ} = \frac{b'_{IJ}}{h_0} = \frac{\mathcal{A}(\alpha_I, \alpha_J)}{h_0} \quad (1.20)$$

Remarque. Pour une inclusion de forme contrôlée dont l'interface est définie analytiquement, une autre approche du calcul de b_{IJ} est également envisageable. Il s'agit alors de déterminer l'éventuelle intersection de la fonction définissant l'interface avec la droite passant par les deux sommets de la face à l'étude (Figure 1.20). La longueur b_{IJ} est alors définie comme la distance séparant ce point intersection (point P_i) avec le sommet situé dans le domaine occupé par la bulle (point S). Cette approche est cependant difficilement généralisable à des inclusions de formes diverses et éventuellement déformables, lorsqu'un contrôle analytique de la

1.2. Caractérisation de l'interface : calcul des fractions surfaciques et des normales à l'interface

forme des bulles n'est plus réalisable. La méthode retenue présente elle un avantage majeur : elle est uniquement basée sur la donnée des surfaces dans chaque cellule 1.20 indépendamment du « type » d'interface considéré.

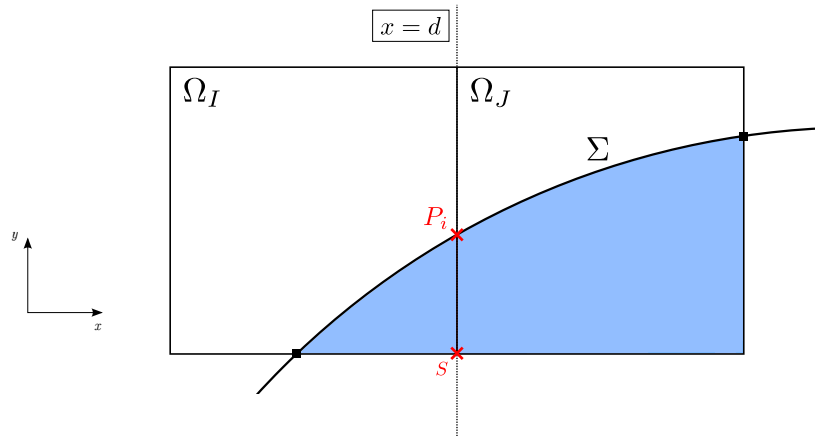


FIGURE 1.20: Calcul de la fraction surfacique de bulle. Le point P_i correspond à l'intersection entre l'interface Σ et de la droite d'équation $x = d$, $d \in \mathbb{R}$. Le point S est le sommet situé dans le domaine occupé par la bulle.

1.2.2 Calcul tridimensionnel des fractions surfaciques

Nous présentons la méthode mise en œuvre pour calculer les fractions surfaciques en représentation tridimensionnelle. Nous cherchons à calculer la surface notée s_{IJ} occupée par la bulle sur chaque face joignant deux cellules d'indices I et J admettant une intersection avec l'interface (Figure 1.21). L'approche retenue pour le calcul des fractions surfaciques en 2D est difficilement généralisable aux représentations 3D. Les objets géométriques manipulés approximant l'interface sont dans ce cas des plans. La formulation des fractions volumiques α_I et α_J à partir des équations de plans telle qu'établie en 1.17) est difficilement réalisable du fait du nombre conséquent de configurations d'interface possibles et de leur détection, ainsi que la complexité des aspects géométriques à traiter (intersections plan-face multiples). Nous privilégions une autre approche nous permettant de calculer à haute précision la surface s_{IJ} sur chaque face. Cette approche se base sur l'utilisation d'une méthode VOF bidimensionnelle.

Chapitre 1. Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles

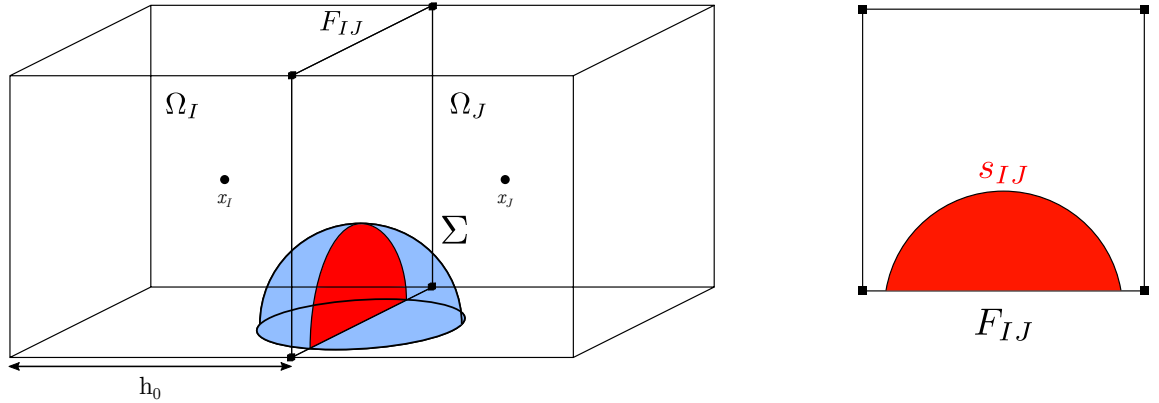


FIGURE 1.21: La face F_{IJ} admet une intersection (aire rouge) avec l'interface Σ de surface S_{IJ} .

Considérons un maillage cartésien de $N \times N \times N$ mailles et une bulle de forme sphérique de rayon r , de centre (x_0, y_0, z_0) et d'équation $(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 = r^2$ (Figure 1.22). Notons h_0 la dimension caractéristique des cellules cubiques de dimension caractéristique h_0 . Les sommets des cellules du maillage sont localisés aux positions (x_i, y_j, z_k) , $(i, j, k) \in [1 \dots N]^3$.

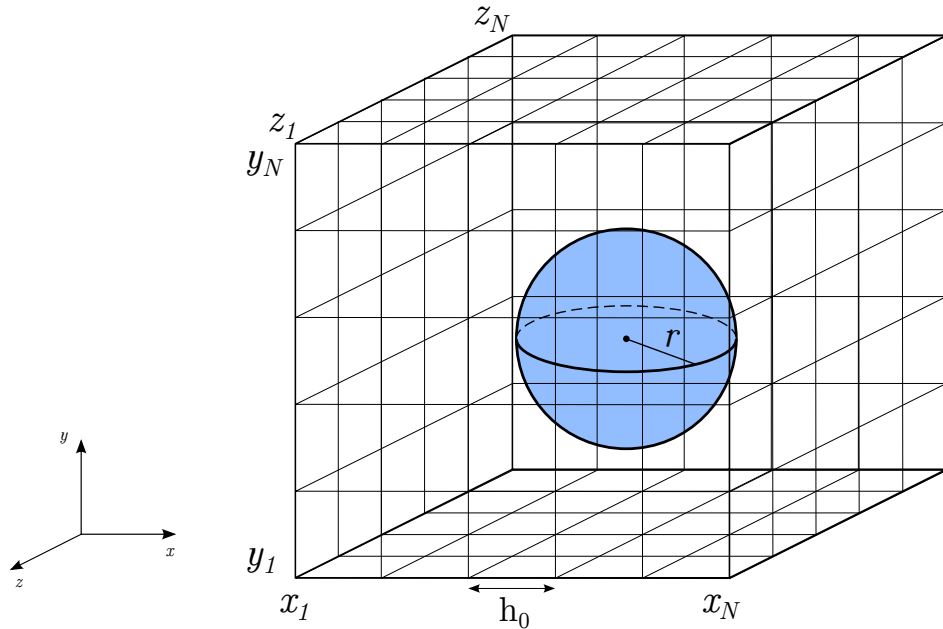


FIGURE 1.22: Configuration à l'étude : maillage cartésien de dimension caractéristique h_0 ; le domaine de calcul contient une bulle sphérique de rayon r .

Définissons formellement l'intersection d'une bulle sphérique et d'une face donnée. Les faces du maillage sont des carrés de dimension h_0 dont les sommets partageant

1.2. Caractérisation de l'interface : calcul des fractions surfaciques et des normales à l'interface

une composante commune x_i , y_j , ou z_k appartiennent à un même plan d'équation :

$$x = (x_i)_{1 \leq i \leq N} \quad \text{ou} \quad y = (y_j)_{1 \leq j \leq N} \quad \text{ou} \quad z = (z_k)_{1 \leq k \leq N}. \quad (1.21)$$

Plus généralement, l'intersection d'une sphère de centre x_0, y_0, z_0 et d'équation $(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2 = r^2$ avec un plan d'équation $Ax + By + Cz + D = 0$ est un cercle contenu dans le plan de centre noté (x_c, y_c, z_c) et de rayon noté r_c tel que :

$$\begin{aligned} x_c &= x_0 - \frac{A(Ax_0 + By_0 + Cz_0 + D)}{A^2 + B^2 + C^2} \\ y_c &= y_0 - \frac{B(Ax_0 + By_0 + Cz_0 + D)}{A^2 + B^2 + C^2} \\ z_c &= z_0 - \frac{C(Ax_0 + By_0 + Cz_0 + D)}{A^2 + B^2 + C^2} \end{aligned} \quad (1.22)$$

$$r_c = \sqrt{r^2 - \frac{(Ax_0 + By_0 + Cz_0 + D)^2}{A^2 + B^2 + C^2}} \quad (1.23)$$

La distance notée d_c séparant le centre du cercle-intersection du centre de la sphère est :

$$d = \frac{|Ax_0 + By_0 + Cz_0 + D|}{\sqrt{A^2 + B^2 + C^2}} \quad (1.24)$$

Le critère d'intersection entre le plan et la sphère est établi selon les valeurs de d_c :

$$\begin{aligned} \text{Intersection plan-sphère} &: r > d \\ \text{Plan tangent à la sphère} &: r = d \\ \text{Pas d'intersection plan-sphère} &: r < d \end{aligned} \quad (1.25)$$

Revenons au calcul de la surface s_{IJ} associée à chaque face joignant deux cellules voisines I et J . Dans un premier temps, l'équation de plan associée à chaque face est établie en déterminant la composante commune à tous les sommets d'une même face (Figure 1.22).

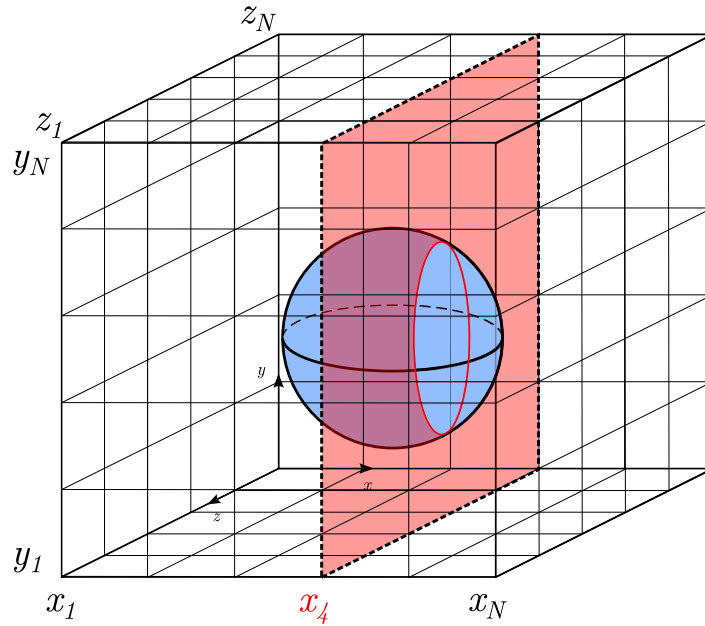


FIGURE 1.23: Le plan en rouge contient tous les sommets vérifiant $x = x_4$.

Nous appliquons ensuite le critère de détection à chaque face ; dans le cas d'une intersection, nous disposons de la position (x_c, y_c, z_c) du centre du cercle-intersection et de son rayon r_c . La surface s_{IJ} correspond à la surface intérieure au cercle intersection. Ainsi, la jonction de toutes les faces définies sur un même plan forme une pseudo-grille cartésienne bidimensionnelle (Figure 1.24).

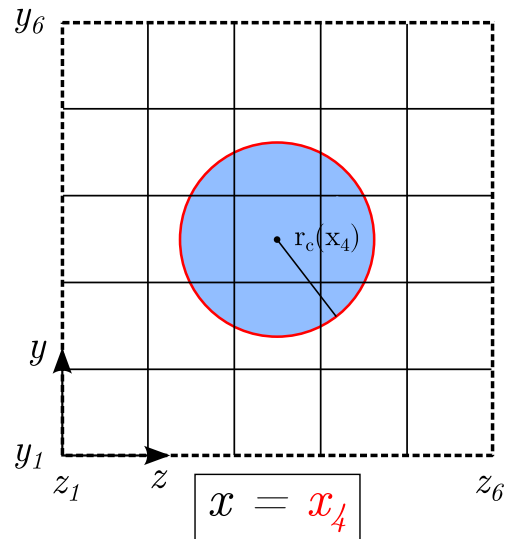


FIGURE 1.24: Pseudo-grille cartésienne composée de toutes les faces contenues dans le plan d'équation $x = x_4$. Selon cette vue du problème, le calcul des fractions surfaciques correspond à un calcul de fractions volumiques 2D.

1.2. Caractérisation de l'interface : calcul des fractions surfaciques et des normales à l'interface

Le calcul des s_{IJ} correspond donc à un calcul bidimensionnel de fraction volumique pour un cercle de centre (x_c, y_c, z_c) et de rayon r_c dont la formulation analytique implicite dépend de l'équation du plan associé à la face :

$$\begin{aligned} \text{plan } (Oxy) : & \quad (x - x_c)^2 + (y - y_c)^2 - r_c^2 = 0, \\ \text{plan } (Oyz) : & \quad (y - y_c)^2 + (z - z_c)^2 - r_c^2 = 0, \\ \text{plan } (Oxz) : & \quad (x - x_c)^2 + (z - z_c)^2 - r_c^2 = 0. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Ces fractions volumiques 2D sont calculées via la méthode VOF [Bnà et al. (2015)] présentée en 1.1.2.

Adaptation de la méthode pour le traitement de la périodicité

Le calcul des fractions volumiques et surfaciques requiert un traitement numérique spécifique lorsque la bulle franchit une frontière du domaine associée à une condition limite de périodicité (Figure 1.25). Du fait de la périodicité, la bulle occupe deux positions de manière simultanée. La donnée d'une seule position ne suffit pas à calculer toutes les fractions volumiques/surfaciques associées à une bulle.

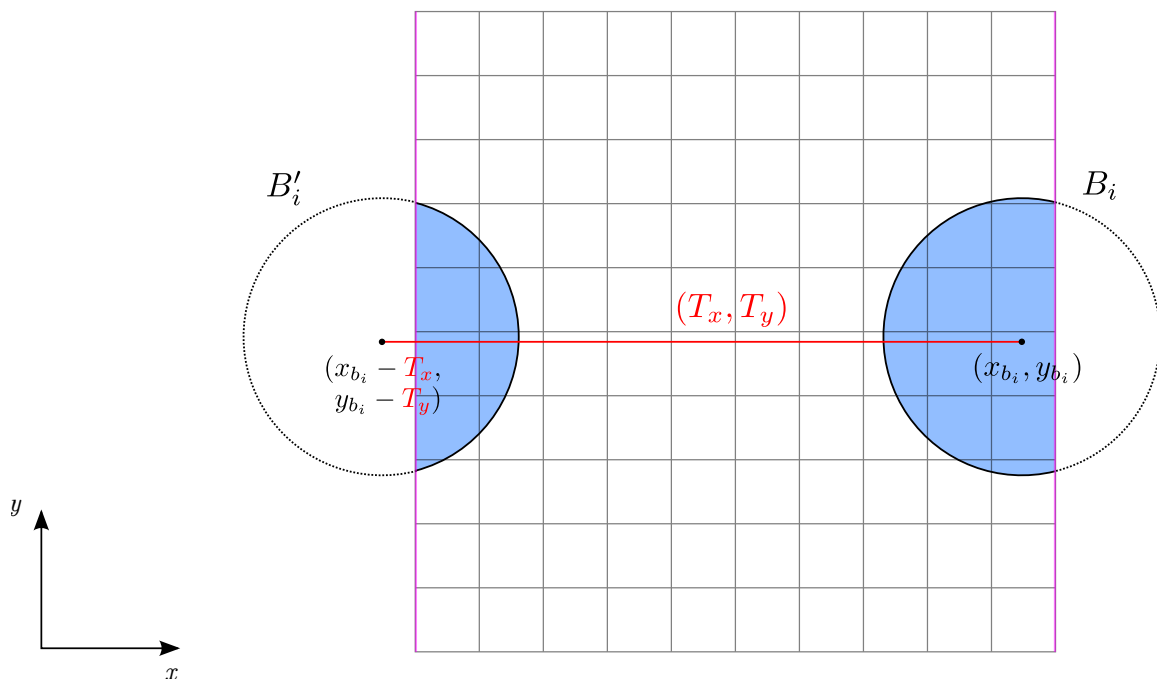


FIGURE 1.25: La bulle B_i franchit la paroi (violet) affectée d'une condition limite de périodicité et est réintroduite à gauche comme la bulle B'_i image de B_i par la translation $(T_x, T_y = 0)$.

Notons B_i la bulle de centre $\mathbf{x}_{b_i} = (x_{b_i}, y_{b_i}, z_{b_i})$ franchissant une frontière affectée d'une condition limite de périodicité et B'_i la bulle de centre $\mathbf{x}_{b'_i} = (x'_{b_i}, y'_{b_i}, z'_{b_i})$

Chapitre 1. Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles

définie comme l'image de B_i par la translation $T = (T_x, T_y, T_z)$ associée à la périodicité tel que :

$$\mathbf{x}_{\mathbf{b}'_i} = (x'_{b_i}, y'_{b_i}, z'_{b_i}) = (x_{b_i} + T_x, y_{b_i} + T_y, z_{b_i} + T_z) \quad (1.27)$$

Le détail du calcul de T figure dans la section 1.3.2. Nous proposons une méthode pour le calcul complet des fractions volumiques/surfaciques basée sur l'utilisation de B_i et de son image B'_i .

Pour un maillage cartésien donné, et une représentation analytique de l'interface établie, d'après les méthodes détaillées dans la section précédente, nous admettons l'écriture des fractions volumiques/surfaciques comme fonctions (respectivement \mathcal{V} / \mathcal{A}) des centres des cellules/faces et du centre de masse de la bulle ; pour une cellule Ω_k de centre x_k et une face d'indice F , de centre x_F , en l'absence de périodicité :

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \mathcal{V}(x_k, \mathbf{x}_{\mathbf{b}_i}) \\ \alpha_F &= \mathcal{A}(x_F, \mathbf{x}_{\mathbf{b}_i}) \end{aligned} \quad (1.28)$$

Les fractions volumiques/surfaciques totales s'obtiennent en sommant les contributions des bulles B_i et B'_i :

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \mathcal{V}(x_k, \mathbf{x}_{\mathbf{b}_i}) + \mathcal{V}(x_k, \mathbf{x}_{\mathbf{b}'_i}) \\ \alpha_F &= \mathcal{A}(x_F, \mathbf{x}_{\mathbf{b}_i}) + \mathcal{A}(x_F, \mathbf{x}_{\mathbf{b}'_i}) \end{aligned} \quad (1.29)$$

1.2.3 Calcul des normales à l'interface liquide-bulle

Nous rappelons la formulation du calcul des normales détaillée dans la section précédente. Considérons une cellule Ω_k d'un maillage cartésien, notons V_k l'ensemble de ses cellules voisines. Les fractions surfaciques aux faces joignant Ω_k et Ω_v , sont notées α_{vk} , avec $v \in V_k$; les normales aux faces associées sont notées n_{vk} . La formulation de la normale à l'interface notée n_{p_k} est établie à partir des fractions surfaciques calculées aux faces de Ω_k :

$$n_{p_k} = \sum_{v \in V_k} \alpha_{vk} n_{vk} \quad (1.30)$$

1.3 Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

Le calcul des fractions volumiques et surfaciques détaillé dans la section précédente permet une caractérisation locale de la présence de l'interface dans le domaine de calcul. Nous disposons donc de ces grandeurs géométriques pour réaliser la construction de la méthode numérique permettant la résolution des équations de conservation en vue d'obtenir une description du champ fluide sur la grille eulérienne. Cependant, sous l'action hydrodynamique du fluide, les inclusions sont

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

amenées à être advectées dans l'écoulement. Les bulles peuvent potentiellement entrer en collision ou interagir avec les conditions aux limites du domaine de calcul (rebond ou périodicité). Il apparaît donc nécessaire de préciser le formalisme lagrangien décrivant le suivi des inclusions dans le domaine de calcul. La section suivante est dédiée à la description des aspects Lagrangiens de la méthode comportant l'avancée en temps des bulles, la mise en oeuvre de la périodicité des bulles sortant du domaine de calcul, le traitement des collisions bulle-bulle et bulle-paroi, ainsi que l'algorithme collisionnel général régissant la mise à jour des positions et des vitesses des bulles lors de la simulation.

1.3.1 Avancée en temps des bulles

Le suivi des bulles est réalisé selon une méthode Euler-Lagrange. La forme des bulles (sphérique, ellipsoïdale) et les positions de leur centre de masse étant connus, la fonction couleur est aisément calculable à tout instant de la simulation (voir 1.1). Il est donc préférable de calculer la fonction C à partir des positions des particules au temps $t_{n+1} = (n+1)\Delta t$ plutôt que de résoudre une équation de transport sur C .

La vitesse de bulle \mathbf{u}_b^{n+1} peut être déterminée par l'action des forces hydrodynamiques sur celle-ci (voir 2.9); une vitesse (sans couplage) peut également être imposée à la bulle. Cette vitesse Lagrangienne est utilisée pour la mise à jour des positions des centres de masse des bulles \mathbf{x}_b par le schéma de type Euler implicite d'ordre 1 :

$$\mathbf{x}_b^{n+1} = \mathbf{x}_b^n + \Delta t \mathbf{u}_b^{n+1} \quad (1.31)$$

La nouvelle position de chaque bulle est connue. La fonction couleur C est recalculée en projetant selon l'hypothèse de forme sur les inclusions à partir de la position du centre de masse actualisé \mathbf{x}_b^{n+1} .

Pour des approches de simulation similaires à la notre, incluant un suivi Lagrangien de particules de formes contrôlées sur une grille eulérienne, la même méthode d'advection des centres de masse a été mise en oeuvre pour des schémas numériques différents : pour des écoulements particuliers [Vincent et al. (2014)] un schéma de Runge Kutta d'ordre 2 et pour des écoulements à bulles un schéma Euler explicite d'ordre 1 [Badreddine et al. (2015)].

1.3.2 Traitement de la périodicité pour le suivi des bulles

L'interaction d'une bulle avec une condition limite de périodicité se traduit par une réintroduction de la bulle dans le domaine de calcul lorsque sa frontière franchit les limites du domaine. Pour ce type de condition limite, les aspects liés à la caractérisation de l'interface sur la grille eulérienne, i.e. l'adaptation de la méthode de calcul des fractions volumiques et surfaciques à été détaillée dans la section

Chapitre 1. Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles

précédente. Nous traitons ici du suivi Lagrangien de la bulle traversant une limite périodique. Le traitement de la périodicité pour le suivi des bulles consiste à détecter à l'issu d'une itération les bulles partiellement ou intégralement sorties du domaine, à établir le vecteur de translation de périodicité associé, puis à relocaliser le centre de masse de la bulle selon ce vecteur de translation.

Détection des inclusions à relocaliser.

Le traitement de la périodicité est présenté en représentation bidimensionnelle. Considérons un maillage cartésien de $N \times N$ mailles délimité par les bornes x_1, x_N et y_1, y_N avec $x_N - x_1 = L_x$ et $y_N - y_1 = L_y$, et une bulle dont le centre $\mathbf{x}_{b_i} = (x_{b_i}, y_{b_i})$ se situe à l'extérieur du domaine de calcul après avoir franchi intégralement les frontières du domaine associées à des conditions limites de périodicité (Figure 1.25). Pour des inclusions circulaires, le critère de détection de dépassement des bornes du domaine porte sur la position du centre de la bulle. Nous introduisons les distances relatives suivantes :

$$\begin{aligned} d_{p_{x,1}} &= x_1 - x_{b_i} & \text{et} & & d_{p_{y,1}} &= y_1 - y_{b_i} \\ d_{p_{x,N}} &= x_{b_i} - x_N & & & d_{p_{y,N}} &= y_{b_i} - y_N \end{aligned} \quad (1.32)$$

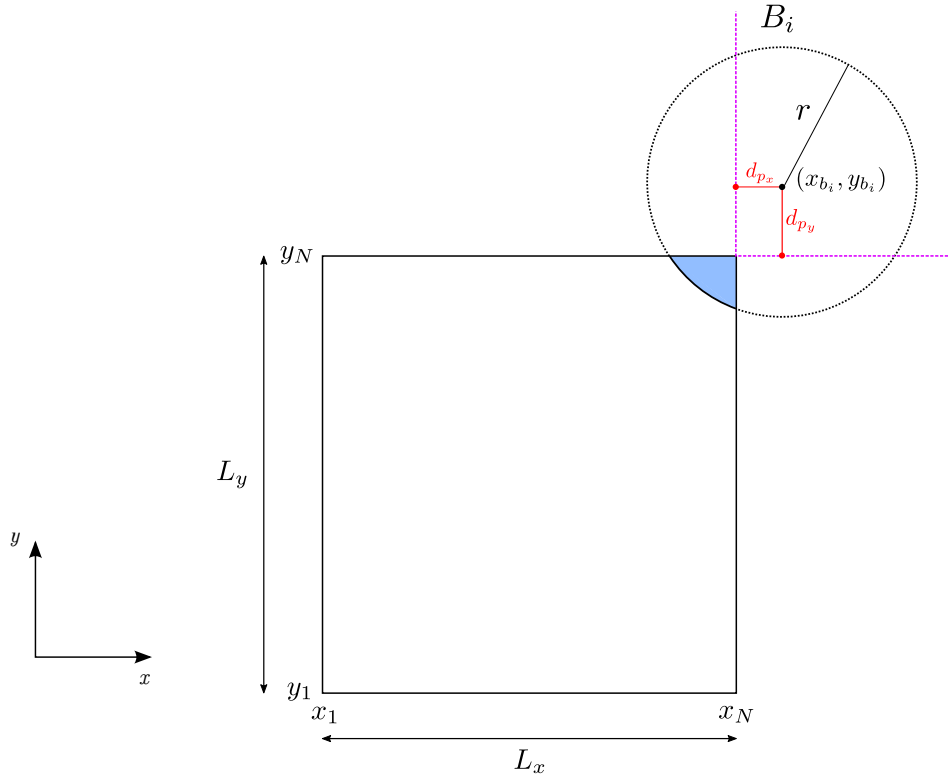


FIGURE 1.26: Configuration à l'étude : le centre de la bulle B_i se situe hors du domaine de calcul.

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

Une relocalisation de bulle est à traiter si le critère suivant est vérifié :

$$d_{p_{x,1}} > 0 \text{ ou } d_{p_{x,N}} > 0 \text{ ou } d_{p_{y,1}} > 0 \text{ ou } d_{p_{y,N}} > 0.$$

Calcul du vecteur de périodicité associé.

Une bulle dont le centre franchit les bornes du domaine est relocalisée selon un vecteur $T = (T_x, T_y)$ correspondant à la relation de périodicité définie sur la frontière concernée. Deux frontières connexes peuvent être franchies simultanément. Pour un domaine de dimensions L_x et L_y , nous recensons l'ensemble des translations possibles :

$$T = (T_x, T_y) = \begin{cases} (\pm L_x, \pm L_y) \\ (\pm L_x, 0) \\ (0, \pm L_y) \end{cases}$$

Finalement, le vecteur de translation $T = (T_x, T_y)$ correspond à l'unique déplacement (Figure 1.27) situant le centre de la bulle dans le domaine de calcul :

$$x_1 \leq (x_{b_i} + T_x) \leq x_N \text{ et } y_1 \leq (y_{b_i} + T_y) \leq y_N.$$

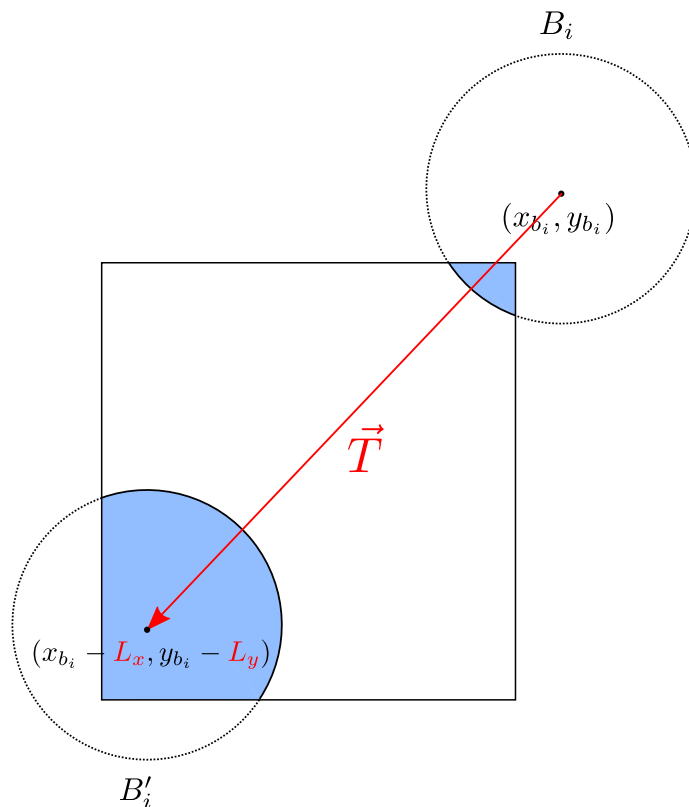


FIGURE 1.27: Translations possibles de la bulle B_i si $x_{b_i} \geq x_N$ ou $y_{b_i} \geq y_N$.

Mise à jour de la position de la bulle.

La position de la bulle est mise à jour (Figure 1.37) d'après le vecteur de translation établi précédemment :

$$\mathbf{x}_{b_i} = (x_{b_i}, y_{b_i}) \longrightarrow (x_{b_i} + T_x, y_{b_i} + T_y)$$

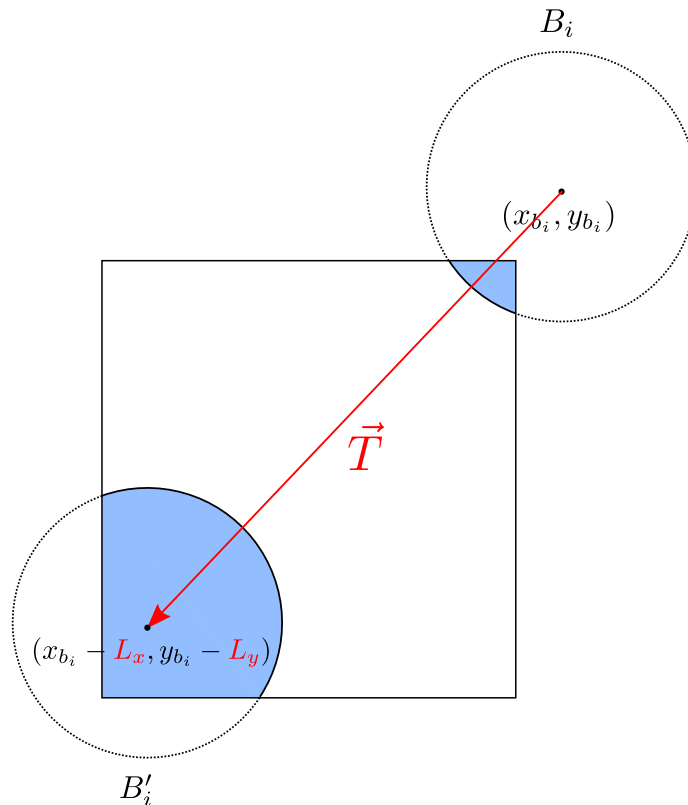


FIGURE 1.28: Mise à jour de la position de la bulle d'après la translation \vec{T} .

1.3.3 Interaction bulle-bulle et bulle-paroi

1.3.3.1 Traitement des collisions bulles-bulles

La réalisation de simulations d'écoulements à particules sphériques induit nécessairement un traitement des interactions entre inclusions. L'interaction entre deux inclusions proches est déterminée par de nombreux phénomènes (couche de lubrification, rugosité, forces de répulsion...). Une résolution très précise de la couche fluide séparant deux particules proches est requise pour restituer dans les simulations l'ensemble de ces effets. En pratique, la méthode numérique ne permet pas toujours une résolution suffisamment fine pour capter l'intégralité des

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

phénomènes d'interaction à petite échelle. Le modèle d'interaction est donc choisi en conséquence. Les modèles existants couvrent un spectre assez large, allant des modèles « simples » traitant uniquement les collisions entre inclusions aux modèles plus complexes incluant par exemple les effets de lubrification. Le choix du modèle conditionne grandement les résultats de simulation obtenus, en particulier les vitesses moyennes des particules ; une étude de sensibilité de ces résultats selon plusieurs modèles d'interaction est détaillée dans [Dance et al. (2004)].

Pour les simulations réalisées dans notre cadre d'étude, lorsque l'inertie du fluide est importante, les trajectoires des bulles sont amenées à s'intersecter. La méthode générale développée doit donc être en mesure de gérer les éventuelles collisions entre les bulles. La méthode numérique traitant les collisions entre inclusions doit correspondre au mieux à la physique des collisions entre bulles, ou plus précisément aux phénomènes d'interaction intervenant lorsque deux bulles se rapprochent. La nécessité de la mise en œuvre d'une méthode de collision est également d'ordre numérique : il s'agit d'éviter les phénomènes d'agrégation, i.e. le recouvrement d'une même cellule par deux interfaces de deux inclusions différentes.

Nous rappelons que les phénomènes de coalescence sont proscrits et les bulles indéformables ; par conséquent l'interaction par contact entre deux bulles se limite à un effet de rebond entre celles-ci après collision. Une classification des modèles de collision selon deux catégories est proposée dans [Corre et al. (2009)] : les modèles dits de soft-sphere (Figure 1.29) et les modèles de sphère rigide (Figure 1.30).

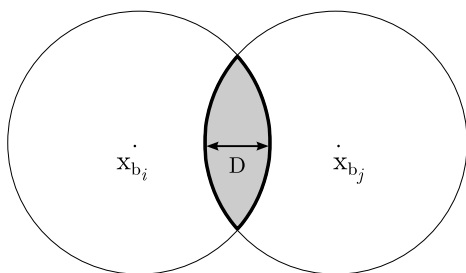


FIGURE 1.29: Modèle soft-sphere : sphères en intersection se recouvrant sur une distance D .

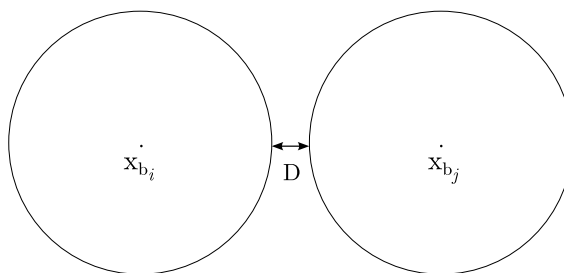


FIGURE 1.30: Modèle de sphère rigide : la distance de D est minimale lors du contact entre les sphères.

Le modèle soft-sphère admet l'interpénétration des sphères en collision. L'expression générale de la force interagissant sur les particules d'indices i et j s'écrit :

$$\vec{F}_{i/j} = -K \times D \times \frac{\overrightarrow{\mathbf{x}_{b_i} \mathbf{x}_{b_j}}}{\|\overrightarrow{\mathbf{x}_{b_i} \mathbf{x}_{b_j}}\|}$$

avec $D = \|\overrightarrow{\mathbf{x}_{b_i} \mathbf{x}_{b_j}}\| - 2 \times R$ longueur de recouvrement et K constante de raideur de la collision. La méthode générale ne permet pas de gérer des recouvrements de deux bulles, nous privilégions donc une autre approche, la méthode de sphère

rigide.

L'hypothèse d'indéformabilité des inclusions définit la nature de l'interaction entre les bulles. Lorsque des bulles se rapprochent, la pression dans le domaine fluide confiné entre les deux bulles augmente ; la contrainte exercée sur les bulles se traduit par une déformation de leur interface. En omettant les effets de déformation, les bulles sont simplement repoussées l'une de l'autre. Les mécanismes déterminant ces changements de trajectoires sont mal maîtrisés ; nous cherchons à modéliser une approximation de cette tendance.

La méthode d'interaction de type soft-sphere employée dans [Dance et al. (2004)] est combinée à une augmentation artificielle du rayon $r + \Delta x$ (Figure 1.31) afin d'éviter les recouvrements d'interfaces sur une même cellule. Nous proposons une méthode de collision inspirée de cette approche.

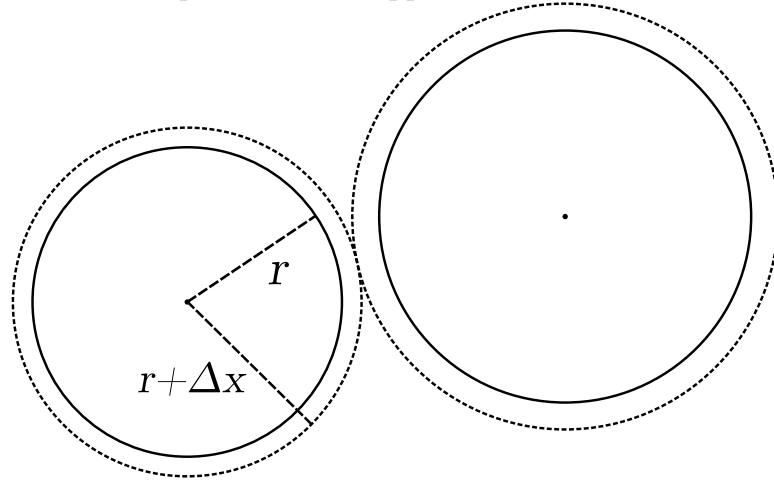


FIGURE 1.31: La bordure extérieure bleue est le cercle de rayon $r + \Delta x$. Le nouveau point de collision entre les deux cercles assure un éloignement relatif des interfaces initiales.

Considérons deux bulles sphériques en collision respectivement de rayons r_1 et r_2 , de vitesses (avant collision) $\mathbf{u}_1 = (\mathbf{u}_{x_1}, \mathbf{u}_{y_1}, \mathbf{u}_{z_1})$ et $\mathbf{u}_2 = (\mathbf{u}_{x_2}, \mathbf{u}_{y_2}, \mathbf{u}_{z_2})$, de masse m_1 et m_2 . Notons $\mathbf{u}_1^* = (\mathbf{u}_{x_1}^*, \mathbf{u}_{y_1}^*, \mathbf{u}_{z_1}^*)$ et $\mathbf{u}_2^* = (\mathbf{u}_{x_2}^*, \mathbf{u}_{y_2}^*, \mathbf{u}_{z_2}^*)$ les vitesses de bulle après collision. Soit $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z) = \mathbf{x}_{b_2} - \mathbf{x}_{b_1} / \|\mathbf{x}_{b_2} - \mathbf{x}_{b_1}\|$ le vecteur normal au plan d'intersection des deux bulles. Dans un premier temps, la méthode de rebond décrit un choc élastique entre les bulles. En l'absence de forces tangentielles s'exerçant sur les bulles à la collision (Figure 1.32), les composantes tangentielles des vitesses restent inchangées après la collision. Les vitesses \mathbf{u}_1^* et \mathbf{u}_2^* sont établies à partir des équations suivantes :

- conservation de la quantité de mouvement totale :

$$m_1 \mathbf{u}_1 + m_2 \mathbf{u}_2 = m_1 \mathbf{u}_1^* + m_2 \mathbf{u}_2^* \quad (1.33)$$

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

- conservation de l'énergie cinétique totale :

$$\frac{1}{2}m_1\mathbf{u}_1\cdot\mathbf{u}_1 + \frac{1}{2}m_2\mathbf{u}_2\cdot\mathbf{u}_2 = \frac{1}{2}m_1\mathbf{u}_1^*\cdot\mathbf{u}_1^* + \frac{1}{2}m_2\mathbf{u}_2^*\cdot\mathbf{u}_2^* \quad (1.34)$$

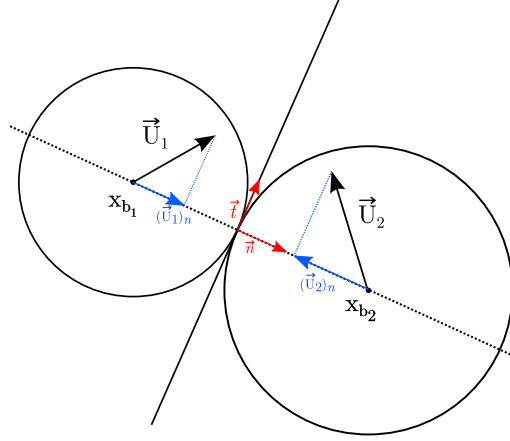


FIGURE 1.32: Collision entre deux bulles sphériques. Seules les vitesses normales (bleu) sont modifiées lors de la collision.

Par développement de 1.33 et 1.34 :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{x1}^* &= \mathbf{u}_{x1} + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \left((\mathbf{u}_{x2} - \mathbf{u}_{x1})n_x + (\mathbf{u}_{y2} - \mathbf{u}_{y1})n_y + (\mathbf{u}_{z2} - \mathbf{u}_{z1})n_z \right) n_x \\ \mathbf{u}_{y1}^* &= \mathbf{u}_{y1} + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \left((\mathbf{u}_{x2} - \mathbf{u}_{x1})n_x + (\mathbf{u}_{y2} - \mathbf{u}_{y1})n_y + (\mathbf{u}_{z2} - \mathbf{u}_{z1})n_z \right) n_y \quad (1.35) \\ \mathbf{u}_{z1}^* &= \mathbf{u}_{z1} + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \left((\mathbf{u}_{x2} - \mathbf{u}_{x1})n_x + (\mathbf{u}_{y2} - \mathbf{u}_{y1})n_y + (\mathbf{u}_{z2} - \mathbf{u}_{z1})n_z \right) n_z \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{x2}^* &= \mathbf{u}_{x2} - \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \left((\mathbf{u}_{x2} - \mathbf{u}_{x1})n_x + (\mathbf{u}_{y2} - \mathbf{u}_{y1})n_y + (\mathbf{u}_{z2} - \mathbf{u}_{z1})n_z \right) n_x \\ \mathbf{u}_{y2}^* &= \mathbf{u}_{y2} - \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \left((\mathbf{u}_{x2} - \mathbf{u}_{x1})n_x + (\mathbf{u}_{y2} - \mathbf{u}_{y1})n_y + (\mathbf{u}_{z2} - \mathbf{u}_{z1})n_z \right) n_y \quad (1.36) \\ \mathbf{u}_{z2}^* &= \mathbf{u}_{z2} - \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \left((\mathbf{u}_{x2} - \mathbf{u}_{x1})n_x + (\mathbf{u}_{y2} - \mathbf{u}_{y1})n_y + (\mathbf{u}_{z2} - \mathbf{u}_{z1})n_z \right) n_z \end{aligned}$$

Nous introduisons un paramètre de restitution \mathbf{R}_c pour pouvoir également modéliser des chocs inélastiques, traduisant une dissipation d'énergie lors des collisions. Les équations 1.35 et 1.36 sont alors reformulées :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}_{x_1}^* &= \mathbf{u}_{x_1} + \frac{(1 + \mathbf{R}_c)m_2}{m_1 + m_2} \left((\mathbf{u}_{x_2} - \mathbf{u}_{x_1})n_x + (\mathbf{u}_{y_2} - \mathbf{u}_{y_1})n_y + (\mathbf{u}_{z_2} - \mathbf{u}_{z_1})n_z \right) n_x \\
 \mathbf{u}_{y_1}^* &= \mathbf{u}_{y_1} + \frac{(1 + \mathbf{R}_c)m_2}{m_1 + m_2} \left((\mathbf{u}_{x_2} - \mathbf{u}_{x_1})n_x + (\mathbf{u}_{y_2} - \mathbf{u}_{y_1})n_y + (\mathbf{u}_{z_2} - \mathbf{u}_{z_1})n_z \right) n_y \\
 \mathbf{u}_{z_1}^* &= \mathbf{u}_{z_1} + \frac{(1 + \mathbf{R}_c)m_2}{m_1 + m_2} \left((\mathbf{u}_{x_2} - \mathbf{u}_{x_1})n_x + (\mathbf{u}_{y_2} - \mathbf{u}_{y_1})n_y + (\mathbf{u}_{z_2} - \mathbf{u}_{z_1})n_z \right) n_z
 \end{aligned} \tag{1.37}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}_{x_2}^* &= \mathbf{u}_{x_2} - \frac{(1 + \mathbf{R}_c)m_1}{m_1 + m_2} \left((\mathbf{u}_{x_2} - \mathbf{u}_{x_1})n_x + (\mathbf{u}_{y_2} - \mathbf{u}_{y_1})n_y + (\mathbf{u}_{z_2} - \mathbf{u}_{z_1})n_z \right) n_x \\
 \mathbf{u}_{y_2}^* &= \mathbf{u}_{y_2} - \frac{(1 + \mathbf{R}_c)m_1}{m_1 + m_2} \left((\mathbf{u}_{x_2} - \mathbf{u}_{x_1})n_x + (\mathbf{u}_{y_2} - \mathbf{u}_{y_1})n_y + (\mathbf{u}_{z_2} - \mathbf{u}_{z_1})n_z \right) n_y \\
 \mathbf{u}_{z_2}^* &= \mathbf{u}_{z_2} - \frac{(1 + \mathbf{R}_c)m_1}{m_1 + m_2} \left((\mathbf{u}_{x_2} - \mathbf{u}_{x_1})n_x + (\mathbf{u}_{y_2} - \mathbf{u}_{y_1})n_y + (\mathbf{u}_{z_2} - \mathbf{u}_{z_1})n_z \right) n_z
 \end{aligned} \tag{1.38}$$

Avec $0 \leq \mathbf{R}_c \leq 1$. Pour $\mathbf{R}_c = 1$, on retrouve la formulation du choc élastique.

Pour des pas de temps relativement petits, et donc des amplitudes de déplacement faibles des bulles, des problèmes numériques liés aux recouvrement d'une même cellule par deux interfaces peuvent survenir. Sur une cellule donnée, lorsque deux interfaces sont très proches, une erreur locale du calcul de la fraction volumique totale (définie comme la somme des contributions de fractions volumiques associée à chaque bulle) peut causer $C > 1$. On note également que le critère de détection de collision entre les deux bulles peut ne pas être vérifié malgré la réalisation d'une collision, à cause d'une estimation de la distance séparant les inclusions proche du zéro machine. De plus, la méthode numérique générale ne permet pas de traiter la présence de deux interfaces dans une même cellule. La re-discrétisation des différents opérateurs différentiels est basée sur l'hypothèse de la présence d'une seule bulle sur une maille. La présence d'autres bulles dans une même maille supposerait a priori l'utilisation des grandeurs géométriques propres à chaque inclusion (fraction volumique, fractions surfaciques, normale à chaque interface) dans la formulation des bilans. Nous souhaitons éviter ces configurations de quasi-contact entre les bulles ou plus largement les recouvrements de cellules par deux interfaces; nous complétons notre méthode de collision en introduisant un rayon artificiel $r_c = K \times r$. Pendant la simulation, les bulles sont ainsi maintenues à une distance minimale arbitrairement choisie (Figure 1.33).

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

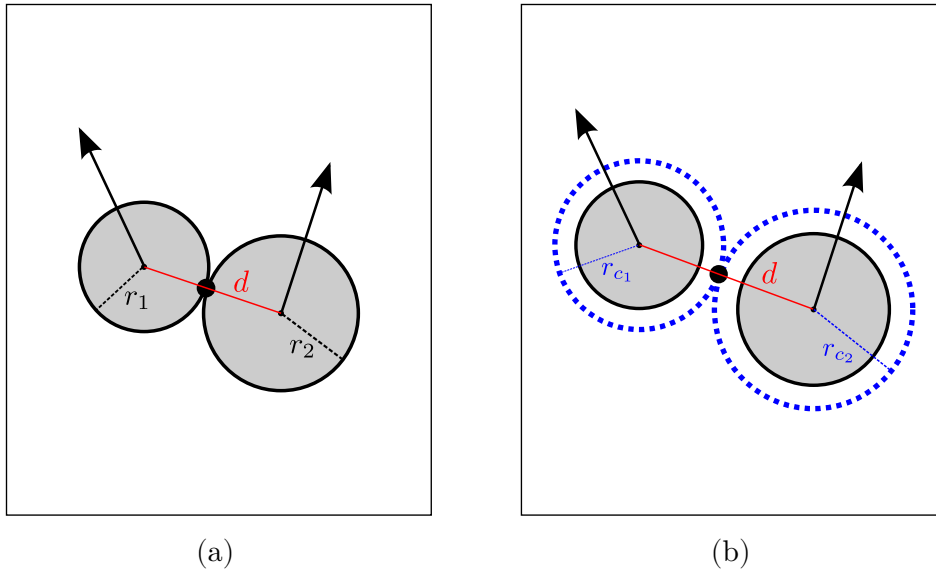


FIGURE 1.33: Bulles en collision ; (a) collision classique ; (b) augmentation artificielle du rayon.

La distance de détection de collision s'écrit donc $d = \|\overrightarrow{\mathbf{x}_{b_i} \mathbf{x}_{b_j}}\| - (r_{c1} + r_{c2}) = \|\overrightarrow{\mathbf{x}_{b_i} \mathbf{x}_{b_j}}\| - K(r_1 + r_2)$.

1.3.3.2 Traitement des collisions bulles-parois

En vue des applications finales, des conditions limites de type paroi ont été intégrées à la méthode générale. Nous nous restreignons aux configurations décrites dans la Figure 1.34, dans lesquelles les parois ne s'opposent pas à l'ascension des bulles.

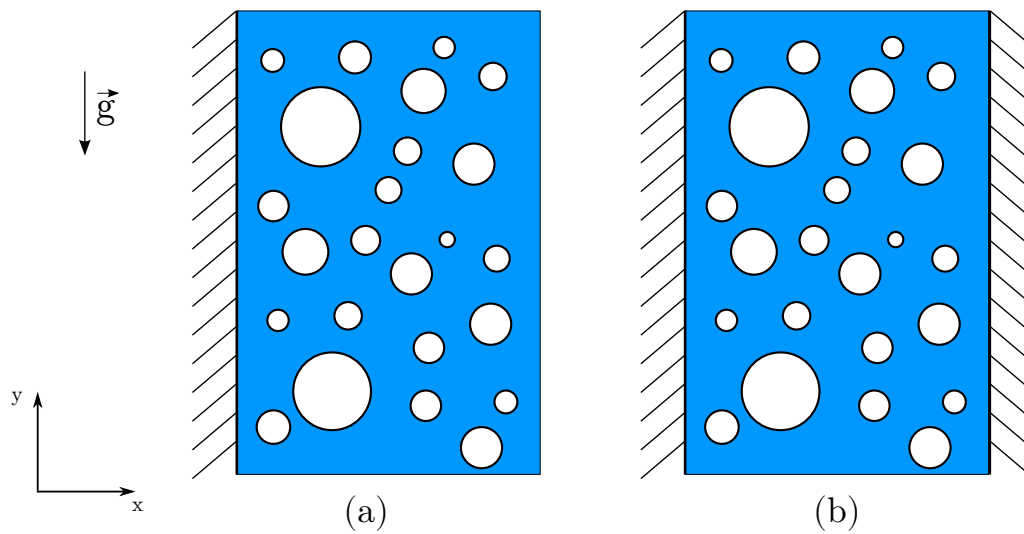


FIGURE 1.34: Configurations étudiées : (a) paroi latérale gauche ; (b) parois sur les bords latéraux.

Dans ces configurations de simulation, il est nécessaire de préciser le comportement d'une bulle interagissant avec ce type de condition limite. La contrainte principale est que l'interface liquide-bulles ne doit pas sortir du domaine de calcul. De plus, idéalement, la modélisation de l'interaction entre une bulle et la paroi doit correspondre à la « physique » de ce genre de phénomène. En particulier, deux mécanismes sont à l'œuvre : les effets de rebond sur la paroi, et la formation d'une couche de lubrification entre la bulle et la paroi. Par simplification, seuls les effets de rebond sont pris en compte.

L'interaction se décompose en trois étapes : l'approche, le contact à la paroi et le rebond (Figure 1.35). Le mouvement des bulles d'air subissant une collision avec une paroi rigide a été l'objet d'études expérimentales [Zenit and Legendre (2009)]. La donnée d'intérêt de l'étude, un paramètre dit coefficient de restitution ϵ , se définit comme :

$$\epsilon = -\frac{U_{depart}}{U_0}$$

avec U_{depart} la vitesse à laquelle la bulle perd le contact à la paroi, et U_0 la vitesse mesurée avant l'interaction avec la paroi. En particulier, l'étude établit que la dépendance du coefficient de restitution ϵ au nombre de Stokes est très différente si l'on considère des sphères rigides (au lieu des bulles). La complexité de ce mécanisme de rebond est donc considérable, dépendant à la fois de la nature des inclusions, mais également des propriétés du fluide et de la vitesse d'approche. De plus, la déformation des bulles pendant leur contact à la paroi est un mécanisme essentiel conditionnant la valeur de ϵ . Dans le cadre du développement de la méthode générale, du fait de l'hypothèse d'indéformabilité des bulles, il paraît peu cohérent d'utiliser un modèle de rebond établi dans un cadre d'étude différent de celui défini pour nos simulations. Nous optons pour un modèle de collision « simple » de type choc élastique ($\epsilon = 1$). Ce choix s'avère plus en accord avec notre stratégie de simulation consistant à approcher la dynamique complexe des bulles sphériques faiblement déformées par la dynamique des sphères rigides.

Considérons une bulle de vitesse $\mathbf{u}_b = (\mathbf{u}_{bx}, \mathbf{u}_{by})$ approchant la paroi verticale, une collision étant détectée entre les temps t_1 et $t_2 = t_1 + \Delta t$, le temps auquel se produit le contact est noté t_c avec $t_1 < t_c < t_2$. La collision à la paroi verticale conduit à une inversion (Figure 1.35) de la composante horizontale (normale à la paroi) de vitesse.

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

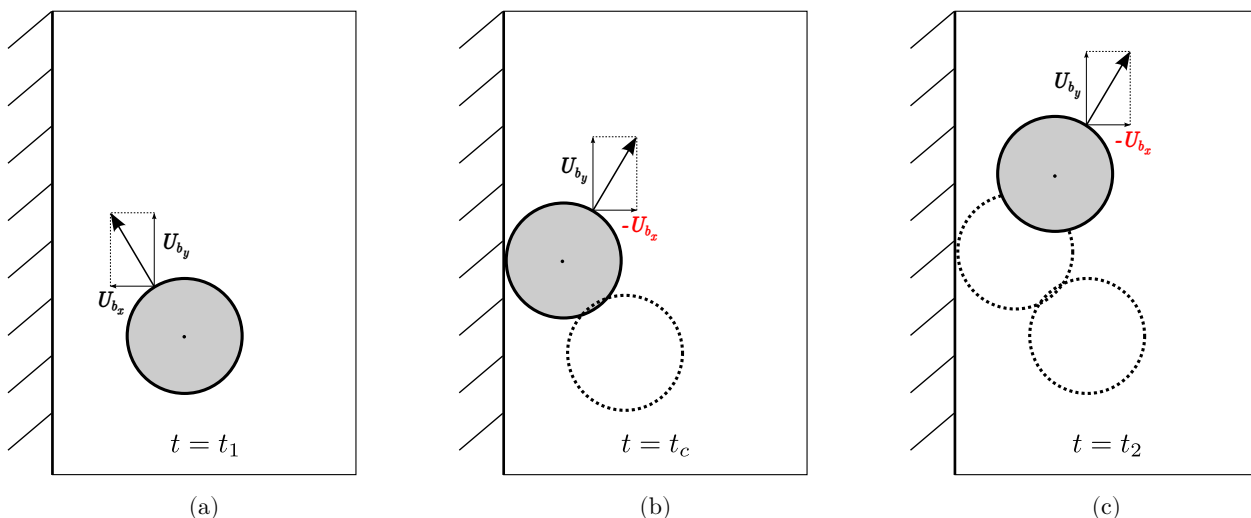


FIGURE 1.35: (a) phase d'approche de la bulle, (b) contact à la paroi, (c) rebond à la paroi.

Le mécanisme approche-contact-rebond correspond au déroulement des étapes suivantes :

- o de t_1 à t_c , la bulle approche de la paroi à une vitesse $\mathbf{u}_b = (\mathbf{u}_{bx}, \mathbf{u}_{by})$;
- o à t_c , contact bulle-paroi, $\mathbf{u}_b = (-\mathbf{u}_{bx}, \mathbf{u}_{by})$;
- o de t_c à t_2 rebond de la bulle qui s'éloigne de la paroi à une vitesse $\mathbf{u}_b = (-\mathbf{u}_{bx}, \mathbf{u}_{by})$

1.3.4 Algorithme collisionnel général

Une problématique récurrente survient lors de l'écriture de l'algorithme collisionnel pour la réalisation de simulations d'écoulements à particules. Cette interrogation concerne l'approche à privilégier afin de procéder à une détection rigoureuse et efficace des collisions lors des simulations. [Wunsch (2009)] rappelle la classification des approches existantes divisées selon deux catégories.

La première catégorie englobe les algorithmes régis par le temps (algorithmes Time Driven). Selon cette approche, chaque inclusion est déplacée pour un même pas de temps Δt . Une fois les inclusions déplacées, un critère de recouvrement est appliqué à chaque paire de bulles pour détecter les éventuelles collisions. Les chocs sont ainsi traités à posteriori. A titre d'exemple, [Hopkins and Louge (1991)] font usage de ce type d'algorithme pour la simulation d'écoulements granulaires bidimensionnels pour des disques inélastiques lisses (sans phénomène de friction). Ces algorithmes, bien que simples à implémenter et relativement peu complexes, présentent des inconvénients majeurs. Une première contrainte impose que chaque inclusion connait au plus une collision par pas de temps, critère n'étant pas toujours garanti en pratique. De plus, ces approches n'assurent pas rigoureusement le traitement de toutes les collisions pour des pas de temps élevés : deux parti-

Chapitre 1. Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles

cules peuvent avoir été en collision pendant l'itération mais ne pas se retrouver en recouvrement à l'issue du pas de temps. Une autre contrainte apparaît alors sur le pas de temps, la formulation de cette contrainte, dépendant de la physique du problème, peut s'avérer fastidieuse.

La deuxième approche est basée sur une gestion intégrale des évènements (algorithme Event Driven) selon leur ordre de succession chronologique. Cette méthode consiste à traiter tous les événements liés à une collision (choc entre bulle, choc aux limites du domaine...) comme une séquence d'évènements ordonnée dans le temps. Le premier usage de cet algorithme [Alder and Wainwrigth (1959)] concernait la simulation d'écoulements granulaires pour un nombre modéré de particules (≤ 500). La première formalisation de l'organisation d'un algorithme Event Driven y est établie. Elle correspond au processus récursif suivant :

1. A partir d'un temps de référence t_r , on détermine le temps t_c correspondant au prochain événement collisionnel.
2. Avancée partielle des particules jusqu'à $t = t_c$.
3. Traitement de la collision.
4. Mise à jour du temps de référence $t_r = t_c$, Retour à 1.

Dans le cadre du développement de notre méthode générale, notre choix se porte sur l'approche Event Driven. Bien que d'écriture plus complexe que les algorithmes Time Driven, cette approche exclut le recouvrement des bulles à l'issue d'une itération (les recouvrements n'étant pas admis par la méthode générale), et permet de traiter l'intégralité des événements collisionnels. Ces deux propriétés essentielles en font notre candidat de choix.

Notre choix est principalement déterminé par un besoin d'efficacité et de rigueur dans le traitement des collisions, la méthode générale n'admettant pas certaines configurations (recouvrement), celles-ci pouvant mettre fin à la simulation de manière anticipée. Le coût en ressources de calcul est donc une problématique secondaire au regard de nos besoins. Afin de déterminer le temps t_c de la prochaine collision lors de l'étape 1., chaque paire $(i, j) \in [1 \dots N_b]^2$ de bulle est parcourue pour déterminer une éventuelle collision. Cette instruction est répétée à chacune des N_c collisions. Le coût estimé de l'algorithme est d'ordre $\mathcal{O}(N_c N_b^2)$. D'après [Sigurgeirsson et al. (2001)], l'optimum d'efficacité de l'algorithme est atteint pour $N_b < 100$, et même pour des systèmes plus larges en terme de particules, une chute des performances de l'algorithme n'est pas établie. Les simulations réalisées dans cette thèse font intervenir un nombre de particules relativement modéré ($N_b < 1000$), nous situant à une limite acceptable de l'utilisation de cet algorithme. Pour des applications impliquant un nombre de particules plus conséquent, des méthodes d'optimisation des coûts en ressources de calcul ont été développées. Les pistes d'amélioration suivent deux axes majeurs. [Alder and Wainwrigth (1959)] ont établi que la plupart des collisions réalisées à l'étape 1.

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

pour deux itérations consécutives seront similaires. Dans un temps proche, il est improbable qu'une collision ait une incidence sur d'autres collisions mettant en scène des particules relativement éloignées. La sauvegarde des temps de collision permettrait une amélioration certaine des temps de calcul. Seuls les temps de collision des couples de particules concernées seront recalculés. La deuxième piste d'amélioration de l'algorithme concerne l'introduction d'une grille de détection des collisions [Alder and Wainwrigth (1959); Sigurgeirsson et al. (2001)]. La probabilité d'une collision est plus importante pour des particules proches. Le principe d'utilisation de la grille est la subdivision d'un domaine de calcul cubique en plusieurs sous-domaines cubiques de petite taille, appelés cellules de détection, chaque particule étant associée de manière unique à une cellule de détection donnée. Le critère de détection est évalué uniquement pour des particules contenues dans des cellules voisines. La mise en œuvre de ces deux améliorations [Sigurgeirsson et al. (2001)] permet une réduction du coût en ressource de calcul de l'ordre $\mathcal{O}(N_c N_b^2)$ à $\mathcal{O}(N_c \log(N_b))$.

Nous présentons dans la section suivante l'algorithme général de type « Event Driven » développé dans NEPTUNE_CFD pour traiter les aspects collisionnels de la méthode Lagrangienne. Nous rappelons que les chocs se traduisent par un changement de vitesse des bulles déterminé par la nature de la collision, bulle-bulle (1.3.3.1) ou bulle-paroi (voir 1.3.3.2).

1.3.4.1 Algorithme collisionnel général

Nous cherchons à déterminer la mise à jour des positions des centres de masse des bulles $\{\mathbf{x}_{\mathbf{b}_1}^{n+1}, \mathbf{x}_{\mathbf{b}_2}^{n+1}, \dots, \mathbf{x}_{\mathbf{b}_N}^{n+1}\}$ à un temps de simulation $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ à partir de leurs positions $\{\mathbf{x}_{\mathbf{b}_1}^n, \mathbf{x}_{\mathbf{b}_2}^n, \dots, \mathbf{x}_{\mathbf{b}_N}^n\}$ au temps t_n . L'avancée des bulles est déterminée par la relation 2.7.4 à partir des vitesses $\{\mathbf{u}_{\mathbf{b}_1}^{n+1}, \mathbf{u}_{\mathbf{b}_2}^{n+1}, \dots, \mathbf{u}_{\mathbf{b}_N}^{n+1}\}$.

Lors de l'avancée de la bulle, on dénombre trois cas de figures : une collision avec une autre bulle, une collision avec une paroi, une avancée « simple » sans collision ; chacun de ces événements pouvant être réalisé plusieurs fois pour une même bulle entre t_n et t_{n+1} . L'algorithme collisionnel proposé est basé sur une disjonction de l'ensemble des événements intervenant entre t_n et t_{n+1} selon leur ordre de succession chronologique. Notons N_c le nombre d'événements réalisés entre t_n et t_{n+1} liés à une collision. Nous introduisons les temps $t_{c_1}, t_{c_2}, \dots, t_{c_{N_c}}$ correspondant à ces réalisations et les pas de temps associés $\Delta t_1, \Delta t_2, \dots, \Delta t_{N_c+1}$ tels que :

$$\begin{aligned} \Delta t_{c_1} &= t_{c_1} - t_n, \\ \Delta t_{N_c+1} &= t_{n+1} - t_{c_{N_c}}, \\ \Delta t_{c_i} &= t_{c_i} - t_{c_{i-1}} \quad 2 \leq i \leq N_c \end{aligned} \tag{1.39}$$

L'algorithme collisionnel comprend les étapes suivantes :

- Étape 1** Détection du temps t_{c_k} de la prochaine collision.
- Étape 2** Avancée partielle des bulles à t_{c_k} .
- Étape 3** Traitement de la prochaine collision.
- Étape 4** Retour à l'étape 1. En cas d'absence de collision, fin de l'algorithme.

Nous présentons ci-dessous la suite d'instructions composant l'algorithme collisionnel.

Étape 1 : détection de la prochaine collision. Nous cherchons à déterminer t_{c_k} avec $k \in [1 \dots N_c]$ correspondant à la réalisation de la prochaine collision bulle-bulle ou bulle-paroi à partir d'un temps de référence initialisé à t_n . Le calcul de t_{c_k} (t_{c_1} à l'initialisation) diffère selon le type de collision :

Collision bulle-bulle (Figure 1.41). Nous déterminons pour chaque paire de bulles d'indices $(i, j) \in [1 \dots N_b]^2$ et de rayons (r_i, r_j) le temps $t_{c_{ij}}^*$ à la collision.

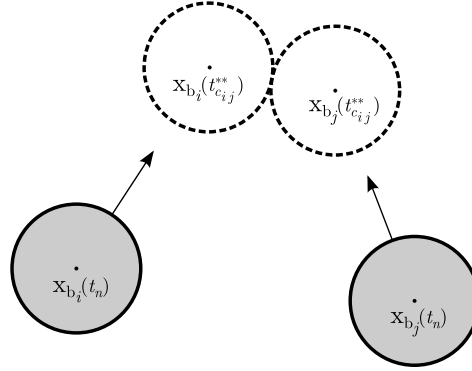


FIGURE 1.36: Avancée d'une paire de bulle (i, j) jusqu'à la collision.

La position de contact entre les bulles (Figure 1.36) se traduit par la relation :

$$\|\mathbf{x}_{b_j}(t_{c_{ij}}^*) - \mathbf{x}_{b_i}(t_{c_{ij}}^*)\| - (r_i + r_j) = 0 \quad (1.40)$$

D'après la relation d'advection 2.7.4 :

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{b_i}(t_{c_{ij}}^*) &= \mathbf{x}_{b_i}^n + t_{c_{ij}}^* \mathbf{u}_{b_i}^{n+1} \\ \mathbf{x}_{b_j}(t_{c_{ij}}^*) &= \mathbf{x}_{b_j}^n + t_{c_{ij}}^* \mathbf{u}_{b_j}^{n+1} \end{aligned} \quad (1.41)$$

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

Nous introduisons $\Delta \mathbf{x}_{\mathbf{b}}^n = \mathbf{x}_{\mathbf{b}_j}^n - \mathbf{x}_{\mathbf{b}_i}^n$ et $\Delta \mathbf{u}_{\mathbf{b}}^{n+1} = \mathbf{u}_{\mathbf{b}_j}^{n+1} - \mathbf{u}_{\mathbf{b}_i}^{n+1}$. La relation 1.40 portée au carré et formulée en utilisant les expressions des positions $\mathbf{x}_{\mathbf{b}_i}(t_{c_{ij}}^*)$ et $\mathbf{x}_{\mathbf{b}_j}(t_{c_{ij}}^*)$ de 1.41 donne l'équation quadratique suivante :

$$t_{c_{ij}}^{*2} \|\Delta \mathbf{u}_{\mathbf{b}}^{n+1}\|^2 + 2t_{c_{ij}}^* \Delta \mathbf{x}_{\mathbf{b}}^n \Delta \mathbf{u}_{\mathbf{b}}^{n+1} + \|\Delta \mathbf{x}_{\mathbf{b}}^n\|^2 v - (r_i + r_j)^2 = 0. \quad (1.42)$$

Le temps de collision $t_{c_{ij}}^*$ correspond au minimum des deux solutions positives de l'équation 1.43 s'il satisfait également $t_{c_{ij}}^* \in [t_n, t_{n+1}]$. Si l'équation n'admet pas de solution réelle positive, la paire de bulles d'indice (i, j) n'admet pas de collision entre t_n et t_{n+1} et $t_{c_{ij}}^* = +\infty$.

Le temps correspondant à la réalisation de la prochaine collision bulle-bulle noté t_c^{**} est défini comme le minimum des temps de collision calculés pour chaque paire de bulle :

$$t_c^* = \min(t_{c_{ij}}^*)_{(i,j) \in [1 \dots N]^2} \quad (1.43)$$

Conditions limites de périodicité. En présence de conditions limites de périodicité, le critère de détection d'une collision entre deux bulles doit être réévalué. Lorsque le centre de masse d'une bulle franchit ce type de condition limite, elle est réintroduite dans le domaine selon la relation de périodicité associée, et dans ce cas le critère de détection établi précédemment reste valable; cependant lorsque l'interface d'une bulle franchit la limite du domaine sans que son centre de masse la franchisse, elle peut entrer en collision avec une autre bulle qui ne se situe pas dans son voisinage proche (Figure 1.37). Afin de traiter toutes les collisions, il est nécessaire d'être en mesure de détecter ce type de configuration.

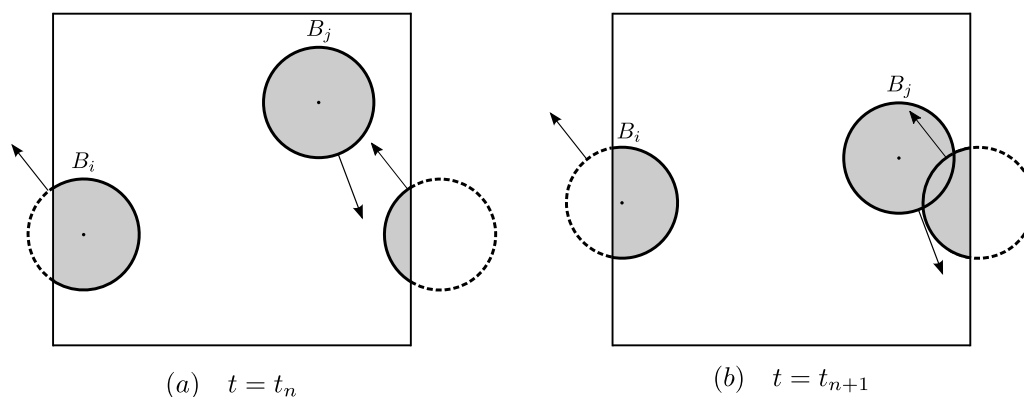


FIGURE 1.37: Le critère de collision ne permet pas de détecter le recouvrement des bulles à $t = t_{n+1}$ à partir de leurs positions à $t = t_n$.

Chapitre 1. Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles

Pour une paire de bulles d'indices $(i, j) \in [1 \dots N_b]^2$, nous cherchons à déterminer la position effective de la bulle B_i établie par translation de périodicité. Notons B'_i la bulle occupant cette position $\mathbf{x}_{b'_i} = (x'_{b_i}, y'_{b_i})$. La bulle B'_i occupe une des positions suivantes :

$$\mathbf{x}_{b'_i} = (x'_{b_i}, y'_{b_i}) = \begin{cases} (x_{b_i} \pm L_x, & y_{b_i} \pm L_y) \\ (x_{b_i} \pm L_x, & y_{b_i}) \\ (x_{b_i}, & y_{b_i} \pm L_y) \end{cases}$$

La position effective B'_i est établie en déterminant la distance $d_{i'j}$ minimale séparant les centres des bulles B_i et B'_i (Figure 1.38). Une fois la position $\mathbf{x}_{b'_i}$ déterminée, le critère de collision 1.43 est appliqué aux bulles B_i et B_j .

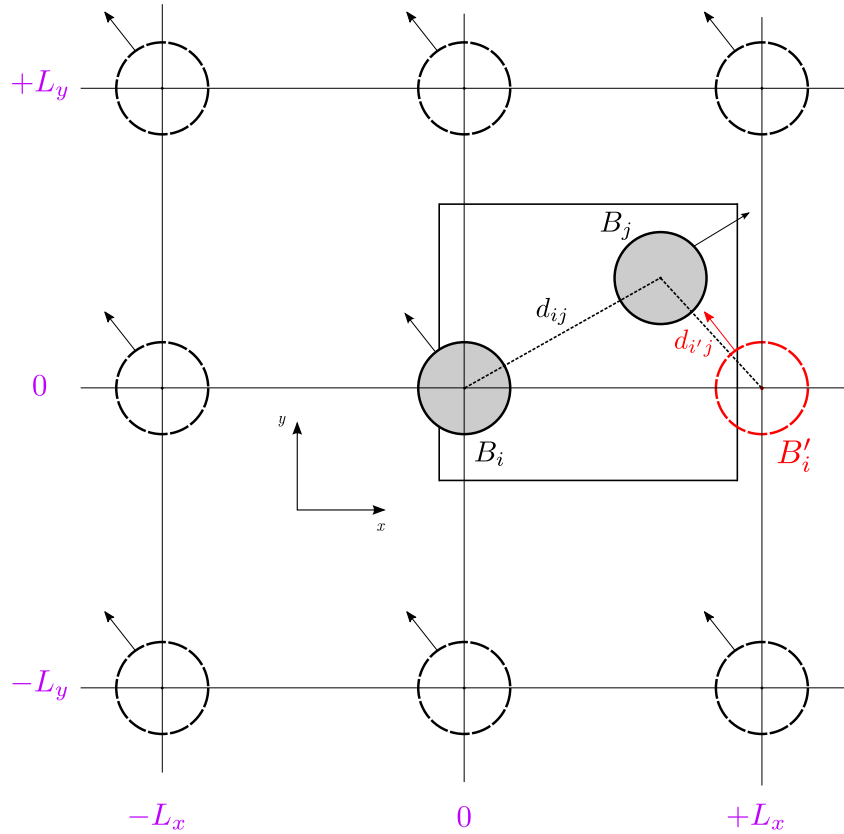


FIGURE 1.38: La position de la bulle en rouge minimise la distance $d_{i'j}$.

Collision bulle-paroi (Figure 1.40). Nous déterminons pour chaque bulle d'indice $i \in [1 \dots N_b]$ et de rayon r_i le temps $t_{c_i}^{**}$ à la collision à la paroi (Figure 1.39).

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

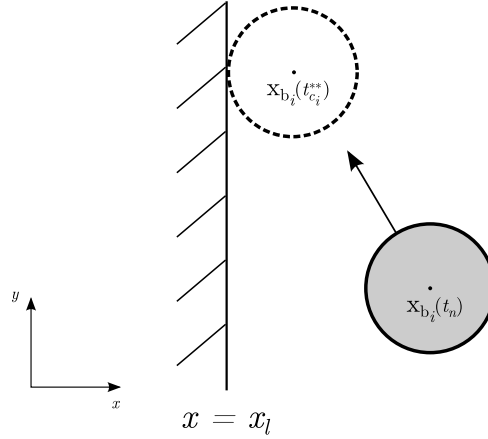


FIGURE 1.39: Avancée d'une bulle jusqu'à sa position de contact à la paroi.

La position $\mathbf{x}_{b_i}^n(t_{c_i}^{**})$ vérifie à la collision :

$$\mathbf{x}_{b_i}(t_{c_i}^{**}) - r_i = x_l \quad (1.44)$$

D'après la méthode d'advection 2.7.4 :

$$\mathbf{x}_{b_i}(t_{c_i}^{**}) = \mathbf{x}_{b_i}^n + t_{c_i}^{**} \mathbf{u}_{b_i}^{n+1}$$

Finalemment :

$$t_{c_i}^{**} = \begin{cases} \frac{x_l - \mathbf{x}_{b_i}^n + r_i}{\mathbf{u}_{b_i}^{n+1}} & \text{si } t_n \leq \frac{x_l - \mathbf{x}_{b_i}^n + r_i}{\mathbf{u}_{b_i}^{n+1}} \leq t_{n+1} \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.45)$$

Le temps correspondant à la réalisation de la première collision bulle-paroi noté t_c^{**} est défini comme le minimum des temps de collisions calculés pour chaque bulle :

$$t_c^{**} = \min(t_{c_i}^{**})_{i \in [1..N]} \quad (1.46)$$

Étape 2 : avancée partielle des bulles. Le temps t_{c_k} est défini comme le minimum des temps des collisions bulle-bulle et bulle-paroi :

$$t_{c_k} = \min(t_c^*, t_c^{**})$$

Si une collision à été détectée à l'étape 1 ($t_{c_k} < \infty$), chaque bulle d'indice i est advectée dans le domaine pour un pas de temps Δt_{c_k} :

$$\mathbf{x}_{b_i}(t_{c_k}) = \mathbf{x}_{b_i}(t_n) + \Delta t_{c_k} \mathbf{u}_{b_i}^{n+1}$$

Sinon il n'y a plus de collision à traiter entre t_{c_k} et t_{n+1} , les bulles sont advectées jusqu'au temps final de l'itération :

$$\mathbf{x}_{b_i}(t_{n+1}) = \mathbf{x}_{b_i}(t_n) + \Delta t_{N_c+1} \mathbf{u}_{b_i}^{n+1}$$

Étape 3 : traitement de la collision. Selon le type de collision à l'œuvre, on procède à la mise à jour des vitesses des bulles en collision dans le cas d'une collision bulle-bulle (section 1.3.3.1) ou de la vitesse de la bulle dans le cas d'une collision bulle-paroi (section 1.3.3.2).

Étape 4 : retour à l'Étape 1. Le temps de référence est actualisé par le temps actuel de collision t_{c_k} . L'algorithme est répété jusqu'à $t_{c_k} = t_{N_c}$, c'est-à-dire tant qu'une collision est détectée à l'étape 1 entre le temps de référence t_{c_k} et t_{n+1} .

Les figures 1.40 et 1.41 illustrent le déroulement des Étapes 1 à 4 pour une configuration avec $N_b = 5$ et $N_c = 2$.

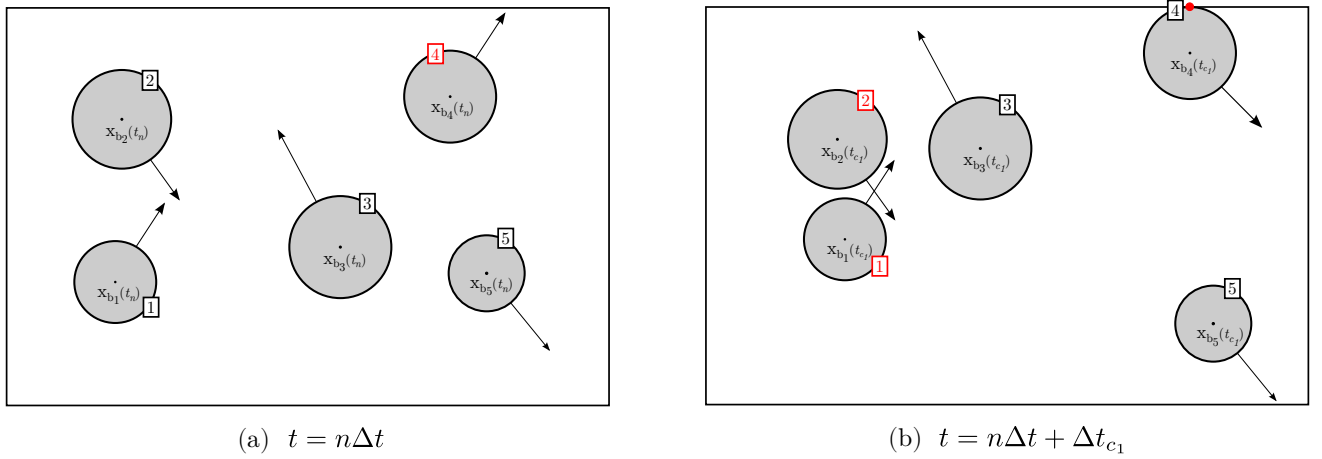


FIGURE 1.40: (a) La prochaine collision correspondant à collision de la bulle 4 avec la paroi à t_{c_1} est détectée. (b) Avancée des bulles pour un pas de temps Δt_{c_1} . La prochaine collision correspond à la collision des bulles 1 et 2 à t_{c_2} .

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

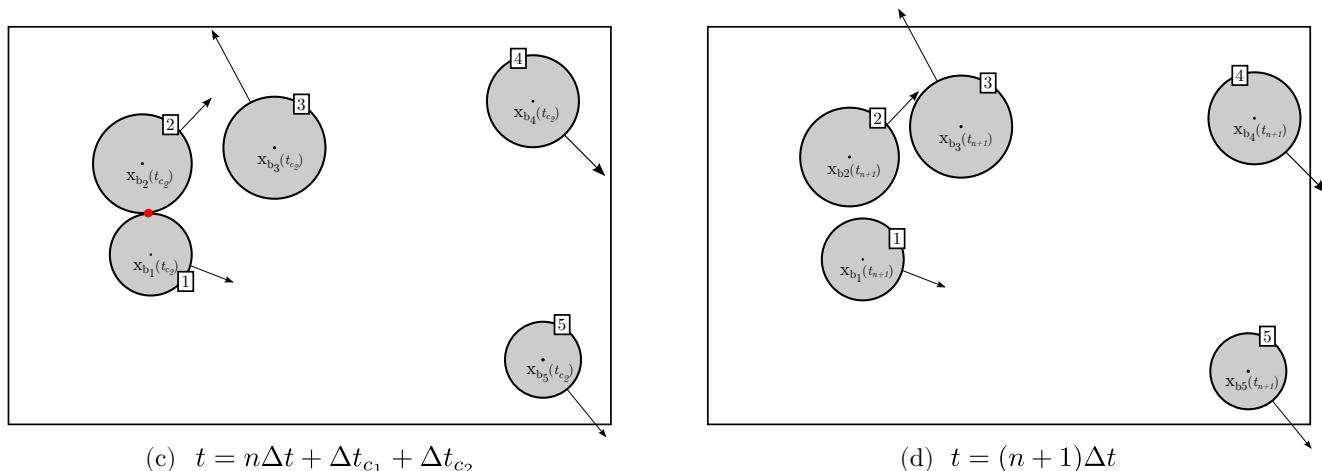


FIGURE 1.41: (c) Avancée d'une bulle pour un pas de temps Δt_{c_2} . Pas de collision détectée entre t_{c_2} et t_{n+1} . (d) Avancée des bulles pour un pas de temps $\Delta t_{Nc+1} = t_{n+1} - t_{Nc}$.

1.3.4.2 Parallélisme du suivi Lagrangien

L'écriture de l'algorithme collisionnel général est principalement conditionné par l'organisation du parallélisme de la méthode. Nous précisons les choix d'implémentation concernant le parallélisme du suivi des bulles dans le domaine de calcul.

Considérons une structure de N_b bulles de centres de masse $\{\mathbf{x}_{b_1}, \mathbf{x}_{b_2}, \dots, \mathbf{x}_{b_{N_b}}\}$. Le domaine de calcul initial Ω est divisé en N_P sous domaines avec $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \dots \cup \Omega_{N_P}$; pour N_P cœurs (ou unités de calcul) disponibles.

Idéalement, pour une implémentation optimisée de la méthode, chaque processus d'indice $p \in [1 \dots N_P]$ associé à chaque sous-domaine Ω_p réalise exclusivement le suivi des bulles dont il contient le centre de masse (Figure 1.42). Chaque processus ne connaît que les informations d'intérêt (position, vitesse, rayon(s) et masse) des bulles appartenant au sous-domaine associé. Le traitement des collisions selon cette approche requiert un échange conséquent d'informations entre les processus afin de détecter les éventuelles collisions. De plus, une bulle peut être sujette à plusieurs collisions lors d'une même itération en temps, renforçant considérablement la complexité de l'implémentation d'une telle approche.

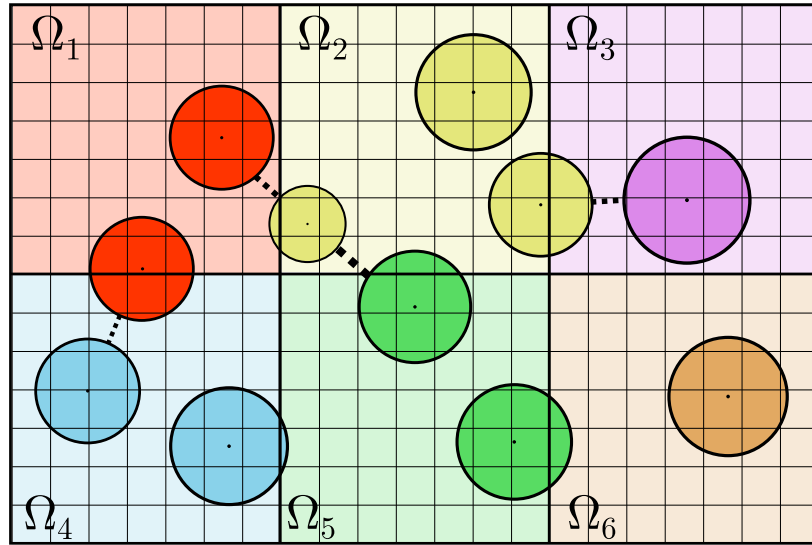


FIGURE 1.42: Représentation de $N_b = 6$ bulles, $N_P = 6$. Chaque bulle est uniquement définie sur le domaine à laquelle elle appartient. Les liaisons en pointillés désignent les collisions potentielles entre bulles associées à deux processus différents.

Une autre approche plus simple repose sur l'utilisation d'une structure contenant les informations d'intérêt (position, vitesse, rayon(s) et masse) répliquée sur chaque processus. Chaque inclusion est « vue » par chaque sous-domaine (Figure 1.43). En comparaison avec l'approche évoquée précédemment, cette méthode engendre un coût en espace mémoire supplémentaire, chaque processus disposant des informations relatives aux N_b bulles. Nous privilégions cette approche car elle simplifie la détection et donc le traitement des collisions. Un processus donné « voit » chaque bulle dans l'écoulement.

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

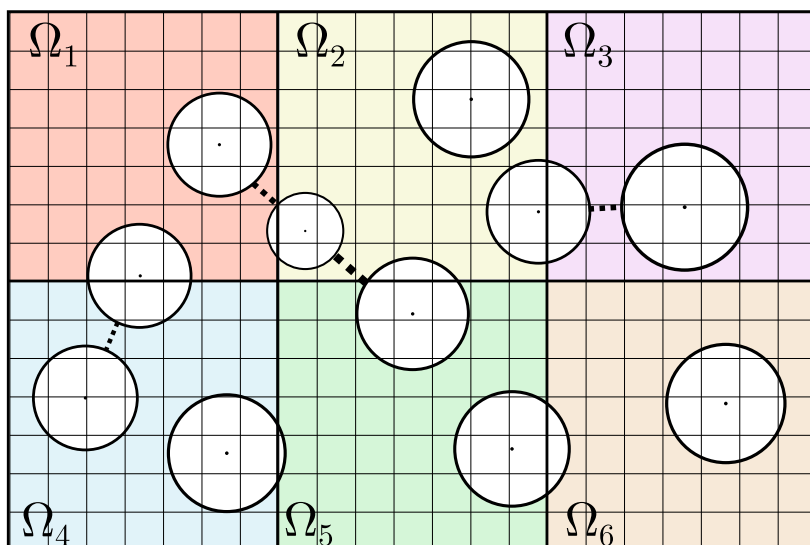


FIGURE 1.43: Représentation de $N_b = 6$ bulles, $N_P = 6$. Chaque processus « voit » l'intégralité des bulles du domaine Ω . Les liaisons en pointillés désignent les collisions potentielles entre bulles associées à deux processus différents.

1.3.4.3 Validation de l'algorithme collisionnel général

Nous cherchons à valider l'implémentation de l'algorithme collisionnel général. L'étude porte exclusivement sur les aspects lagrangiens de la méthode ; la résolution du champ fluide n'est donc pas d'intérêt pour cette étude et les effets du fluide sur les inclusions ne sont pas considérés. En conséquence le processus de validation décrit par la suite est établi pour tout maillage cartésien de dimension de maille choisie arbitrairement (toutefois choisie de manière à éviter des problèmes numériques évidents). Nous réalisons la simulation du mouvement d'une population de bulles affectées de vitesses aléatoires dans un domaine cubique. Les conditions limites aux frontières du domaine sont de type rebond aux parois ou de type périodicité. Par ces simulations, nous souhaitons retrouver des résultats et tendances statistiques établis par la théorie.

Nous introduisons les suites de variables aléatoires $(X_n)_{n \geq 1}$, $(Y_n)_{n \geq 1}$ et $(Z_n)_{n \geq 1}$ qui associent à événement collisionnel ω (collision bulle-bulle ou bulle-paroi) les composantes respectives du vecteur vitesse d'une bulle à l'issue de la collision :

$$X_n : \omega \rightarrow X_n(\omega)$$

$$Y_n : \omega \rightarrow Y_n(\omega)$$

$$Z_n : \omega \rightarrow Z_n(\omega)$$

Considérons également les sommes suivantes :

Chapitre 1. Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles

$$S_{n,x} = X_1 + X_2 + \dots + X_n$$

$$S_{n,y} = Y_1 + Y_2 + \dots + Y_n$$

$$S_{n,z} = Z_1 + Z_2 + \dots + Z_n$$

La théorie établit que pour des chocs élastiques entre particules, les trois sommes $S_{n,x}$, $S_{n,y}$ et $S_{n,z}$ suivent la même distribution Gaussienne. Après un nombre de collisions conséquent, la quantité de mouvement totale tend à être distribuée de manière uniforme parmi les particules. Cette propriété est valable pour un domaine « ouvert », i.e. dans lequel les particules n'interagissent pas avec les limites du domaine, configuration que nous assimilons à un domaine totalement périodique. En présence de parois, les sommes suivent également une distribution gaussienne identique si les interactions bulle-paroi sont déterminées par un modèle de collision élastique. Nous cherchons à établir ces comportements par nos simulations lagrangiennes, pour deux types de conditions limites du domaine différentes.

Nous présentons la configuration initiale de simulation à $t = 0$ commune aux deux cas. Considérons une population mono-disperse de $N_b = 64$ bulles sphériques de rayon $r = 8\text{mm}$ réparties de façon homogène dans un domaine cubique (Figure 1.44) de dimensions $1\text{cm} \times 1\text{cm} \times 1\text{cm}$. Les vitesses de bulle $\{\mathbf{u}_{\mathbf{b}_1}^0, \mathbf{u}_{\mathbf{b}_2}^0, \dots, \mathbf{u}_{\mathbf{b}_{N_b}}^0\}$ sont initialisées à des vitesses aléatoires comprises entre les bornes :

$$-3 \leq \mathbf{u}_{\mathbf{b}_x}^0 \leq +3 \text{ mm.s}^{-1}$$

$$-3 \leq \mathbf{u}_{\mathbf{b}_y}^0 \leq +3 \text{ mm.s}^{-1}$$

$$-3 \leq \mathbf{u}_{\mathbf{b}_z}^0 \leq +3 \text{ mm.s}^{-1}$$

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

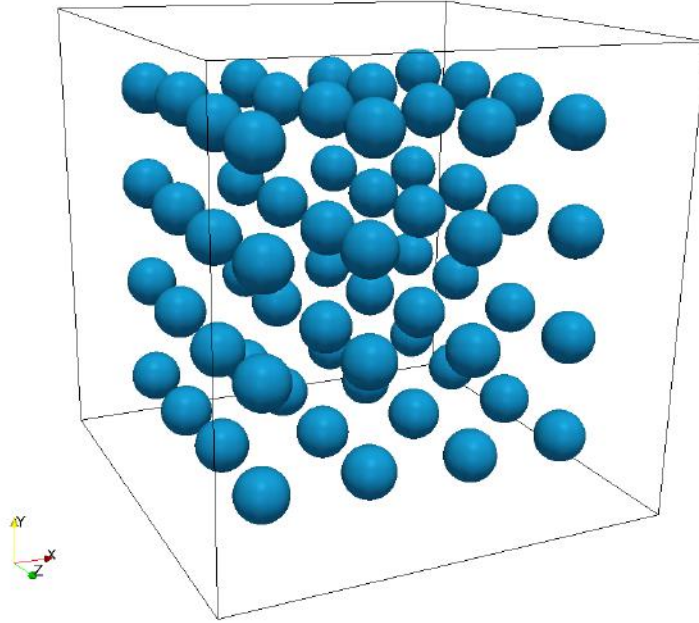


FIGURE 1.44: Configuration initiale de simulation : répartition homogène des inclusions, $N_b = 64$.

L'analyse des distributions obtenues par ces simulations nous fournit le couple (μ, σ) . Nous comparons ces distributions aux densités de probabilité de la loi normale donnée par :

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

L'objet de cette comparaison est d'établir si la loi normale $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$ est une bonne approximation de la loi de chaque somme $S_{n,x}$, $S_{n,y}$ et $S_{n,z}$ lorsque n est grand.

Cas 1 : conditions aux limites périodiques selon \vec{e}_x , \vec{e}_y et \vec{e}_z .

La première simulation est réalisée dans un domaine périodique (Figure 1.45), les bulles sortant du domaine étant réintroduites selon une relation de périodicité établie entre les faces parallèles du cube.

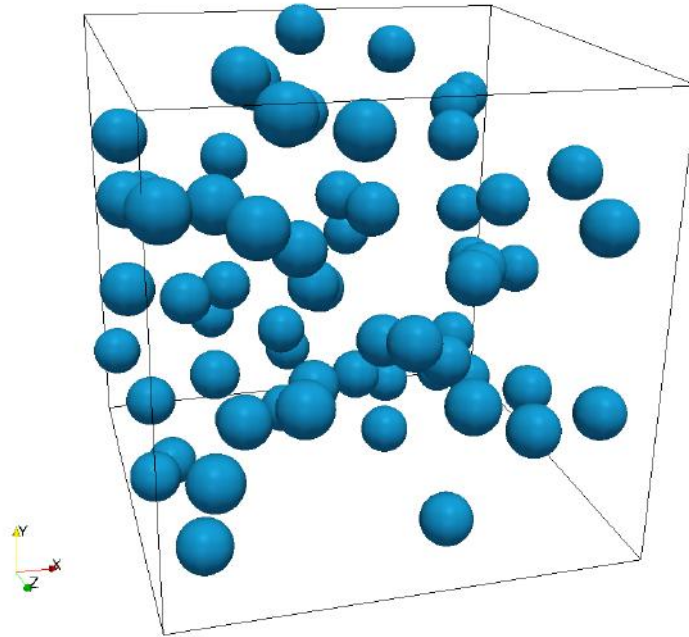


FIGURE 1.45: Disposition des bulles dans le domaine périodique à $N_c = 1250000$.

Le pas de temps choisi est $\Delta t = 0.035s$, ce qui correspond en moyenne à la réalisation de trois collisions par itération. La fonctionnalité de traitement chronologique des collisions de l'algorithme Event Driven est donc effective. La simulation est arrêtée lorsque le nombre de collisions atteint $N_c = 1250000$, garantissant la convergence des suites aléatoires vers des lois normales. Les distributions des composantes du vecteur vitesse sont présentées sur la Figure 1.46.

1.3. Suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement

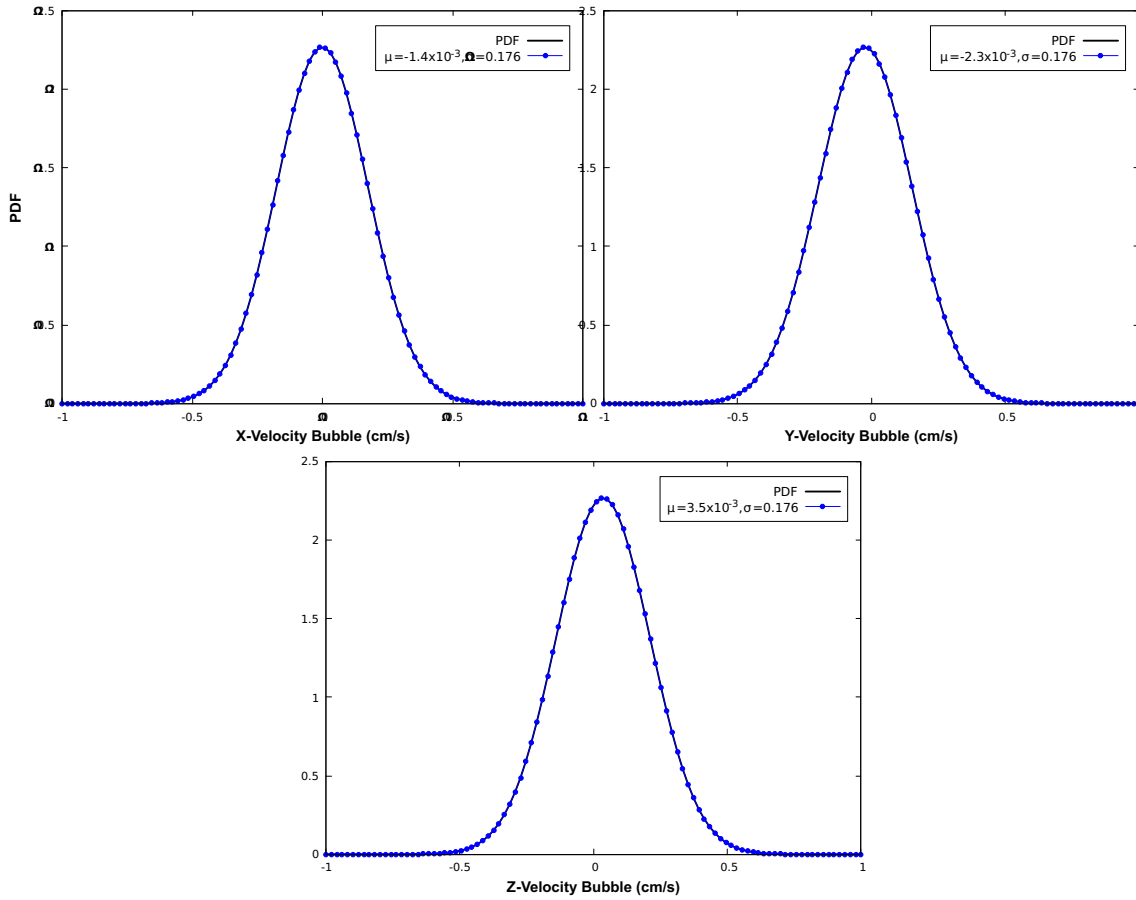


FIGURE 1.46: Comparaison des distributions des composantes des vitesses de bulle et leur loi normale associée.

Les résultats obtenus montrent une correspondance entre les distributions des sommes $S_{n,x}$, $S_{n,y}$ et $S_{n,z}$ associées aux composantes de vitesse et les gaussiennes établies à partir des couples (μ, σ) . Les variables aléatoires $S_{n,x}$, $S_{n,y}$ et $S_{n,z}$ convergent en loi vers des variables aléatoires de lois normales :

$$\begin{aligned} S_{n,x} &\sim \mathcal{N}(\mu = -1.4 \times 10^{-3}, \sigma = 0.176) \\ S_{n,y} &\sim \mathcal{N}(\mu = -2.3 \times 10^{-3}, \sigma = 0.176) \\ S_{n,z} &\sim \mathcal{N}(\mu = 3.5 \times 10^{-3}, \sigma = 0.176) \end{aligned}$$

L'absence de direction privilégiée de déplacement des particules induit que les gaussiennes sont en théorie centrées en 0. Les distributions gaussiennes obtenues possèdent le même écart type $\sigma = 0.176$, et malgré un léger décentrement (dû à la précision de la machine) nous pouvons affirmer qu'elles sont toutes trois identiques.

Cas 2 : conditions aux limites périodiques selon \vec{e}_x , et \vec{e}_z , condition de paroi selon \vec{e}_y .

Chapitre 1. Caractérisation de l'interface liquide-bulle et suivi Lagrangien des bulles

Cette deuxième simulation est réalisée dans un domaine périodique selon les directions \vec{e}_x et \vec{e}_z . Les deux faces du cube restantes sont affectées d'une condition de type paroi (Figure 1.47); l'interaction des particules avec cette paroi correspond à un choc élastique.

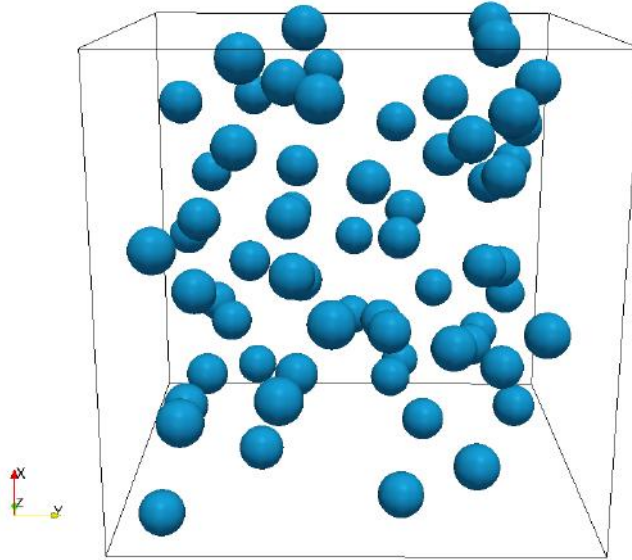


FIGURE 1.47: Disposition des bulles dans le domaine périodique à $N_c = 1250000$.

Le pas de temps choisi est plus grand que celui de la simulation précédente $\Delta t = 0.070s$, les collisions bulles-paroi étant moins fréquentes que les collisions bulle-bulle. Nous cherchons en effet à imposer un traitement par l'algorithme de collisions multiples et de nature différente pendant une même itération en temps. Pour une itération, on dénombre ainsi 6 collisions bulle-bulle pour une collision bulle-paroi. Les statistiques sont extraites lorsque $N_c = 1300000$, les distributions des composantes du vecteur vitesse sont présentées sur la Figure 1.48.

1.4. Conclusions

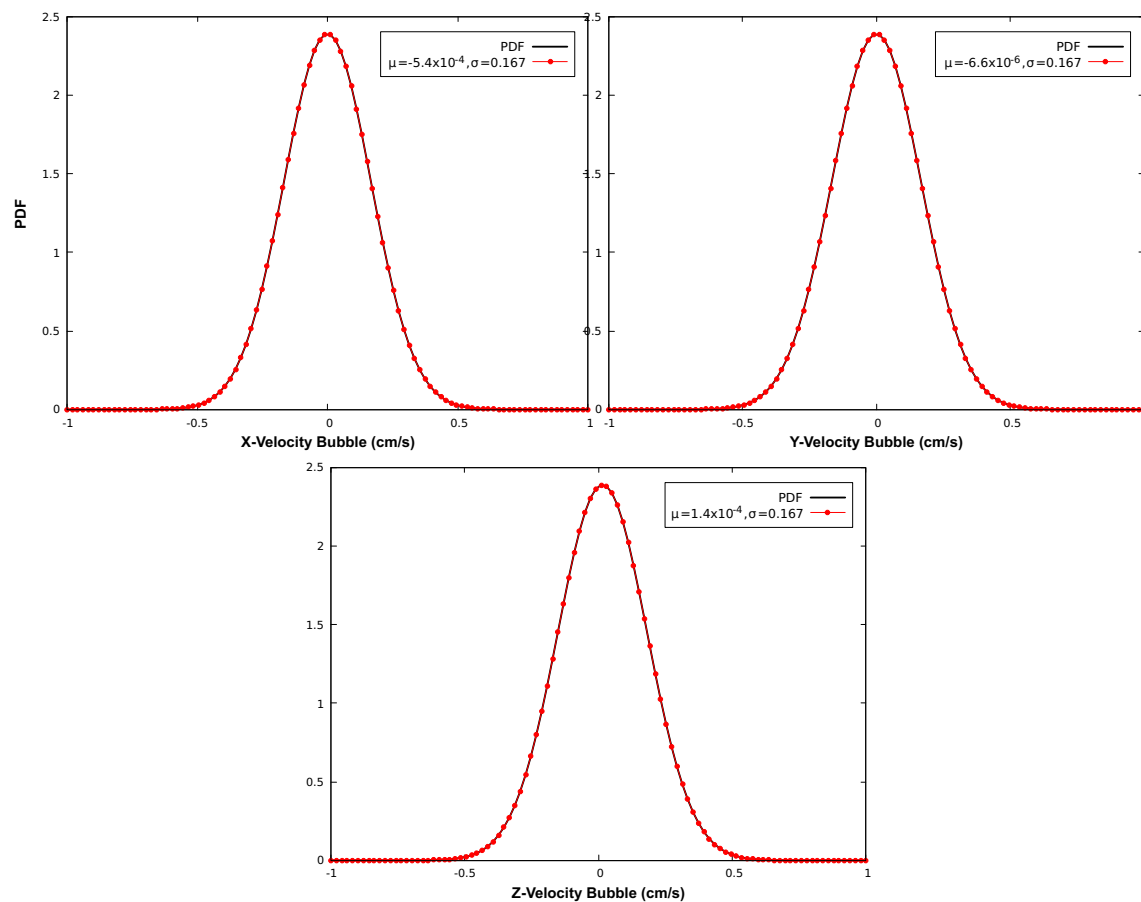


FIGURE 1.48: Comparaison des distributions des composantes des vitesses de bulle et leur loi normale associée.

Les conclusions sont les mêmes que pour la simulation réalisée en totale périodicité. Les variables aléatoires $S_{n,x}$, $S_{n,y}$ et $S_{n,z}$ convergent en loi vers des variables aléatoires de lois normales :

$$S_{n,x} \sim \mathcal{N}(\mu = -5.4 \times 10^{-4}, \sigma = 0.167)$$

$$S_{n,y} \sim \mathcal{N}(\mu = -6.6 \times 10^{-3}, \sigma = 0.167)$$

$$S_{n,z} \sim \mathcal{N}(\mu = 1.4 \times 10^{-3}, \sigma = 0.167)$$

De nouveau, nous pouvons affirmer que les lois normales obtenues sont toutes trois identiques.

1.4 Conclusions

Ce chapitre apporte deux éléments essentiels à la construction de la méthode numérique générale permettant à terme des simulations complètes d'écoulements

liquide-bulles.

Le premier élément concerne les aspects de suivi et de représentation de l'interface sur une grille régulière eulérienne. Le calcul des trois grandeurs locales d'intérêt y est détaillé : fractions volumiques, fractions surfaciques, normales à l'interface. Ces grandeurs géométriques font office de pré-requis indispensable à des développements plus « numériques » de la méthode, comme l'imposition de la condition de glissement à l'interface par une rediscrétisation des opérateurs différentiels des équations de Navier-Stokes, contenu développé dans le chapitre suivant.

Le deuxième élément concerne les aspects lagrangiens de la méthode générale. La conception d'une méthode complète oblige à préciser les modalités de déplacement des inclusions, ainsi que leurs interactions éventuelles, soit entre elles, soit avec les conditions limites choisies. Dans un souci relatif de simplicité, une méthode de choc élastique est choisie pour traiter les collisions entre particules. Les interactions des inclusions avec des conditions limites de type paroi ou de type périodique ont été détaillées. Un algorithme Event-Driven a également été présenté, permettant un traitement intégral et ordonné dans le temps des phénomènes collisionnels entre deux itérations successives lors des simulations. La convergence des vitesses de particules vers des lois normales a été établie, pour les deux types de conditions limites retenues dans le cadre de cette thèse.

Chapitre 2

Résolution des équations de Navier-Stokes dans NEPTUNE_CFD et formulation du couplage liquide-bulles

Contents

2.1	Introduction	68
2.2	Formulation initiale des équations de conservation	68
2.3	Formulation du problème de pénalisation	69
2.4	Position des variables	70
2.5	Le solveur de NEPTUNE CFD	71
2.6	Conditions limites	72
2.6.1	Conditions d'entrée/sortie	72
2.6.2	Conditions de symétrie	72
2.6.3	Conditions de périodicité	72
2.7	Condition de glissement à l'interface	72
2.7.1	Formalisme de discrétisation	72
2.7.2	Formulation de la divergence	74
2.7.3	Calcul des flux de masse	75
2.7.4	Calcul des flux visqueux	77
2.7.5	Correction du gradient de pression	79
2.8	Modifications supplémentaires apportées à la méthode générale	80
2.8.1	Régularisation de la pression dans le domaine pénalisé	80
2.8.2	Régularisation des champs de vitesse et de pression en présence de conditions aux limites périodiques	81
2.9	Formulation du couplage liquide-bulles	82
2.9.1	Position du problème	82
2.9.2	<i>Version 1</i> - Version initiale	82
2.9.3	<i>Version 2</i> - Formalisme diphasique	86
2.9.4	Choix de la méthode de couplage	87
2.9.5	Introduction d'une viscosité de pénalisation μ_p	87
2.10	Conclusions	89

2.1 Introduction

Cette section est dédiée à la description de la méthode numérique développée dans NEPTUNE_CFD [Méchitoua et al. 2003] pour la simulation d'écoulements autour d'obstacles sphériques en mouvement dans le fluide. Le code NEPTUNE_CFD est principalement utilisé dans le cadre d'études liées à des applications de sûreté nucléaire telles que le choc thermique pressurisé (Pressurised Thermal Shock, PTS) ou la crise d'ébullition (Departure from Nuclear Boiling, DNB). Ces problématiques font intervenir des écoulements multiphasiques, principalement des configurations diphasiques de type eau-vapeur. Bien que formulé dans un cadre multiphasique général, le code permet également l'étude d'écoulements monophasiques.

Dans un premier temps nous rappelons la formulation initiale et dans un cadre général les équations de conservation pour un fluide visqueux, incompressible avec présence d'un terme source. Afin de tenir compte de la présence de bulles dans le domaine de calcul, la formulation initiale de ces équations est ainsi modifiée, le nouveau formalisme ainsi établi est décrit comme « le problème pénalisé ». Le positionnement des variables d'usage dans le code NEPTUNE_CFD est présenté, ainsi que l'algorithme général de résolution des équations de Navier-Stokes. Nous détaillons également le traitement des conditions limites (périodicité ou symétrie) sur un domaine « simple » de type cubique.

Dans la section suivante, nous détaillons l'ensemble des modifications mises en œuvre dans l'algorithme général sur les différents opérateurs afin d'imposer une condition de glissement à l'interface liquide bulle. Des modifications supplémentaires d'ordre général (non liées à la condition de glissement) apportées à la méthode sont également présentées (régularisation de la pression à l'intérieur des bulles, régularisation des champs en présence de conditions limites de périodicité).

Enfin, une formulation originale du couplage entre l'action du fluide sur les bulles et le mouvement de celles-ci est proposé.

2.2 Formulation initiale des équations de conservation

Les équations sont écrites dans un repère absolu en coordonnées cartésiennes d'après une description eulérienne de l'écoulement pour un fluide incompressible et newtonien. Les deux équations qui régissent les grandeurs à l'étude sont l'équation de conservation de la masse et l'équation de quantité de mouvement.

L'équation de conservation de la masse pour le fluide s'écrit :

2.3. Formulation du problème de pénalisation

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_i) = 0 \quad (2.47)$$

avec α_f , ρ_f , \mathbf{u} , la fraction volumique fluide, la masse volumique du fluide et la vitesse fluide.

Remarque 1. La formulation classique de l'équation de conservation de la masse pour un écoulement monophasique implique $\alpha_f = 1$. La présence de la grandeur α_f dans cette équation est héritée du formalisme diphasique initial employé dans NEPTUNE_CFD. Elle interviendra explicitement dans les schémas numériques (détails dans les sections suivantes), d'où le choix de la faire figurer en tant que grandeur continue dans la relation de divergence.

Remarque 2. La présence éventuelle d'obstacles mobiles dans l'écoulement (assimilés à des bulles) suppose l'introduction d'une deuxième grandeur α_b représentant la fraction volumique de l'obstacle (donc de la bulle) ; ces deux grandeurs sont liées par la relation de consistance $\alpha_f + \alpha_b = 1$.

L'équation de quantité de mouvement pour la phase fluide est présentée sous sa forme conservative :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\alpha_f \tau_{f,ij}) - \alpha_f \frac{\partial P}{\partial x_i} + \mathbf{S}_{f_i} + \rho_f \mathbf{g}_i \quad (2.48)$$

avec P la pression fluide, \mathbf{g} l'accélération due à la gravité, μ_f la viscosité dynamique du fluide et :

- $\tau_{f,ij} = \mu_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathbf{u}_j}{\partial x_i} \right)$ le tenseur des contraintes visqueuses ;
- $\mathbf{S}_f = \mathbf{S}_f(\alpha_f, \mathbf{u}, P)$, terme source de la phase fluide.

Les équations de quantité de mouvement sont résolues dans NEPTUNE_CFD sous leur forme non conservative. Cette forme est obtenue en décomposant le terme non-stationnaire selon l'équation de conservation de la masse.

$$\alpha_f \rho_f \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_i \frac{\partial}{\partial x_j}(\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{f,ij}) - \alpha_f \frac{\partial P}{\partial x_i} + \rho_f \mathbf{g}_i + \mathbf{S}_{f_i} \quad (2.49)$$

2.3 Formulation du problème de pénalisation

Les équations de Navier-Stokes sont désormais formulées sur $\Omega = \Omega_f \cup \Sigma \cup \Omega_p$, Ω_f désignant le domaine fluide, Ω_p le domaine pénalisé et Σ l'interface séparant ces deux domaines (Figure 2.1).

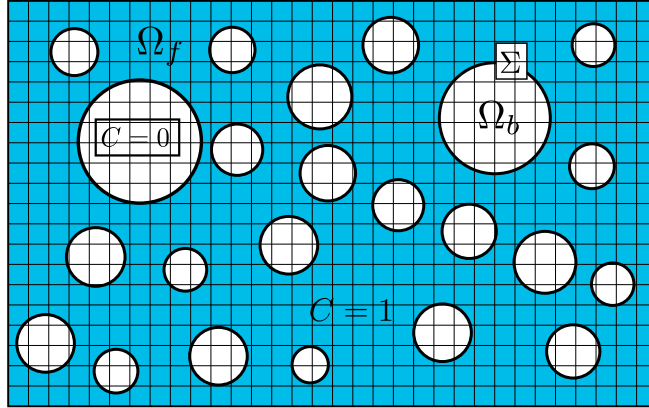


FIGURE 2.1: Définition des sous-domaines de Ω sur la grille Eulérienne et valeurs des fonctions couleurs associées.

L'objet des méthodes de pénalisation [Angot et al. (1999); Caltagirone and Arquies (1984)] est d'imposer un comportement à une inclusion du domaine via un paramètre de perméabilité permettant ce contrôle. La vitesse lagrangienne des bulles \mathbf{u}_b est introduite dans l'équation de quantité de mouvement par pénalisation de la vitesse fluide \mathbf{u} . Le terme de pénalisation apparaissant dans l'équation 2.48 peut être assimilé à un terme source :

$$\mathbf{S}_f(\alpha_f, \mathbf{u}) = (1 - \alpha_f)K(\mathbf{u}_b - \mathbf{u}) = \alpha_b K(\mathbf{u}_b - \mathbf{u}) \quad (2.50)$$

K désignant le paramètre de pénalisation avec $K = +\infty$ dans Ω_b et $K = 0$ dans Ω_f , α_b la fraction volumique de bulle, \mathbf{u}_b la vitesse lagrangienne de bulle et \mathbf{u} la vitesse fluide. Finalement 2.48 s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{f,ij}) - \alpha_f \frac{\partial P}{\partial x_i} + \alpha_b K(\mathbf{u}_{b_i} - \mathbf{u}_i) \quad (2.51)$$

Deux approches de pénalisation sont recensées dans la littérature Angot et al. (1999). La première correspond à une pénalisation de type L_2 et induit une équation de Darcy dans l'objet pénalisé. La seconde correspond à une pénalisation de type H_1 et induit une équation de Brinkman dans l'objet pénalisé. L'approche retenue dans le cadre de cette thèse est une méthode de pénalisation de type L_2 , de ce fait, la formulation « pénalisée » ne concerne pas l'équation de conservation de masse 2.47. La modification du problème initial se résume à l'ajout d'une terme de pénalisation sur la vitesse fluide \mathbf{u} .

2.4 Position des variables

Le choix de la position des variables sur un volume de contrôle Ω_f est étroitement lié aux choix de discrétisations effectués. Ce choix conditionne par exemple l'écriture des conditions aux limites ; la connaissance des variables aux limites du domaine

2.5. Le solveur de NEPTUNE CFD

n'est pas systématiquement assurée. Le nombre de points nécessaire à une interpolation est également conditionné par ce choix. Le code NEPTUNE_CFD a été développé en vue d'utilisation exclusive de maillages colocalisés. Les variables de vitesse fluide \mathbf{u} et de pression fluide P sont positionnées aux centres des mailles.

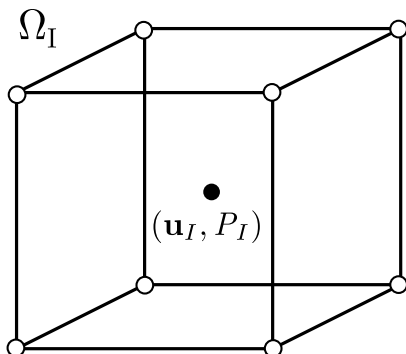


FIGURE 2.2: Positionnement des variables sur un volume de contrôle Ω_I d'un maillage colocalisé.

2.5 Le solveur de NEPTUNE CFD

Cette section est dédiée à la présentation de l'algorithme numérique utilisé dans NEPTUNE_CFD pour résoudre les équations 2.47 par une méthode de volumes finis. On se base sur une méthode à pas fractionnaires qui requiert l'utilisation de solveurs linéaires. Dans le cadre de simulation d'écoulement diphasiques, cet algorithme nommé « alpha-pressure-energy cycle » ($\alpha - P - H$) a pour intérêt d'assurer la conservativité de la masse et de l'énergie et permet un couplage fort des termes de transfert interfacial. Cet algorithme est compressible au sens où il permet des variations de densité en fonction de l'enthalpie et de la pression.

La présentation de l'algorithme est restreinte à notre champ d'intérêt : la discrétisation des termes sources de transfert interfacial et de l'équation d'énergie ne sera pas détaillée. Nous nous centrons sur la méthode numérique permettant de simuler un écoulement monophasique avec un apport à l'écoulement par un terme source.

L'algorithme à pas fractionnaires est de type prédicteur en vitesse et correcteur en pression d'une précision $O(\Delta t)$. L'algorithme ne résout pas directement les équations d'Euler dans leur forme conservative, mais essaie d'atteindre la conservativité de manière itérative. Ce processus itératif permet le couplage de la vitesse, de la pression afin d'atteindre la consistance et assurer une résolution implicite.

2.6 Conditions limites

Plusieurs types de conditions aux limites sont à l'œuvre dans les simulations réalisées dans le cadre de cette thèse : les conditions classiques d'entrée/sortie, des conditions de symétrie imposées à une interface dans le cadre du processus de validation de la méthode ou une condition de périodicité pour la simulation d'écoulement liquide-bulle.

2.6.1 Conditions d'entrée/sortie

La condition d'entrée correspond à une condition de Dirichlet sur la vitesse qui est très fréquemment connue car imposée. Des conditions plus faibles sont imposées en sortie pour les variables du problème, une connaissance de la valeur des grandeurs en sortie du domaine est assez rare. Dans le code NEPTUNE_CFD cette condition est de type Dirichlet et porte sur la pression.

2.6.2 Conditions de symétrie

Dans le cadre de nos simulations, ce type de condition correspond exclusivement au cas où l'axe est le lieu d'une symétrie pour l'écoulement. Les vitesses normales définies sur ces frontières sont nulles.

2.6.3 Conditions de périodicité

Les simulations « complètes » liquide-bulles réalisées dans le cadre de cette thèse font systématiquement intervenir des conditions de périodicité dans la direction d'ascension des bulles. Les bulles sortant du domaine par une frontière sont réinjectées à travers l'autre frontière liée par une relation de périodicité. Généralement, ce choix se justifie lorsque l'écoulement se renferme sur lui-même (canal annulaire), ou lorsqu'une restriction du domaine calcul est adaptée pour la réalisation de l'étude, ce qui est le cas pour les simulations visées dans le cadre de cette thèse. Formellement, pour le champ fluide, la périodicité correspond à une égalité des vitesses aux frontières liées par cette condition.

2.7 Condition de glissement à l'interface

2.7.1 Formalisme de discrétisation

Afin de traiter la présence de bulles en mouvement dans l'écoulement, la discrétisation des différents opérateurs différentiels de Navier-Stokes doit être adaptée. La discrétisation originelle telle qu'implémentée dans NEPTUNE_CFD ne garantit pas la condition de glissement à l'interface. Formellement, la condition de glissement pour une interface immobile s'écrit :

2.7. Condition de glissement à l'interface

$$(a) \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (b) (\tau_f)_T = 0 \quad (2.52)$$

avec \mathbf{n} la normale à l'interface et $(\tau_f)_T$ définie comme la composante tangentielle de la contrainte de cisaillement (τ_f) .

Dans les sections suivantes, nous détaillons la modification des éléments suivants :

- formulation de la divergence (section 2.7.2) ;
- calcul des flux de masse (section 2.7.3) ;
- calcul des flux visqueux (section 2.7.4) ;
- calcul du gradient de pression (section 2.7.5).

L'algorithme général implémenté dans NEPTUNE_CFD est basé sur l'utilisation de schémas de type Volumes Finis colocalisés. Les vitesses et pressions sont localisées au centre des cellules. Nous détaillons dans la figure ci-dessous (Figure 2.3) la position de chaque variable d'intérêt ; nous introduisons les notations suivantes pour un volume de référence Ω_I . Dans un souci de simplicité, la figure est présentée dans une représentation bidimensionnelle.

- $V_I = \{\Omega_W, \Omega_N, \Omega_E, \Omega_S\}$ (directions ouest, nord, est et sud), le voisinage Ω_I ; les centre cellules correspondants $\{x_W, x_N, x_E, x_S\}$;
- les vitesses utilisées pour le calcul des flux de masse $\mathbf{u}_{IP, P \in V_I}$;
- les normales aux faces $n_{IP, P \in V_I}$;
- (\mathbf{u}_I, P_I) la pression et la vitesse dans Ω_I .

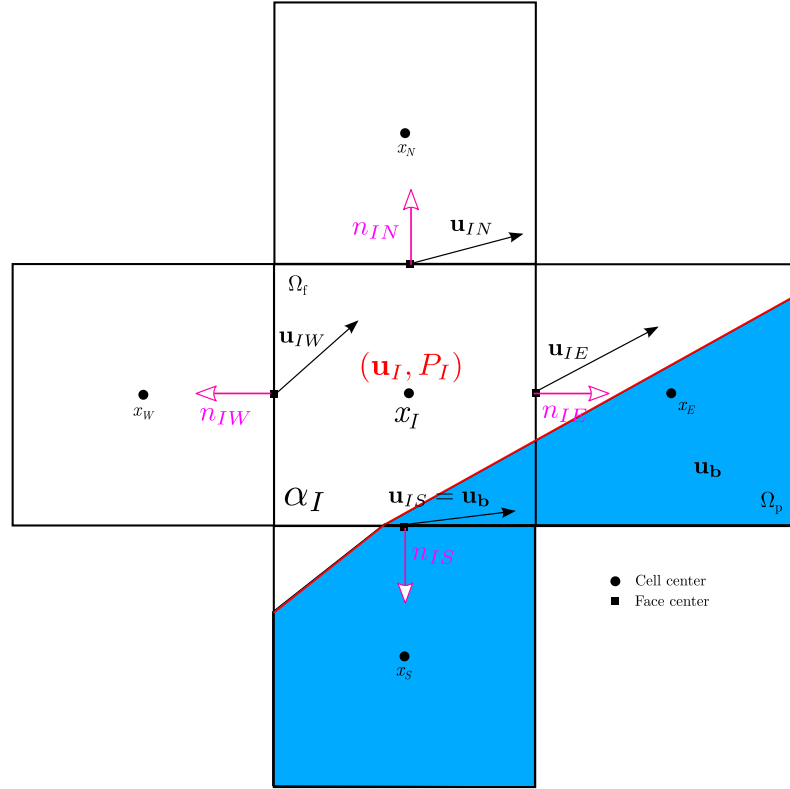


FIGURE 2.3: Localisation des variables sur la cellule Ω_I .

2.7.2 Formulation de la divergence

L'écoulement est supposé incompressible. Dans un volume donné traversé par l'interface, la contrainte de divergence nulle doit être vérifiée. La discrétisation initiale de la divergence dans NEPTUNE_CFD sur une cellule donnée Ω_I est établie comme :

$$\rho_f \Omega_I \frac{\alpha_I^{n+1} - \alpha_I^n}{\Delta t} + \rho_f \sum_{J \in V_I} \alpha_{IJ} \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ} = 0 \quad (2.53)$$

avec $V_I \in V_I$ les fractions surfaciques aux faces. Le terme instationnaire $\rho_f \frac{\alpha_I^{n+1} - \alpha_I^n}{\Delta t}$ est hérité du formalisme multiphasique de NEPTUNE_CFD. La modification concerne le terme $\rho_f \sum_{J \in V_I} \alpha_{IJ} \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ}$; en considérant la réévaluation du volume Ω_I comme décrit dans la (Figure 2.4), la contribution de la vitesse de l'objet pénalisé \mathbf{u}_b est ajoutée au bilan de masse globale. A partir de la relation triviale liant les normales à chaque face, et faisant intervenir les fractions surfaciques, la normale à l'interface est calculée selon la relation :

$$\sum_{J \in V_I} \alpha_{IJ} \mathbf{n}_{IJ} = -\mathbf{n}_p \quad (2.54)$$

L'ajout de la nouvelle contribution au bilan total conduit à la formulation suivante :

2.7. Condition de glissement à l'interface

$$\rho_f \Omega_I \frac{\alpha_I^{n+1} - \alpha_I^n}{\Delta t} + \rho_f \sum_{J \in V_I} \alpha_{IJ} \mathbf{u}_{IJ} \cdot \mathbf{n}_{IJ} + \rho_f \mathbf{u}_{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{n}_p = 0 \quad (2.55)$$

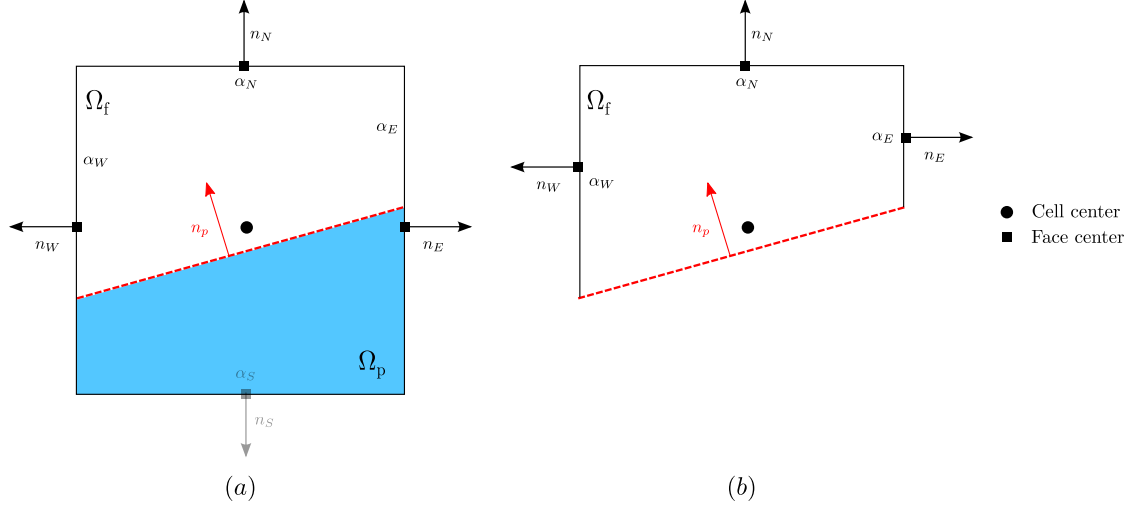


FIGURE 2.4: Passage de (a) à (b) : pseudo-réévaluation de la forme d'une cellule traversée par l'interface conduisant à la nouvelle formulation de la contrainte de divergence.

Ce processus numérique peut-être assimilé à une pseudo-réévaluation des cellules traversées par l'interface par l'ajout d'une nouvelle face définie comme un élément de l'interface liquide-bulle dans la cellule.

2.7.3 Calcul des flux de masse

Nous détaillons dans cette section le méthode de calcul des vitesses aux faces utilisées pour le calcul des flux de masse. La formulation proposée a été établie afin de prendre en compte la présence de l'interface, et également en vue d'être adaptée à la dynamique de l'objet pénalisé en mouvement dans le fluide. Considérons deux cellules Ω_I et Ω_J , Ω_J étant pénalisée. Le centre de la face joignant les deux cellules est noté x_F , dans un souci de simplicité nous introduisons également la notation $\mathbf{u}_F = \mathbf{u}_{IJ}$. La formulation originale héritée de NEPTUNE_CFD établit le calcul de la vitesse à la face selon la relation :

$$\frac{\mathbf{u}_{IJ} - \mathbf{u}_I}{d(x_I, x_F)} = \frac{\mathbf{u}_J - \mathbf{u}_{IJ}}{d(x_J, x_F)}$$

avec $d(x_I, x_F)$ et $d(x_J, x_F)$ étant respectivement les distances entre x_I , x_F et x_J , x_F . En admettant que $d(x_I, x_F) = d(x_J, x_F)$, on a :

$$\mathbf{u}_{IJ} = \frac{\mathbf{u}_I + \mathbf{u}_J}{2}$$

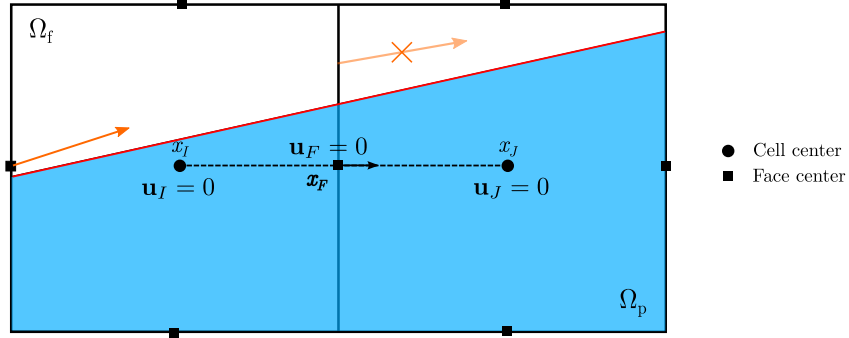


FIGURE 2.5: Étant donné la position du centre de masse x_F dans le domaine pénalisé, une vitesse non-nulle ne peut être calculée à cette position. Une croix orange est située sur le vecteur tel qu'il devrait être défini à la face).

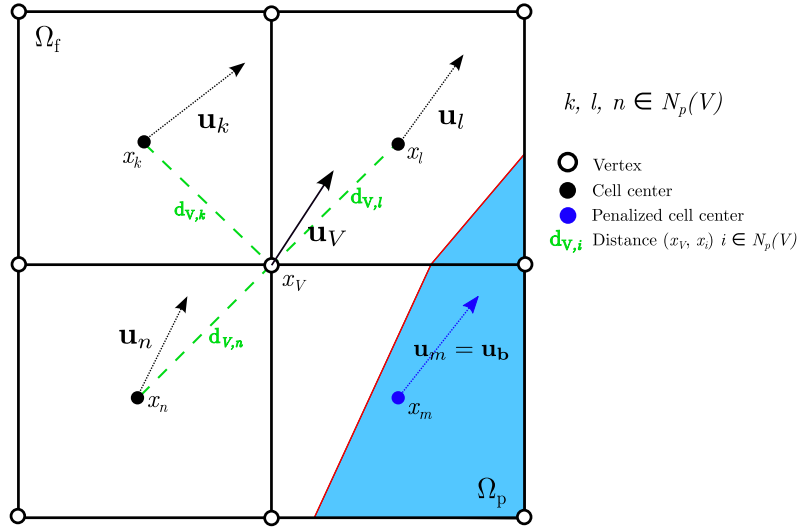


FIGURE 2.6: Calcul de la vitesse au sommet x_V .

Cette formulation n'est plus adaptée lorsque deux cellules partageant une face commune sont pénalisées mais ne sont pas totalement incluses dans le domaine de bulle, entraînant une vitesse à la face nulle, indiquant ainsi « la mauvaise direction » pour le fluide. Pour éviter ce problème, nous introduisons une nouvelle connectivité de type sommet-cellule à NEPTUNE_CFD. Nous introduisons l'ensemble $N_p(V)$ défini comme l'ensemble des cellules voisines non pénalisées d'un sommet donné noté x_V . Les vitesses sont calculées sur chaque sommet x_V (Figure 2.6) comme la vitesse moyenne des cellules voisines non pénalisées :

$$U_V = \frac{\sum_{q \in N_p(V)} d(x_V, x_q) \mathbf{u}_q}{\sum_{q \in N_p(V)} d(x_V, x_q)}$$

Nous introduisons l'ensemble $V_p(F)$ contenant les sommets voisins non-pénalisés sur une face donnée de centre x_F . Les deux configurations existantes, dans une

2.7. Condition de glissement à l'interface

représentation bidimensionnelle sont montrées dans la Figure 2.7. Finalement, le calcul de \mathbf{u}_{IJ} s'écrit simplement comme la somme des vitesses aux nœuds voisins non pénalisés :

$$\mathbf{u}_{IJ} = \frac{1}{|V_p(F)|} \sum_{v \in V_p(F)} \mathbf{u}_v$$

avec $|V_p(F)|$ le nombre d'éléments de l'ensemble $V_p(F)$.

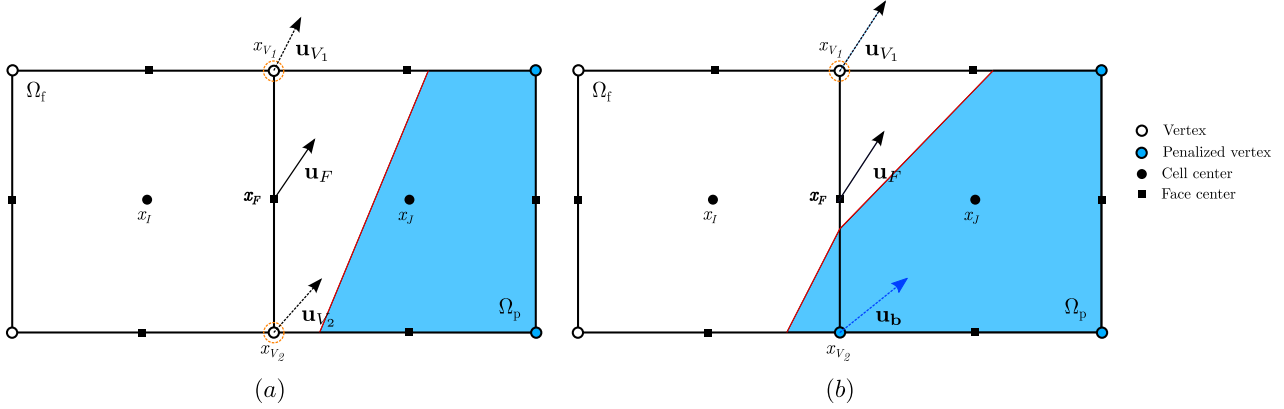


FIGURE 2.7: Calcul des flux de masse à partir des vitesses aux sommets. Les vitesses intervenant dans le calcul sont entourées en orange; (a) deux sommets non-pénalisés, (b) un sommet unique non-pénalisé.

2.7.4 Calcul des flux visqueux

Nous détaillons le calcul des vitesses aux faces utilisées pour le calcul des flux diffusifs entre deux cellules Ω_I and Ω_J , dont une des deux est pénalisée (cellule Ω_J). La cellule Ω_J est traversée par l'interface; à partir des fractions surfaciques nous rappelons que la normale à l'interface est déterminée par (2.54). Ainsi le vecteur tangent à l'interface est trivialement obtenu. Le calcul dans sa formulation initiale dans NEPTUNE_CFD des vitesses de diffusion aux faces notées $\mathbf{u}_{D,IJ}$ est le suivant :

$$\mathbf{u}_{D,IJ} = \mu_I \frac{\mathbf{u}_J - \mathbf{u}_I}{d(x_I, x_J)}$$

avec $d(x_I, x_J)$ la distance entre les centres des cellules. Cette formulation ne permet pas de traiter la présence de l'interface, et la condition de glissement n'est pas assurée à l'interface.

Nous introduisons \mathbf{u}_Σ , définie comme la vitesse à l'interface, calculée à partir des deux contributions suivantes :

- la projection de la vitesse fluide \mathbf{u}_J sur Σ correspondant à la composante tangentielle $(\mathbf{u}_J)_t$;
- la contribution normale de vitesse de la cellule \mathbf{u}_J du fait du déplacement normal de l'interface, $(\mathbf{u}_J)_n$.

La vitesse à l'interface s'écrit donc comme la somme de ces deux contributions :

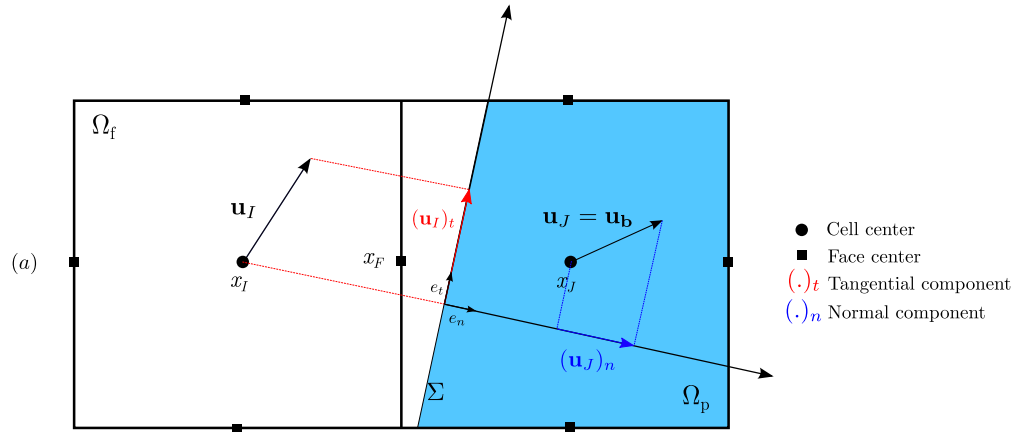
$$\mathbf{u}_\Sigma = (\mathbf{u}_I)_t + (\mathbf{u}_J)_n$$

Au lieu d'utiliser la vitesse de la cellule \mathbf{u}_J , nous proposons une méthode basée sur l'utilisation de \mathbf{u}_Σ , signifiant que la condition de glissement est traitée implicitement (Figure 2.8).

Finalement :

$$\mathbf{u}_{D,IJ} = \mu_I \frac{\mathbf{u}_\Sigma - \mathbf{u}_I}{d(x_I, \Sigma)}$$

avec $d(x_I, \Sigma)$ la distance entre x_I et l'interface Σ calculée à partir de la représentation analytique de Σ .



2.7. Condition de glissement à l'interface

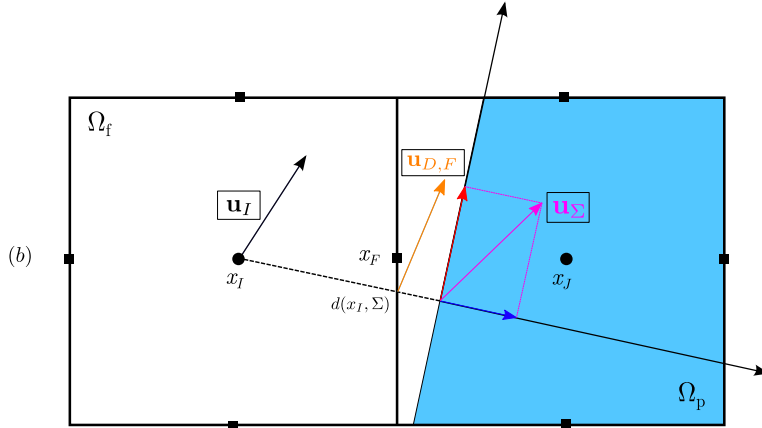


FIGURE 2.8: Calcul de la vitesse de diffusion entre les cellules Ω_I et Ω_J .

(a) La vitesse tangentielle à l'interface (rouge) est obtenue par projection de la vitesse fluide sur l'interface Σ , le déplacement normal de l'interface (bleu) est donné par la vitesse de la cellule pénalisée.

(b) La vitesse à l'interface \mathbf{u}_Σ (magenta) est ensuite calculée à partir de ces composantes ; la vitesse à la face $\mathbf{u}_{D,IJ}$ (orange) est ensuite calculée à partir de \mathbf{u}_I et \mathbf{u}_Σ .

2.7.5 Correction du gradient de pression

Initialement, dans NEPTUNE_CFD, l'intégrale du gradient de pression est calculée sur un volume de contrôle Ω_I comme la somme des pressions définies aux faces multipliées par les vecteurs surfaces.

$$\int_{\Omega_I} \nabla P d\Omega = \sum_{J \in V_I} P_{IJ} n_{IJ}$$

Pour des conditions de type glissement à l'interface, on impose une condition de Neumann homogène sur la pression. Afin d'assurer un gradient nul dans la direction orthogonale à l'interface, l'approximation consiste à imposer la pression à l'interface égale à la pression au centre de la maille P_I . Pour cela, on introduit une face supplémentaire (5ème face en 2D, 7ème face en 3D) qui représente l'interface entre les deux domaines, comme illustré sur la Figure 2.9.

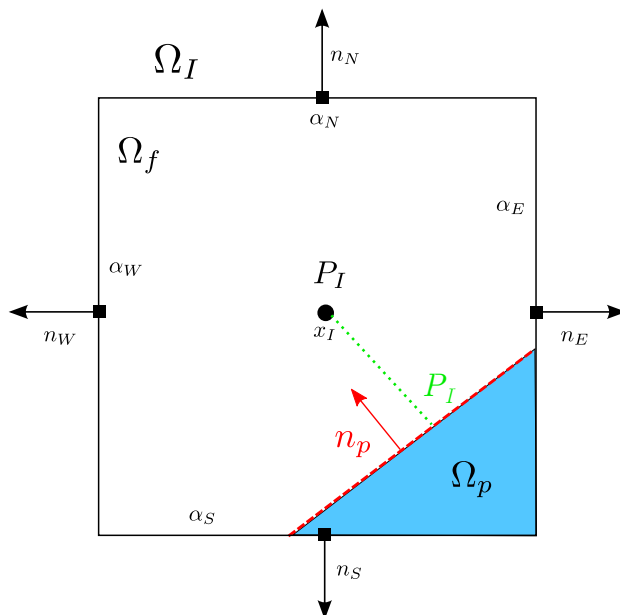


FIGURE 2.9: Reconstruction du gradient de pression sur la maille fluide I.

On rappelle que $\alpha_{IJ}, J \in \mathcal{V}_I$ est la fraction surfacique fluide de la face joignant les mailles I et J. Finalement, l'intégrale du gradient de pression reconstruit s'écrit :

$$\int_{\Omega_I} \nabla P d\Omega = \sum_{J \in \mathcal{V}_I} P_{IJ} \alpha_{IJ} n_{IJ} + P_I n_p$$

2.8 Modifications supplémentaires apportées à la méthode générale

2.8.1 Régularisation de la pression dans le domaine pénalisé

Le traitement numérique du terme de pénalisation sur la vitesse fluide $K(\mathbf{u}_b - \mathbf{u})$ dans les bulles a pour conséquence d'imposer des valeurs non-physiques au champ de pression interne à la bulle. Lorsqu'un objet pénalisé est en mouvement dans le fluide, des instabilités numériques peuvent apparaître par « contamination » du champ de pression interne vers le champ de vitesse. Afin d'éviter ces instabilités lors de la simulation, et de manière générale en vue d'établir un contrôle du champ de pression interne aux bulles en mouvement, le champ de pression est régularisé à l'intérieur de la bulle par diffusion des valeurs du champ de pression des cellules non-pénalisées contenant l'interface associée à une bulle donnée, i.e les cellules fluides limitrophes. Ceci est réalisé par résolution d'une équation de diffusion sur P dans Ω_p avec conditions aux limites de Dirichlet P_Σ , la condition limite étant établie par sélection des valeurs de la pression aux cellules non-pénalisées contenant l'interface. La régularisation de la pression est réalisée par résolution du système suivant :

2.8. Modifications supplémentaires apportées à la méthode générale

$$\begin{cases} \Delta P = 0 \text{ in } \Omega_p \\ P(x) = P_\Sigma, \forall x \in \partial\Omega_p \end{cases} \quad (2.56)$$

d_b (mm)	ρ_f (kg.m ⁻³)	μ_f (Pas)	t_f (s)	\mathbf{u}_b (m/s)	Re
1.0	1000	0.01	0.2	0.1	10

TABLE 2.10: Paramètres numériques de simulation.

L'effet de la régularisation de la pression est illustré sur la Figure 2.10 : une bulle 2D est en mouvement uniforme ($\mathbf{u}_b = 0.1m/s$) dans un fluide au repos pour $Re = 10$; la domaine de calcul est périodique dans chaque direction. Les résultats sont montrés pour $t_f = 0.2s$ quand l'écoulement autour de la bulle est stabilisé. Les paramètres numériques sont reportés sur la Table 2.10.

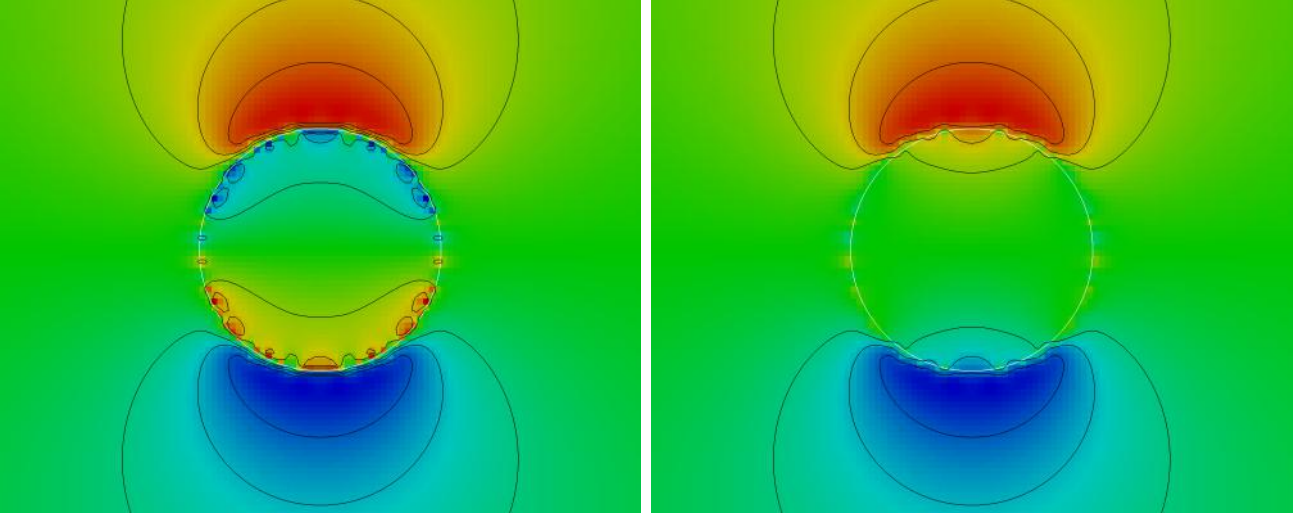


FIGURE 2.10: Bulle en translation dans un fluide au repos pour $Re = 10$. (Gauche) champ de pression non-régularisé ; (droite) diffusion de la pression autour de la bulle vers l'intérieur de la bulle.

2.8.2 Régularisation des champs de vitesse et de pression en présence de conditions aux limites périodiques

En présence de conditions limites périodiques dans la direction verticale d'ascension des bulles, les valeurs du champ de vitesse (composante verticale) et de pression dans le domaine après chaque itération en temps sont régularisées pour les maintenir entre des bornes « physiques » acceptables. Considérons un domaine de N mailles. Nous introduisons les moyennes suivantes :

$$\begin{aligned}
 P_{moy} &= \frac{\sum_{i=1}^N \alpha_{f_i} P_i}{\sum_{i=1}^N \alpha_{f_i}} \\
 \mathbf{u}_{z,moy} &= \frac{\sum_{i=1}^N \alpha_{f_i} \mathbf{u}_{z_i}}{\sum_{i=1}^N \alpha_{f_i}}
 \end{aligned}
 \tag{2.57}$$

P_{moy} étant défini comme la valeur moyenne du champ de pression pondérée par les fractions fluides α_{f_i} , $\mathbf{u}_{z,moy}$ étant défini comme la valeur moyenne de la vitesse verticale également pondérée par les fractions fluides. A l'issue d'une itération en temps, après calcul des champs de vitesse et de pression, nous procédons à la mise à jour suivante de ces champs notés P^* et \mathbf{u}_z^* :

$$\begin{aligned}
 P^* &= P - P_{moy} \\
 \mathbf{u}_z^* &= \mathbf{u}_z - \mathbf{u}_{z,moy}
 \end{aligned}
 \tag{2.58}$$

2.9 Formulation du couplage liquide-bulles

2.9.1 Position du problème

À ce stade, la méthode numérique permet le suivi Lagrangien des bulles dans l'écoulement par une méthode de pénalisation ; de plus la résolution des équations de Navier-Stokes « pénalisées » à été établie pour l'écoulement d'un fluide autour de bulles sphériques en mouvement dans le domaine de calcul. S'impose alors la nécessité de compléter l'outil de simulation en intégrant le mécanisme de mouvement des bulles sous l'action du fluide. L'objet de la présente section est d'établir formellement une relation gouvernant le déplacement des bulles. Deux approches sont présentées, basées toutes deux sur une utilisation des équations pénalisées.

2.9.2 Version 1 - Version initiale

Pour un fluide visqueux, incompressible, nous rappelons les équations de Navier-Stokes formulées sur $\Omega = \Omega_f \cup \Sigma \cup \Omega_p$, Ω_f désignant le domaine fluide, Ω_p le domaine pénalisé et Σ l'interface séparant ces deux domaines. L'équation de quantité de mouvement contient le terme de pénalisation :

$$\begin{aligned}
 \rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) &= -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + K(\mathbf{u}_b - \mathbf{u}) \\
 \text{div } \mathbf{u} &= 0
 \end{aligned}
 \tag{2.59}$$

avec :

$$K(x, t) = \begin{cases} \infty & x \in \Omega_p \\ 0 & x \in \Omega_f \end{cases}$$

La fonction K constante par morceaux est homogène au rapport d'une masse volumique sur un temps. Nous choisissons de la modéliser par :

2.9. Formulation du couplage liquide-bulles

$$K = \frac{\rho_b}{\tau} \quad (2.60)$$

avec ρ_b masse volumique constante dans le domaine pénalisé, τ paramètre de pénalisation défini par :

$$\tau = \begin{cases} \infty & x \in \Omega_p \\ 0 & x \in \Omega_f \end{cases} \quad (2.61)$$

Pour déterminer les forces hydrodynamiques agissant sur une bulle donnée, on intègre le tenseur des contraintes σ sur la surface de la bulle. Pour un fluide Newtonien, visqueux, incompressible :

$$\sigma = -p\mathbf{I} + \mu(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)$$

On reformule l'équation de quantité de mouvement d'après la relation :

$$\operatorname{div} \sigma = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}$$

On a alors :

$$\rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \operatorname{div} \sigma + \rho_b \frac{(\mathbf{u}_b - \mathbf{u})}{\tau} \quad (2.62)$$

Cette équation contient la vitesse de la bulle, mais ne décrit que le mouvement de la phase liquide. Pour réaliser notre couplage liquide-bulle, on exprime les forces hydrodynamiques s'exerçant sur une bulle comme l'intégrale du tenseur des contraintes sur la surface de cette bulle. On note \mathbf{F}_b la résultante des forces hydrodynamiques s'exerçant sur une bulle donnée :

$$\mathbf{F}_b = \oint_{\partial\Omega} \sigma \cdot n \, ds \quad (2.63)$$

On se donne alors un volume correspondant au domaine occupé par la bulle Ω_b et on obtient alors l'expression d'une force volumique à partir d'une force surfacique :

$$\mathbf{F}_b = \oint_{\partial\Omega_b} \sigma \cdot n \, ds = \int_{\Omega_b} \operatorname{div} \sigma \, d\Omega \quad (2.64)$$

Remarque. L'intégrale surfacique 2.63 s'exprime en fonction des pression et vitesses fluides. L'intégrale volumique 2.64 s'exprime en fonction de la valeur des champs de vitesse et de pression dans le domaine occupé par la bulle Ω_b . Le passage d'une intégrale à une autre se justifie par la relation de pénalisation $(\mathbf{u}_b - \mathbf{u})/\tau$ qui impose que la vitesse lagrangienne de bulle est assimilée à la vitesse du fluide dans le domaine que la bulle occupe, la relation de pénalisation devenant dans Ω_b : $\mathbf{u}_b - \mathbf{u} = 0$.

Chapitre 2. Résolution des équations de Navier-Stokes dans NEPTUNE_CFD et formulation du couplage liquide-bulles

Le mouvement de la bulle est régi par somme de la résultante des forces hydrodynamiques et le poids de la bulle :

$$\rho_b \Omega_b \frac{D\mathbf{u}_b}{Dt} = \mathbf{F}_b + \Omega_b \rho_b \mathbf{g} \quad (2.65)$$

En revenant à l'équation 2.64 on a :

$$\mathbf{F}_b = \int_{\Omega_b} \operatorname{div} \sigma \, d\Omega = \int_{\Omega_b} \left(\rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho_b \frac{(\mathbf{u}_b - \mathbf{u})}{\tau} \right) d\Omega$$

L'équation décrivant le mouvement de la bulle s'écrit finalement :

$$\rho_b \Omega_b \frac{D\mathbf{u}_b}{Dt} = \int_{\Omega_b} \left(\rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho_b \frac{(\mathbf{u}_b - \mathbf{u})}{\tau} \right) d\Omega + \Omega_b (\rho_b - \rho_f) \mathbf{g}$$

À ce stade, nous disposons donc de deux équations couplées décrivant le mouvement de la phase liquide et des bulles :

$$\rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho_b \frac{(\mathbf{u}_b - \mathbf{u})}{\tau} \quad (2.66)$$

$$\rho_b \Omega_b \frac{D\mathbf{u}_b}{Dt} = \int_{\Omega_b} \left(\rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho_b \frac{(\mathbf{u}_b - \mathbf{u})}{\tau} \right) d\Omega + \Omega_b (\rho_b - \rho_f) \mathbf{g} \quad (2.67)$$

La première équation régit le mouvement du fluide autour des bulles, la deuxième équation correspond à la formulation du mouvement des bulles dans le fluide. Le mouvement de la bulle est déterminé par une intégrale sur les vitesses fluides. Afin d'établir la formulation discrète de ces relations, nous introduisons l'ensemble des indices de mailles I_b contenues ou traversées par l'interface. Le calcul de l'intégrale s'écrit :

$$\int_{\Omega_b} \left(\rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho_b \frac{(\mathbf{u}_b - \mathbf{u})}{\tau} \mathbf{g} \right) d\Omega = \sum_{i \in I_b} \int_{\Omega_i} \left(\rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho_b \frac{(\mathbf{u}_b - \mathbf{u})}{\tau} \mathbf{g} \right) d\Omega$$

Nous cherchons à établir une approximation de cette intégrale. La formulation du problème de pénalisation nous impose d'utiliser exclusivement les grandeurs évaluées dans les mailles pénalisées, c'est à dire les mailles « internes » à la bulle. On introduit un deuxième ensemble I_p tel que $I_p \subset I_b$, défini comme l'ensemble des indices des mailles pénalisées. L'intégrale est alors approchée de la manière suivante :

2.9. Formulation du couplage liquide-bulles

$$\begin{aligned}
& \sum_{I \in I_b} \int_{\Omega_I} \left(\rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho_b \frac{(\mathbf{u}_b - \mathbf{u})}{\tau} \right) d\Omega \\
& \simeq \sum_{I \in I_p} \int_{\Omega_I} \left(\rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho_b \frac{(\mathbf{u}_b - \mathbf{u})}{\tau} \right) d\Omega \\
& \simeq \sum_{I \in I_p} \alpha_I \Omega_I \left(\rho_f \frac{\mathbf{u}_I^{n+1} - \mathbf{u}_I^n}{\Delta t} + \rho_f \sum_{J \in V_I} \mathbf{u}_{IJ}^n (\mathbf{u}_{IJ}^n \cdot \mathbf{n}_{IJ}) - \rho_b \frac{(\mathbf{u}_b^{n+1} - \mathbf{u}_b^{n+1})}{\tau} \right)
\end{aligned}$$

On définit alors les moyennes suivantes :

$$\frac{1}{\Omega_b} \sum_{I \in I_p} \alpha_I \Omega_I \mathbf{u}_I^n = \bar{\mathbf{u}}^n \quad \text{et} \quad \frac{1}{\Omega_b} \sum_{I \in I_p} \alpha_I \Omega_I \mathbf{u}_I^{n+1} = \bar{\mathbf{u}}^{n+1}$$

Par retour à l'équation 2.67, on a :

$$\begin{aligned}
\rho_b \Omega_b \frac{\mathbf{u}_b^{n+1} - \mathbf{u}_b^n}{\Delta t} &= \Omega_b \left(\rho_f \frac{\bar{\mathbf{u}}^{n+1} - \bar{\mathbf{u}}^n}{\Delta t} + \rho_f \sum_{I \in I_p} \alpha_I \Omega_I \sum_{J \in V_I} \mathbf{u}_{IJ}^n (\mathbf{u}_{IJ}^n \cdot \mathbf{n}_{IJ}) - \rho_b \frac{(\mathbf{u}_b^{n+1} - \bar{\mathbf{u}}^{n+1})}{\tau} \right) \\
&+ (\rho_b - \rho_f) \Omega_b \mathbf{g}
\end{aligned}$$

À partir de la relation précédente, on formule le terme de pénalisation de manière implicite :

$$\begin{aligned}
\rho_b \frac{\mathbf{u}_b^{n+1} - \bar{\mathbf{u}}^{n+1}}{\tau} &= \frac{\rho_b}{\tau + \Delta t} (\mathbf{u}_b^n - \bar{\mathbf{u}}^{n+1}) + \frac{\rho_f \Delta t}{\tau + \Delta t} \left(\frac{\bar{\mathbf{u}}^{n+1} - \bar{\mathbf{u}}^n}{\Delta t} + \sum_{I \in I_p} \alpha_I \Omega_I \sum_{J \in V_I} \mathbf{u}_{IJ}^n (\mathbf{u}_{IJ}^n \cdot \mathbf{n}_{IJ}) \right) \\
&+ \frac{(\rho_b - \rho_f) \Delta t}{\tau + \Delta t} \mathbf{g}
\end{aligned}$$

Cette expression est ensuite réintroduite dans l'équation du fluide 2.66 afin de réaliser le couplage avec l'hypothèse :

$$\forall I \in I_p, \quad \mathbf{u}_I^n \simeq \bar{\mathbf{u}}^n \quad \text{et} \quad \mathbf{u}_I^{n+1} \simeq \bar{\mathbf{u}}^{n+1}$$

Pour une maille I contenue dans la bulle on a :

$$\begin{aligned}
& \rho_f \frac{\mathbf{u}_I^{n+1} - \mathbf{u}_I^n}{\Delta t} + \rho_f \sum_{J \in V_I} \mathbf{u}_{IJ}^n (\mathbf{u}_{IJ}^n \cdot \mathbf{n}_{IJ}) = \\
& - (\nabla p)_I + \mu (\nabla^2 u)_I \\
& + \frac{\rho_b}{\tau + \Delta t} (\mathbf{u}_b^n - \mathbf{u}_I^{n+1}) + \frac{\rho_f \Delta t}{\tau + \Delta t} \left(\frac{\mathbf{u}_I^{n+1} - \mathbf{u}_I^n}{\Delta t} + \sum_{I \in I_p} \alpha_I \Omega_I \sum_{J \in V_I} \mathbf{u}_{IJ}^n (\mathbf{u}_{IJ}^n \cdot \mathbf{n}_{IJ}) \right) \\
& + \frac{(\rho_b - \rho_f) \Delta t}{\tau + \Delta t} \mathbf{g}
\end{aligned}$$

En négligeant les gradients de vitesse définis entre deux mailles pénalisées on obtient :

$$\begin{aligned} \rho_f \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau + \Delta t}\right) \frac{\mathbf{u}_I^{n+1} - \mathbf{u}_I^n}{\Delta t} = & -(\nabla p)_I + \mu(\nabla^2 u)_I \\ & + \frac{\rho_b}{\tau + \Delta t} (\mathbf{u}_b^n - \mathbf{u}_I^{n+1}) \\ & + \frac{(\rho_b - \rho_f)\Delta t}{\tau + \Delta t} \mathbf{g} \end{aligned}$$

Une fois les équations de Navier-Stokes résolues sur le domaine fluide, on dispose de \mathbf{u}^{n+1} et on peut alors mettre à jour la vitesse de la bulle.

2.9.3 Version 2 - Formalisme diphasique

Nous présentons une approche alternative pour la réalisation du couplage entre le liquide et les bulles. Au lieu de développements successifs de l'équation de pénalisation 2.51, cette approche différente se base sur un formalisme similaire au cadre diphasique général, dans lequel une équation de quantité de mouvement associée à chaque phase est pondérée par les fractions volumiques (α_f , α_b) respectivement pour la phase liquide et la phase associée à la bulle. Ce formalisme inclut également l'utilisation des densités (ρ_f , ρ_b) et des vitesses associées à chaque phase (u_f , u_b).

Les vitesses de bulle u_b et fluide u_f apparaissant dans le terme de pénalisation sont choisies au temps t_{n+1} pour un couplage plus stable entre la vitesse des bulles et l'action hydrodynamique du fluide sur celles-ci ; ceci conduit à une formulation implicite du système de couplage.

Il s'agit d'exprimer le terme de couplage $\alpha_b \rho_b \frac{u_b^{n+1} - u_f^{n+1}}{\tau}$ implicitement, à partir de la vitesse fluide aux temps t_n et t_{n+1} : u_f^n, u_f^{n+1} .

Dans un souci de simplicité, le système est présenté dans sa forme non-conservative :

$$\begin{aligned} \mathbf{L} : \alpha_f \rho_f \frac{\partial u_f}{\partial t} + \alpha_f \rho_f u_f \cdot \nabla u_f = & -\alpha_f \nabla P + \alpha_f \rho_f g + \alpha_f \alpha_b \rho_b \frac{u_b^{n+1} - u_f^{n+1}}{\tau} \\ \mathbf{B} : \alpha_b \rho_b \frac{\partial u_b}{\partial t} + \alpha_b \rho_b u_b \cdot \nabla u_b = & -\alpha_b \nabla P + \alpha_b \rho_b g - \alpha_f \alpha_b \rho_b \frac{u_b^{n+1} - u_f^{n+1}}{\tau} \end{aligned} \quad (2.68)$$

La transmission de l'action des forces hydrodynamiques est réalisée à travers le gradient de pression ∇P , dont la formulation dans l'équation de la phase liquide est injectée dans l'équation de la phase de bulle.

2.9. Formulation du couplage liquide-bulles

En développant l'équation associée à la phase bulle, et en admettant l'écriture suivante du terme conservatif : $\alpha_b \rho_b u_b \cdot \nabla u_b = 0$; nous obtenons la formulation suivante du terme de pénalisation :

$$\begin{aligned} \mathbf{B} : \rho_b \frac{u_b^{n+1} - u_f^{n+1}}{\tau} &= \rho_b \frac{\Delta t}{\tau + \Delta t} \frac{u_b^n - u_f^{n+1}}{\Delta t} + \rho_f \frac{\Delta t}{\tau + \Delta t} \left[\frac{u_f^{n+1} - u_f^n}{\Delta t} + u_f \cdot \nabla u_f \right] \\ &+ (\rho_b - \rho_f) \frac{\Delta t}{\tau + \Delta t} g \end{aligned} \quad (2.69)$$

qui est alors injectée dans l'équation associée à la phase liquide afin d'obtenir le couplage inverse dans le domaine fluide :

$$\begin{aligned} \mathbf{L} : \rho_f \left(1 - \alpha_b \frac{\Delta t}{\tau + \Delta t} \right) \left[\frac{u_f^{n+1} - u_f^n}{\Delta t} + u_f \cdot \nabla u_f \right] &= -\nabla P + \left(\rho_f + \alpha_b (\rho_b - \rho_f) \frac{\Delta t}{\tau + \Delta t} \right) g \\ &+ \alpha_b \rho_b \frac{u_b^n - u_f^{n+1}}{\tau + \Delta t} \end{aligned} \quad (2.70)$$

2.9.4 Choix de la méthode de couplage

Les deux méthodes présentées dans les sous-sections précédentes se distinguent selon une caractéristique connue a posteriori. Une tendance a été observée dans les résultats de simulations fournis par ces deux méthodes (simulations d'ascension de bulle isolée ou en configuration nuage de bulles). Cette caractéristique concerne la dépendance des résultats (vitesses moyennes de bulle, vitesses terminales de bulle) à un paramètre de calage μ_p dont l'intérêt est détaillé dans la section suivante 2.9.5. La *Version 1* offre un champ d'influence à μ_p qui nous est convenable (voir Chapitre 4) alors que la *Version 2* du couplage limite fortement l'influence de μ_p sur les résultats. La *Version 1* de couplage liquide-bulles est la version retenue pour les simulations présentées dans cette thèse.

2.9.5 Introduction d'une viscosité de pénalisation μ_p

La méthode de couplage a pour effet de créer une disparité du champ de vitesse à l'intérieur de la bulle (Figure 2.11). La formulation du terme de pénalisation :

$$\frac{u_b^{n+1} - u_f^{n+1}}{\tau} \quad (2.71)$$

impose qu'une vitesse unique du champ fluide doit être définie à l'intérieur de la bulle. Pour « forcer » ce comportement du fluide, nous introduisons un paramètre μ_p défini comme une viscosité interne de pénalisation. Dénué de sens physique, son rôle est d'homogénéiser le champ de vitesse à l'intérieur de la bulle.

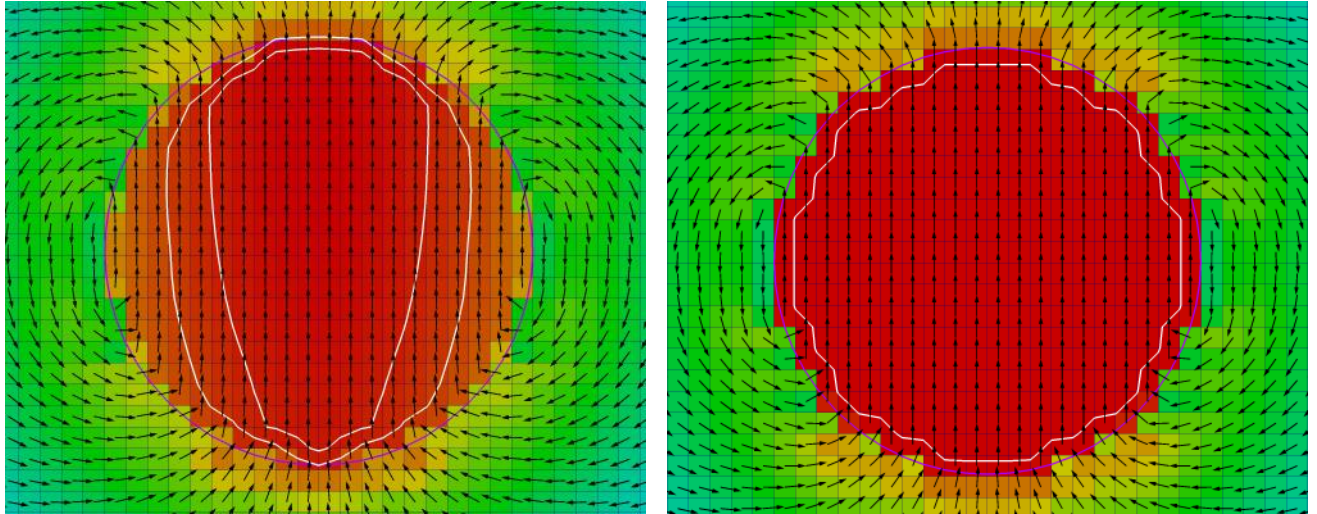


FIGURE 2.11: Effect de la viscosité interne de la bulle sur le champ de vitesse interne à la bulle ; A gauche : $\mu_p = 1$, A droite $\mu_p = 100$. Les contours du module de la vitesse sont tracés en blanc, les contours de la fonction couleur sont tracés en violet.

La figure 2.12 représente une bulle en vue 2D sur une grille eulérienne. Les cellules en rouges sont les cellules totalement pénalisées ($\alpha_{f_i} = 1$). Du point de vue de la discrétisation, seules les faces séparant des mailles totalement pénalisées (marquées d'un point sur la figure) vont être affectées de la viscosité artificielle μ_p .

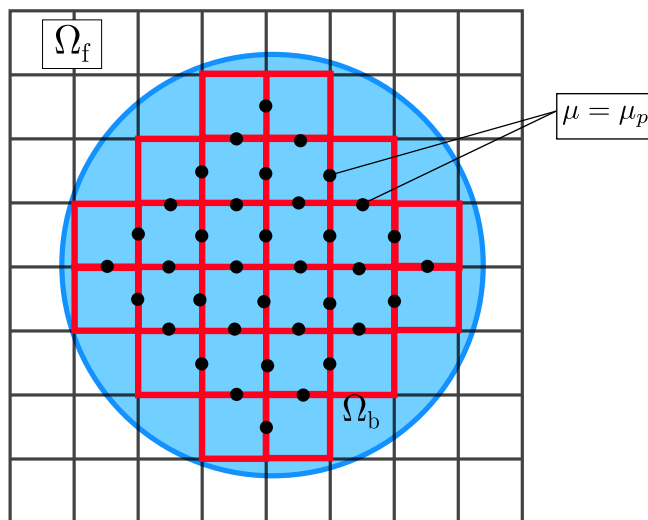


FIGURE 2.12: Représentation en 2D d'une bulle sur un maillage régulier. Les cellules en rouges sont entièrement pénalisées, les faces les liant marquées d'un point vont être affectées de la viscosité μ_p .

Remarque. Le choix de la valeur de μ_p est cependant en pratique limité. Des viscosités trop élevées à l'intérieur des bulles ont pour conséquence un mauvais conditionnement de la matrice assemblée à l'étape de prédiction des vitesses, ce

qui amène des limitations sur les choix d’algorithme de résolution.

2.10 Conclusions

Ce chapitre décrit les grandes étapes numériques de la construction de la méthode. Le choix d’une méthode de pénalisation pour le suivi des bulles dans l’écoulement conduit au formalisme des équations de Navier-Stokes présenté. Ce formalisme constitue ainsi la base de la méthode numérique. Les aspects numériques généraux liés au code `NEPTUNE_CFD` ont été décrits (position des variables, conditions limites). L’ensemble des modifications (divergence, flux de masse, contrainte de cisaillement, gradient de pression) apportées à l’algorithme correcteur-prédicteur de `NEPTUNE_CFD` en vue d’imposer la condition de glissement à l’interface ont été détaillées. En supplément de ces modifications s’ajoutent des ajustements numériques indispensables (régularisation de la pression interne, régularisation du champ de vitesse global dans le direction d’ascension des bulles). Ces apports supplémentaires à la méthode sont nécessaires à la bonne conduite des simulations numériques. Enfin, deux nouvelles approches ont été proposées dans la dernière section pour la réalisation d’un couplage liquide-bulles selon une méthode de pénalisation. L’introduction de la viscosité de pénalisation constitue un nouveau paramètre de l’étude dont la dépendance et la sensibilité seront évaluées dans les sections dédiées aux validation du couplage liquide-bulle en configuration de bulle isolée.

Chapitre 3

Validation numérique de la méthode

Contents

3.1	Introduction	90
3.2	Stratégie de validation	91
3.3	Configuration d’objets pénalisés statiques	93
3.3.1	Écoulement dans un canal courbe	93
3.3.2	Écoulement potentiel autour d’un cylindre	97
3.3.3	Écoulement d’un fluide visqueux autour d’un cylindre avec glissement	102
3.4	Configurations d’objets pénalisés mobiles	107
3.4.1	Écoulement en canal incliné avec parois défilantes	107
3.4.2	Bulle sphérique en mouvement relatif nul et homogène dans le fluide	113
3.5	Conclusions	118

3.1 Introduction

Ce chapitre est dédié à la validation numérique des modifications apportées à l’algorithme général en vue d’imposer la condition de glissement à l’interface. Ces modifications détaillées dans le chapitre précédent concernent la correction de la divergence (section 2.7.2), la correction des flux de masse (section 2.7.3), la correction du gradient de pression (section 2.7.5) et la modification du terme diffusif (contrainte de cisaillement, section 2.7.4). Ce chapitre est le premier des trois chapitres dédiés à la validation de la méthode numérique. Il se focalise uniquement sur les aspects de discrétisation (condition de glissement) ; les deux prochains chapitres étant dédiés à la validation de la méthode de couplage dans des configurations différentes (bulle isolée et nuage de bulle). Dans ce chapitre, les objets pénalisés manipulés dans les différents cas-tests ne sont pas assimilables à des bulles sphériques. Les vitesses des objets pénalisés sont imposées et constantes aux cours des différentes simulations, les effets de réaction de la bulle à l’action du fluide étant désactivés.

En vue de la réalisation de la validation, plusieurs configurations ont été pensées et établies afin d’étudier spécifiquement la contribution de chaque modification apportée à l’algorithme de résolution. Ces configurations se divisent en deux catégories : les configurations statiques ($\mathbf{u}_b = 0$), pour lesquelles l’objet pénalisé est fixe

3.2. Stratégie de validation

dans le domaine de calcul et les configurations dynamiques, pour lesquelles l'objet pénalisé est en mouvement contrôlé dans le fluide en imposant sa vitesse ($\mathbf{u}_b \neq 0$). Les interfaces entre le fluide et les objets pénalisés sont de formes diverses (courbes, planes, cylindriques, sphériques). Les propriétés du fluide, les conditions limites du domaine et les paramètres de simulation sont choisis spécifiquement pour chaque test.

3.2 Stratégie de validation

Le processus de validation détaillé dans ce chapitre cible spécifiquement la rediscrétisation des opérateurs différentiels des équations de Navier-Stokes réalisée en vue d'imposer une condition de glissement à l'interface liquide-bulles. Une série de cas test est proposée pour qualifier et quantifier la nécessité de la réévaluation de chacun de ces opérateurs. L'ensemble des modifications apportées à l'algorithme général de résolution sont regroupées dans la liste suivante :

- La correction de la divergence (CD), voir section 2.7.2 ;
- La correction des flux de masse (CMF), voir section 2.7.3 ;
- La correction du gradient de pression (CPG), voir section 2.7.5 ;
- La modification du terme diffusif (contrainte de cisaillement) (CS), voir section 2.7.4.

Afin d'établir une validation complète de la méthode numérique, la contribution de chacune de ces modifications à la résolution du champ fluide autour de l'objet pénalisé doit être évaluée. Inversement, l'absence d'une de ces corrections lors des simulations peut conduire à l'apparition d'instabilités ou de divergence de la solution. La stratégie de validation consiste à étudier une série de configurations d'interfaces (courbe, plane, cylindrique, sphérique), de domaines et de paramètres de calcul (propriété du fluide, conditions limites) choisis spécifiquement de manière à mettre en relief la contribution des modifications (CD), (CMF), (CPG), (CS). Les modifications ne sont pas évaluées de façon isolée, cette approche limitant leur domaine de validité. Les cas test suivants (et les modifications à évaluer qui leur sont associées) seront détaillés dans la suite du chapitre :

1. Écoulement dans un canal courbe (CMF)+(CPG)+(CS), section 3.3.1 ;
2. Écoulement potentiel autour d'un cylindre (CMF)+(CS), section 3.3.2 ;
3. Écoulement d'un fluide visqueux autour d'un cylindre (CMF)+(CPG)+(CS), section 3.3.3 ;
4. Écoulement dans un canal incliné avec parois défilantes (CD)+(CMF)+(CPG)+(CS), section 3.4.1 ;
5. Bulle sphérique en mouvement relatif nul et homogène dans le fluide (CD)+(CMF)+(CS), section 3.4.2.

Dans chacune de ces configurations, des conditions de glissement sont imposées à l'interface. Les cas présentés se répartissent en deux types de configurations : les configurations statiques (cas **1**, **2**, **3** : $\mathbf{u}_b = 0$) et les configurations dynamiques (cas **4**, **5** : $\mathbf{u}_b \neq 0$). Les cas **1**, **2**, **3**, **4** ont été réalisés en représentation 2D, le cas **5** en représentation 3D (sphère en mouvement). Des solutions analytiques ou des solutions de référence sont établies pour chacun des cas tests. Les résultats des simulations fournis par notre outil sont comparés à ces solutions analytiques/référence : notre analyse se porte sur la convergence en espace des champs de pression P et de vitesse fluide \mathbf{u} vers la solution établie par la théorie. De plus, des profils de vitesse et de pression au voisinage de l'interface Σ sont extraits des simulations.

L'utilisation de configurations simplifiées est courante dans le cadre de la validation de méthodes numériques nouvelles, en particulier pour les approches de type IBM (Immersed Boundary Method) similaires à l'approche de pénalisation développée dans cette thèse. Deux facteurs en sont à l'origine : la facilité de représentation des obstacles « immergés » (carré, cylindre, sphère, plan) et la disponibilité dans la littérature de résultats analytiques et expérimentaux établis ou calculés spécifiquement pour ces interfaces décrites par des relations analytiques simples. Concernant l'imposition d'une condition de glissement à l'interface, les travaux récents de [Kempe et al. (2015)] ont une proximité certaine avec le travail décrit dans cette thèse. L'objet des travaux développés dans [Kempe et al. (2015)] est la construction d'une méthode de type IBM continue pour la simulation d'écoulements à bulles (sphériques et ellipsoïdales) dans des fluides purifiés, d'où la nécessité de traiter la condition de glissement à l'interface. La méthode est vérifiée à travers l'étude d'un écoulement de Stokes autour d'une sphère fixe ; son ordre de convergence est établie via l'étude d'un écoulement autour d'une ellipsoïde aplatie (fixe ou en rotation). [Seo and Song (2012)] étudie l'influence de l'imposition d'une condition de glissement (partielle à totale) à l'interface d'un cylindre pour des Reynolds modérés ($20 < Re < 100$). Cependant, peu de ces références concernent l'imposition de conditions de glissement à l'interface, la plupart des cas étudiés concernant des conditions de non-glissement. Les stratégies de validation développées pour ces conditions limites demeurent cependant intéressantes. Les travaux de [Doradoux (2017)] relatifs à la construction d'une méthode de pénalisation et de porosité variable détaillent des simulations autour d'un carré ($Re = 40$) et d'un cylindre ($Re = 200$). Le cas test d'écoulement de Poiseuille dans un canal (analogue à l'écoulement dans un canal avec glissement) y est également présenté. Ce même cas test est également répertorié dans les travaux de [Etcheverlepo (2013)], les simulations sont réalisées par une méthode de pénalisation de second ordre. Des simulations autour d'un cylindre sont également réalisées à haut Reynolds ($Re = 3900$). Enfin, [Angot et al. (1999)] étudie la convergence et la précision des méthodes de pénalisation L_2 et H_1 via des simulations d'écoulements autour d'obstacles cylindriques et carrés pour $Re = 40$ (pénalisation L_2 et H_1) et $Re = 80$ (pénalisation L_2).

3.3. Configuration d'objets pénalisés statiques

Afin de mettre en évidence la contribution des modifications apportées dans ce travail, nous introduisons également les références suivantes utilisées dans les sections 3.4.1 et 3.4.2 :

- CR (correction) : les simulations sont réalisées à partir des équations de Navier-Stokes pénalisées, avec toutes les modifications apportées à l'algorithme général ((CD)+(CMF)+(CPG)+(CS)).
- NCR (non correction) : les simulations sont réalisées à partir des équations de Navier-Stokes pénalisées sans aucune modification de la discrétisation originelle des opérateurs différentiels des équations de Navier-Stokes.

Des grilles cartésiennes de pas d'espace Δx ont été utilisées pour les simulations réalisées avec l'outil numérique. Le pas de temps Δt est choisi constant ; la CFL associée aux simulations effectuées est la suivante : $C_0 = |\mathbf{u}|\Delta t/\Delta x = 0.5$. Le paramètre de pénalisation est fixé à $\tau = 10^{-14}$.

Dans ce chapitre, les champs de vitesse et de pression fournis par les simulations sont notés $V = (V_x, V_y, V_z)$ et P . Lorsqu'une solution analytique est établie, elle est notée $V_s = (V_{sx}, V_{sy}, V_{sz})$ et P_s .

3.3 Configuration d'objets pénalisés statiques

Dans les sous-sections suivantes, les objets pénalisés sont immobiles dans l'écoulement ($\mathbf{u}_b = 0$) et la condition de glissement est imposée à leur surface. Les objets étant immobiles, la modification de la formulation de la divergence (CD) n'est pas effective dans l'algorithme général de résolution des équations de Navier-Stokes. Les modifications à l'étude sont (CMF)+(CPG)+(CS).

3.3.1 Écoulement dans un canal courbe

Nous étudions l'écoulement d'un fluide visqueux, incompressible dans un canal courbe de rayon $R = 0.5\text{m}$ délimité par deux demi-cercles de rayon 1 et 2 centrés en $(0, 0)$ (Figure 3.6). Ce cas test permet l'examen des contributions de la correction des flux de masse (CMF), de la reconstruction du gradient de pression à l'interface (CPG) et de l'imposition de la contrainte de cisaillement nul à l'interface (CS). Les dimensions du domaine sont $L_x = 4.4\text{m}$ and $L_y = L_x/2\text{m}$. Une condition de glissement est imposée à l'interface Σ . A l'extérieur du domaine fluide, le domaine est pénalisé par une vitesse nulle $\mathbf{u}_b = 0$. Un fluide est injecté en entrée du domaine selon le profil de vitesse :

$$\begin{cases} V_{x,inlet}(x, y) = -y \\ V_{y,inlet}(x, y) = x \end{cases} \quad (3.72)$$

En sortie du canal, une condition sur la pression est imposée :

$$P_{outlet}(x, y) = x^2 + y^2 \quad (3.73)$$

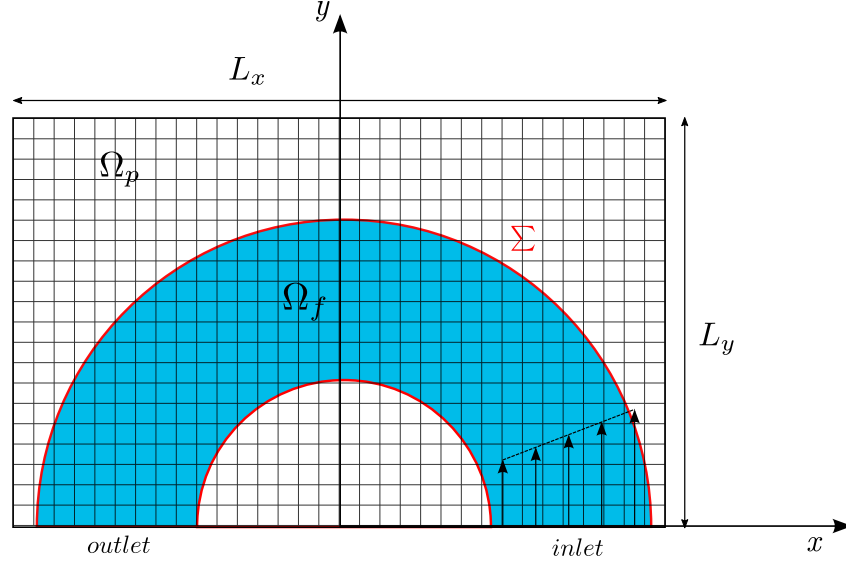


FIGURE 3.1: Sketch of the inclined channel configuration.

La solution stationnaire a pour champs de pression et de vitesse P_s et $V_s = (V_{s_x}, V_{s_y})$:

$$\begin{cases} V_{s_x}(y) = -y \\ V_{s_y}(x) = x \\ P_s(x, y) = x^2 + y^2 \end{cases} \quad (3.74)$$

L'objet de l'étude de ce cas-test est d'établir l'ordre de convergence de la méthode numérique. A ce stade, deux approches de simulation sont envisageables : la première consiste à initialiser le champ de de pression et de vitesse P et $V = (V_x, V_y)$ dans Ω_f directement à partir de l'expression de la solution analytique attendue :

$$\begin{cases} V_x(y, t = 0) = -y \\ V_y(x, t = 0) = x \\ P(x, y, t = 0) = x^2 + y^2 \end{cases} \quad (3.75)$$

Cette approche fournit une mesure très précise de l'erreur et donc une bonne description du maintien de la solution fournie par la simulation. Cependant, elle ne permet pas d'évaluer la capacité de l'algorithme à évoluer au cours des itérations vers la solution analytique. C'est pourquoi notre choix se porte sur un état initial dit de « déséquilibre », c'est-à-dire relativement différent de la solution analytique :

$$\begin{cases} V_x(y, t = 0) = 0 \\ V_y(x, t = 0) = 0 \\ P(x, y, t = 0) = 0 \end{cases} \quad (3.76)$$

3.3. Configuration d'objets pénalisés statiques

Afin d'établir l'ordre de convergence de la méthode, 6 maillages différents ont été utilisés correspondant à 4, 8, 16, 32, 64 et 128 mailles dans le rayon du canal. A $t = t_0$ le fluide est injecté dans le canal, la simulation est stoppée lorsque une invariance en temps du champ de vitesse est détectée. Ce temps final est calculé pour la simulation sur le maillage le plus grossier (4 mailles dans le rayon du canal), soit $t_f = 5s$. Ce temps fait office de temps final de référence pour les autres simulations.

$R(m)$	$\rho_f(kg.m^{-3})$	$\mu_f(Pa.s)$	$t_f(s)$	$\mathbf{u}_b(ms^{-1})$
0.5	2	0.01	5	0

TABLE 3.11: Paramètres numériques de simulation (écoulement en canal courbe).

Les champs de pression et de vitesse (Figures 3.2 et 3.3) ont été extraits de la simulation correspondant à 128 mailles dans le rayon du canal. Les contours de la pression sont formés par des demi-cercles concentriques (Figure 3.2) tel que le suppose l'expression de la solution analytique du champ de pression : $P((x, y), t = 0) = x^2 + y^2$. La coloration graduelle du champ de vecteurs vitesse selon un axe traversant le canal et passant par $(0, 0)$ (Figure 3.3) est en accord avec l'expression de la norme du champ de vitesse $|V|_2 = \sqrt{x^2 + y^2}$. La condition de glissement à l'interface peut-être examinée plus en détail en zoomant le champ de vitesse proche de l'interface (Figure 3.4). Une simulation supplémentaire à même finesse de maillage (128 cellules dans le rayon du canal) a été réalisée en simple pénalisation (NCR) afin de mettre en évidence la contribution de l'ensemble des modifications apportées à l'algorithme général. Dans le cas (CR), le fluide s'écoule tangentiuellement à l'interface, comportement qui n'est pas observable pour le cas (NCR).

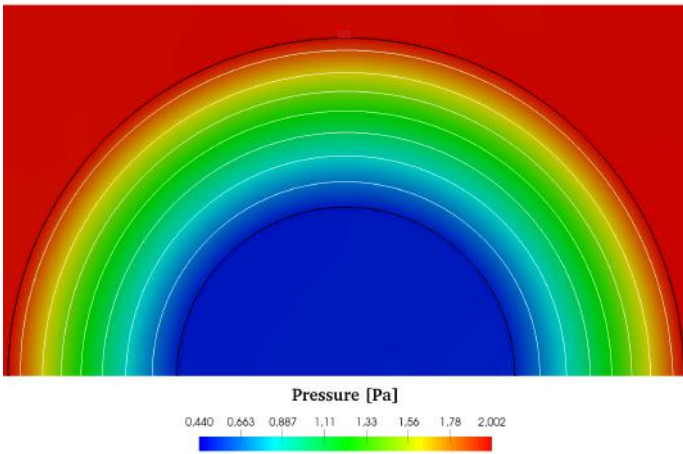


FIGURE 3.2: Champ de pression à $t = t_f$ et ses contours associés.

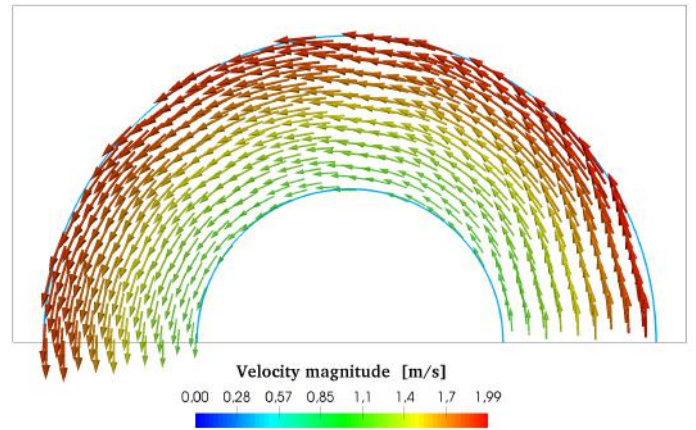


FIGURE 3.3: Champ de vitesse à $t = t_f$ et ses contours associés.

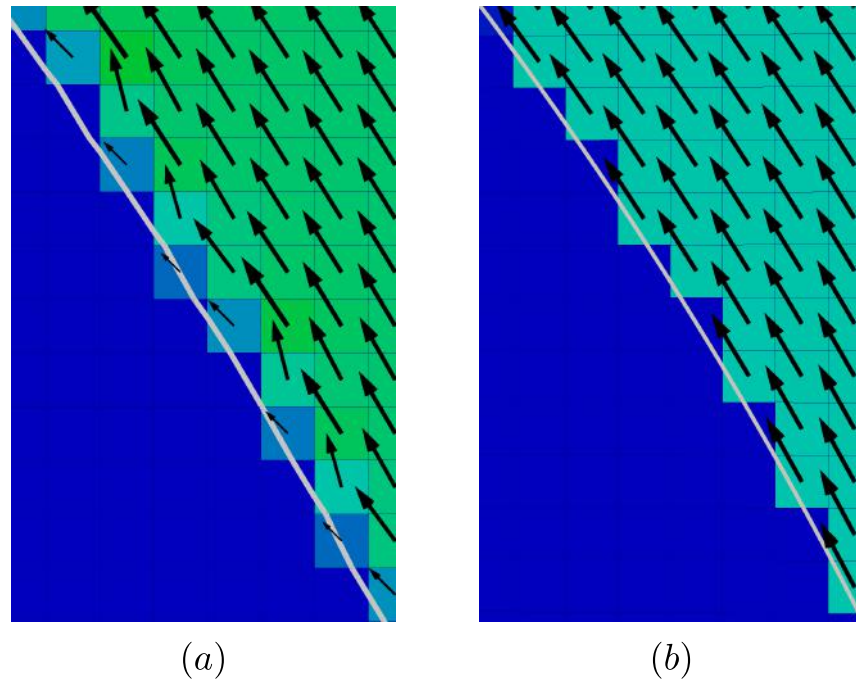


FIGURE 3.4: Zoom sur le champ de vitesse près de l'interface; (a) : (NCR) simulation. (b) : (CR) simulation.

L'erreur est mesurée en norme L_1 sur la pression $|P - P_s|_1/|P_s|_1$ et les composantes du vecteur vitesse $|V_x - V_{s_x}|_1/|V_{s_x}|_1$ et $|V_y - V_{s_y}|_1/|V_{s_y}|_1$. L'évolution de l'erreur est tracée sur la Figure 3.5. L'erreur des composantes de la vitesse décroît à l'ordre 0.75. La décroissance de l'erreur de la pression est de l'ordre de 1. Les paramètres de simulations sont renseignés en Table 3.11.

3.3. Configuration d'objets pénalisés statiques

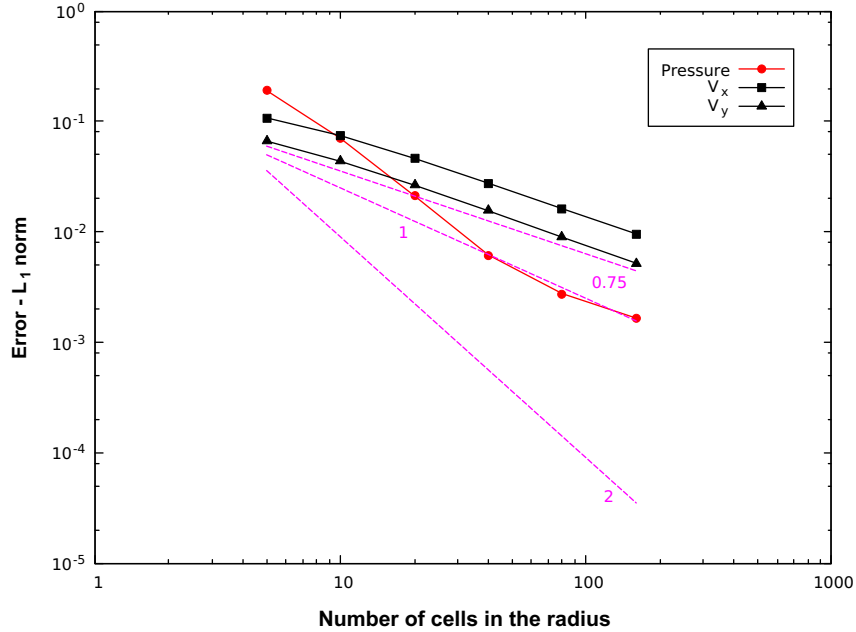


FIGURE 3.5: Etude de convergence pour $P, (V_x, V_y)$ en norme L_1 (écoulement dans un canal courbe).

3.3.2 Écoulement potentiel autour d'un cylindre

Nous étudions l'écoulement d'un liquide non-visqueux, incompressible autour d'un cylindre de rayon $R = 0.006\text{m}$ centré dans un domaine $\Omega = [-5R; 5R] \times [-5R; 5R]$ (Figure 3.6). Ce cas test permet l'examen des contributions de la correction des flux de masse (CMF) et de la reconstruction du gradient de pression à l'interface (CPG). Le domaine est muni d'une condition d'entrée sur la vitesse fluide et d'une condition de sortie sur la pression, les limites du domaine restantes sont affectées d'une condition de symétrie. La vitesse du fluide en entrée U_∞ est constante. Notons $V_s = (V_{s_r}, V_{s_\theta})$ le vecteur vitesse fluide solution ($V_s = (V_{s_x}, V_{s_y})$ en coordonnées cartésiennes) et P_s le champ de pression solution du problème. A la surface du cylindre de normale n , la condition suivante sur V_s est imposée :

$$V_s \cdot n = 0 \quad (3.77)$$

La théorie établit alors que pour un écoulement non-visqueux, incompressible, de masse constante ρ_f et irrotationnel ($\nabla \times V = 0$), il existe un potentiel ϕ tel que :

$$V_s = \nabla \phi \quad (3.78)$$

Du fait de l'hypothèse d'incompressibilité, $\nabla \cdot V_s = 0$, ϕ satisfait l'équation de Laplace :

$$\nabla^2 \phi = 0. \quad (3.79)$$

En coordonnées polaires, l'équation de Laplace devient :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} = 0 \quad (3.80)$$

La solution vérifiant la condition limite 3.77 s'écrit en coordonnées polaires :

$$\begin{cases} V_{sr} = \frac{\partial \phi}{\partial r} = U_\infty \left(1 - \frac{R^2}{r^2} \right) \cos \theta \\ V_{s\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial \theta} = -U_\infty \left(1 + \frac{R^2}{r^2} \right) \sin \theta. \end{cases} \quad (3.81)$$

Le fluide étant non-visqueux et irrotationnel, l'équation de Bernoulli établit l'expression de la pression P directement à partir de la vitesse V :

$$P_s = \frac{1}{2} \rho (U_\infty^2 - V_s^2) + P_\infty, \quad (3.82)$$

avec $P_\infty = 0$, la pression s'écrit finalement :

$$P_s = \frac{1}{2} \rho U^2 \left(2 \frac{R^2}{r^2} \cos(2\theta) - \frac{R^4}{r^4} \right). \quad (3.83)$$

Dans cette configuration, du fait de la non-viscosité du fluide, la condition limite sur le cylindre 3.77 correspond à une condition de glissement (appauvrie du fait de la disparition de la contrainte de cisaillement nulle à l'interface) que nous cherchons à imposer via nos modifications.

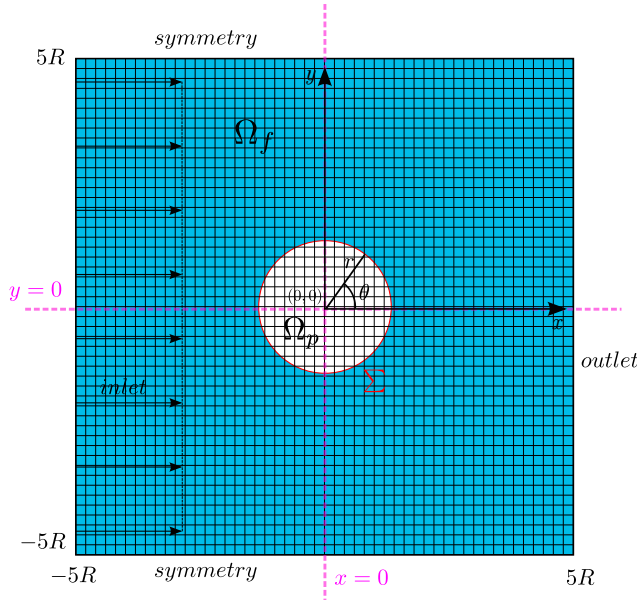


FIGURE 3.6: Représentation de la configuration à l'étude.

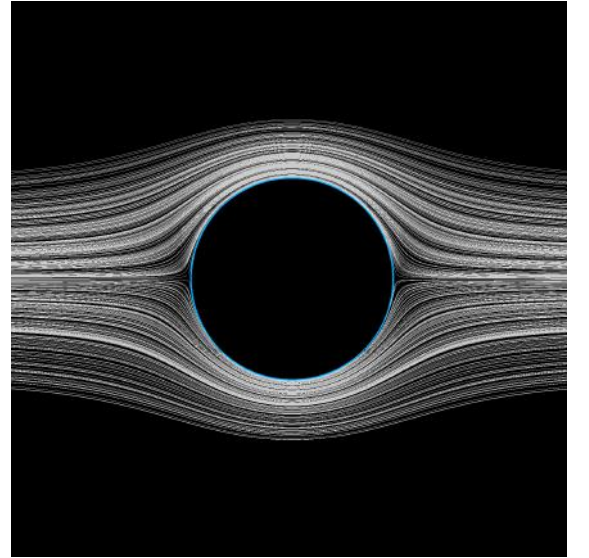


FIGURE 3.7: Lignes de courant autour de l'obstacle cylindre pour le niveau de raffinement R6.

Nous cherchons à qualifier la convergence des résultats fournis par notre méthode numérique vers les expressions théoriques des champs de vitesses et de pression. La

3.3. Configuration d'objets pénalisés statiques

forme du cylindre est projetée sur le domaine de calcul par le calcul des fractions volumiques. Le cylindre est maintenu immobile dans le domaine de calcul : $\mathbf{u}_b = 0$. Les conditions initiales sur la vitesse et la pression sont les suivantes :

$$\begin{cases} V(t = 0, (x, y)) = 0 \\ P(t = 0, (x, y)) = 0 \end{cases} \quad (3.84)$$

Pour réaliser l'étude de convergence, 6 maillages ont été testés. Leur niveau de raffinement correspond à des maillages de 25^2 , 50^2 , 100^2 , 200^2 , 400^2 , 800^2 éléments (les références de raffinement de maillage associés sont notés respectivement R1, R2, R3, R4, R5 et R6). Les paramètres numériques de simulation sont rapportés dans en Table 3.12.

$R(m)$	$\rho_f(kg.m^{-3})$	$\mu_f(Pa.s)$	$t_f(s)$	$\mathbf{u}_b(ms^{-1})$	$U_\infty(ms^{-1})$
0.006	1000	0.0	1	0	0.1

TABLE 3.12: Paramètres numériques de simulation (écoulement potentiel autour d'un cylindre).

A $t_0 = 0$, le fluide est injecté à une vitesse U_∞ . Comme pour le cas test précédent, les simulations sont stoppées lorsqu'une invariance en temps du champ de vitesse est détectée. Ce temps final ($t_f = 1s$) est calculé pour le maillage le plus grossier (R1) et fait office de temps de référence pour les autres simulations. A la fin de la simulation, nous avons extrait les profils de vitesse et de pression (Figures 3.8 et 3.9) tracés pour les axes $x = 0$ et $y = 0$ (Figure 3.6, axe latéral et longitudinal) pour R1, R2, R3, R4 et R5. Nous observons que le niveau de raffinement le plus bas (R1) offre une bonne approximation de la vitesse théorique sur les deux axes étudiés (Figure 3.9). La convergence de la solution est en partie conditionnée par la méthode de représentation de l'obstacle dans le domaine et par la raideur du critère de pénalisation associé (position du centre cellule à l'intérieur de Ω_p). Les centres des cellules contenant l'interface doivent être relativement proches de l'interface afin que la solution décrive convenablement la valeur de la vitesse proche de l'interface. Le tracé des profils associés aux niveaux de raffinements R2, R3, R4 traduisent bien la convergence de la solution vers la vitesse et pression théorique, pour les deux axes étudiés. Enfin, pour le dernier niveau de raffinement R5 tracé, nous observons une superposition parfaite des profils de pression et de vitesse. Les profils associés à R6 n'ont pas été tracé car se superposant sur les profils de R5.

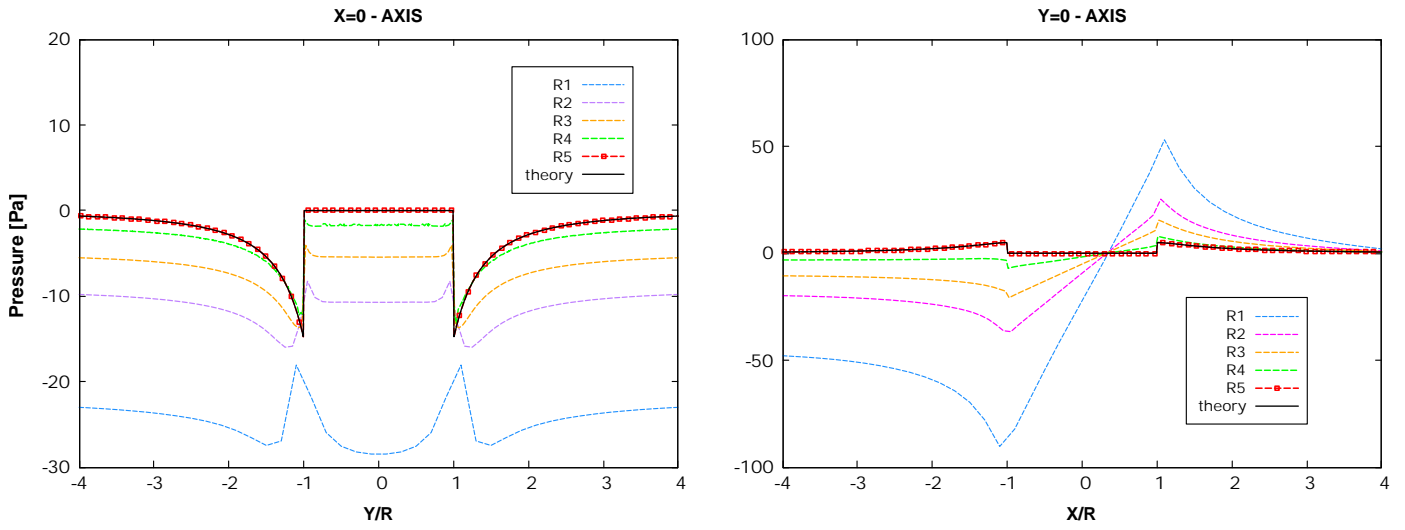


FIGURE 3.8: Profils de pression transversale ($x = 0$, gauche) et longitudinale ($y = 0$, droite) pour 5 niveaux de raffinement R1, R2, R3, R4 et R5.

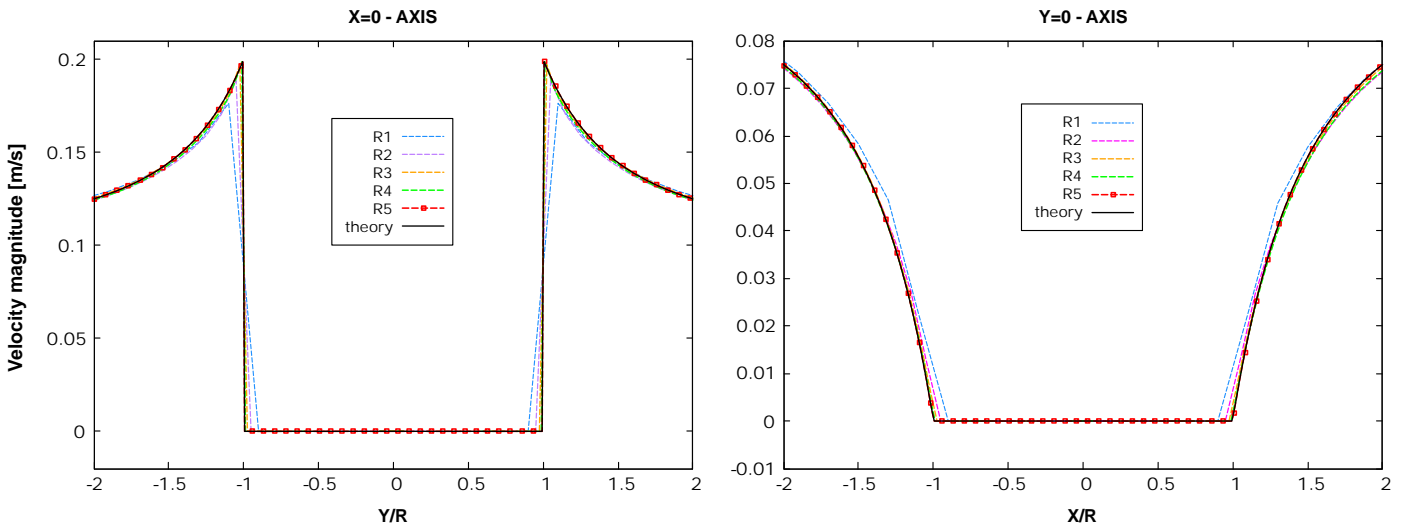


FIGURE 3.9: Profils de vitesse transversale ($x = 0$, gauche) et longitudinale ($y = 0$, droite) pour 5 niveaux de raffinement R1, R2, R3, R4 et R5.

L'erreur en norme L_1 est évaluée pour chacune des simulations (Figure 3.10), pour le champ de pression $|P - P_s|_1/|P_s|_1$ et les composantes du vecteur vitesse $|V_x - V_{s_x}|_1/|V_{s_x}|_1$ et $|V_y - V_{s_y}|_1/|V_{s_y}|_1$. On retrouve l'ordre de convergence des cas-tests précédents : les deux composantes de vitesse V_x et V_y convergent à l'ordre 0.75 et la pression P converge à l'ordre 2.

3.3. Configuration d'objets pénalisés statiques

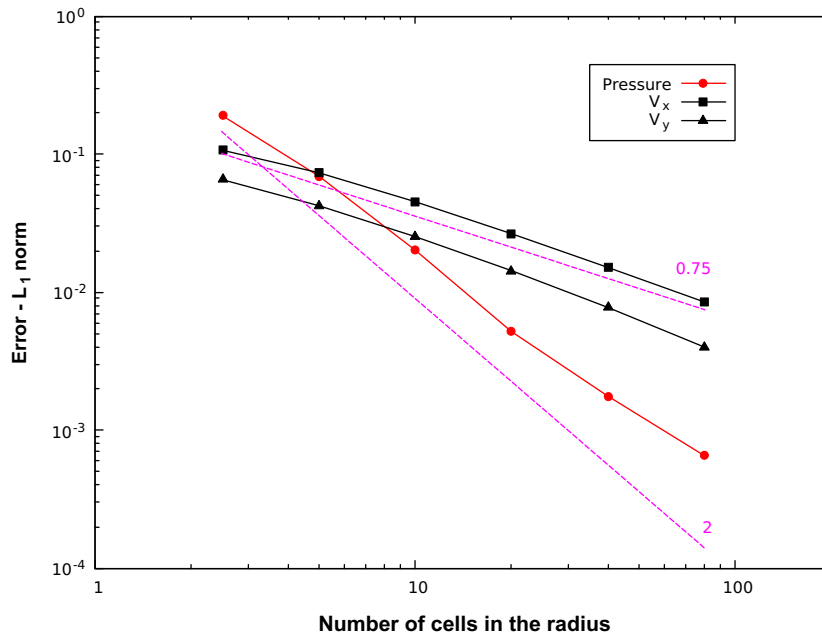


FIGURE 3.10: Étude de convergence pour $P, (V_x, V_y)$ en norme L_1 (écoulement potentiel autour d'un cylindre).

Afin d'illustrer la nécessité de l'apport de la correction des flux de masse et de la reconstruction du gradient de pression près de l'interface, nous comparons deux résultats de simulation : la première simulation correspond à une pénalisation simple sans correction (NCR), la deuxième correspond à une des simulations présentée précédemment (CR). Les paramètres de simulations sont identiques. Le niveau de raffinement est choisi à R6 (maillage 800^2), la simulation (CR) associée à ce raffinement offrant une très bonne approximation de la solution. A $t = t_f$, les champs de pression et de vitesse sont extraits (Figures 3.11 et 3.12). Les pressions internes aux cylindres ont été imposées nulles dans un souci de lisibilité des figures. Nous savons que pour un écoulement autour d'un cylindre, les champs de pression et de vitesse admettent une symétrie parfaite selon les axes $x = 0$ et $y = 0$. Ceci se traduit par le fait que les lignes de courant épousent parfaitement la forme du cylindre (Figure 3.7). Le tracé des contours de pression (Figure 3.12) révèle une asymétrie du champ de pression pour le cas (NCR) selon l'axe $x = 0$. Ce champ ne correspond à la solution établie par la théorie. Le tracé de champs de vitesse de la simulation (NCR) et ses contours associés (Figure 3.11) n'est que légèrement affecté par cette asymétrie. En revanche, la décroissance de la norme de la vitesse est plus marquée en s'éloignant du cylindre selon l'axe transversal $x = 0$. Or, les profils de vitesses établis par la théorie correspondent exactement aux profils de vitesse fournis par nos simulations sur l'axe $x = 0$ (Figure 3.9). Cela conduit finalement à une structure du champ de vitesse autour du cylindre différente de celle établie par la théorie. Ceci illustre l'apport de la correction des flux de masse et de la reconstruction du gradient de pression près de l'interface.

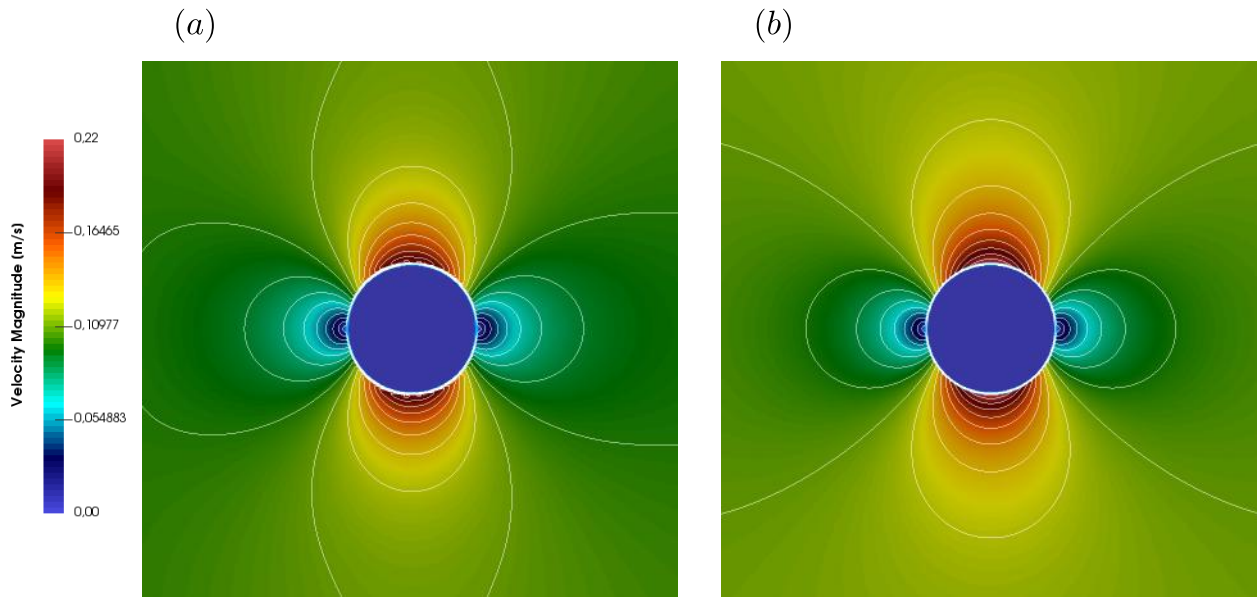


FIGURE 3.11: Champs de vitesse et contours associés à $t = t_f$: (a) NCR, (b) CR.

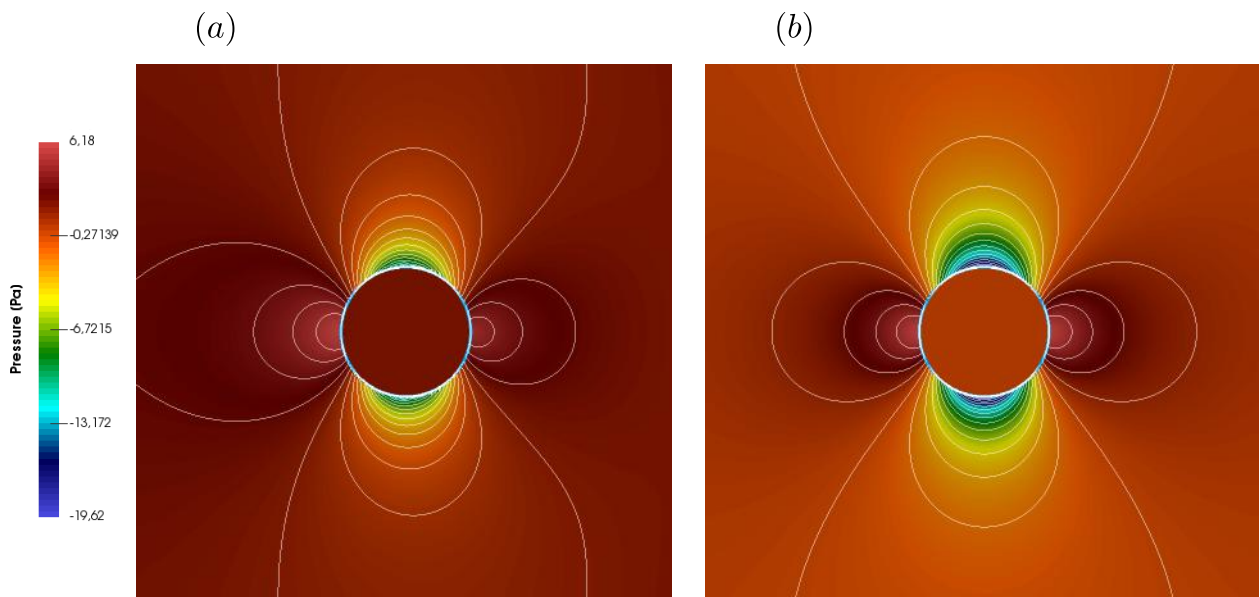


FIGURE 3.12: Champs de pression et contours associés à $t = t_f$: (a) NCR, (b) CR.

3.3.3 Écoulement d'un fluide visqueux autour d'un cylindre avec glissement

Ce cas test permet l'examen des contributions de la correction des flux de masse (CMF) et de la reconstruction du gradient de pression à l'interface (CPG) ainsi que l'imposition de la contrainte de cisaillement nulle à l'interface (CS). Nous étudions l'écoulement d'un fluide très visqueux ($\mu_f = 0.03$), incompressible autour d'un obstacle cylindrique de rayon $R = 0.0005$ positionné à l'origine du repère (Figure

3.3. Configuration d'objets pénalisés statiques

3.13). Le domaine de calcul est défini par $\Omega = [-6R;6R] \times [-5R;28R]$. La vitesse imposée à l'entrée du domaine est $U_\infty = 0.03\text{ms}^{-1}$. La pression est imposée nulle en sortie du domaine, $P_{outlet} = 0$. Les autres conditions limites sont affectées d'une condition de symétrie. Les paramètres numériques de simulation sont rapportés en Table 3.13.

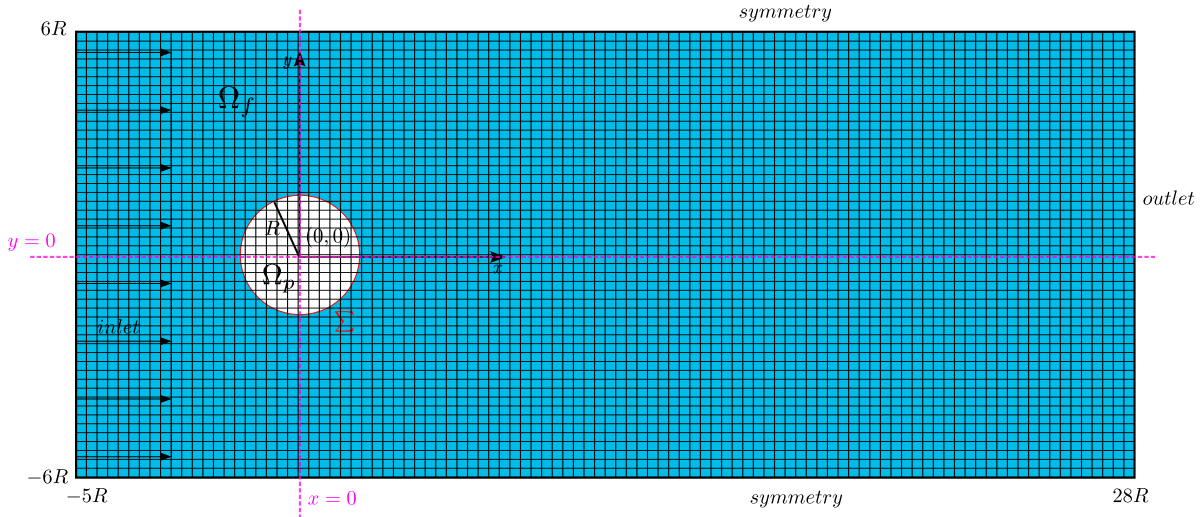


FIGURE 3.13: Configuration étudiée : cas-test d'écoulement autour d'un cylindre.

$R(m)$	$\rho_f(kg.m^{-3})$	$\mu_f(Pa.s)$	$t_f(s)$	$\mathbf{u}_b(ms^{-1})$	$U_\infty(ms^{-1})$
0.0005	1000	0.03	2	0	0.03

TABLE 3.13: Paramètres numériques de simulation (écoulement autour d'un cylindre pour $Re = 1$).

Contrairement aux autres cas-test présentés dans ce chapitre, nous ne disposons pas de solution analytique dans cette configuration. L'objectif de cas-test est d'examiner de manière séparée les contributions des modifications apportées à l'algorithme (CMF)+(CPG)+(CS). Ce cas-test est particulièrement adapté à l'étude de l'imposition d'une condition de glissement à l'interface : le Reynolds d'étude étant relativement faible $Re = 1$, les effets des termes visqueux jouent un rôle important dans le développement de l'écoulement autour du cylindre. Cette configuration d'écoulement ne permet pas d'établir une solution analytique. Afin de pouvoir comparer les résultats de notre méthode numérique, nous avons réalisé une simulation directe en approche body-fitted (approche selon laquelle le maillage est adapté à la forme de l'obstacle (Figure 3.14)). Les mailles sont quadrangles près de l'interface et cubiques loin du cylindre. Une condition de glissement est imposée à la surface de l'obstacle maillé.

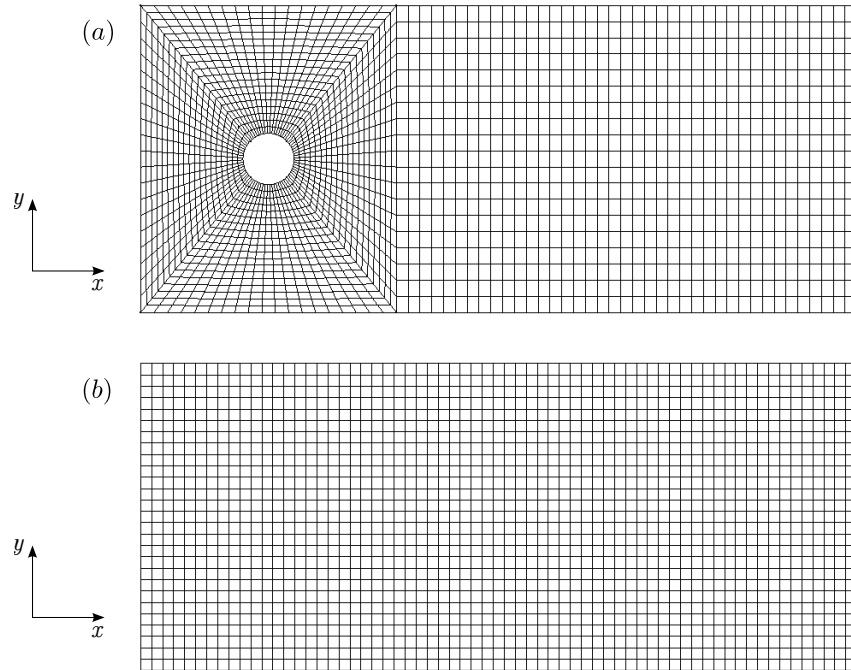


FIGURE 3.14: (a) Maillage adapté à l'obstacle cylindrique, (b) grille cartésienne utilisée pour la simulation.

L'interface cylindrique est projetée sur la grille cartésienne par le calcul des fractions volumiques et surfaciques. Les paramètres de calcul sont identiques dans chaque configuration (cf. Table 3.13). Afin de maintenir une similitude entre les deux simulations, les deux maillages sont constitués d'un nombre équivalent d'éléments (260 000 pour le maillage adapté à l'obstacle, 280 000 pour la grille cartésienne). Nous cherchons à déterminer les contributions des modifications (CMF)+(CPG)+(CS) à l'établissement de la solution. Au total, 6 simulations ont été réalisées. En plus de la simulation directe, les simulations (NCR) et (CR) ont été réalisées. Les contributions séparées des modifications ont été obtenues en réalisant les simulations (CS), (CMF)+(CPG) et (CMF)+(CS). A $t = 0$, le fluide est injecté dans le domaine (Figure 3.13) à une vitesse $U_\infty = 0.03\text{ms}^{-1}$. Le temps de final de simulation est établi par la simulation (CR), lorsqu'une invariance du champ de vitesse est détectée ($t_f = 2\text{s}$). Les autres simulations sont stoppées au même temps final. Notre intérêt se porte en particulier sur la résolution du champ du fluide. Nous avons extrait des profils de pression et de vitesse (Figure 3.13) pour chacune des simulations selon l'axe longitudinal $y = 0$ traversant le sillage du cylindre, et l'axe transversal $x = 0$. Les profils sont tracés en Figure 3.15 (pression) et Figure 3.16 (norme de la vitesse).

3.3. Configuration d'objets pénalisés statiques

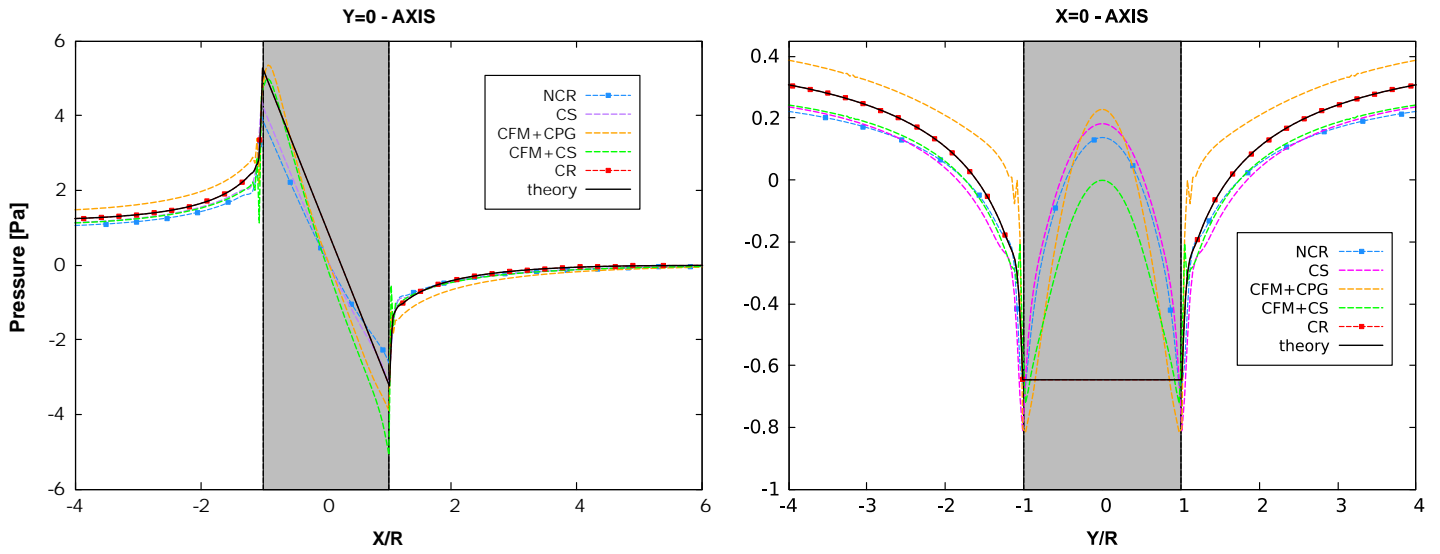


FIGURE 3.15: Profils de pression longitudinale ($y = 0$, gauche) et transversale ($x = 0$, droite).

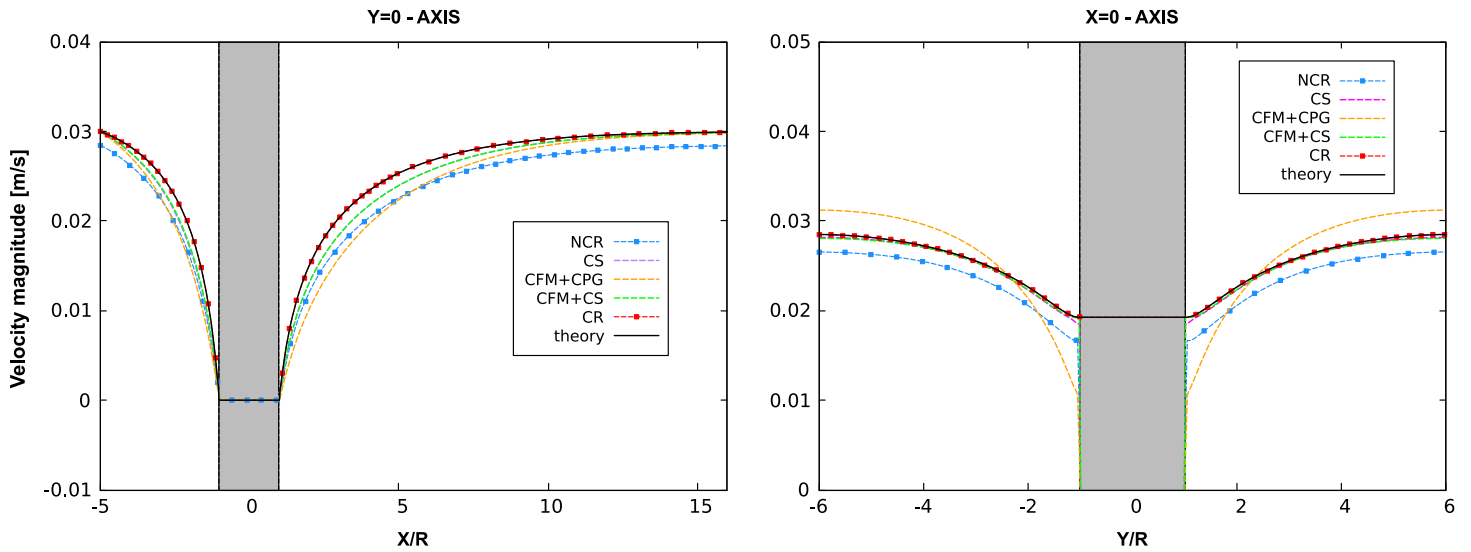
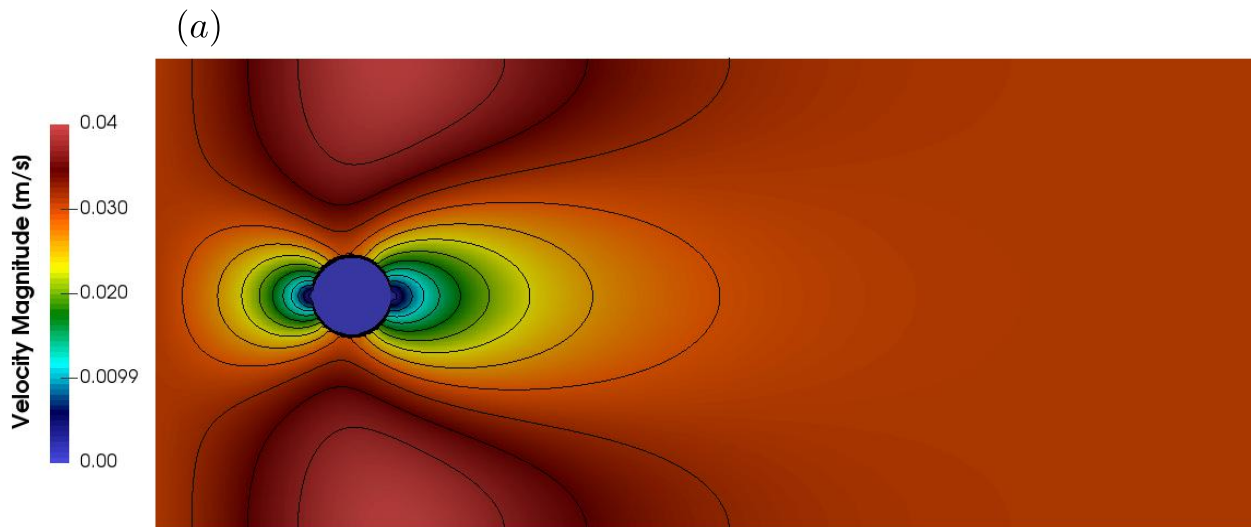


FIGURE 3.16: Profils de vitesse longitudinale ($y = 0$, gauche) et transversale ($x = 0$, droite).

L'analyse des profils établit clairement la simulation (NCR) comme la plus éloignée du cas de référence. Cet écart s'observe tout particulièrement sur les profils de vitesse. L'imposition d'une contrainte de cisaillement nulle à l'interface (CD) améliore nettement le correspondance des profils avec la solution de référence, en particulier pour la vitesse (les profils de vitesse des simulations (CS) et (CMF)+(CS) se superposent quasi-exactement). Dans la direction transversale, le profil de vitesse est en parfait accord avec la solution de référence. Dans cette direction, le défaut de raccord avec $U_\infty = 0.03\text{ms}^{-1}$ loin du cylindre est dû à des effets de confinement, les dimensions du domaine n'étant pas suffisam-

ment grandes par rapport à la dimension de l'obstacle. Ces effets sont toutefois également reproduits par la simulation directe, ce qui n'a donc pas d'incidence dans l'analyse des résultats. La correspondance avec la pression de référence demeure cependant insatisfaisante dans chacune des directions. La modification des flux de masse couplée à la reconstruction du gradient de pression (CMF)+(CPG) améliore la simulation (NCR) pour le calcul de la vitesse et de la pression dans la direction longitudinale, mais les dégrade dans la direction transversale. La valeur de la vitesse à l'interface est relativement éloignée de la solution de référence. Dans cette même direction, la simulation (CS) offrait une correspondance parfaite de la vitesse avec la solution de référence, ce qui met en avant l'importance d'une discrétisation précise de la contrainte de cisaillement dans la résolution du fluide, notamment en proche paroi. La modification des flux de masse couplée à la modification de la contrainte de cisaillement (CMF)+(CS) améliore (CS) pour chaque champ et chaque direction. Dans la direction transversale, la correspondance avec la vitesse de référence déjà établie par (CS) est préservée. La prise en compte des flux de masse modifiés améliore donc les résultats à la condition que cette modification soit associée à (CS). Enfin, la reconstruction du gradient de pression (CMF)+(CS)+(CPG)=(CR) permet la correction des légères oscillations de la pression observée dans chacune des directions. La simulation précédente est alors nettement améliorée, les profils correspondent parfaitement à la solution de référence pour chaque champ et chaque direction. L'analyse des champs de vitesse (Figure 3.17) n'illustre que faiblement l'impact de la prise en compte intégrale des modifications sur la résolution du champ au regard de ce qui vient d'être établi. Le tracé des contours de vitesse permet d'observer la différence établie par la comparaison des profils entre les simulations (NCR) et (CR). La correspondance des champs de vitesse et de ses contours associés est excellent entre la simulation intégrale (CR) et la solution de référence.



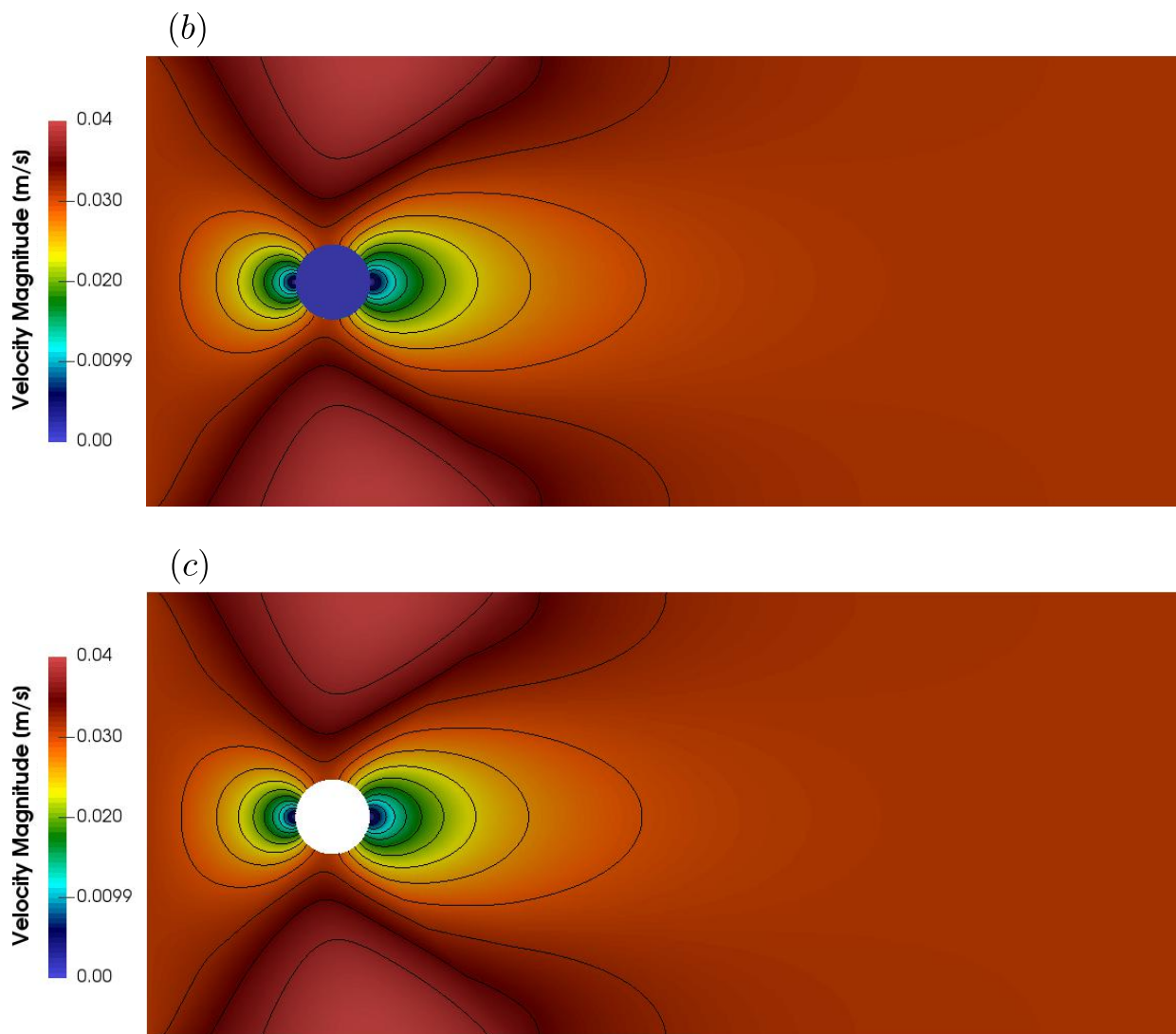


FIGURE 3.17: Champs de vitesse et leurs contours associés : (a) NCR, (b) CR, (c) cas avec maillage adapté à la forme de l'obstacle.

3.4 Configurations d'objets pénalisés mobiles

Les objets pénalisés étant en mouvement dans le fluide ($\mathbf{u}_b \neq 0$), la modification de la divergence (CD) est activée pour les simulations présentées dans les sous-sections suivantes.

3.4.1 Écoulement en canal incliné avec parois défilantes

Pour ce premier cas-test dynamique, nous étudions l'écoulement d'un fluide visqueux, incompressible dans un canal incliné à parois défilantes (Figure 3.18). Les parois du canal (Σ_1 and Σ_2) de rayon $R = 0.125\text{m}$ sont paramétrées par des droites parallèles de vecteur directeur $(1, 8)$. Les parois se déplacent à la vitesse

imposée dans le champ pénalisé Ω_p : $\mathbf{u}_b = -(0.1, 0.8)\text{ms}^{-1}$. Les dimensions du domaine sont $L_x = 1\text{m}$, $L_y = 2 \times L_x$. Des conditions de glissement sont imposées à l'interface $\Sigma = \Sigma_1 \cup \Sigma_2$. A l'entrée du canal est imposée une vitesse d'entrée correspondant à $V_{inlet} = -\mathbf{u}_b$. En sortie du canal nous imposons une pression de référence nulle $P_{outlet} = 0$.

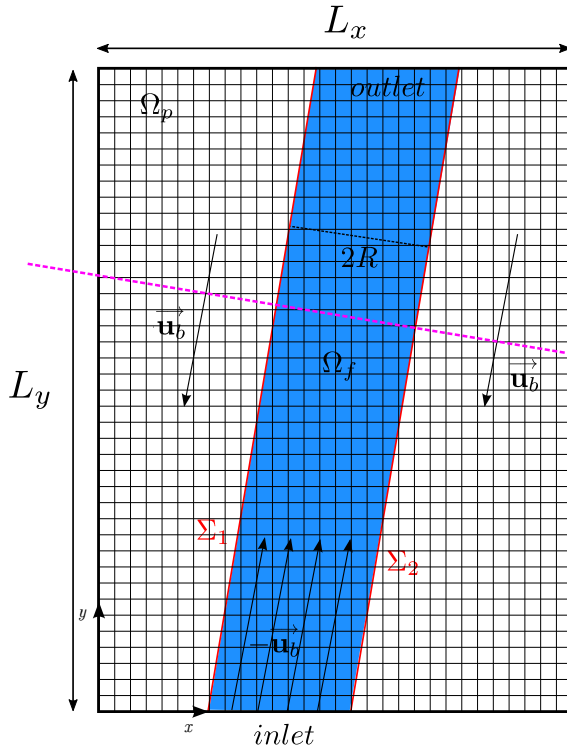


FIGURE 3.18: Schéma de la configuration du canal incliné.

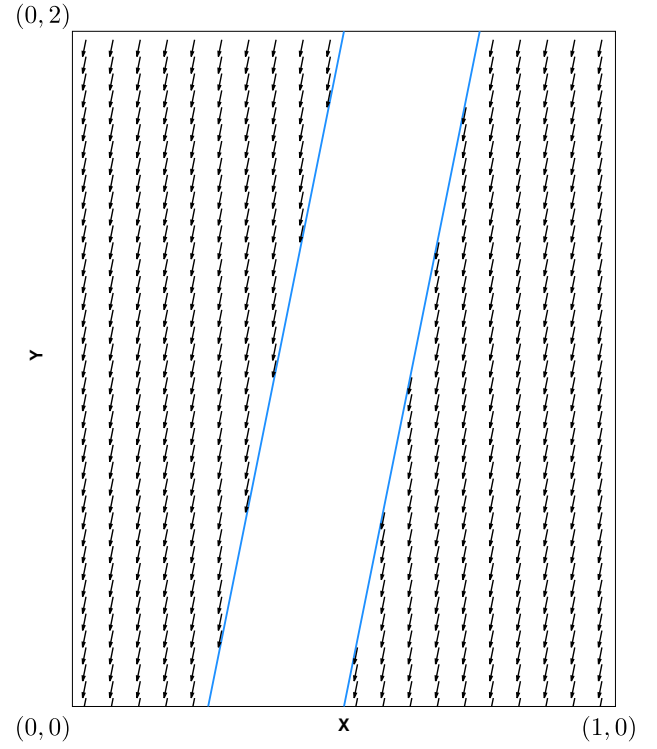


FIGURE 3.19: Initialisation du champ de vitesse à $t = 0$.

Du fait de la condition de glissement à l'interface, les parois en mouvement n'interagissent pas avec le fluide. L'état stationnaire de cet écoulement est décrit par les champs analytiques de pression et de vitesse notés respectivement P_s et $V_s = (V_{s_x}, V_{s_y})$:

$$\begin{cases} V_s = -\mathbf{u}_b \\ P_s = 0 \end{cases} \quad (3.85)$$

De façon analogue au cas de l'écoulement dans un canal courbe (section 3.3.1) et de l'écoulement potentiel autour du cylindre (section 3.3.2), la vitesse fluide dans le domaine Ω_f est initialisée à un état de déséquilibre (Figure 3.19) :

$$\begin{cases} V_x = 0 \\ V_y = 0 \\ P = 0 \end{cases} \quad (3.86)$$

3.4. Configurations d'objets pénalisés mobiles

Ainsi, la vitesse imposée \mathbf{u}_b du domaine pénalisé est opposée à la vitesse d'entrée du fluide. Cette configuration correspond au cas le plus défavorable entre le domaine fluide et le domaine pénalisé. Ce cas test permet d'examiner la capacité de l'algorithme de résolution à converger vers la solution analytique à partir d'une configuration défavorable. Ceci n'est réalisable si et seulement si la condition de glissement est correctement imposée à l'interface. Dans le cas contraire, le mouvement des parois défilantes viendra altérer près de l'interface le champ de pression et le champ de vitesse dans le domaine fluide Ω_f . Ce cas test intégral permet l'évaluation de l'ensemble des modifications apportées à l'algorithme (CD)+(CMF)+(CS)+(CPG).

Le fluide est injecté dans le canal à $t = 0$ à la vitesse $V_{inlet} = -\mathbf{u}_b$ (Figure 3.18). Nous avons réalisé au total 7 simulations pour des grilles de 20, 40, 80, 160, 320, 640 et 1280 éléments dans la largeur L_x du domaine. Les paramètres de calculs sont renseignés dans la Table 3.14. La simulation sur le maillage le plus grossier établit le temps de final de calcul, qui correspond à une invariance du champ de vitesse dans le domaine fluide ($t_f = 5s$).

$R(m)$	$\rho_f(kg.m^{-3})$	$\mu_f(Pa.s)$	$t_f(s)$	$\mathbf{u}_b(ms^{-1})$	$V_{inlet}(ms^{-1})$
0.5	1000	0.1	5	(-0.1, -0.8)	(0.1, 0.8)

TABLE 3.14: Paramètres numériques de simulation (écoulement en canal incliné).

Un calcul supplémentaire a été réalisé (NCR) pour un niveau de raffinement correspondant à 20 mailles dans la largeur du domaine. Afin d'illustrer la capacité du code à imposer la condition de glissement à l'interface, nous avons extrait les champs de vitesse de chacune des simulations (CR) et (NCR) (Figure 3.20) pour le maillage de 20×40 éléments. Dans le cas (CR), on observe que le champ de vecteur demeure homogène tout le long du canal, alors que dans le cas (NCR), le champ de vitesse est perturbé au voisinage proche de l'interface. La trajectoire des particules du fluide dans le canal est oscillante le long du canal, le champ de vitesse ne pouvant se stabiliser.

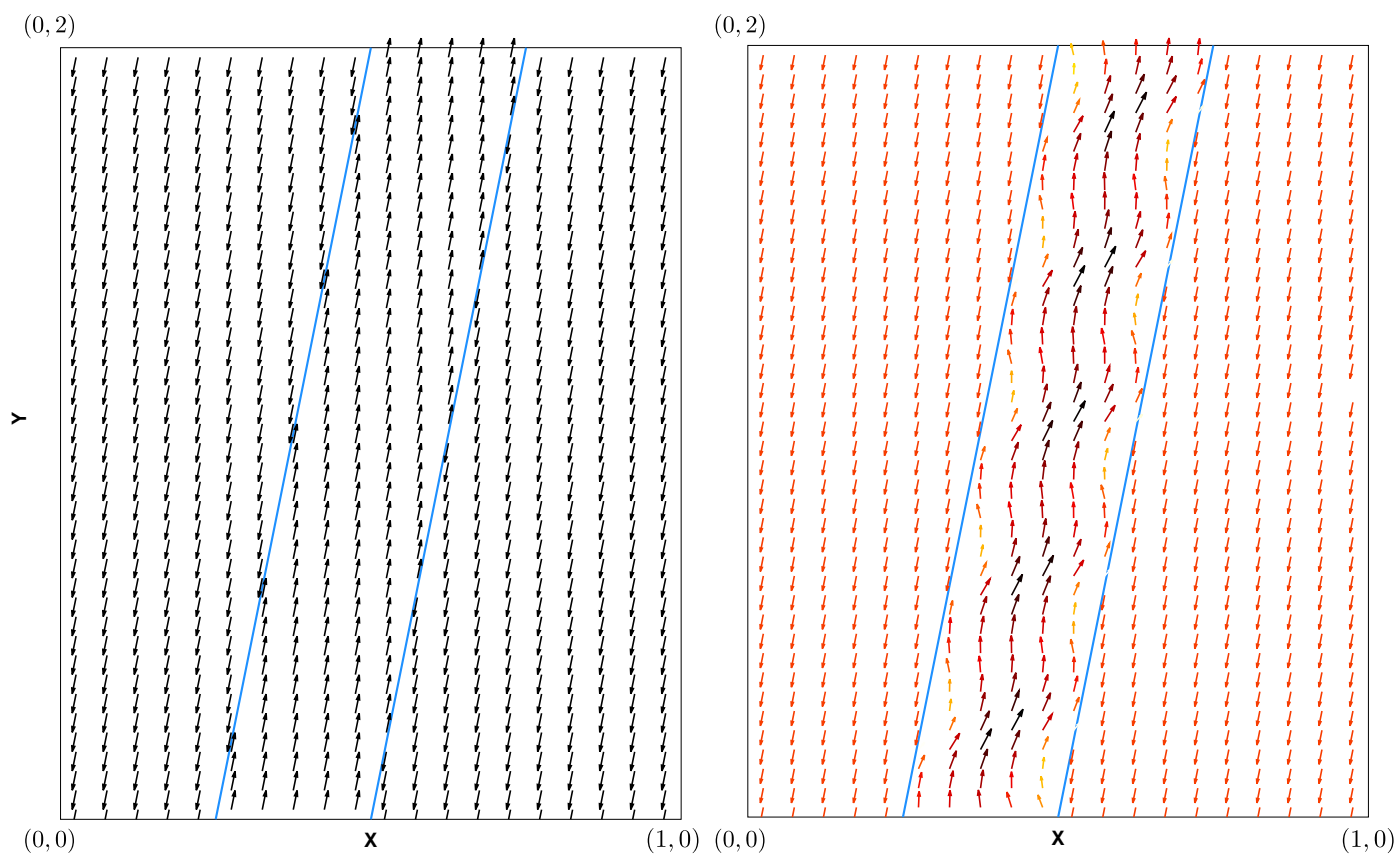


FIGURE 3.20: Champs de vecteurs vitesses à $t = t_f$, grille 20×40 ,
Gauche : (CR) ; Droite : (NCR).

Nous avons également extrait de ces simulations des profils de vitesse et de pression (Figure 3.21) selon un axe traversant perpendiculairement Σ_1 et Σ_2 (Figure 3.18). L'analyse des profils de vitesse et de pression confirme le comportement décrit précédemment.

3.4. Configurations d'objets pénalisés mobiles

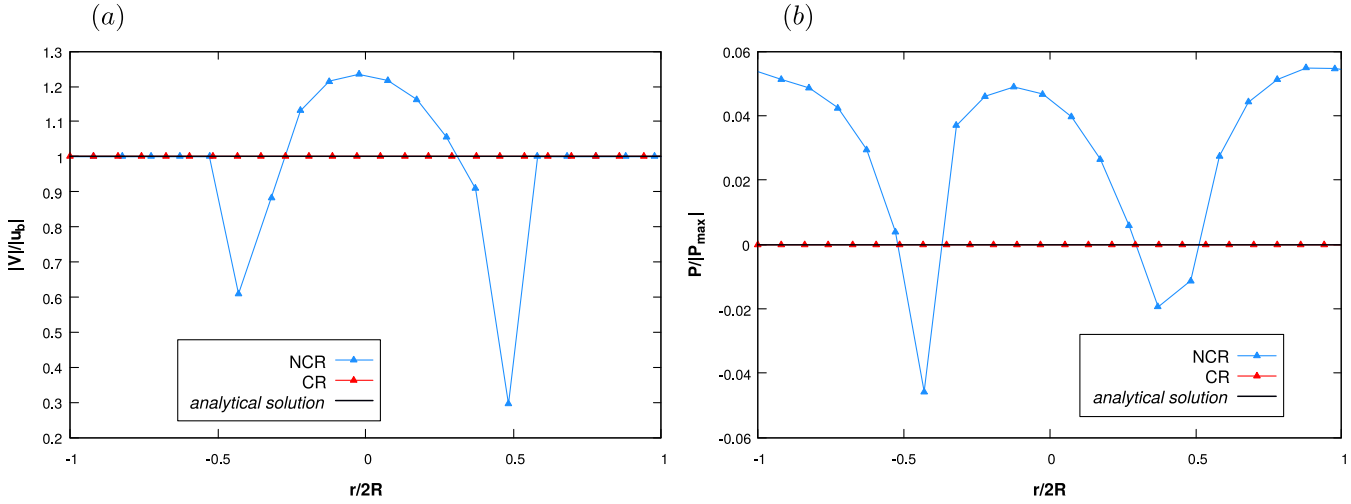


FIGURE 3.21: Simulation sur un maillage de 20×40 éléments. (a) : profils de pression normalisée et (b) : profils de vitesse normalisée en travers du canal incliné.

Afin d'examiner l'évolution de l'erreur de l'état initial du fluide jusqu'à son état stationnaire et convergé, nous avons également extrait l'erreur en norme L_1 du champ de pression P et des composantes du vecteur vitesse V_x et V_y (Figure 3.22) à différents temps de la simulation $t = 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100\%$ de t_f . Pour l'approche (CR), l'erreur des composantes de vitesse décroît très rapidement pour atteindre son minimum à 80% de t_f et se stabiliser jusqu'à la fin de la simulation pour une mesure d'erreur finale proche de 10^{-17} . L'erreur de la pression décroît également très rapidement et se stabilise à environ $t = 70\%t_f$, pour une mesure d'erreur finale proche de 10^{-15} . L'erreur finale mesurée pour chacun des champs atteste de la grande précision de la méthode numérique. L'évolution de l'erreur pour la simulation (NCR) met en évidence la divergence de l'algorithme en l'absence de modification de la discrétisation originelle des équations de Navier-Stokes. Cet résultat de d'étude est crucial car l'usage final de la méthode est destiné à simuler des écoulements avec des inclusions en mouvement. Une validation de la méthode sur une base exclusive de cas-tests statiques n'aurait pas permis de soulever ce point important.

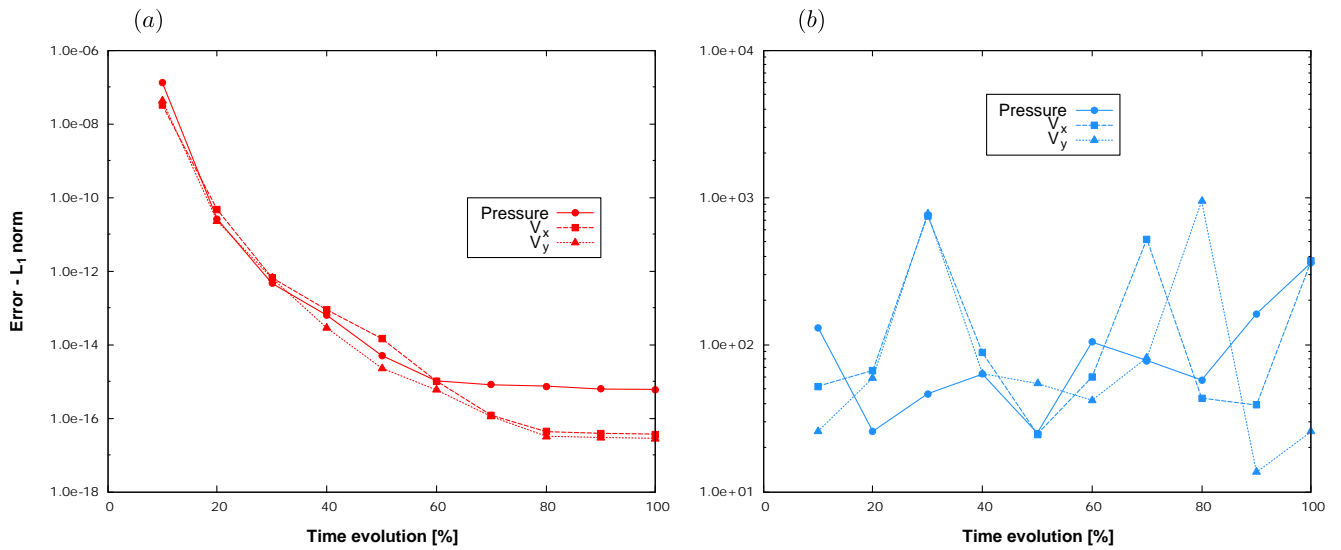


FIGURE 3.22: Évolution de l’erreur en norme L_1 de la pression P et des composantes de vitesse V_x et V_y (grille 40x80) : (a) : CR ; (b) : (NCR).

Afin d’examiner l’influence du raffinement en maillage sur la précision de la résolution de l’algorithme, une mesure de l’erreur en norme L_1 sur la pression $|P - P_s|_1/|P_s|_1$ et les composantes du vecteur vitesse $|V_x - V_{sx}|_1/|V_{sx}|_1$ et $|V_y - V_{sy}|_1/|V_{sy}|_1$ a été réalisée sur chacun des maillages. L’évolution de l’erreur est tracée en Figure 3.23. L’erreur demeure très faible ($< 10^{-15}$) pour la pression et pour les composantes de vitesse ($< 10^{-17}$), du maillage le plus grossier au plus fin, ce qui atteste de la précision de la méthode.

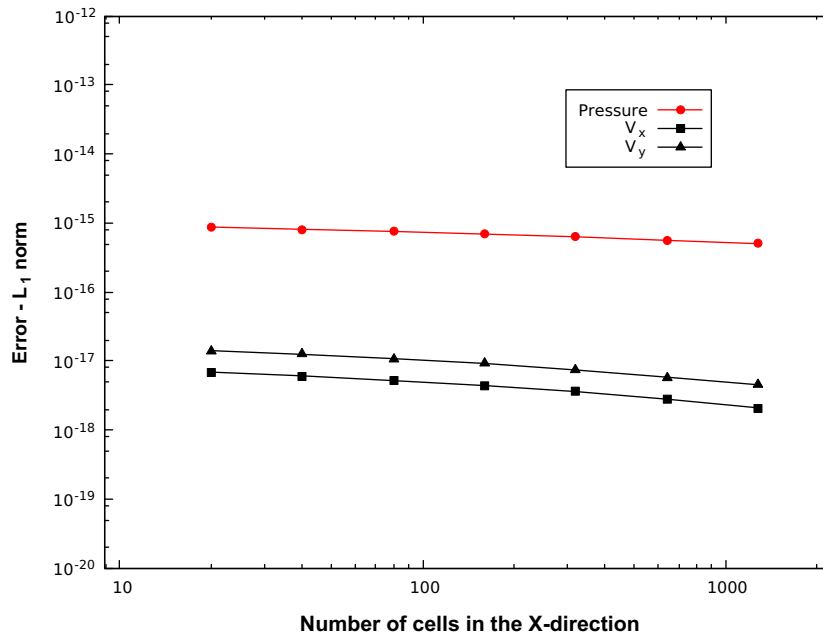


FIGURE 3.23: Étude de convergence des champs $P, (V_x, V_y)$ en norme L_1 (écoulement en canal incliné).

3.4. Configurations d'objets pénalisés mobiles

3.4.2 Bulle sphérique en mouvement relatif nul et homogène dans le fluide

Nous étudions dans ce cas-test 3D le déplacement uniforme d'une bulle sphérique à vitesse relative nulle avec un fluide visqueux et incompressible. Ce cas test permet l'évaluation de l'ensemble des modifications apportées à l'algorithme (CD)+(CMF)+(CS). La bulle sphérique de rayon $R = 0.0016\text{m}$ se déplace à vitesse constante $\mathbf{u}_b = (\mathbf{u}_{bx}, \mathbf{u}_{by}, \mathbf{u}_{bz}) = (0.10, 0.15, 0.20) \text{ ms}^{-1}$ dans un domaine cubique $L^3 = 0.01\text{m} \times 0.01\text{m} \times 0.01\text{m}$ (Figure 3.24). La position de la bulle est notée (x_b, y_b, z_b) .

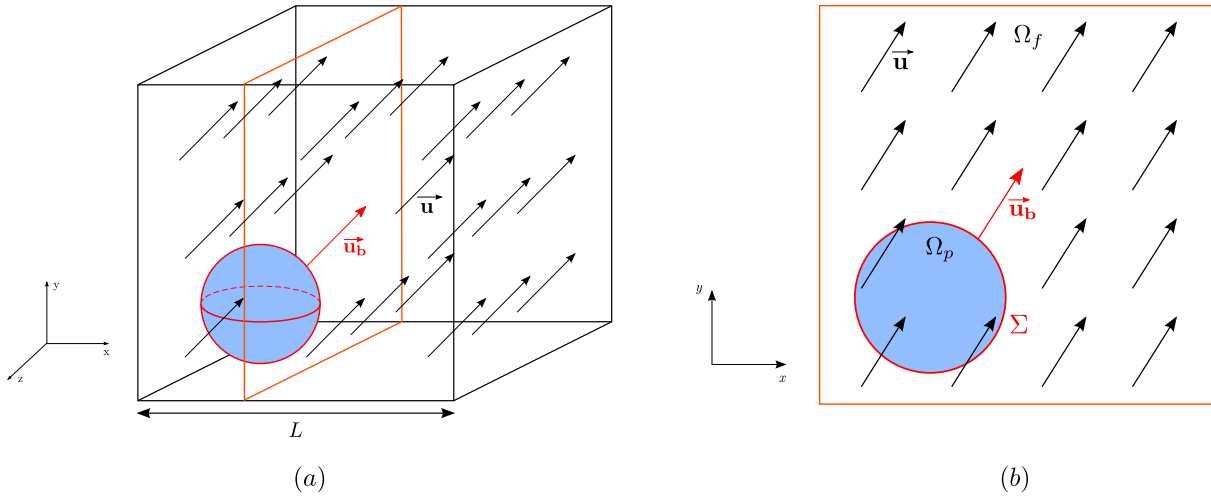


FIGURE 3.24: (a) Initial sketch of the configuration, (b) Extracted plane.

Des conditions de périodicité sont imposées sur chaque face du cube. La condition de glissement à imposée à l'interface liquide-sphère Σ . A $t = 0$, la bulle positionnée en $p_0 = (0.002, 0.002, 0.002)$ se déplace jusqu'à atteindre la position p_f à $t = t_f$ telle que $|p_0 - p_f| = 0.75 \times L$. Considérons les conditions initiales suivantes :

$$\begin{cases} V(x, t = 0) = \mathbf{u}_b \\ P(x, t = 0) = 0 \end{cases} \quad (3.87)$$

Ainsi l'apport du terme de pénalisation $((\mathbf{u}_b - V)/\tau = 0)$ à l'équation de quantité de mouvement est nul. Les autres contributions de chacun des opérateurs des équations de Navier-Stokes sont neutralisées trivialement. Le problème pénalisé se réduit à l'examen d'un fluide en mouvement homogène constant dans un domaine périodique. Les champs de vitesse et de pression solutions du problème (notés V_s et P_s) sont égaux en tout temps aux conditions initiales 3.88 :

$$\begin{cases} V_s(x) = \mathbf{u}_b \\ P_s(x) = 0 \end{cases} \quad (3.88)$$

L'intérêt de l'étude de ce cas-test concerne la capacité de l'algorithme de résolution à reproduire cette invariance du champ de pression et de vitesse au cours de la

simulation. Seules les modifications faisant intervenir explicitement dans leur formulation l'interface via sa normale sont susceptibles d'altérer l'homogénéité des champs de vitesse et de pression. Nous nous intéressons tout particulièrement à ces modifications. Le calcul des flux de masse que nous proposons ne fait pas intervenir explicitement l'interface. Ce cas-test permet donc l'examen de la reconstruction du gradient de pression, de la formulation de la divergence et de l'imposition de la contrainte de cisaillement nulle à l'interface, tous trois faisant intervenir la normale à l'interface via les fractions surfaciques aux faces. Deux types de simulations ont été menées : la première avec simple ajout du terme de pénalisation (NCR), la deuxième intégrant dans l'algorithme de résolution les trois modifications mentionnées précédemment (CR).

$R(m)$	$\rho_f(kg.m^{-3})$	$\mu_f(Pa.s)$	$t_f(s)$	$\mathbf{u}_b(ms^{-1})$
0.5	1000	0.1	2	(0.1, 0.8)

TABLE 3.15: Paramètres numériques de simulation (bulle en mouvement homogène à vitesse relative nulle avec le fluide).

Le premier élément de comparaison présenté concerne les profils de vitesse et de pression tracés entre $-10R$ et $10R$ pour (NCR) et (CR) selon les droites de vecteurs directeurs colinéaires (D_1) à \mathbf{u}_b ou orthogonaux à \mathbf{u}_b (D_2, D_3) (Figure 3.25) sur un maillage relativement grossier (25^3 mailles). Les paramètres numériques de simulation sont rapportés dans en Table 3.15.

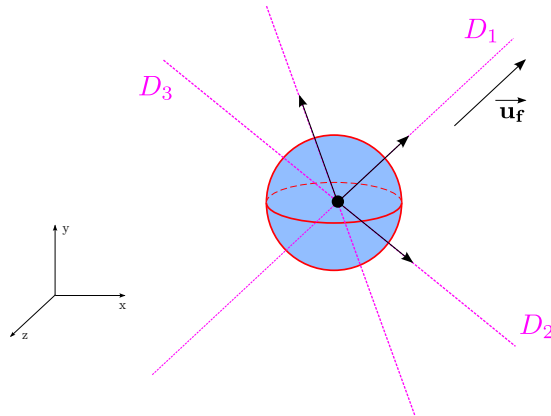


FIGURE 3.25: Directions utilisées pour l'établissement des profils.

Les profils de vitesse et de pression normalisés sont extraits à $t = t_f$ et tracés entre $-10R$ et $10R$ pour (CR) et (NCR) (Figures 3.4.2, 3.26 et 3.4.2). La solution théorique constante est également tracée. Pour (NCR) l'altération des champs de vitesse et de pression est flagrante, indépendamment de la direction considérée. Les profils de vitesse et de pression extrait de (CR) sont en très bon accord avec la solution théorique.

3.4. Configurations d'objets pénalisés mobiles

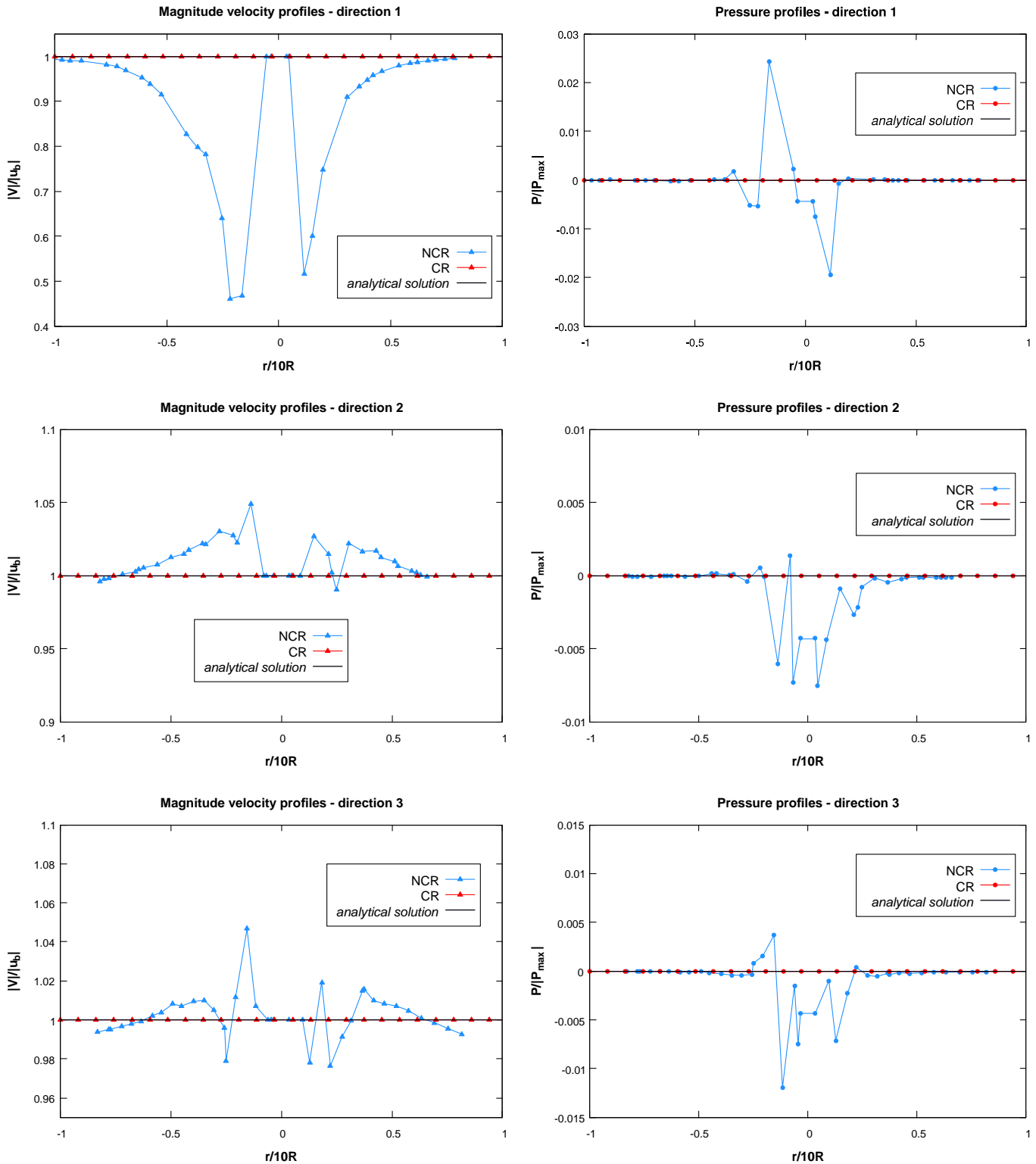


FIGURE 3.26: Profils de vitesse et de pression selon les directions D_1 , D_2 et D_3 .

Afin de mieux identifier les effets de l'absence de modification de la contrainte de cisaillement, du gradient de pression et de la formulation de la divergence, nous avons également extrait de la simulation précédente à $t = t_f$ les champs de vitesse

des plans correspondants à $x = x_b$, $y = y_b$ et $z = z_b$ (notés respectivement YZ, XZ, XY, Figure 3.27) pour (CR) et (NCR). L'analyse est identique pour chacun des plans extraits. Le champ de vitesse est rigoureusement homogène dans le cas de la simulation (CR). Pour la simulation (NCR), le fluide semble s'écouler autour de l'objet en mouvement ce qui traduit l'effet d'une contribution non désirée des formulations initiales non- modifiées de la contrainte de cisaillement, du gradient de pression et de la formulation de la divergence.

Un troisième élément d'analyse concerne la stabilité de la solution au cours du temps. Les mesures d'erreurs suivantes ont été réalisées pour chacun des cas - (CR) et (NCR) - (Table 3.16) à trois temps différents de simulation $t_1 = t_f/3$, $t_2 = 2t_f/3$ and $t_3 = t_f$ sur un maillage de 200^3 éléments. L'erreur demeure relativement faible et stable pour (NC) alors que l'erreur ne se stabilise pas pour (NCR).

	Méthode	t ₁	t ₂	t ₃
$\frac{ \mathbf{u} - \mathbf{u}_b _2}{ \mathbf{u}_b _2}$	CR	4.19×10^{-16}	4.14×10^{-16}	4.24×10^{-16}
	NCR	$1.76 \times 10^{+1}$	$2.61 \times 10^{+1}$	$1.31 \times 10^{+1}$

TABLE 3.16: Evolution de l'erreur L_2 sur la vitesse ; maillage de 200^3 éléments.

Finalement, une mesure de l'erreur en norme L_1 sur la pression $|P - P_s|_1/|P_s|_1$ et les composantes du vecteur vitesse $|V_x - V_{s_x}|_1/|V_{s_x}|_1$, $|V_y - V_{s_y}|_1/|V_{s_y}|_1$ et $|V_z - V_{s_z}|_1/|V_{s_z}|_1$ a été réalisée pour les maillages suivants : 25^3 , 50^3 , 100^3 , 200^3 , 400^3 et 800^3 (Figure 3.28). L'erreur demeure très faible ($< 10^{-15}$) et stable du maillage le plus grossier au plus fin, ce qui atteste de la performance de l'algorithme de résolution modifié.

3.4. Configurations d'objets pénalisés mobiles

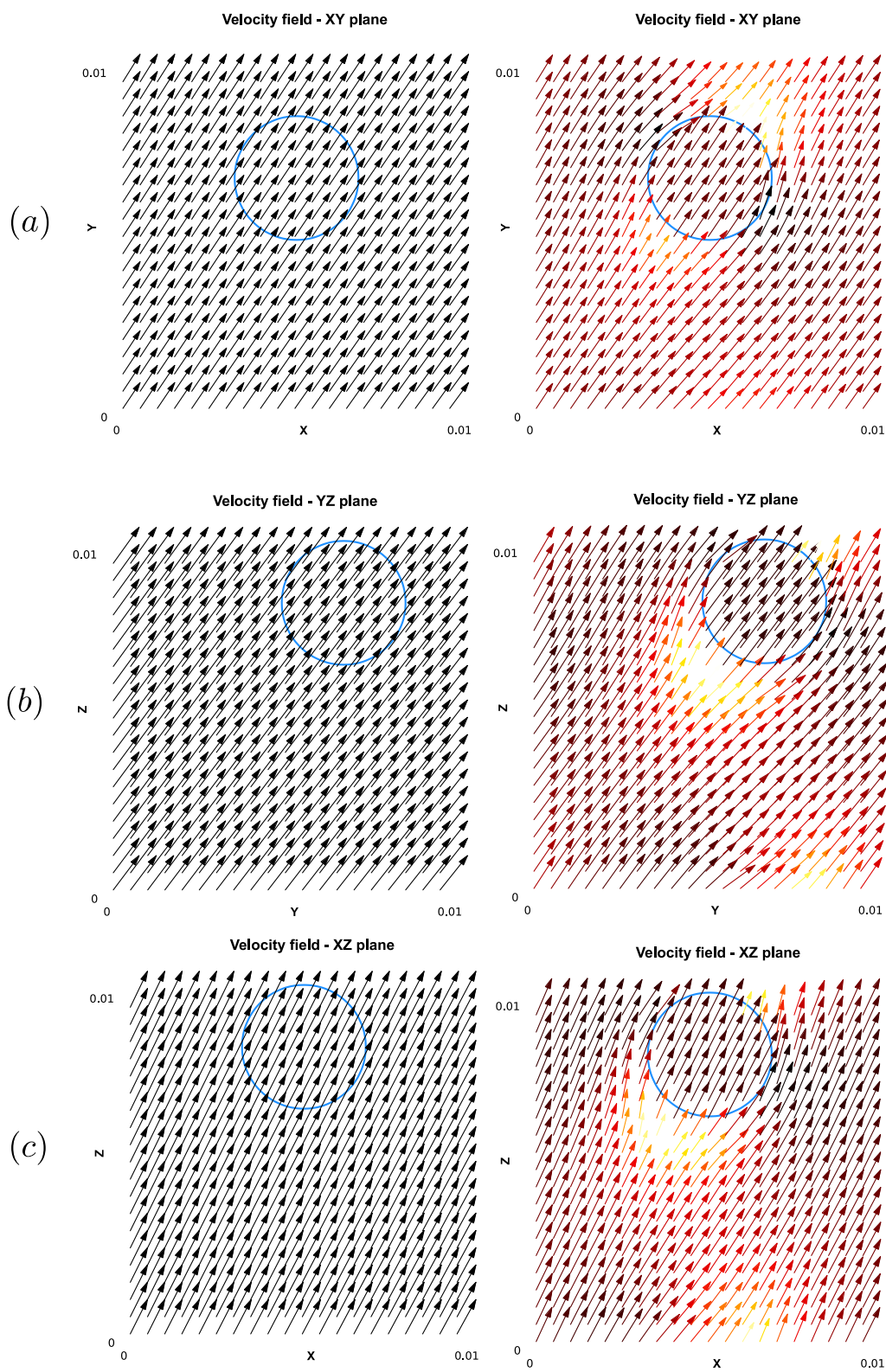


FIGURE 3.27: Champ de vitesse à la fin de la simulation $t = t_f$ (Gauche : (CR), Droite : (NCR)) : (a) plan YZ, (b) plan XZ et (c) plan XY.

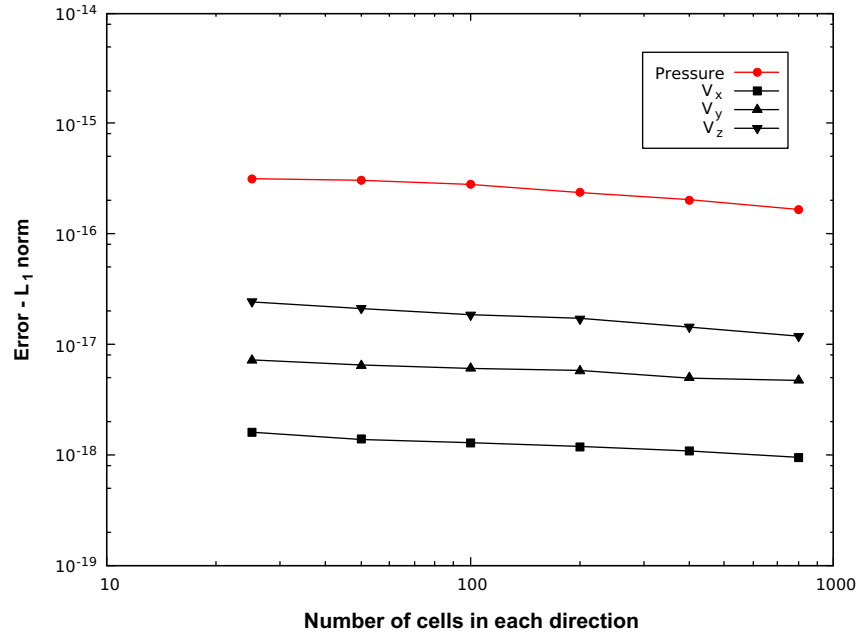


FIGURE 3.28: Étude de convergence pour $P, (V_x, V_y, V_z)$ en norme L_1 (bulle en mouvement homogène et relatif nul dans un fluide).

3.5 Conclusions

Ce chapitre constitue une base de validation complète et diversifiée de la méthode numérique, dans un usage restreint à la simulation d'écoulements avec objets pénalisés non-interagissant avec le fluide. Le cas-test d'écoulement dans un canal a permis de déterminer l'ordre de convergence de la méthode en norme L_1 (0.75 pour les composantes de vitesse, 2 pour la pression), qui a été par la suite confirmé par l'étude de l'écoulement potentiel autour du cylindre. L'écoulement autour du cylindre avec viscosité a permis l'examen des contributions des différentes modifications apportées à l'algorithme. Le premier cas-test dynamique présenté (écoulement en canal incliné avec parois défilantes) démontre la capacité de la méthode à converger vers une solution analytique malgré des conditions initiales « défavorables ». Le dernier cas-test présenté annonce des perspectives réjouissantes pour la suite du processus de validation. La configuration étudiée, objet du chapitre suivant est quasi-analogue (hormis l'activation du couplage liquide-bulles) à l'étude du déplacement d'une bulle sphérique en terme de représentation de l'objet sur une grille eulérienne tridimensionnelle. Pour chacun des cas-tests présentés, statiques ou dynamiques, la comparaison entre les simulations (NCR) et (CR) a mis en évidence la nécessité de modifier la discrétisation originelle des opérateurs différentiels des équations de Navier-Stokes, tel que nous l'avons décrit dans le chapitre précédent. La capacité de la méthode à traiter des interfaces de formes diverses ouvre également des perspectives d'utilisation de la méthode à champs d'application divers requérant le traitement d'une condition de glissement à l'interface.

Chapter 4

Validation of the method in a single bubble configuration

Contents

4.1	Introduction	119
4.2	Dynamics of a rising spherical bubble	122
4.3	Simulation strategy	123
4.4	Simulations results	124
4.4.1	Initial accelerations	125
4.4.2	Terminal velocities	127
4.4.3	Discussion : selection of the penalization viscosity	128
4.4.4	Velocity fields	130
4.4.5	Maximal vorticity	134
4.4.6	Wake profiles	135
4.5	Conclusions	138

4.1 Introduction

The aim of this chapter is to continue the validation of the numerical method started in the previous chapter. So far, the validation process involved penalized objects with different shapes non interacting with the fluid : their movement in the fluid was not established from a computation of the hydrodynamic forces acting on the bubbles. Thus, the lagrangian velocity of the bubble \mathbf{u}_b was set to a specific chosen value, depending on the configuration of the test-case considered. The full simulations involve a numerous number of bubbles (swarm configuration) ; with their motion determined as a consequence of the forces exerted on them. The coupling method selected as our best candidate (2.9.3) governs dynamically the coupling between the movement of the bubbles and the action of the fluid. The following chapter (and the next one, in which a swarm of bubbles is considered) continues the validation process. The penalized objects considered are now exclusively spherical. All the validation of the coupling method is done in a 3D configuration.

We oriented our study on the simulation of a spherical bubble rising in a quiescent liquid. The Reynolds number of the study is defined as :

Chapter 4. Validation of the method in a single bubble configuration

$$Re = \frac{\rho_f \mathbf{u}_{bT} 2R}{\mu_f} \quad (4.89)$$

where R denotes the bubble radius, \mathbf{u}_{bT} the terminal velocity of the bubble, ρ_f the density of the fluid, and μ_f the fluid viscosity.

For a clean spherical bubble, the force balance on the bubble can be written as [Magnaudet and Eames (2000)] :

$$\begin{aligned} C_M \frac{\pi d_b^3}{6} \rho_f \frac{d\mathbf{u}_b}{dt} = C_d \frac{\pi d_b^2}{8} \rho_f \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_b\| (V_0 - \mathbf{u}_b) - \frac{\pi d_b^3}{6} \rho_f g \\ + (1 + C_M) \frac{\pi d_b^3}{6} \rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) + C_l \frac{\pi d_b^3}{6} \rho_f (\mathbf{u}_b - \mathbf{u}) \times \Omega \end{aligned} \quad (4.90)$$

with d_b the diameter of the bubble, \mathbf{u} the velocity of the bubble, \mathbf{u} and Ω the instantaneous undisturbed liquid velocity and vorticity, C_M the added mass coefficient, C_d the drag force coefficient and C_l the lift force coefficient. The history force is neglected in this formulation. Many analytical, numerical and experimental studies have been dedicated to determine the expression of C_M , C_l , C_d in a wide range of flow regimes. We shortly review the expressions in the literature of these coefficients for different flow configurations.

For high Reynolds numbers, the drag coefficient writes as [Moore (1959)] :

$$C_d = \frac{48}{Re} \left[1 - \frac{2.21}{Re^{1/2}} \right] \quad (4.91)$$

For low Reynolds number, the expression of the coefficient is given by the well-known work of Hadamard and Rybczynski [Batchelor (1967)] :

$$C_d = \frac{16}{Re} \quad (4.92)$$

[Mei et al. (1994)] established an empirical drag law for clean spherical bubbles that matches both asymptotic limits :

$$C_d = \frac{16}{Re} \left\{ 1 + (8/Re + 1/2(1 + 3.315/Re^{0.5})^{-1}) \right\} \quad (4.93)$$

The added mass coefficient for a spherical object is $C_m = 1/2$. [Auton (1987)] calculations shown that for a rotational flow the numerical value of the lift coefficient C_l is $1/2$. As notable work around spherical rising bubbles, Tomiyama [Tomiyama et al. (1993)] calculated with a VOF method bubbles shapes and terminal velocities for a wide range of Eotvos and Morton (including nearly spherical bubbles) and compared the results with experiments. Recently, [Merle et al. (2005)] investigated the forces acting on the bubble at high Reynolds numbers. Experimental studies have also been dedicated to study the rise of nearly spherical (spheroids, due to a surface tension dominant regime) bubbles rising in a stagnant liquid [Tomiyama

4.1. Introduction

et al. (2002)].

Considering the configuration of a rising single bubble we selected for the validation, the drag coefficient is thus given by Mei correlation [Mei et al. (1994)] for a clean spherical bubble. The other forces involved in the dynamics are easily expressed (added mass, buoyancy). Thus the whole dynamics of a rising bubble in liquid at rest are obtained. This complete theoretical description allows us to analyze in detail the results of our numerical simulations.

An essential input of the study concerns the Reynolds number selected. The correlation for the drag force mentioned previously requires the bubble to remain spherical during its rise in the domain. To guarantee non-deformation of the bubble, we have chosen a range of Reynolds number whose value is between 1 and 100 according to the map of bubble regimes provided by [Grace (1973)] (Figure 4.1), assuming the lowest value of the Eötvös number. Above this range of Reynolds numbers, the deformation mechanism plays a key role in the dynamics of the bubble and must be taken into account in the numerical method. The simulations shown in the present work have been run for two Reynolds numbers $Re_1 = 17$ and $Re_1 = 71$. They are compared to previous results obtained from DNS.

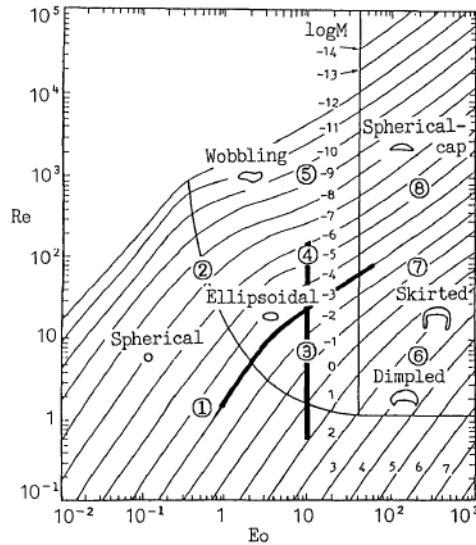


FIGURE 4.1: Graphical correlation proposed by Grace [Grace (1973)].

The coupling formulation introduces a dependence to the numerical parameter defined as the viscosity of penalization μ_p . The objective here is twofold : determine the effect of μ_p on the evolution of the rising velocity given by the theory. Then, study the influence of the mesh refinement on the results. The main complexity of the study relies on the fact that both of these effects are strongly coupled.

In the following sections, we first describe the dynamics of a rising spherical

bubble obtained through Mei's correlation. Then we detail the numerical configuration (numerical parameters, geometry, meshes selected) linked to our validation methodology. The simulations results provided by the simulations are shown and analyzed. Finally, we discuss the influence of the viscosity of penalization μ_p on the dynamics of the rising bubble.

The simulations have been carried out on EDF R&D supercomputer POR-THOS, a total of 24×28 CPU units were available for this study.

4.2 Dynamics of a rising spherical bubble

The dynamics of a rising bubble is governed by the balance between the added mass F_A , the drag force F_D , the history force F_H and the buoyancy F_G . The bubble motion is given by :

$$F_A = F_G + F_D + F_H \quad (4.94)$$

$$-m_f C_M \frac{d\mathbf{u}_b}{dt} = -m_f g + \frac{1}{2} \rho_f C_d \pi R^2 \mathbf{u}_b^2 + F_H \quad (4.95)$$

where the drag coefficient is described through the correlation [Mei et al. (1994)] :

$$C_d = \frac{16}{Re} \left\{ 1 + (8/Re + 1/2(1 + 3.315/Re^{0.5})^{-1}) \right\} \quad (4.96)$$

and $m_f = \rho_f \frac{4}{3} \pi R^3$ is the mass of the fluid enclosing the same volume as the sphere, $m_b = \rho_b \frac{4}{3} \pi R^3$ the mass of the bubble, $C_M = 1/2$ the added mass coefficient for a spherical object. The history force F_H has been shown to be of second order for bubble motion at large Reynolds number [Magnaudet and Eames (2000)].

As shown by Equation 4.95, the bubble acceleration is controlled by the added mass. In particular, at $t = 0$, the balance between added mass and buoyancy gives :

$$\frac{1}{2} \frac{d\mathbf{u}_b}{dt} = g \quad (4.97)$$

The initial bubble acceleration a_0 is thus $a_0 = d\mathbf{u}_b/dt = 2g$.

The bubble terminal velocity \mathbf{u}_{bT} is given by the balance between buoyancy and drag :

$$F_D + F_B = 0 \quad (4.98)$$

$$-m_f g + \frac{1}{2} \rho_f C_d \pi R^2 \mathbf{u}_{bT}^2 = 0 \quad (4.99)$$

Equation 4.99 can be solved using non-linear solvers (the non-linearity of the equation is due to the dependance of C_d with Re), leading to the theoretical computation of the terminal velocity \mathbf{u}_{bT} .

4.3. Simulation strategy

Remark. The transient evolution of the bubble rising velocity can also be directly computed by solving (with non-linear solvers) the equation 4.95.

4.3 Simulation strategy

We consider the configuration described in (Figure 4.2) : a spherical bubble located at the bottom of a tank-like computational domain. Wall boundary conditions are set on each boundary. At t_0 , the bubble starts rising until reaching its terminal velocity, the simulation is stopped after the steady state being reached, for a final simulation time t_f depending on the considered Reynolds. Simulations have been carried out for two different viscosities leading to two different terminal velocities. The list of the parameters used is given in Table 4.17. The penalization parameter has no influence on the terminal velocities computed ; its value is set to $\tau = 10^{-14}$. We want to establish the isolated influence of the penalization viscosity μ_p on the terminal velocities of the bubble. The influence of the time step Δt has been shortly studied. The time step acts as decreasing factor for the terminal velocities. However, we chose to focus on the influence of μ_p and the mesh refinement, the influence of Δt is not further examined here. For each simulation we performed, the time step was chosen in order to satisfy the constant the CFL criteria : $|\mathbf{u}|\Delta t/\Delta x = 0.5$.

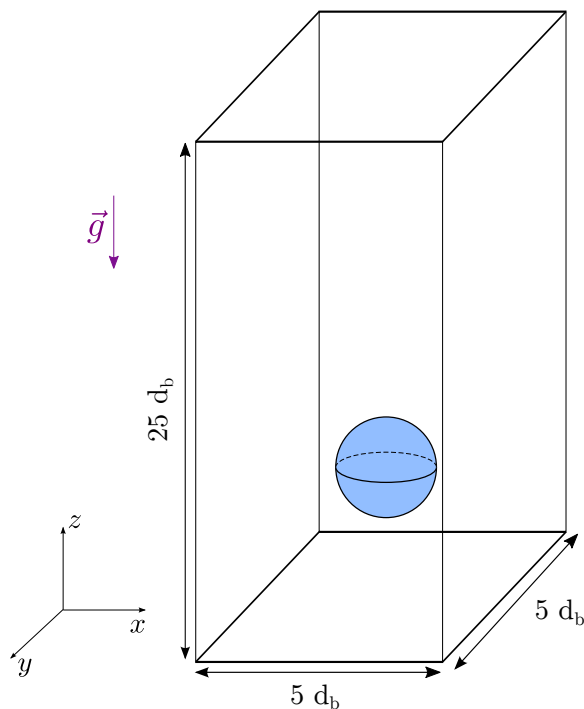


FIGURE 4.2: Initial configuration of the study : the bubble is located at the bottom of the tank.

Three grid refinements have been tested (Figure 4.3) : 4, 8 and 16 cells in the radius of the bubble. The dimensions of the computational domain are detailed

Chapter 4. Validation of the method in a single bubble configuration

d_b (mm)	ρ_b ($kg.m^{-3}$)	ρ_f ($kg.m^{-3}$)	μ_f (Pas)	t_f (s)	\mathbf{u}_{bT} (cm/s)	Re_b
1.0	50	1000	0.005	0.06	8.90	17.80
1.0	50	1000	0.0022	0.12	15.60	71.20

TABLE 4.17: Set of numerical parameters for the simulations.

on (Figure 4.2) : $5d_b \times 5d_b \times 25d_b$. The bubble starting position is $(x_b, y_b, z_b) = (0.25d_b, 0.25d_b, 0.2d_b)$. For $d_b = 1\text{mm}$, we have thus $\Omega = [0.005]^2 \times [0.025]$. This corresponds to the use of three meshes of 320 000, 2560000 and 20480000 cells. The boundary layer thickness estimation around the bubble evolves as $\delta \sim d_b/Re_b^{1/2}$. For $Re_b = 71$, $\delta \sim 0.00012$. The 3 mesh refinements we selected provides the following length of cell $h_0 = 0.00012, 0.000062$ and 0.000031 for respectively 4, 8 and 16 cells in the radius of the bubble.

48 simulations in total have been carried out for a wide range of internal viscosities, 8 for a given Reynolds number and grid refinement. The computational resources have been adapted to the refinement of each grid : $6 \times 24, 8 \times 24, 12 \times 24$ CPU units were used respectively for 4, 8 and 16 cells in the radius of the bubble, leading to the corresponding simulation times : *45min, 6hours, 20hours* for a single simulation.

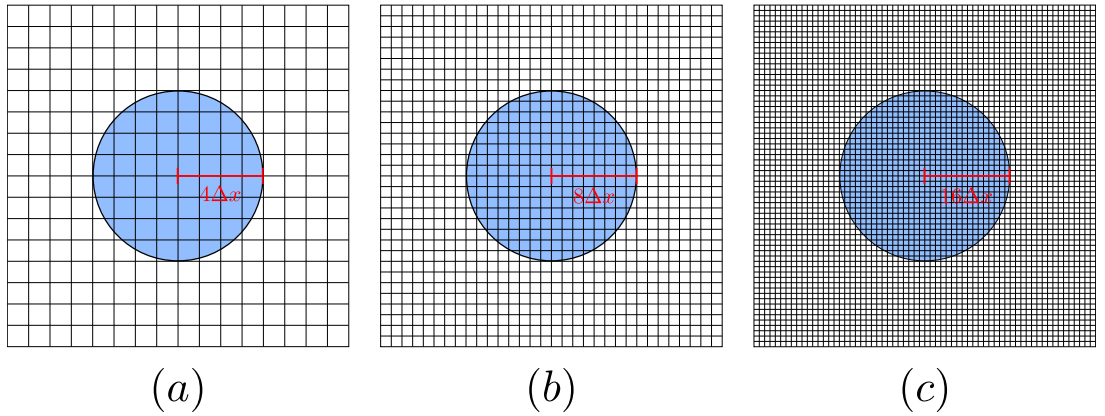


FIGURE 4.3: Mesh refinements selected for the study : (a) 4, (b) 8 and (c) 16 cells in the radius of the bubble.

4.4 Simulations results

We selected in total five elements of analysis to study the results provided by our simulations. We focus our attention on the initial acceleration (added mass effect), on the terminal velocity (dissipation effects) and on the bubble wake because of its importance for the development of the bubble induced agitation [Riboux et al. \(2010\)](#). We computed the maximal vorticity in the liquid field and compared its value to the DNS-based expression given in [[Legendre \(2007\)](#)]. We also extracted velocity fields to examine the influence of the mesh refinement on the results.

4.4. Simulations results

4.4.1 Initial accelerations

We present in Figures 4.4 and 4.5 the bubble rising velocities provided by the 48 simulations we made in total. For the sake of clarity, the simulations presented have been selected in terms of an increase of the penalization viscosity magnitude. The theoretical initial acceleration ($2g$, black line), the theoretical terminal velocity (red curve), both detailed in section 4.2 and the best fitting solution (blue curve) are also plotted.

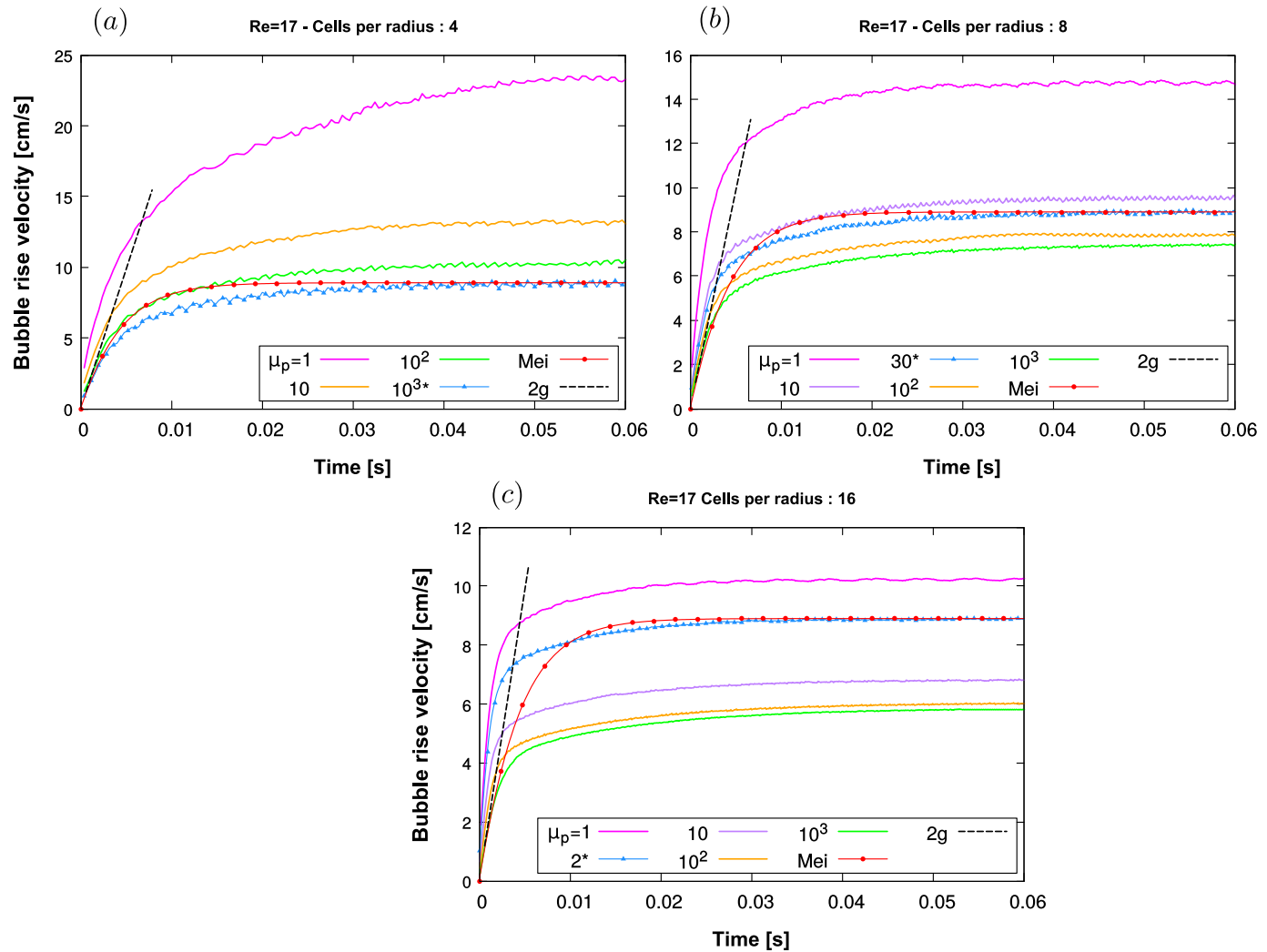


FIGURE 4.4: Rising velocities for $Re_b = 17$. The fitting solution is marked with the symbol $*$.

Chapter 4. Validation of the method in a single bubble configuration

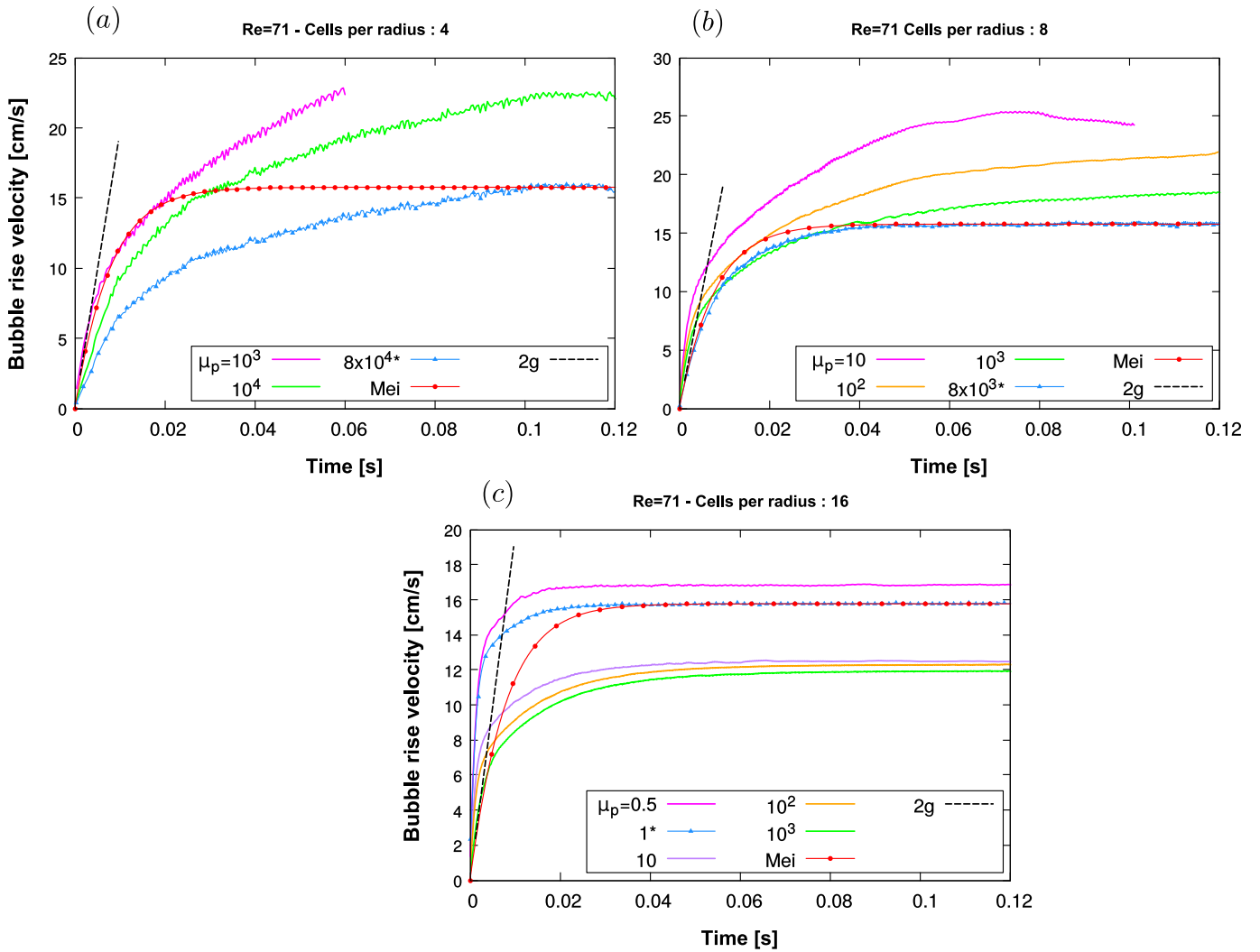


FIGURE 4.5: Rising velocities for $Re_b = 71$. The fitting solution is marked with the symbol *.

We reported in Table 4.18 the value of the initial acceleration of the plotted rising velocities. The results clearly highlight the decreasing influence of μ_p on the initial accelerations. For $Re_b = 17$, the associated value μ_p of the best candidates (closest accelerations to $2g$) increase with mesh refinement, while μ_p remains constant for $Re_b = 71$.

4.4. Simulations results

	Re_1			Re_2		
	F ₄	F ₈	F ₁₆	F ₄	F ₈	F ₁₆
$\mu_p = 0.5$	100
1	31	53	58	.	.	80
2	.	.	59	.	.	51
10	19	29	35	.	43	.
30	.	25
100	13	20	25	.	31	42
1000	12	17	18	17	26	24
8000	8	.
10000	.	.	.	10	.	.
80000	.	.	.	7	.	.

TABLE 4.18: Initial accelerations (ms^{-2}) of the bubbles. F₄, F₈, F₁₆ refers to 4, 8 and 16 cells in the radius of the bubble. Values in bold corresponds to the closest acceleration to $2g$.

4.4.2 Terminal velocities

We also reported in Table 4.19 the value of the terminal velocities of the plotted rising velocities.

	Re_1			Re_2		
	F ₄	F ₈	F ₁₆	F ₄	F ₈	F ₁₆
$\mu_p = 0.5$	16.80
1	23.28	14.66	10.26	.	.	15.89
2	.	.	8.87	.	.	.
10	13.05	9.30	6.81	.	24.24	12.56
30	.	8.90
100	10.51	7.62	6.01	.	21.41	12.52
1000	9.08	7.12	5.81	22.37	18.25	12.48
8000	15.68	.
10000	.	.	.	22.05	.	.
80000	.	.	.	15.49	.	.

TABLE 4.19: Terminal velocities (cms^{-1}) of the bubbles. F₄, F₈, F₁₆ refers to 4, 8 and 16 cells in the radius of the bubble. Values in bold corresponds to the closest velocities to the terminal velocity given by Mei correlation : $\mathbf{u}_{bT} = 8.90\text{cms}^{-1}$ for $Re = 17$, $\mathbf{u}_{bT} = 15.60\text{cms}^{-1}$ for $Re = 71$.

The results presented in Table 4.19 clearly establish the influence of μ_p as a decreasing factor for the terminal velocity of the bubble. For each Reynolds, and for each ratio of cells per radius, we are somehow able to expose a fitting rising velocity resulting from our simulations. For both Reynolds numbers, the associated

value μ_p of the best candidates (closest terminal velocities to Mei) decrease with mesh refinement.

4.4.3 Discussion : selection of the penalization viscosity

We discuss in this section the influence of μ_p on the initial acceleration and terminal velocities as shown by the previous simulation results. The criteria we picked in order to select the « correct » penalization viscosity concerned the terminal velocities (« regardless » of the initial acceleration) because it indicates the capability of the numerical method to reproduce the equilibrium between the drag and the buoyancy. In the two following figures, we plotted the evolution of both the acceleration (Figure 4.6) and the terminal velocity (Figure 4.7) as a function of the viscosity of penalization μ_p . The overall tendency observed is the decrease of both the acceleration and the terminal velocity with the increase of μ_p . For $Re_b = 17$, the fitting accelerations (intersecting with $2g$ in the Figure) correspond to a value of μ_p increasing with mesh refinement. Concerning the terminal velocities, this behavior is inverted : the fitting terminal velocities (intersecting with Mei terminal velocity) correspond to a decrease of the value of μ_p with mesh refinement. For $Re_b = 71$ the fitting initial acceleration is reached at $\mu_p = 1000$ for the three mesh refinements. However, the terminal velocity associated to $\mu_p = 1000$ does not fit with the theoretical result expected for any of the mesh refinement. These observations highlight the fact that selecting the fitting acceleration and fitting terminal velocity at the same time can be conflicting for both Reynolds. Thus, the choice to select $\mu_p = 1000$ based on a terminal velocity criteria seems to be the best option.

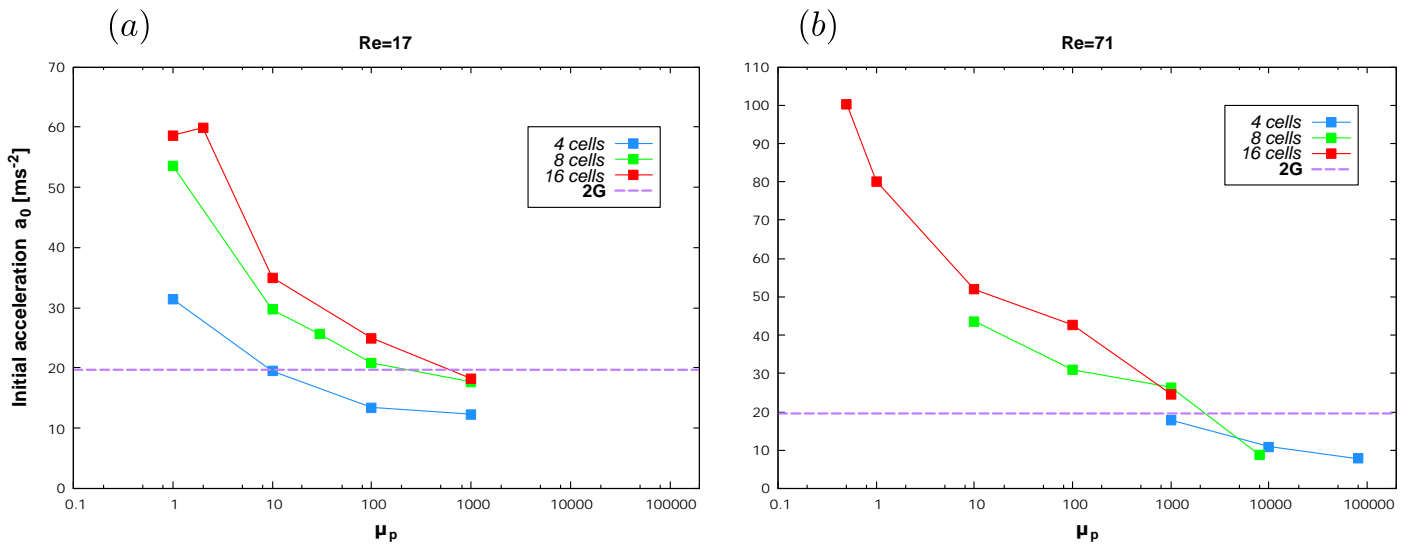


FIGURE 4.6: Influence of μ_p on the initial acceleration a_0 .

4.4. Simulations results

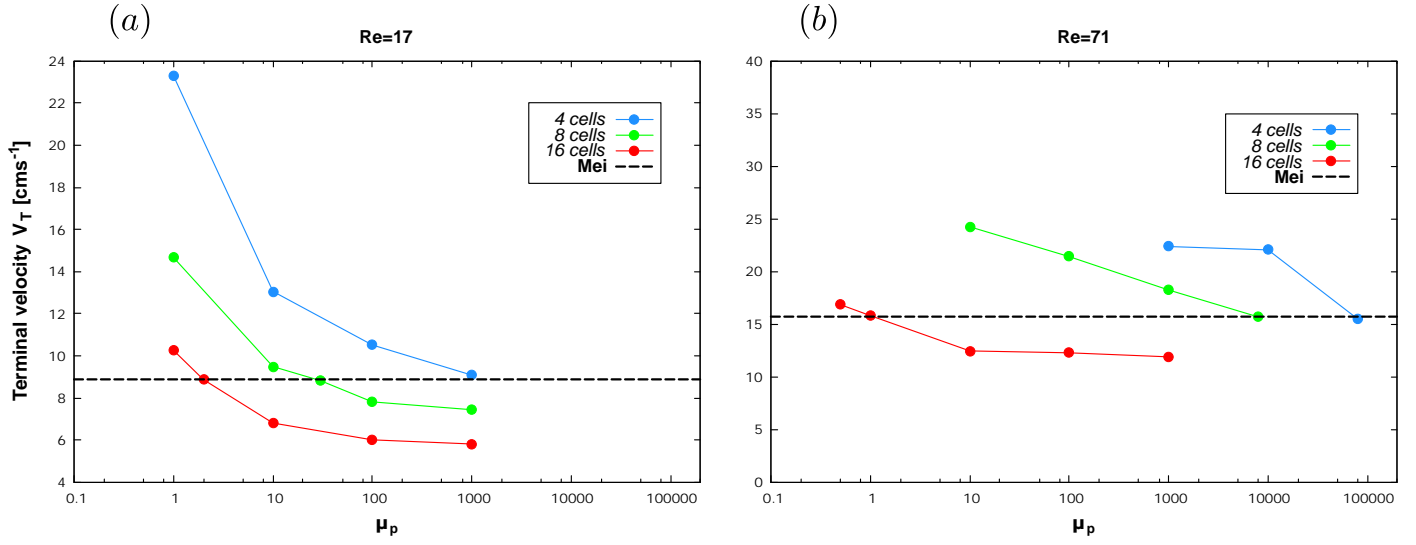


FIGURE 4.7: Influence of μ_p on the terminal velocity \mathbf{u}_{bT} .

A last observation can be made on the influence of μ_p on the computational cost. We see in Figure 4.7 that the fitting terminal velocities are reached for $\mu_p = 2, 10$ and 1000 (respectively for 16, 8 and 4 cells in the radius of the bubble) for $Re_b = 17$. The spacing between the values of μ_p has clearly increased for $Re_b = 71$ ($\mu_p = 1, 10000$ and 100000 respectively for 16, 8 and 4 cells). It is known that high penalization viscosities tend to slow down the solver used in NEPTUNE_CFD. To illustrate this point, we measured the CPU time for 9 simulations of a rising bubble corresponding to 9 values of $\mu_p = \{1, 10, 50, 100, 800, 1200, 2400, 4800, 9600\}$ for $Re_b = 17$ and with 4 cells in the radius of the bubble. We stopped them at the same final time, once the bubble on each simulation reaches its terminal velocity. The CPU times are reported in Figure 4.8. As μ_p increases, the CPU time increases steadily until reaching $\mu_p = 100$. Then it strongly increases between $\mu_p = 100$ and $\mu_p = 800$, and finally evolves steadily again between $\mu_p = 800$ and $\mu_p = 9600$.

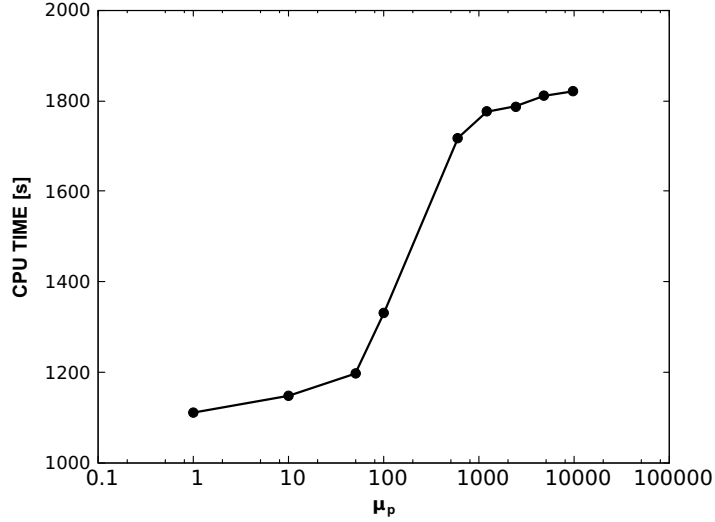


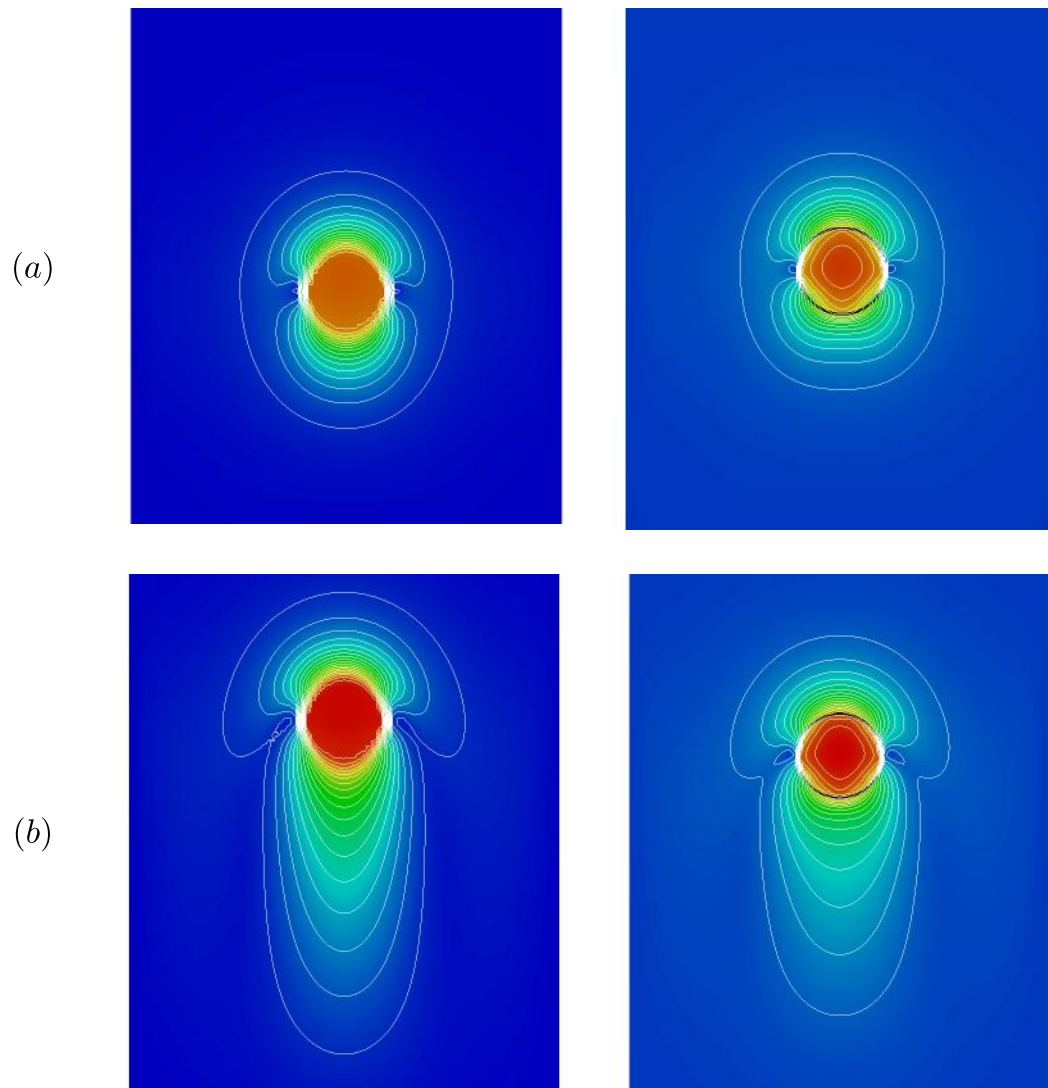
FIGURE 4.8: Influence of μ_p on the CPU Time.

The final simulations we are targeting involve high Reynolds numbers. As the Reynolds number increase, the required value of μ_p (giving the fitting terminal velocity) will also increase. With computational resources being limited, this aspect of the numerical method may represent a relative limitation for future purposes and can't be neglected. However, the nature of the influence of μ_p may differ when considering different configurations (swarm of bubbles). The influence of μ_p on the bubbles must be examined again.

4.4.4 Velocity fields

The results shown previously (initial acceleration, terminal velocities) illustrate the consequent influence of the viscosity of penalization μ_p on the final results. The other axis of investigation concerns the influence of the mesh refinement on the results. We extracted at three simulation times $t_1 = t_f/3$, $t_2 = 2t_f/3$ and $t_3 = t_f$ the velocity fields on the planes crossing the bubble in its middle, oriented vertically. We plotted the magnitude of the velocity and its contours (20 levels) for both Reynolds for numbers $Re_b = 17$ (Figure 4.9) and $Re_b = 71$ (Figure 4.10). Two grids refinements are compared : left figures, 8 cells in the radius ; right figures, 16 cells in the radius of the bubble. We recall that regardless of the refinement the terminal velocities are the same for a given Reynolds number.

4.4. Simulations results



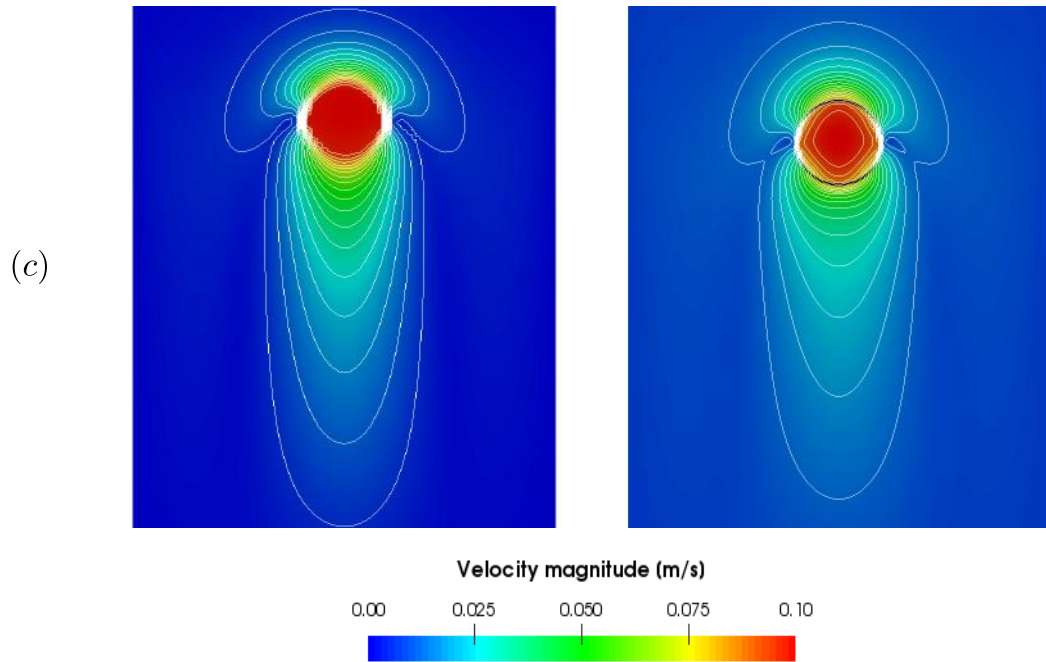
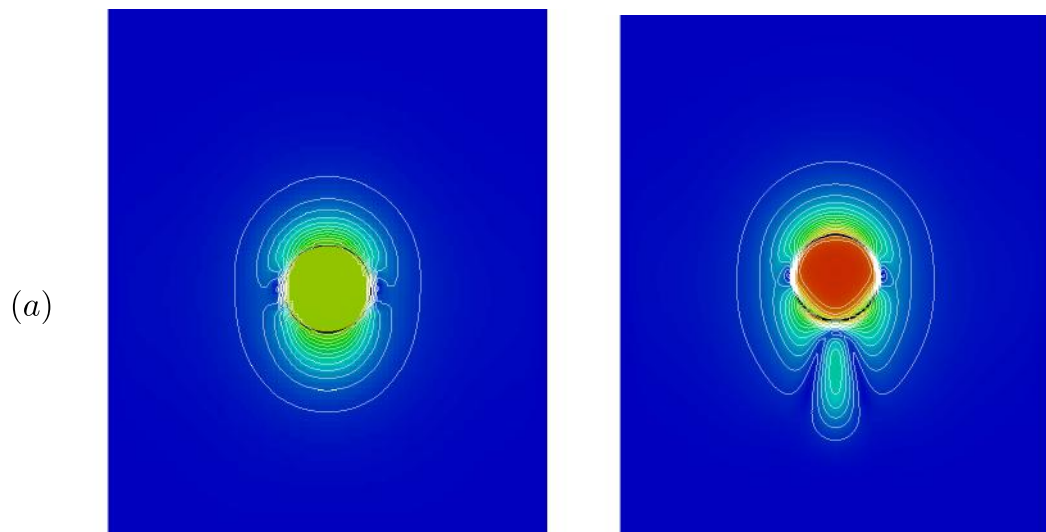


FIGURE 4.9: Rising velocity fields, $Re_b = 17$, left : 8 cells in the radius, right : 16 cells in the radius, simulation times : (a) $t = t_1$, (b) $t = t_2$, (c) $t = t_3$.

The presence of velocity contours inside the bubble for the finest refinement (right) clearly illustrate the tendency of the coupled influence of μ_p and the mesh refinement. The finer the mesh is, lower the penalization viscosity are, leading to a greater heterogeneity of the velocity field inside the bubble. Because of the continuity of the velocity field outside the bubble, this may impact the resolution of the flow around the bubble, mostly in the wake of the bubble. As expected, the vortices located horizontally on either side of the bubble are better reproduced for the finer mesh.



4.4. Simulations results

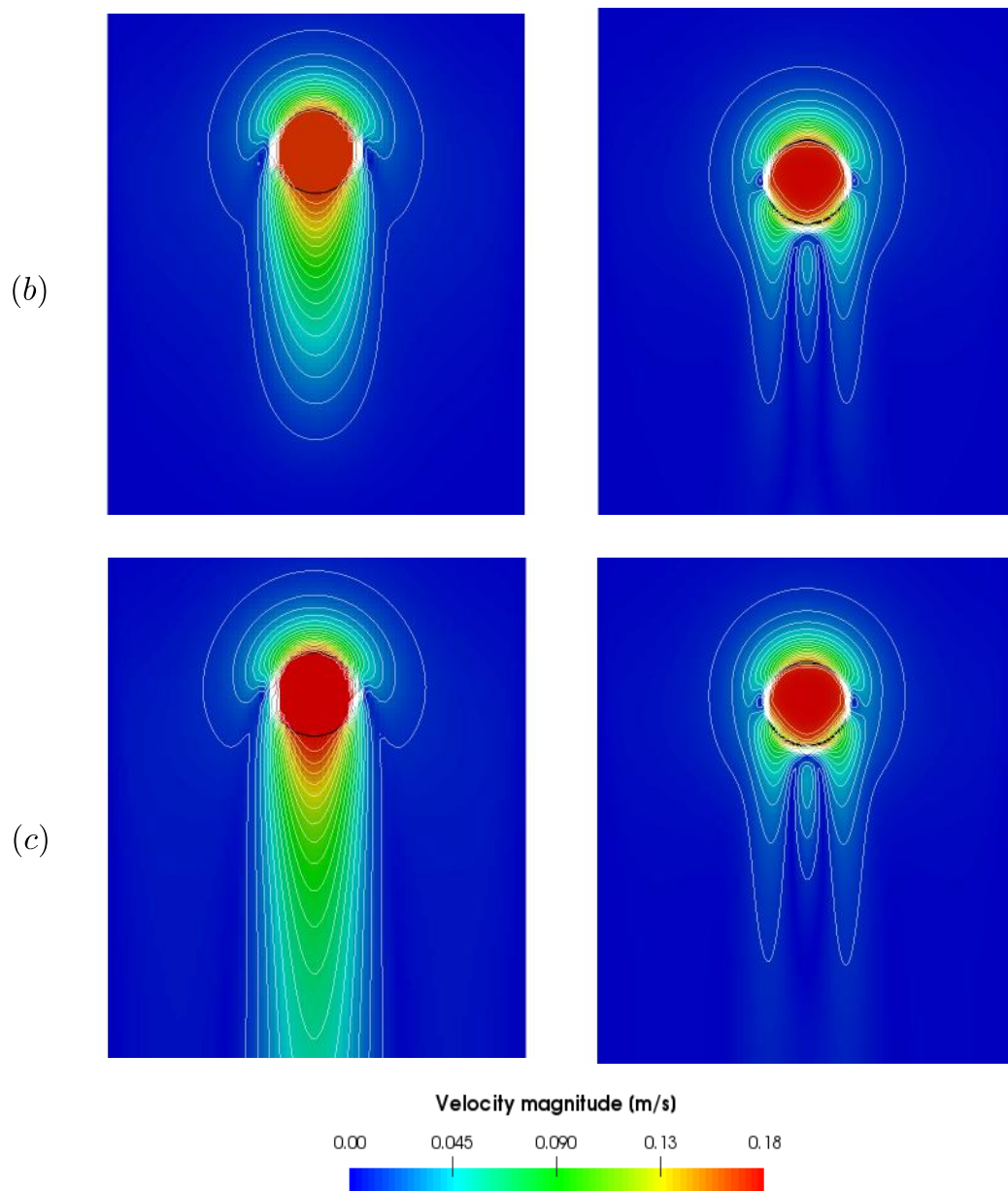


FIGURE 4.10: Rising velocity fields, $Re_b = 71$, left : 8 cells in the radius, right : 16 cells in the radius, simulation times : (a) $t = t_1$, (b) $t = t_2$, (c) $t = t_3$.

The same observations hold for $Re_b = 71$. In addition, we note that the refinement seems to change the structure of the velocity field around the bubble. The decrease of the velocity in the close-wake of the bubble is less continuous. The recirculations areas located horizontally on either side of the bubble are only observable for the finer mesh. This behavior is in agreement with the estimation of the boundary layer around the bubble detailed in section 4.3.

4.4.5 Maximal vorticity

In addition to the velocity fields, we also computed the maximal vorticity Ω_{max} for each mesh refinement and Reynolds number. The maximal vorticity for a spherical (or ellipsoidal) bubble moving steadily in a viscous fluid is given by the following expression [Legendre (2007)] :

$$\Omega_{max} = \frac{\mathbf{u}_{bT}}{R} \frac{16 + 3.315Re^{1/2} + 3Re}{16 + 3.315Re^{1/2} + Re} \quad (4.100)$$

with \mathbf{u}_{bT} the terminal velocity of the bubble as a function of the Reynolds number Re and R the radius of the bubble. This expression has been established through DNS simulations for Reynolds number ranging from 0.1 to 5000. The results are shown in Figure 4.11. The maximal vorticity provided by our simulations clearly show a convergence towards the DNS simulations. Due to the estimation of the boundary layer thickness evolving as $\delta \sim d_b/Re_b^{1/2}$, the results are slightly better for $Re = 17$.

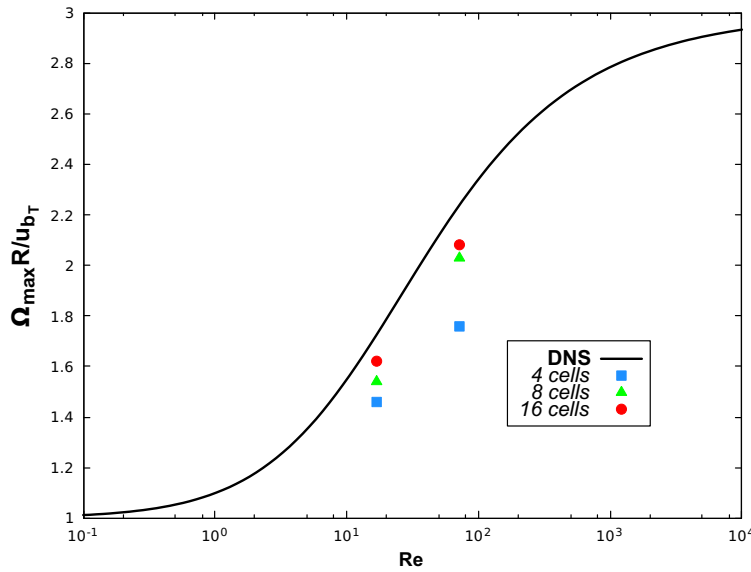


FIGURE 4.11: Normalized vorticity $\Omega_{max}R/\mathbf{u}_{bT}$ for $Re = 17$ and $Re = 71$.

According to [Legendre (2007)], it is also possible to deduce the maximum velocity $\mathbf{u}_{max} = \Omega_{max}/2$ at the bubble surface. The maximal velocity was not computed in this study, but the good agreement shown by the comparison of the maximal vorticity provided by our simulations with the DNS imply that the maximum velocity provided by our simulations might as well be in good agreement with the DNS. This important result highlights the capacity of the numerical method to compute good approximations of the bubble surface velocity. We also plotted the streamlines of the velocity magnitude for both Reynolds numbers for the finer mesh (16 cells). This representation shows clearly the location of the vorticity zones as mentioned in the previous section, which intensity is higher for the largest Reynolds

4.4. Simulations results

number.

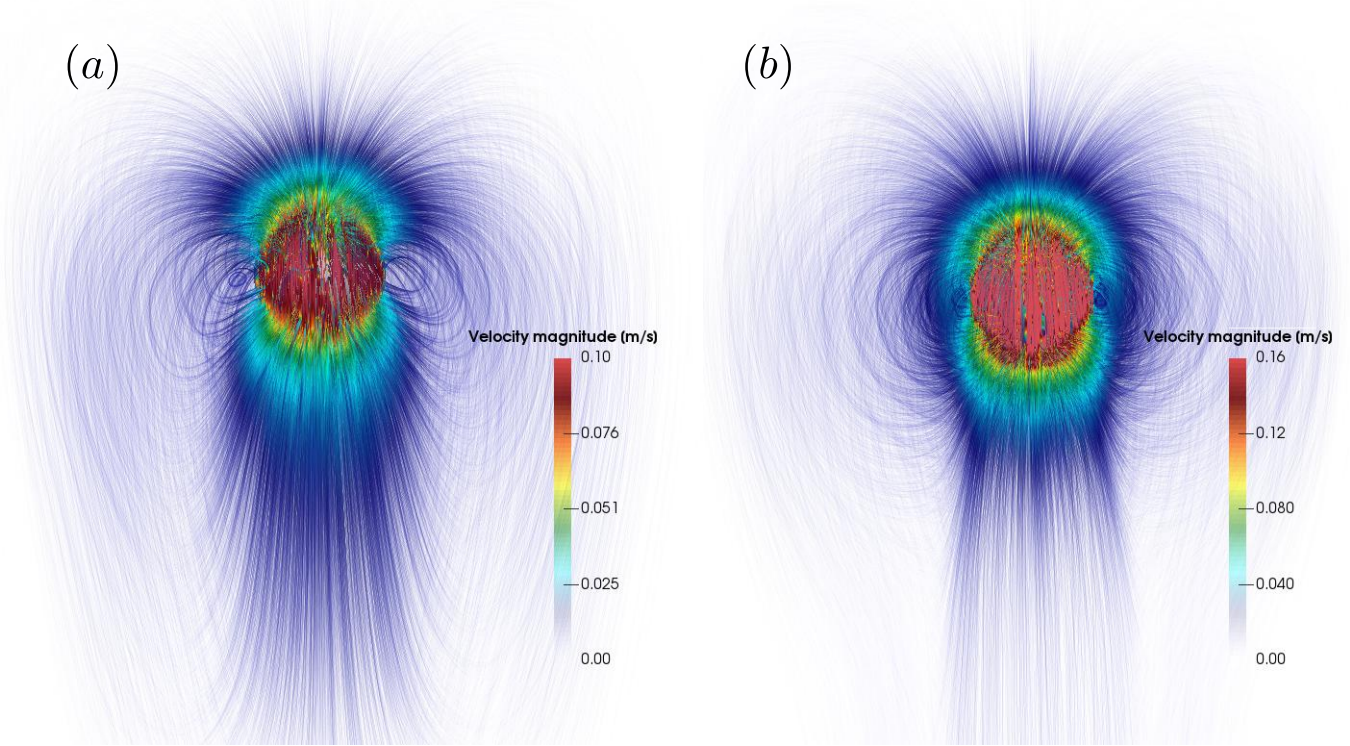


FIGURE 4.12: Streamlines of the velocity magnitude : (a) $Re_b = 17$, (b) $Re_b = 71$.

4.4.6 Wake profiles

The last element of analysis concerns the wake of the bubble. We focus on this element of analysis because of its importance for the development of bubble induced agitation. The liquid agitation in bubble swarm results from nonlinear interactions between bubble wakes. A detail on that description can be found in [Riboux et al. (2010)]. We denote X the radial distance from the wake axis, Y the distance downstream (see Figure 4.14). At large distances downstream, the flow is known to follow the standard far-wake behaviour and the velocity deficit profile is parallel to the X -direction and is given by [Batchelor (1967)] :

$$u_{wake} \sim \frac{-\mathbf{u}_{bT}Q}{4\pi\nu Y} \exp\left[\mathbf{u}_{bT} \frac{X^2}{4\nu Y}\right] \quad (4.101)$$

where $Q = F_D/\rho_f\mathbf{u}_{bT}$ is determined by integration over the wake and is directly related to the total drag F_D of the body.

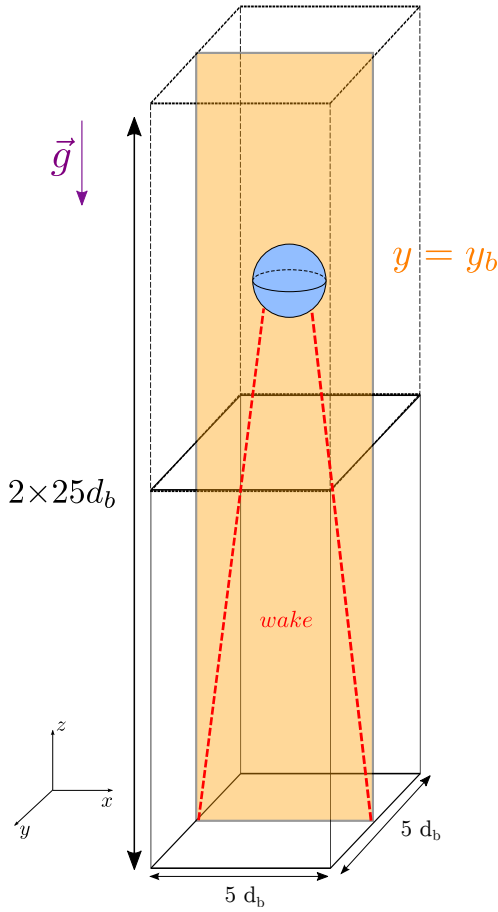


FIGURE 4.13: New configuration of the study : the initial domain has been doubled in the vertical direction.

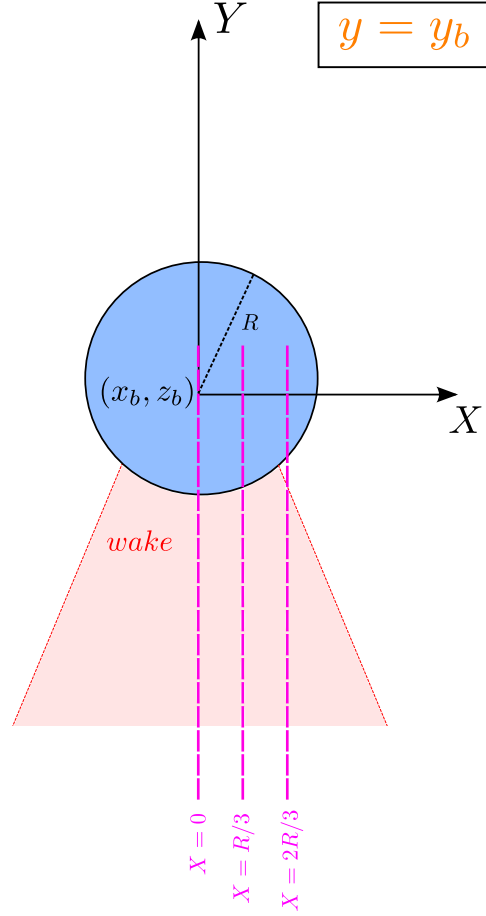


FIGURE 4.14: Configuration for the wake comparison.

We consider the configuration described in (Figure 4.13) : the initial domain has been doubled in the vertical direction to avoid any influence of the zero velocity set at the bottom boundary of the tank. As previously, wall boundary conditions are set on each boundary. At t_0 , the bubble starts rising until reaching its terminal velocity, the simulation is stopped when the bubble reach a position far enough from the bottom of the tank (at least $15 \times R$, R the radius of the bubble).

Given \mathbf{u}_{bT} and equation (4.101) we obtain the wake description for $X = 0$, $X = R/3$ and $X = 2R/3$ (Figure 4.14). The results are presented in the Figures 4.15, 4.16 and 4.17 for respectively $X = 0$, $X = R/3$ and $X = 2R/3$, for both Reynolds and for each mesh refinement : 4, 8 and 16 cells in the radius of the bubble. The decrease of the velocity in the wake has been measured between $1.5 \times R$ and $15 \times R$ from the bottom of the bubble.

4.4. Simulations results

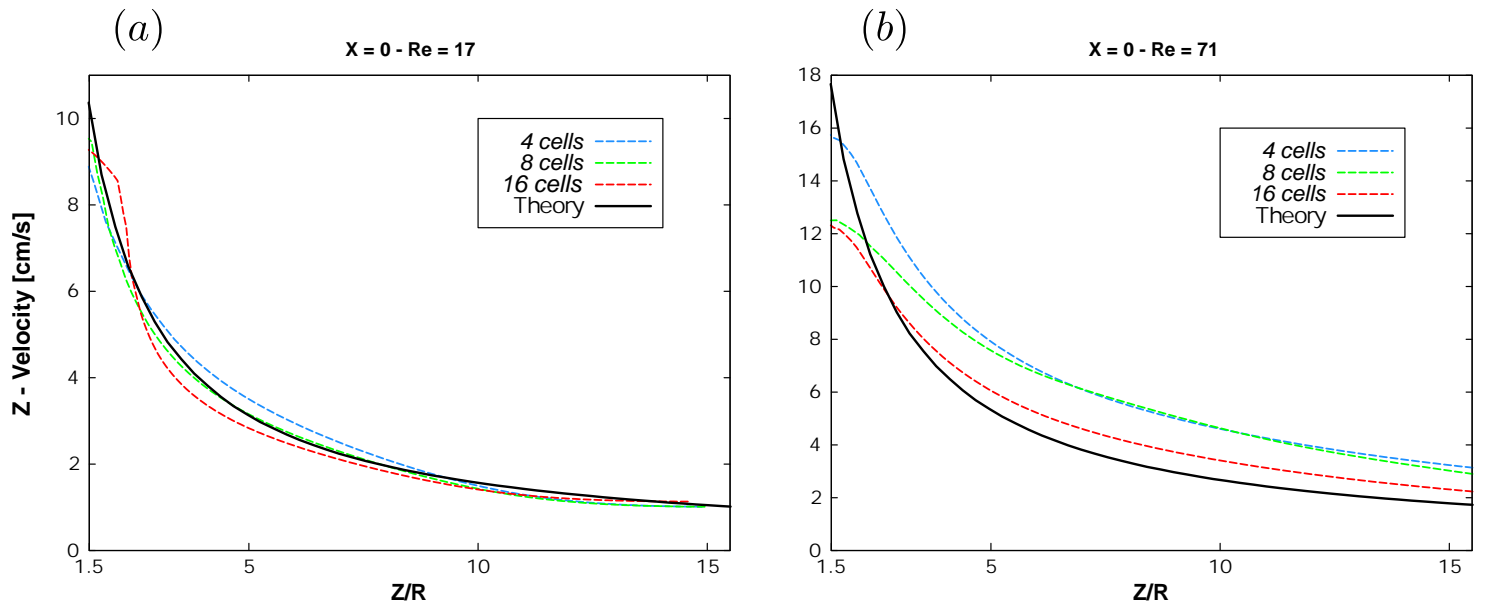


FIGURE 4.15: Profile of the rise velocity in the wake of the bubble, $X = 0$: (a) $Re = 17$, (b) $Re = 71$.

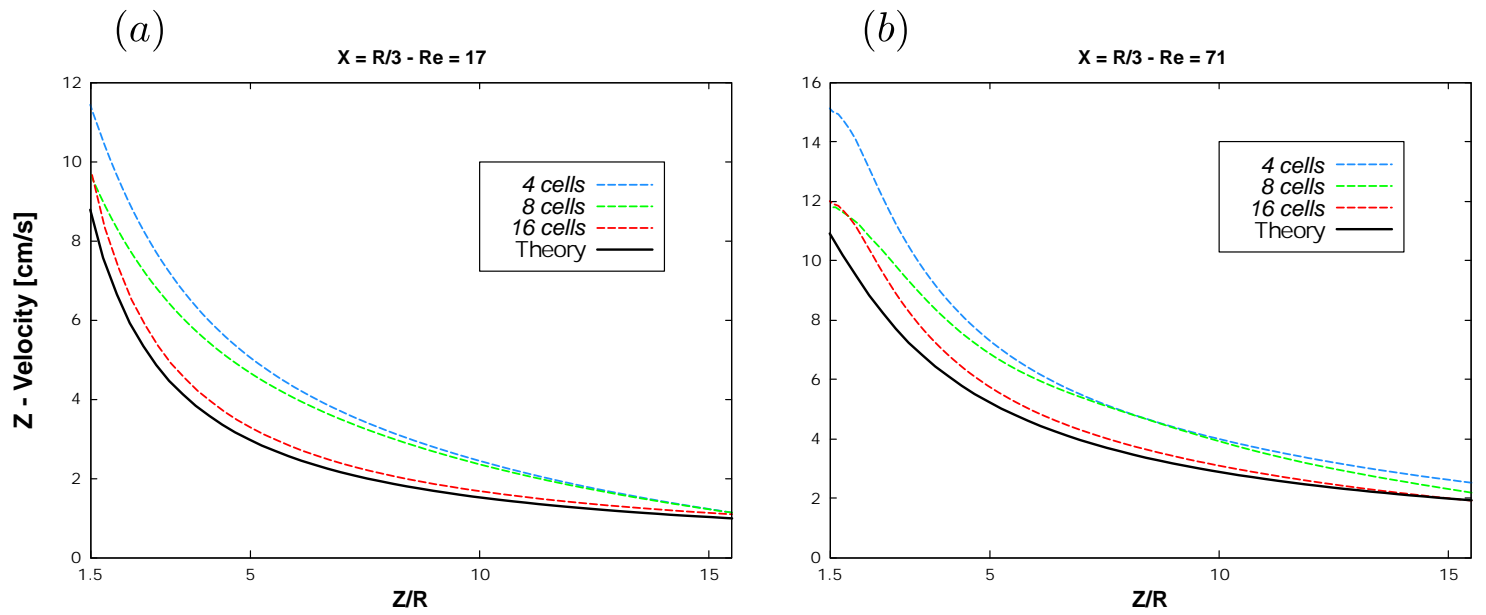


FIGURE 4.16: Profile of the rise velocity in the wake of the bubble, $X = R/3$: (a) $Re = 17$, (b) $Re = 71$.

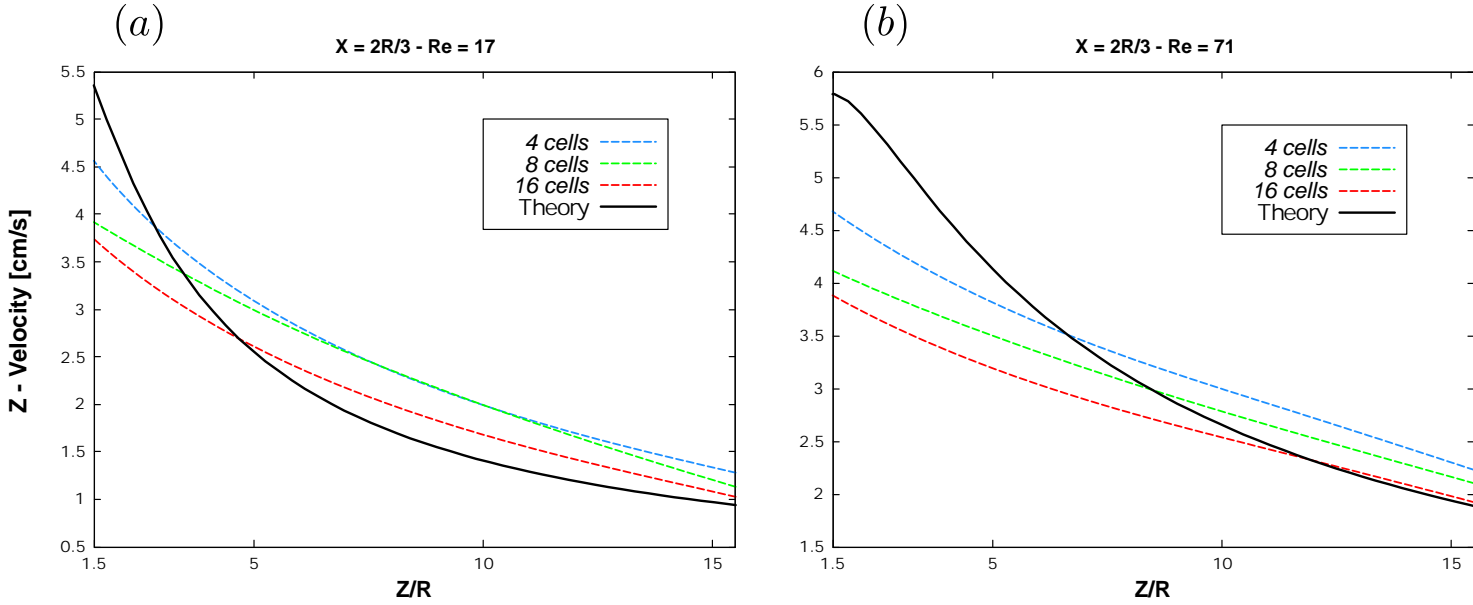


FIGURE 4.17: Profile of the rise velocity in the wake of the bubble, $X = 2R/3$: (a) $Re = 17$, (b) $Re = 71$.

The figures above show good agreement between the wakes provided by the method and the theoretical result. The mesh refinement results in a decrease of the average velocity in the wake of the bubble for both Reynolds numbers. For $Re_b = 17$, the agreement between the simulation and the theory slightly diminish as we move away ($X = R$, $X = 2R/3$) from the central axis ($X = 0$), remaining good however. The red curve (16 cells) shows a very good agreement regardless the value of X . For $Re_b = 71$, the general agreement between the simulations and the theory decrease remains good. The red curve (16 cells) also offers a very good agreement for each value of X .

The general convergence of the wake profiles is clearly established. Given the importance of the wake interaction in the bubble induced agitation (multi-bubbles configurations) , these promising results qualify our numerical method as a good candidate for complete simulations in swarm of bubble configuration.

4.5 Conclusions

We selected the configuration of a single bubble rising in liquid at rest for the first step of the liquid-bubble coupling validation. This choice allowed us to easily establish the description of the whole dynamics of the bubble, from its initial acceleration to its terminal velocity. Many simulations have been run out to determine the influence of one important numerical parameter : the internal viscosity μ_p . We extracted from our simulations four elements of comparison : the initial acceleration, terminal velocities, velocity fields and wake profiles. The best

4.5. Conclusions

fitting solutions have been selected rather on the terminal velocity criteria than the initial acceleration criteria. The observation of the velocity fields highlight the mesh refinement effect on the results. Our simulations provided a good description of the far-wake behavior, which is promising for multi-bubbles simulations, due to the importance of the wake for the development of bubble induced agitation.

We discussed in the final section the global influence of μ_p on the results and that trying to reach at the same time a « perfect » agreement with the theoretical initial acceleration and terminal velocity was hardly achievable. We also shown the possible limitations in term of computational resources induced by high values of μ_p . In swarm of bubble configurations, given the high Reynolds numbers involved, we might indeed reach very high values of μ_p . This aspect of the numerical method is not prohibitive but must be fully considered.

Chapter 5

Validation of the numerical method on swarm of bubble configurations

Contents

5.1	Introduction	140
5.2	Preliminary study	141
5.2.1	Influence of the mesh refinement on the simulations results	141
5.2.2	Influence of the containment effect	143
5.2.3	Influence of the penalization viscosity μ_p	146
5.3	Simulations of monodisperse bubble swarms	147
5.4	Simulations of bidisperse bubble swarms	153
5.4.1	Isolated influence of the radius disparity	154
5.4.2	Influence of the void fraction ratio between large and small bubbles	157
5.5	Conclusions	164

5.1 Introduction

This chapter is dedicated to the numerical simulation of swarm of bubble configurations. The simulations carried out were directed toward a twofold aim. First, extends the validation of the coupling method (started in the previous chapter) to swarm of bubble configurations, close in many ways to industrial configurations in the backdrop of this thesis. To achieve this goal, we focused on the characterisation of the bubble induced agitation. The experimental work [Riboux et al. (2010)] provides a rather complete description of the bubble induced agitation in monodisperse swarm of bubbles configuration. The validation strategy consists in comparing results provided by simulations carried out with our numerical tool, and compare them to experimental data. Then, we performed bidisperse simulations in order to examine the influence of the bubble radius disparity on the simulations results.

We conducted a preliminary study before running the final monodisperse and bidisperse simulations. The first objective of the study was to determine the minimal dimensions of the fully periodical box, in order to optimize the computational resources. To illustrate this containment effect, we refer to the work of [Bunner and Tryggvason (2002)], in which simulations of bubble swarms (up to 216 bubbles)

5.2. Preliminary study

were carried out in periodic computational domains model but finally, it was observed that a system with only 12 bubbles gives a good estimate of the average bubble velocity (as an example of measurement that can be made on a bubble swarm). The limitation can be directly imposed on the number of bubbles, or indirectly through the volume of the computational domain, such as in our case. Secondly, we studied the influence of the mesh refinement on the results to select a value of Δx (corresponding to a given number of cells in the radius of the bubble). The final objective was to examine the influence of the penalization viscosity μ_p on the bubbly flows dynamics.

The simulations have been carried out on EDF R&D supercomputers ATHOS and PORTHOS, a total of $2 \times 24 \times 28$ CPU units were available for this study.

5.2 Preliminary study

In order to achieve the validation of the numerical method, simulations are carried out in this chapter. We extract statistics on the liquid and on the bubbles. Due to the exclusive use of periodical boundary conditions for the simulations, a limit size of the computational domain must be established. A mesh refinement must also be selected. Given the consequent influence of the penalization viscosity μ_p on the dynamics of a single bubble (established in the previous chapter), its influence for swarm of bubbles configuration must also be studied. We detail in the following section the preliminary study relative to those three elements.

5.2.1 Influence of the mesh refinement on the simulations results

We want to establish the influence of the mesh refinement with particular attention on the liquid and bubble velocity fluctuations. We introduce three grids refinements R_0 , R_1 and R_2 corresponding respectively to 3, 6 and 12 cells in the constant radius of the bubble (monodisperse swarm). The computational is chosen as $\Omega = D_1 = [0; 005] \times [0; 005] \times [0; 025]$ (Figure 5.2). Three void fractions have been studied : $\alpha = 5\%$, 10% and 15% , corresponding to $N_b = 60, 120$ and 180 bubbles. We extracted the PDFs of the fluid and the bubble horizontal and vertical components (Figure 5.1).

Chapter 5. Validation of the numerical method on swarm of bubble configurations

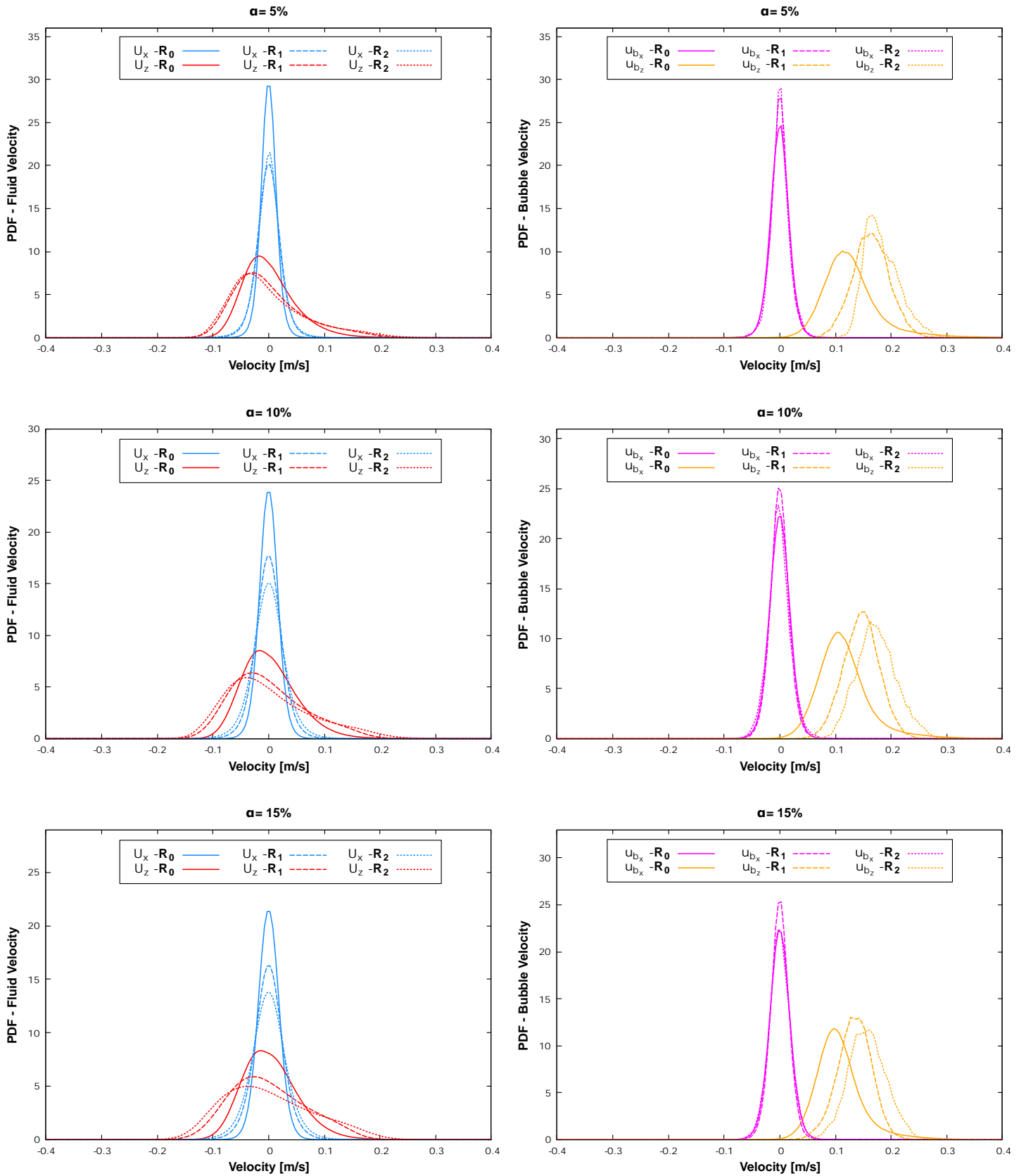


FIGURE 5.1: Normalized PDFs of liquid (left) and bubble (right) velocity component fluctuations.

5.2. Preliminary study

The refinement effect has no influence on the bubble horizontal velocity. The others velocity components show sensitivity to the refinement. The average bubble rising velocity increases as Δx decreases. This is due to the rising velocity of the bubbles being underestimated on coarse grids, mostly due to the relative high Reynolds number of the simulation ($Re \simeq 350$) and the development of the boundary layer at the bubble surface decreasing as $Re^{-1/2}$. The average rising velocity is evolving in the same way for each void fraction. The variance of the horizontal fluid velocity increases slightly with the mesh refinement. The variance of the vertical fluid velocity also increases with the mesh refinement, for each void fraction. Statistics on the flow have been measured between $t = 0.2s$, once the fluid is homogeneously agitated, and $t_f = 2s$. The simulations performed with the mesh refinement R_0 , R_1 and R_2 required respectively 12, 81 and 350 *hours* of calculation for 6×28 CPU units. Due to feasibility constraints, we picked the refinement R_1 for all the simulations detailed in the following sections.

5.2.2 Influence of the containment effect

We want to set on each boundary of the computational domain Ω periodic boundary conditions for the swarm of bubbles simulations. The initial computational domain selected to perform those simulations is similar to the one used in the previous chapter, $\Omega = D_1 = [0; 5d_b] \times [0; 5d_b] \times [0; 25d_b]$, with $d_b = 1mm$. The swarm of bubbles simulations presented in this chapter involve bubbles with $d_b = 1mm$ (monodisperse swarm) or $0.8mm < d_b < 1.6mm$ (bidisperse swarm). Given the relative equivalence between all these diameters, we assume that in both cases (monodisperse and bidisperse swarm) the reference bubble diameter is the same $d_b \simeq 1mm$. For each simulation, the number of bubbles N_b is deduced from the volume of the computational domain and the imposed void fraction α . If the number of bubbles in the domain reaches a relative low value, the statistical measurements won't be able to describe precisely the bubble-induced agitation of the fluid. We want to demonstrate this assertion by performing simulations of a monodisperse swarm of bubbles on $D_1 = [0; 5d_b] \times [0; 5d_b] \times [0; 25d_b] = [0; L_x] \times [0; L_y] \times [0; L_z]$ and on two additional computational domains $D_2 = [0; L_x] \times [0; L_y] \times [0; 2L_z]$ and $D_3 = [0; 2L_x] \times [0; 2L_y] \times [0; L_z]$, corresponding to a increase by a factor 2 of the length of the domain respectively in the (Oz) direction, and in both directions (Ox) and (Oy) (Figure 5.2). Three void fractions have been studied : $\alpha = 5\%$, 10% and 15% , corresponding to $N_b = 60, 120$ and 180 bubbles for $\Omega = D_1$; $N_b = 120, 240$ and 360 bubbles for $\Omega = D_2$, $N_b = 240, 480$ and 720 bubbles for $\Omega = D_3$.

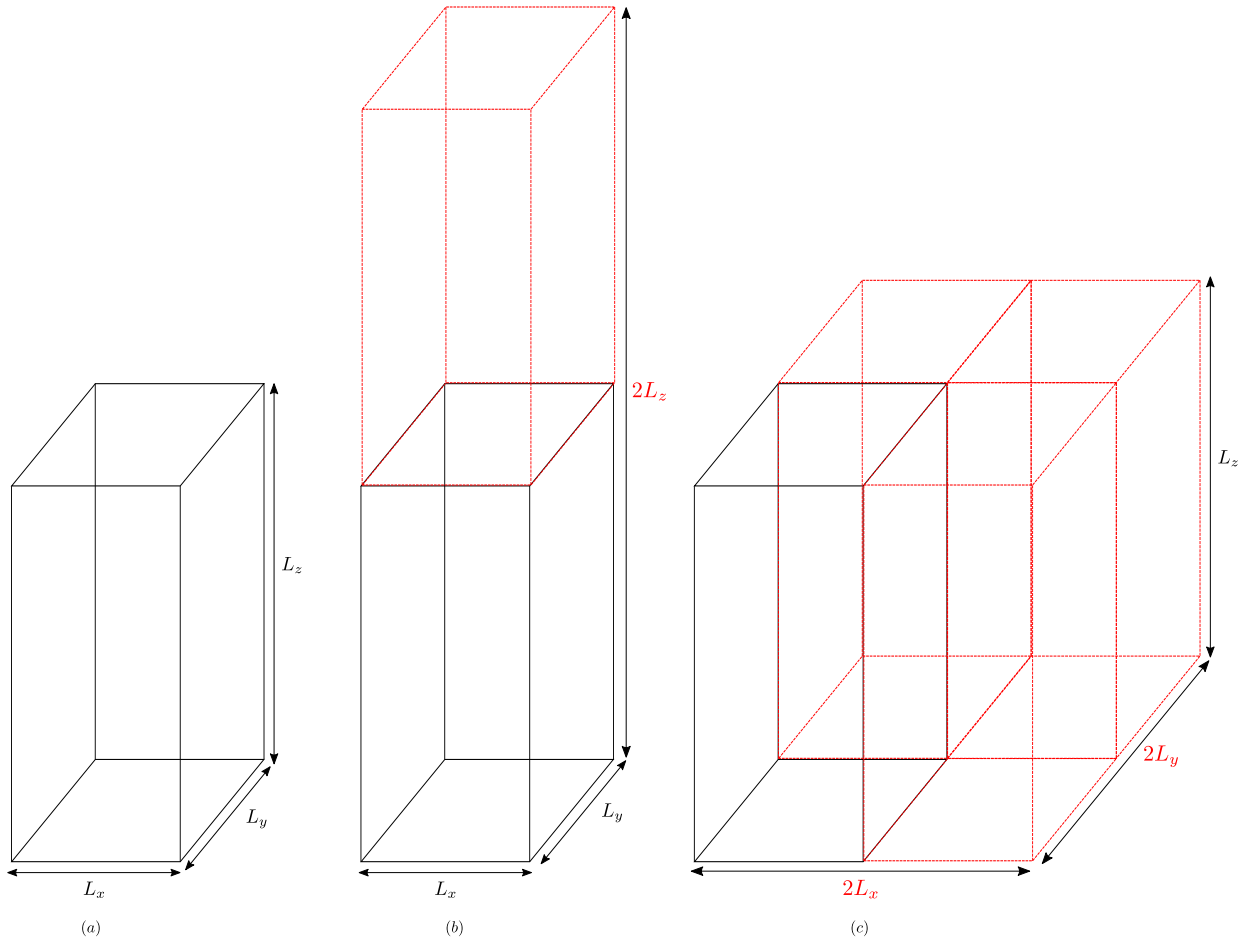


FIGURE 5.2: Computational domains used for the study of the containment effect (a) D_1 (b) D_2 , (c) D_3 .

We extracted from each simulation the PDF of the fluid and the bubble velocity components. PDFs have been measured between $t = 0.2s$, once the fluid is homogeneously agitated, and $t_f = 2s$. The simulations required approximately 4, 6 and 8 *days* (for the associated computational domains D_1, D_2, D_3) of calculation for 6×28 CPU units. The normalized PDF plotted in Figure 5.13 show a strong correspondence between the results provided by each computational domain D_1, D_2 and D_3 , for each component of the liquid and bubble velocity, independently from the void fraction considered ($\alpha = 5\%, 10\%$ and 15%).

5.2. Preliminary study

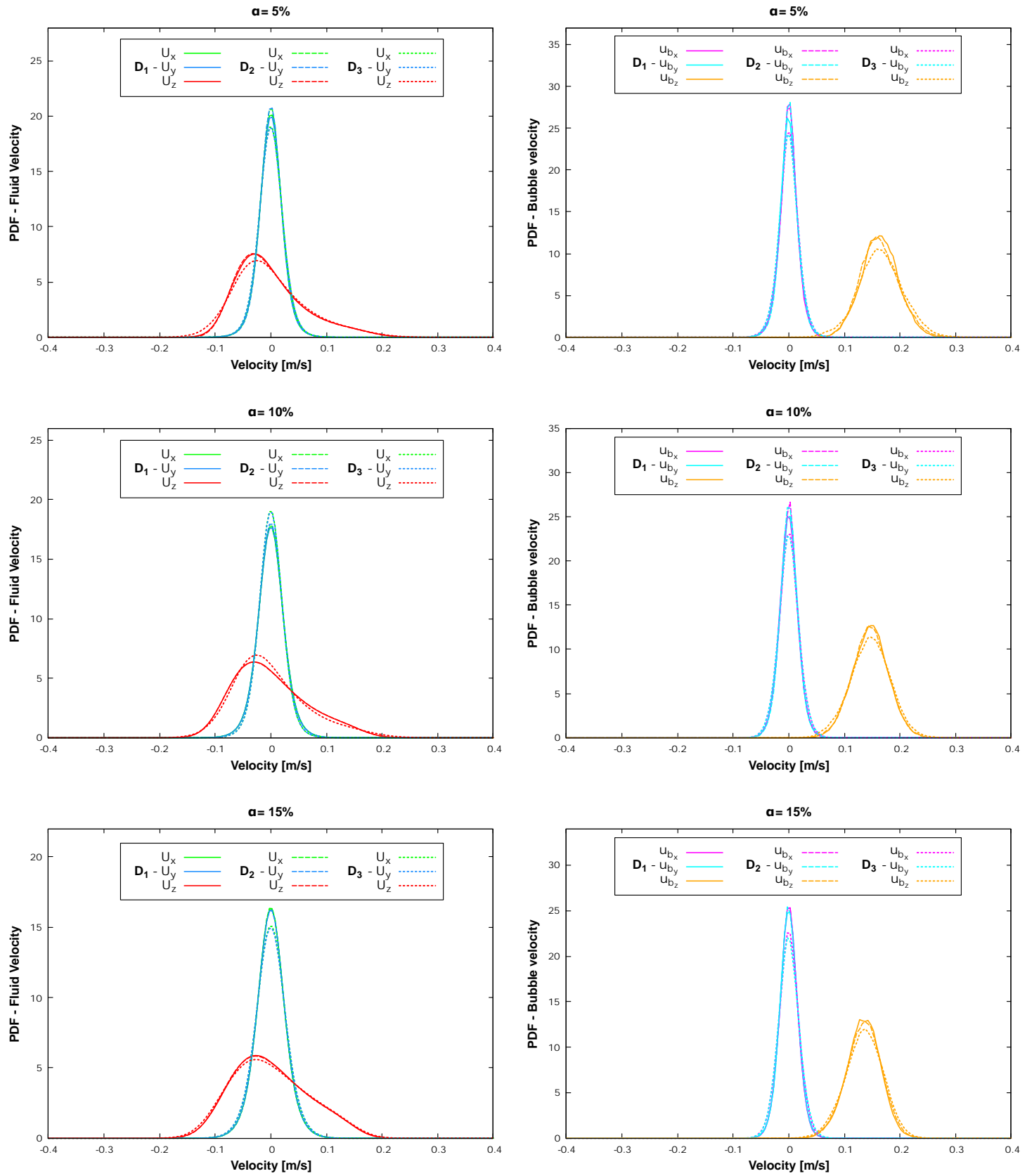


FIGURE 5.3: Normalized PDFs of vertical and horizontal liquid (left) and bubble (right) velocity fluctuations.

We conclude that performing simulations on a computational domain larger than D_1 in any direction won't provide any additional information on the PDF. All simulations presented in the following sections are carried out using $D_1 = [0; 005] \times [0; 005] \times [0; 025]$.

5.2.3 Influence of the penalization viscosity μ_p

In the previous chapter, we detailed the influence of the penalization viscosity μ_p on the dynamics of a single bubble rising in a quiescent liquid. A given value of μ_p , depending on the Reynolds number of the bubble and on the mesh refinement, allowed the bubble to reach its terminal velocity. As we deal now with swarm of bubbles, we want to examine again the influence of the parameter on the simulations results. Three simulations have been carried out to evaluate that influence, corresponding to three values of $\mu_p = 0.1, 1$ and 10 for a given void fraction $\alpha = 10\%$. The mesh refinement is established by the study detailed in section 5.2.1), and is thus set to R2 (6 cells in the radius of the bubble). The simulations are stopped at $t_f = 4s$, well after the fluid is homogeneously agitated. We extracted PDFs of the horizontal and vertical components of the fluid and bubble velocities (Figures 5.4 and 5.5) for $\mu_p = 0.1, 1$ and 10 . For each component of the liquid or bubble velocity, the agreement is perfect between the PDFs corresponding to different values of μ_p . As a conclusion, the choice of μ_p has no influence on the simulations results in swarm of bubble configurations.

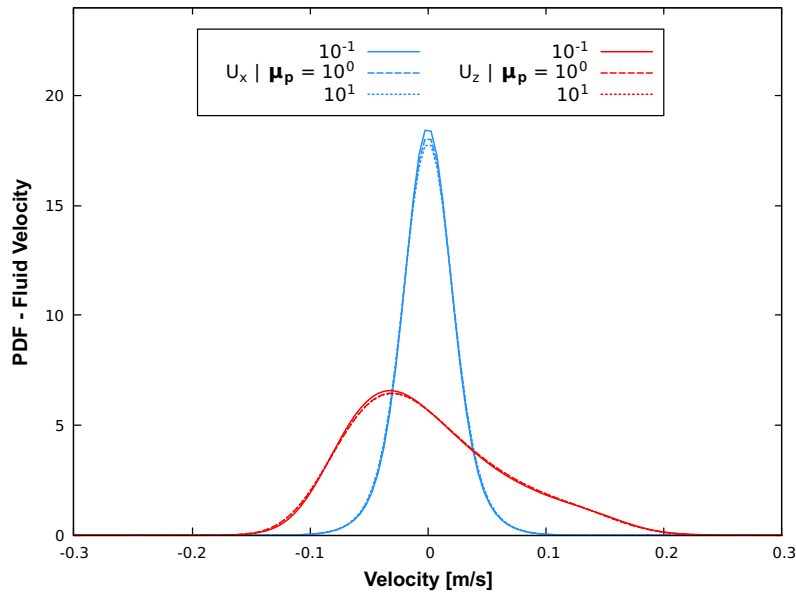


FIGURE 5.4: Normalized PDFs of vertical and horizontal components of the liquid velocity for $\mu_p = 0.1, 1$ and 10 .

5.3. Simulations of monodisperse bubble swarms

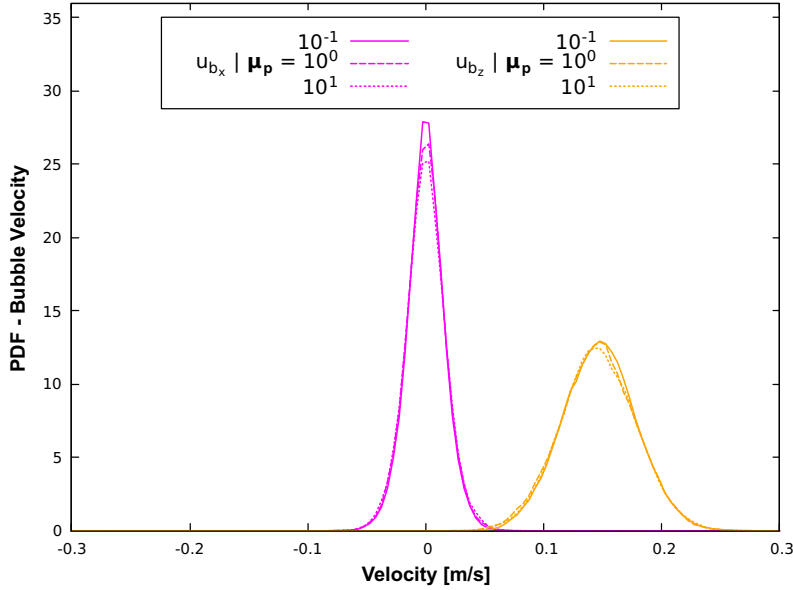


FIGURE 5.5: Normalized PDFs of vertical and horizontal components of the bubble velocity for $\mu_p = 0.1, 1$ and 10 .

We discussed in the previous chapter the influence of the numerical value of μ_p on the CPU time. We established that as μ_p increased, the CPU time strongly increased. For each simulation performed ($\mu_p = 0.1, 1$ and 10) we reported the final CPU time at $t_f = 2s$ (Table 5.20). Again, we note the increase of the CPU time as μ_p increase. However the CPU times increase is only around 7% for a change of one order of magnitude for μ_p (0.1 to 1 and 1 to 10), which remains acceptable in term of management of computing resources.

	$\mu_p = 0.1$	$\mu_p = 1$	$\mu_p = 10$
CPU Time (<i>hours</i>)	72	77	83

TABLE 5.20: Evolution of the final CPU time for $\mu_p = 0.1, 1$ and 10 .

5.3 Simulations of monodisperse bubble swarms

The objective is now to conduct simulations of bubbly flows and compare them to experimental measurements performed at high bubble Reynolds numbers and significant void fractions. An experimental investigation of the flow generated by a homogeneous population of bubbles rising in water has been carried out [Riboux et al. (2010)]. The results provide a rather complete description of the effect of the void fraction on both the bubble motion and liquid agitation.

The flow is fully periodic in each direction. Elastic collisions are considered between the bubbles, leading to the conservation of the total momentum and

Chapter 5. Validation of the numerical method on swarm of bubble configurations

kinetic energy of the bubbles. The computation domain is chosen as $\Omega = D_1$ (Figure 5.2). We mesh refinement corresponds to 6 cells in the radius of the bubble. Six simulations have been carried out over a large range of void fractions from $\alpha = 2.5\%$ to 20% . The parameters are shown in Table 5.21. The analysis of the results (scaling, normalization) required the computation of a single bubble and the corresponding reference velocity V_0 and void fraction α_0 used for the normalization of the results are reported in Table 5.21. Statistics on the flow (PDFs) have been measured between $t = 0.2$, once the fluid is homogeneously agitated, and $t_f = 2s$ with the PDFs being fully converged. Each simulation required approximately 4 *days* of calculation for 6×28 CPU units. The corresponding bubble positions and streamlines are shown in figure 5.6. The structure of the flow is clearly disorganized and the increase of the void fraction increase the reduction of the wake signature of individual bubbles.

d_b (mm)	ρ_b ($kg \cdot m^{-3}$)	ρ_f ($kg \cdot m^{-3}$)	μ_f (Pas)	μ_p/μ_f	V_0 (cm/s)	Re_b	α_0
1.0	50	1000	0.0008	100	22.50	315.80	0.008

TABLE 5.21: Set of numerical parameters for the simulation.

5.3. Simulations of monodisperse bubble swarms

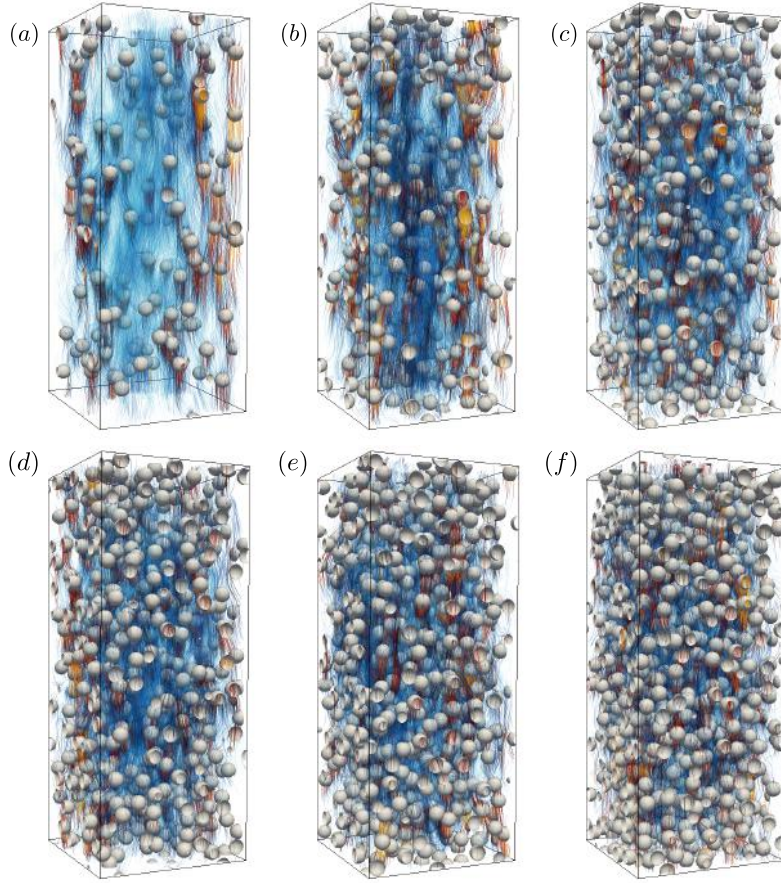


FIGURE 5.6: Streamlines of the velocity field corresponding to the void fractions : from (a), (b), (c), (d), (e) to (f) : $\alpha = 2.5\%$, 5% , 7.5% , 10% , 12.5% and 15% .

The average bubble rising velocity u_{b_z} is reported in Figure 5.7 as a function of the void fraction for $0.002 \leq \alpha \leq 0.20$. The diameter $d_b = 1mm$ corresponding to the present work is reported using the red square and is compared to the experiments of Riboux [Riboux et al. (2010)] ($d_b = 1.6, 2.1$ and $2.5mm$), Zenit [Zenit et al. (2001)] ($d_b = 1.4mm$), and Garnier [Garnier et al. (2002)] ($d_b = 3.5mm$). The velocities are normalized by the average velocity V_0 of a single rising bubble in the same conditions. The results are in very good agreement with the decreasing law $V_0(1 - \alpha^{0.49})$ established by the experiments. The dissipation in the flow is thus increased resulting in the decrease of the bubble velocity. Our simulations confirm the relevance of the scaling : the normalized evolution is not dependent on the diameter, the diameter effect being contained in the velocity V_0 of a single bubble.

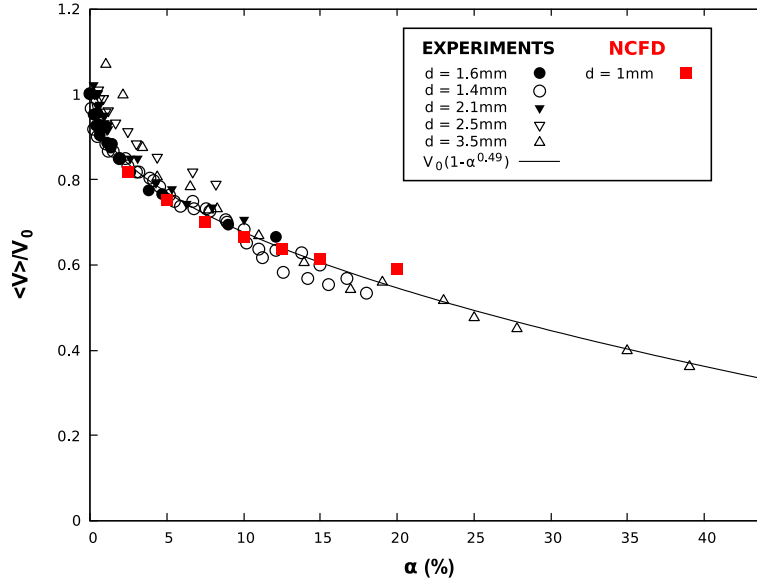


FIGURE 5.7: Average bubble velocity u_{b_z} normalized by the velocity V_0 of a single rising bubble as a function of the gas volume fraction α . Legend : red squares, present work; \bullet \blacktriangledown ∇ Riboux et al. (2010), \circ Zenit et al. (2001); Δ Garnier et al. (2002).

Variances $u_{b_z}^2$ of the bubble velocity are shown in Figure 5.8 and compared with the available data corresponding to the diameter $d_b = 1.6, 2.1$ and 2.5mm from the experiments [Riboux et al. (2010)]. Our simulations confirm the experiments: the bubble agitation is not influenced by the void fraction. The comparison reveals that the level of agitation is not the same, $\approx 1.2 \times 10^{-2} \text{m}^{-2} \text{s}^{-2}$ in the experiments compared to $\approx 2 \times 10^{-3} \text{m}^{-2} \text{s}^{-2}$ for the present work. This difference is maybe due to the nature of the wake of the corresponding single bubble. Considering the Reynolds numbers in the experiments ($Re \approx 800$), the bubble is significantly deformed (aspect ratio equal 2.5) and the wake of a such a bubble is clearly unstable and a zig-zag motion is observed. Here the bubble shape is imposed to be spherical and for such a shape the wake is stable and the rise follows a straight vertical line. We believe that it may be the main explanation to explain the lower bubble agitation observed in Figure 5.8 in comparison with the experiments.

5.3. Simulations of monodisperse bubble swarms

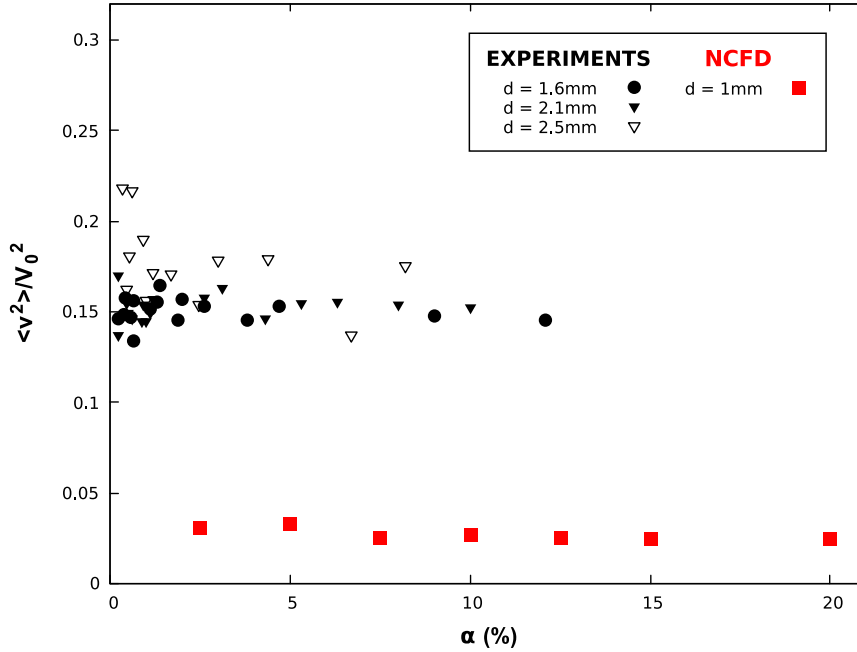


FIGURE 5.8: Variance v^2 of the bubble velocity against the void fraction α for the three bubble diameters ($d_b = 1.6\text{mm}, 2.1\text{mm}, 2.5\text{mm}$) given by the experiments and the present work ($d_b = 1\text{mm}$). Legend : red squares, present work ; \bullet \blacktriangledown ∇ Riboux et al. (2010).

The normalized PDF of the bubbles rising velocity are shown in Figure 5.9. All PDFs of the bubble horizontal velocity have a symmetric shape and are centred on 0, corresponding to the statistical tendency of the bubble to move « right and left » in the horizontal direction : the simulations are able to reproduce the anisotropy property. Due to the small variances mentioned previously, all PDFs of the bubble rising velocity seem to have a symmetric shape. Upward fluctuations being more probable than downward ones the results doesn't exactly fit the expected shape of the PDF. We can observe as established previously (Figure 5.7) the decrease of the mean bubble rising velocity as the void fraction increases. The PDF are re-centred for the sake of the comparison in Figure 5.10. We can thus observe that once centred, the PDFs of the bubble rising velocity can be assumed nearly identical with the volume fraction ranging from $\alpha = 2.5\%$ to $\alpha = 15\%$.

Chapter 5. Validation of the numerical method on swarm of bubble configurations

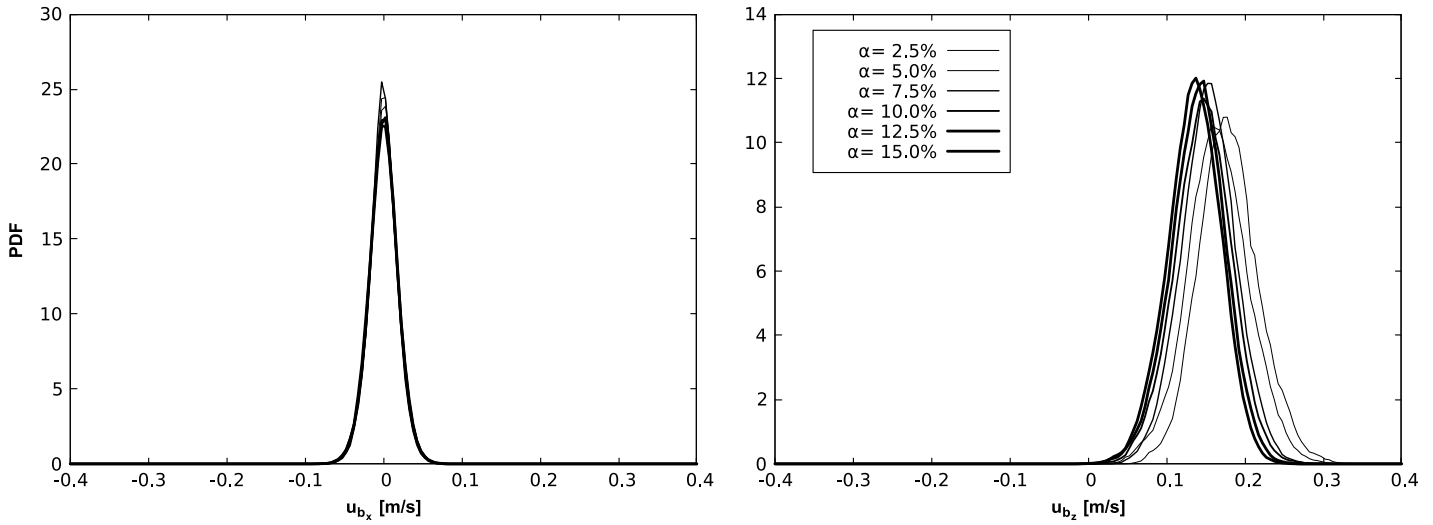


FIGURE 5.9: Normalized PDFs of vertical (left) and horizontal (right) bubble velocity fluctuations.

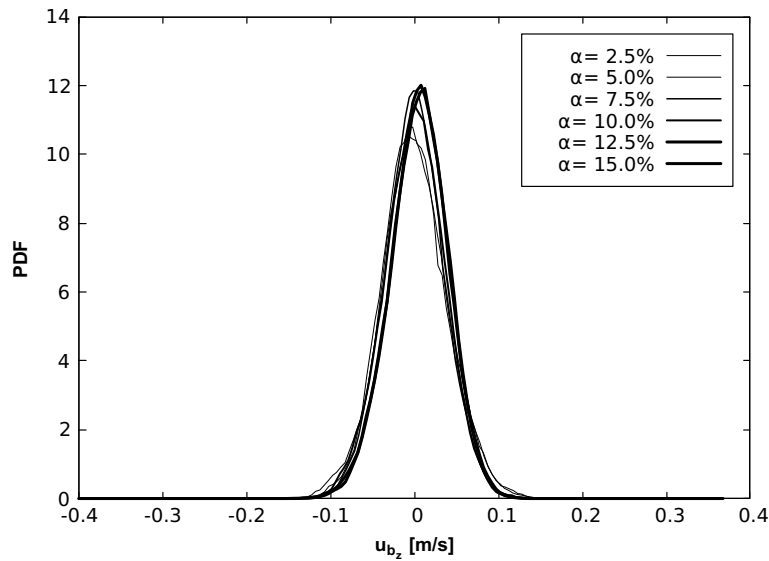


FIGURE 5.10: Normalized centred PDFs of the horizontal bubble velocity fluctuations.

We finally focus on the liquid agitation. The agitation is presented using normalized PDF that contain all the information of the velocity fluctuations. In Figure 5.11, normalized PDFs of the horizontal and vertical component of the fluid velocity are shown for different void fractions. Given the scaling $V_0\alpha^{0.4}$ initially proposed by Risso [Risso and Ellingsen (2002)], the results show the self-similarity of the PDF in both directions for many void fractions (same observation can be made on PDF from experiments detailed in Risso [Risso and Ellingsen (2002)]). The appropriate scaling of the fluid velocity PDFs leading to the self-similarity

5.4. Simulations of bidisperse bubble swarms

property is still being debated. For this study, we tried the following scalings : $V_0\alpha^{0.3}$, $V_0\alpha^{0.35}$, $V_0\alpha^{0.5}$, $V_0\alpha^{0.55}$ and $V_0\alpha^{0.60}$. Given our simulation results, the scaling providing the « best » self-similarity of the PDFs was confirmed as $V_0\alpha^{0.4}$. As expected, the PDF of the horizontal velocity (right) is symmetric, meaning that the simulations are able to restore the anisotropy property, the flow being statistically axisymmetric around the bubble, and the distribution of bubbles in the horizontal direction being uniform. As revealed by the experiments, the shape of the vertical bubble velocity PDF (left) is clearly non-symmetric. The shape we observe is due to the entrainment of the flow in the wake of the bubbles, implying that upward fluctuations are being more probable. The comparison of both distribution shapes, horizontal and vertical, are clearly in very good agreement with the one obtained from the experiments.

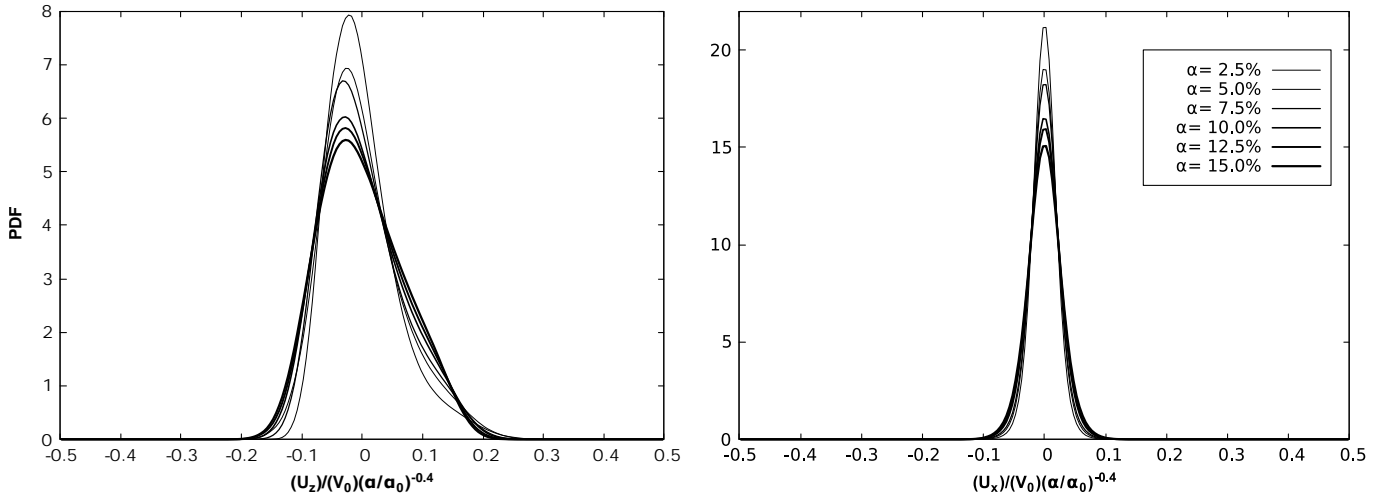


FIGURE 5.11: Normalized PDFs of vertical (left) and horizontal (right) liquid velocity fluctuations.

5.4 Simulations of bidisperse bubble swarms

In this section, we introduce the following notations : N_s and N_l refers to the number of small and large bubbles in the swarm such as $N_b = N_s + N_l$, the associated void fractions α_s and α_l such as $\alpha = \alpha_s + \alpha_l$. The associated radius are denoted R_s and R_l . The fluid density, the bubbles density and the fluid viscosity are set as in the previous section (monodisperse swarm) : $\rho_b = 50kg.m^{-3}$, $\rho_f = 1000kg.m^{-3}$ and $\mu_f = 0.0008Pas$. So is the viscosity of penalization chosen again as : $\mu_p/\mu_f = 100$. The normalization of the results presented in section 5.4.2 required for each different radius the computation of a single bubble and the corresponding reference velocity V_0 .

Each simulation presented in the following sections required 7 *days* of computation for $6 \times$ CPU units.

5.4.1 Isolated influence of the radius disparity

The aim of this section is to highlight the influence of the radius disparity within a swarm of bubble on the bubble induced agitation. To achieve this, we designed simulations of bidisperse swarms similar to the monodisperse simulations presented in the previous section. The void fraction and the total interfacial area are set identical between the bidisperse and monodisperse simulations. This leads to the following relation:

$$\begin{cases} \alpha_s + \alpha_l = \alpha_M \\ N_s R_s^2 + N_l R_l^2 = N_{b_M} R_s^2 \end{cases} \quad (5.102)$$

with α_M and N_{b_M} respectively the void fraction and the number of bubbles provided by the monodisperse simulation. This relation can be expressed with N_s and N_l as the variables of the system:

$$\begin{cases} N_s R_s^3 + N_l R_l^3 = N_{b_M} R_s^3 \\ N_s R_s^2 + N_l R_l^2 = N_{b_M} R_s^2 \end{cases} \quad (5.103)$$

Simulations are performed for $\alpha_M = 5\%, 10\%, 15\%$ and $N_{b_M} = 63, 117, 180$ (Figure 5.12). The bubbles radius in the bidisperse swarm are set to: $R_s = 0.4\text{mm}$ and $R_l = 0.6\text{mm}$. Solving (Equation 5.103) provides N_s and N_l . For $\alpha_M = 5\%, 10\%, 15\%$, the corresponding number of bubbles are respectively $(N_s = 62, N_l = 16)$, $(82, 45)$ and $(144, 61)$. The computational domain is $\Omega = D_1$, the mesh refinement correspond to 6 cells in the radius of a 1mm diameter bubble. We extracted from the bidisperse swarm simulations PDFs of the bubble and the liquid velocity components and compared them to the associated monodisperse simulations (Figure 5.13).

5.4. Simulations of bidisperse bubble swarms

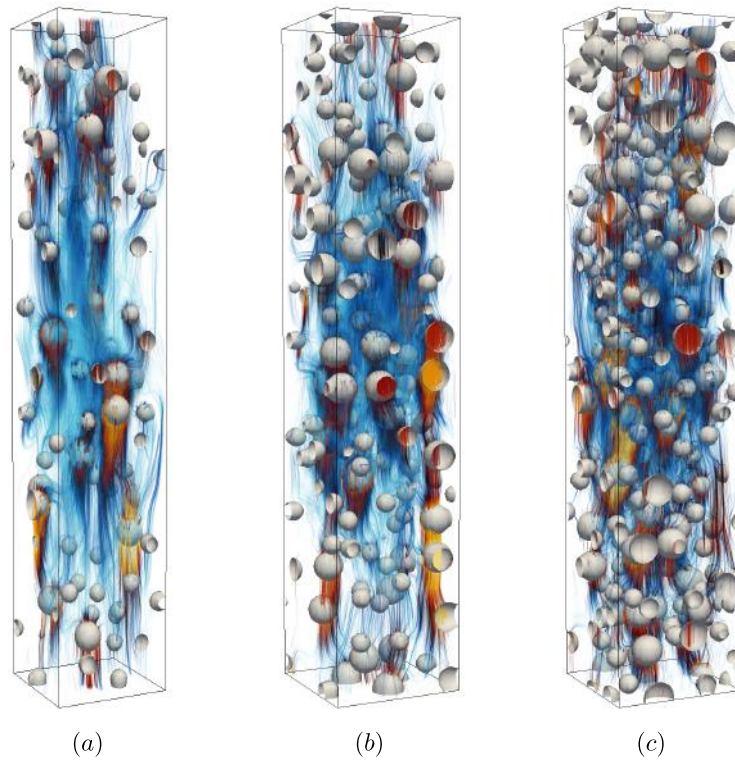


FIGURE 5.12: Streamlines of the velocity field corresponding to the void fractions: (a), (b), (c): $\alpha = 5\%$, 10% and 15% .

The PDFs of the horizontal component of the liquid and the bubble velocity are identical for both monodisperse and bidisperse simulations and for each void fraction, while the PDFs of the vertical component of both the liquid and the bubble velocity reveal the main difference between monodisperse and bidisperse fluctuations. However, agitation appears to be more reduced in monodisperse flows than in bidisperse flows, this effect being more pronounced for the liquid agitation.

Chapter 5. Validation of the numerical method on swarm of bubble configurations

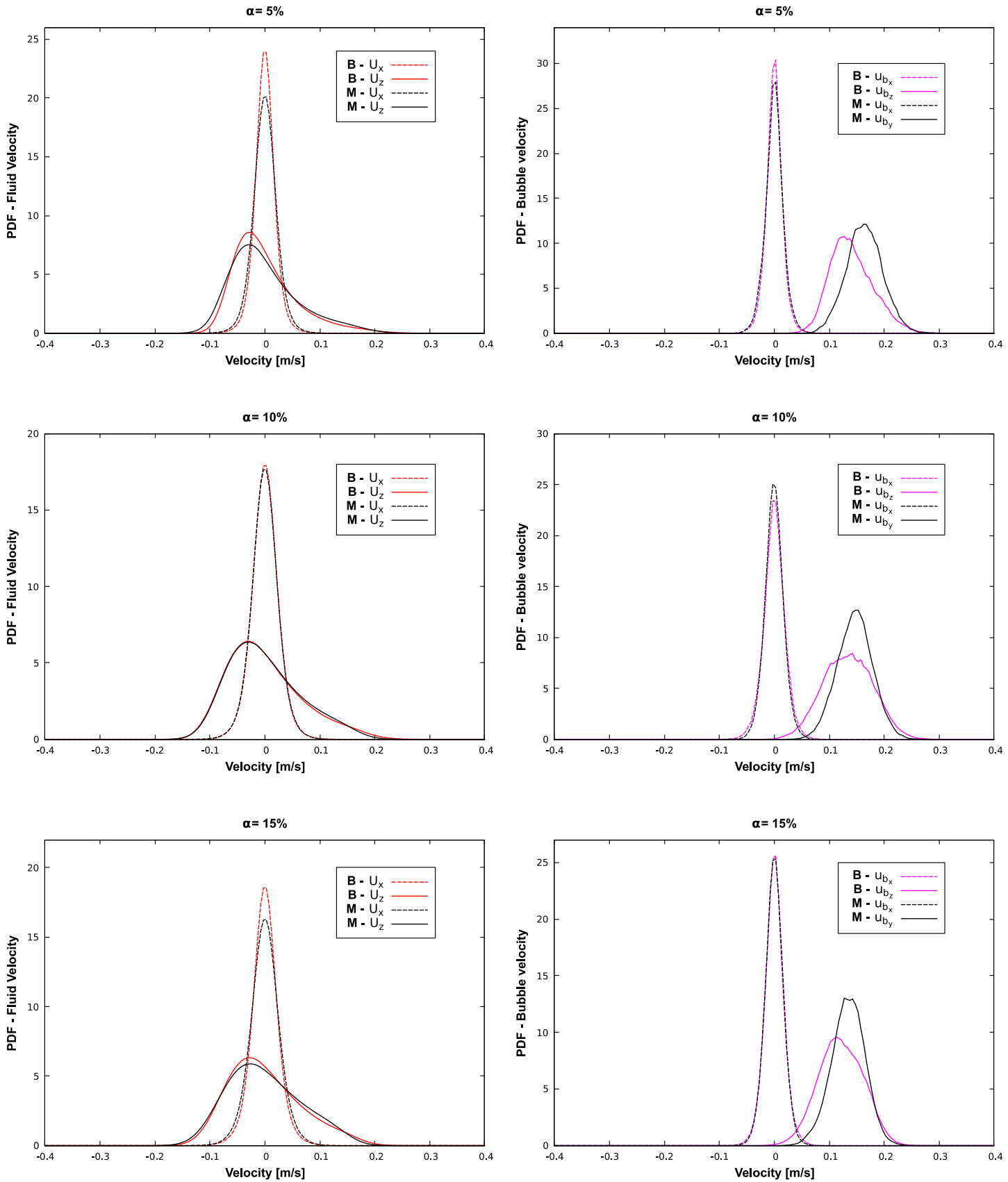


FIGURE 5.13: Normalized PDFs of vertical and horizontal liquid (left) and bubble (right) velocity fluctuations.

5.4. Simulations of bidisperse bubble swarms

5.4.2 Influence of the void fraction ratio between large and small bubbles

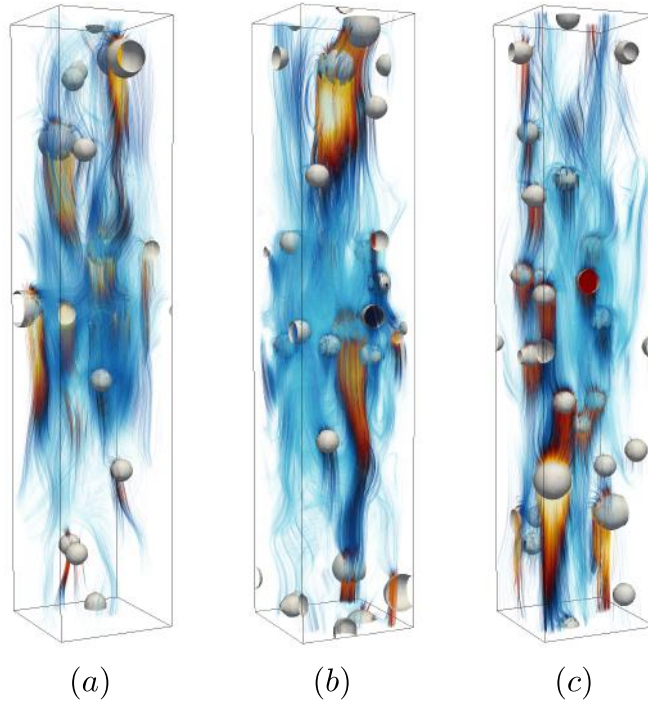
We present in this section simulation results of a bidisperse swarm of bubbles. The number of large and small bubbles in the swarm is controlled through the ratio Ra defined as :

$$Ra = \frac{\alpha_l}{\alpha_s} \quad (5.104)$$

Adding a condition on the total void fraction α , this leads to the following system :

$$\begin{cases} 4/3\pi N_s R_s^3 + 4/3\pi N_l R_l^3 = |\Omega|\alpha \\ N_s R_s^3 Ra = N_l R_l^3 \end{cases} \quad (5.105)$$

Solving (Equation 5.103) provides N_s and N_l . Simulations are performed for $\alpha = 2.5\%, 5\%, 10\%$ and $Ra = 1/3, 1, 3$ (Figure 5.14). The bubbles radius in the bidisperse swarm are set to : $R_s = 0.5\text{mm}$ and $R_l = 0.8\text{mm}$. For $\alpha = 5\%, 10\%, 15\%$, the corresponding number of bubbles are respectively $(N_s = 7, N_l = 5)$, $(15, 11)$, $(30, 22)$, for $Ra = 3$, $(15, 4)$, $(30, 7)$, $(60, 15)$ for $Ra = 1$ and $(23, 2)$, $(46, 4)$, $(90, 7)$ for $Ra = 1/3$. The computational domain is $\Omega = D_1$, the mesh refinement correspond to 6 cells in the radius of a 1mm diameter bubble. We extracted from the bidisperse swarm simulations PDFs of the bubble and the liquid velocity components (Figures 5.15 and 5.15).



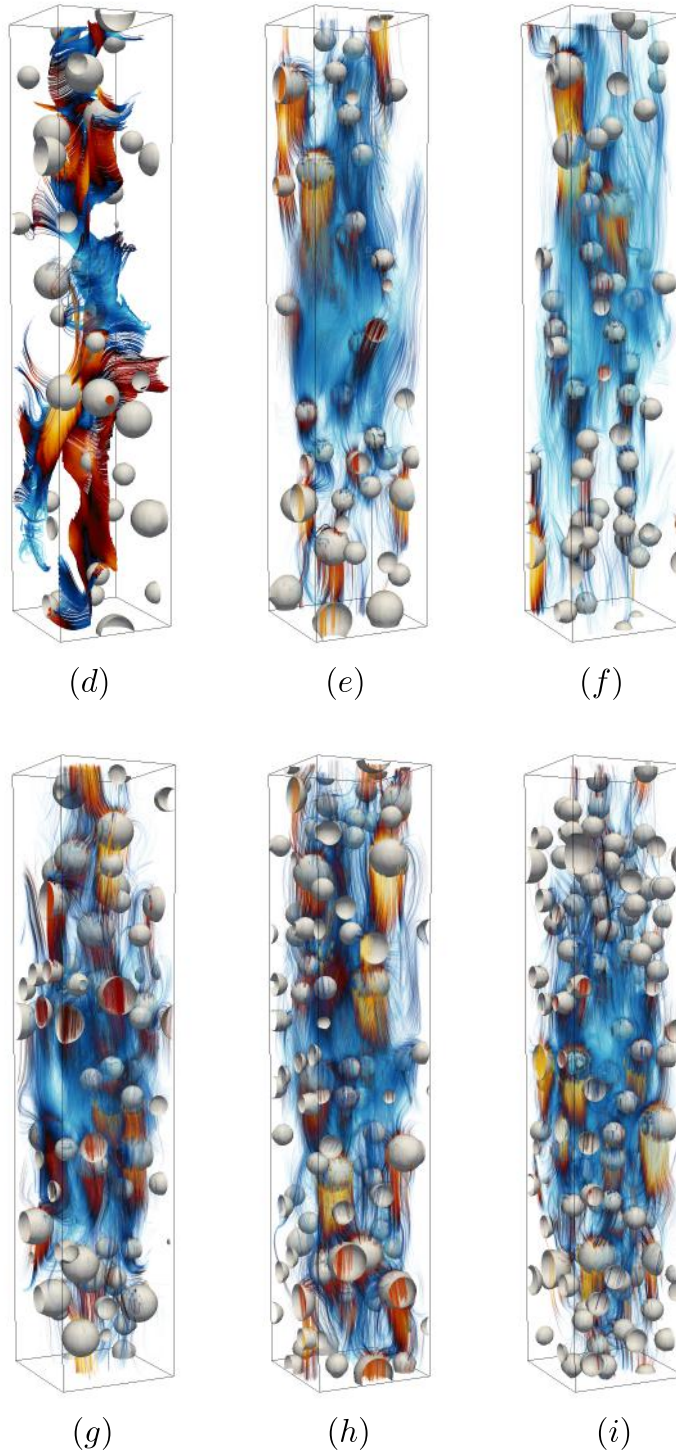


FIGURE 5.14: Streamlines of the velocity field corresponding to the ratios : (a) $Ra = 1/3$, (b) $Ra = 1$, (c): $Ra = 3$, $\alpha = 2.5\%$; (d) $Ra = 1/3$, (e) $Ra = 1$, (f): $Ra = 3$, $\alpha = 5\%$; (g) $Ra = 1/3$, (h) $Ra = 1$, (i): $Ra = 3$, $\alpha = 10\%$.

The PDFs of the horizontal bubble velocity are symmetric. The simulation is able to reproduce the anisotropy property, for each value of Ra and α . The

5.4. Simulations of bidisperse bubble swarms

PDFs of the bubble rising velocity are as in the previous case non symmetrical, meaning that upward fluctuations are more probable than downward ones given the shape of the PDFs. For a given void fraction, the variance of the PDF seem to increase with the decrease of the ratio Ra . The comparison of the PDFs of the rising velocity between each void fraction show a decrease of the average velocity with the increase of the void fraction.

Chapter 5. Validation of the numerical method on swarm of bubble configurations

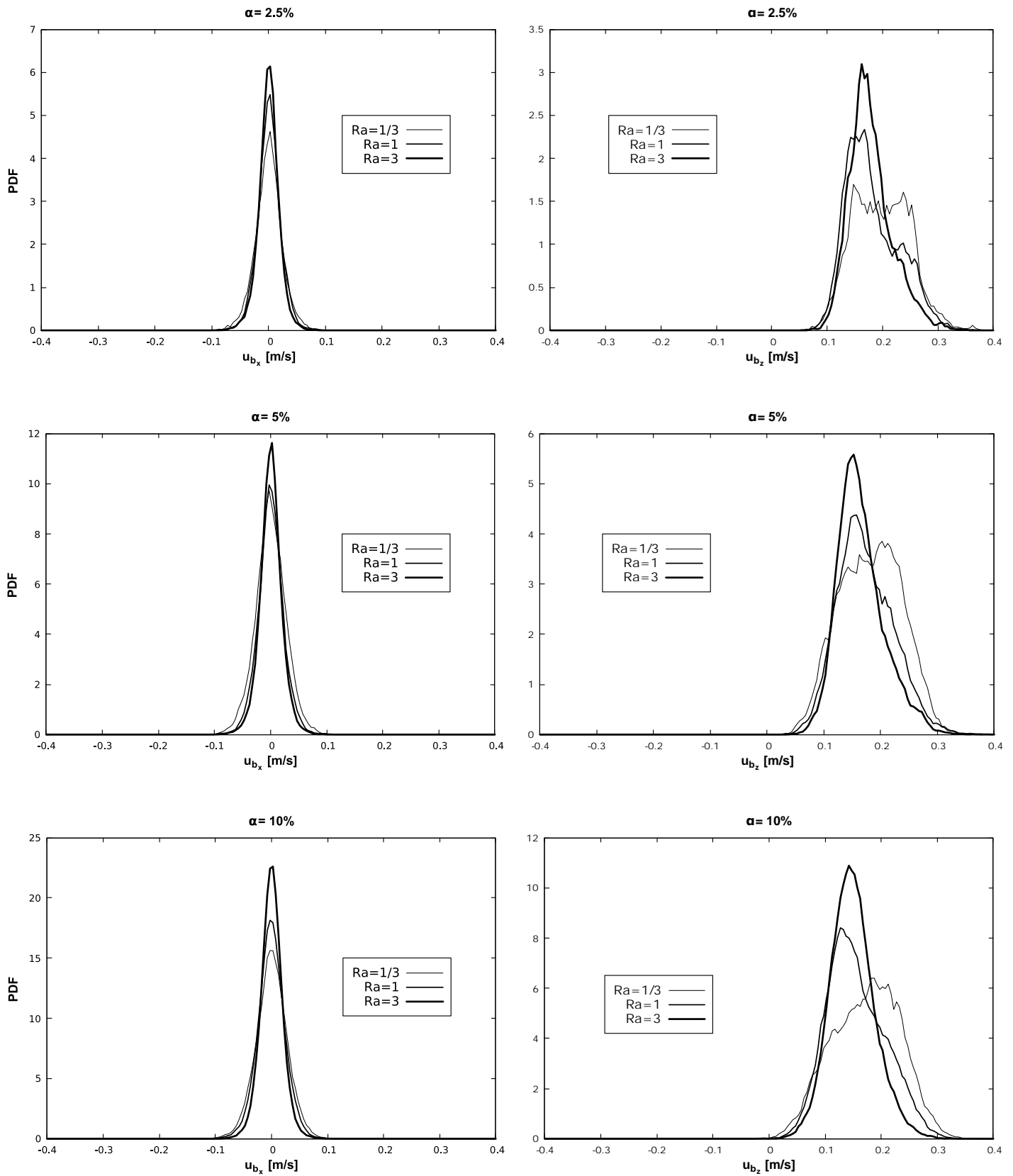


FIGURE 5.15: Normalized PDFs of horizontal (left) and vertical (right) bubble velocity fluctuations.

5.4. Simulations of bidisperse bubble swarms

The PDFs of the horizontal fluid velocity are symmetric. Again, the simulation is able to reproduce the anisotropy property, for each value of Ra and α . For the lowest void fraction ($\alpha = 2.5\%$), the PDFs of the vertical velocity of the fluid seems to be independent from the value of Ra . However, as the void fractions increases, we note clearly the decreasing effect of Ra in the variance of the fluid.

Chapter 5. Validation of the numerical method on swarm of bubble configurations

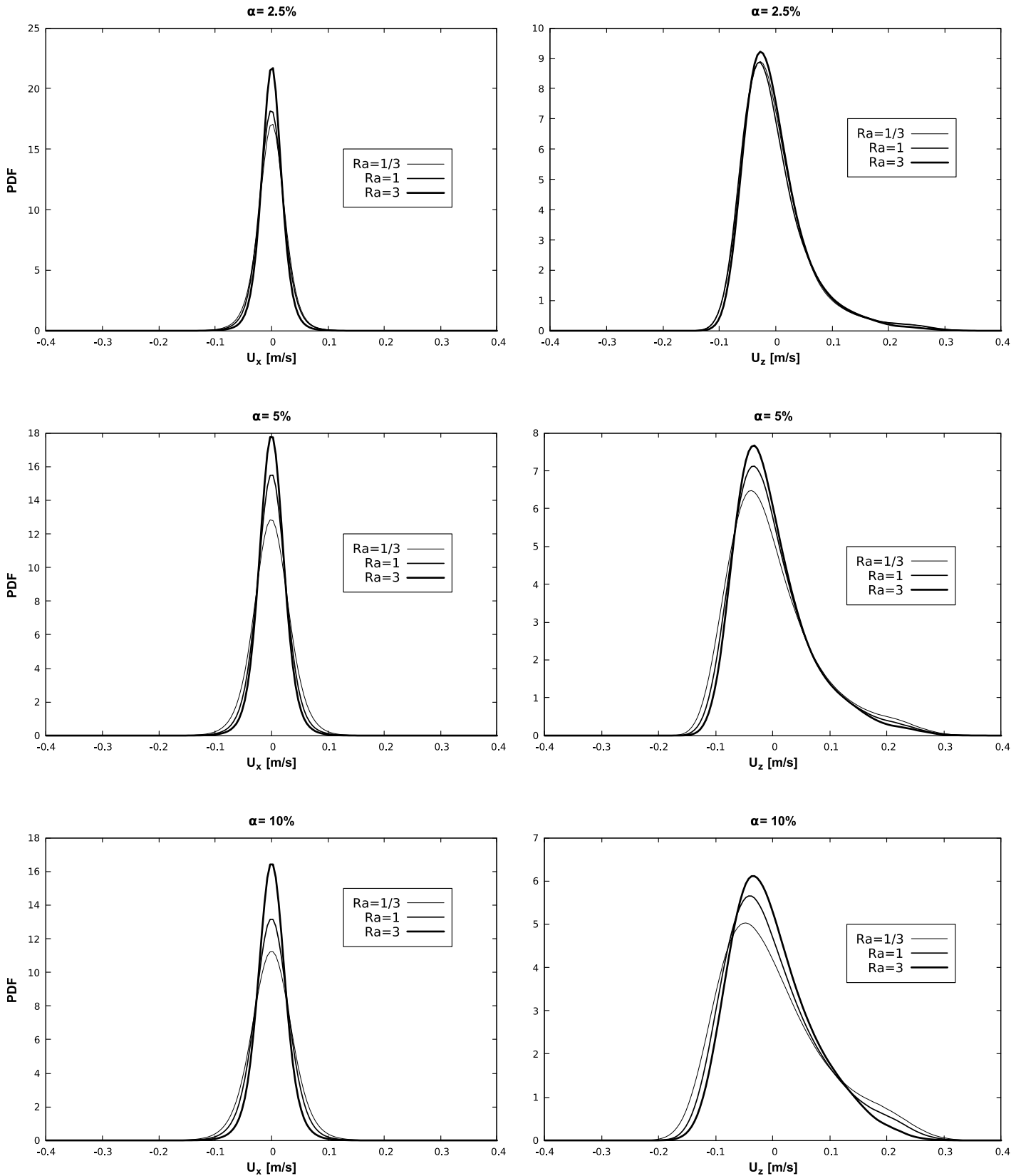


FIGURE 5.16: Normalized PDFs of horizontal (left) and vertical (right) fluid velocity fluctuations.

5.4. Simulations of bidisperse bubble swarms

The average bubble velocity u_{b_z} associated to each radius of bubble is reported in Figure 5.17 as a function of the void fraction for $\alpha = 2.5\%$, 5% , 10% and $Ra = 1/3, 1, 3$. The results show an agreement with the decreasing law $V_0(1-\alpha^{0.49})$ established by monodisperse swarm of bubble experiments and also the previous simulations on a monodisperse swarm of bubble configuration. The average velocity of large and small bubbles follow the same law. The value of Ra has no influence in the decay of the bubble average velocity.

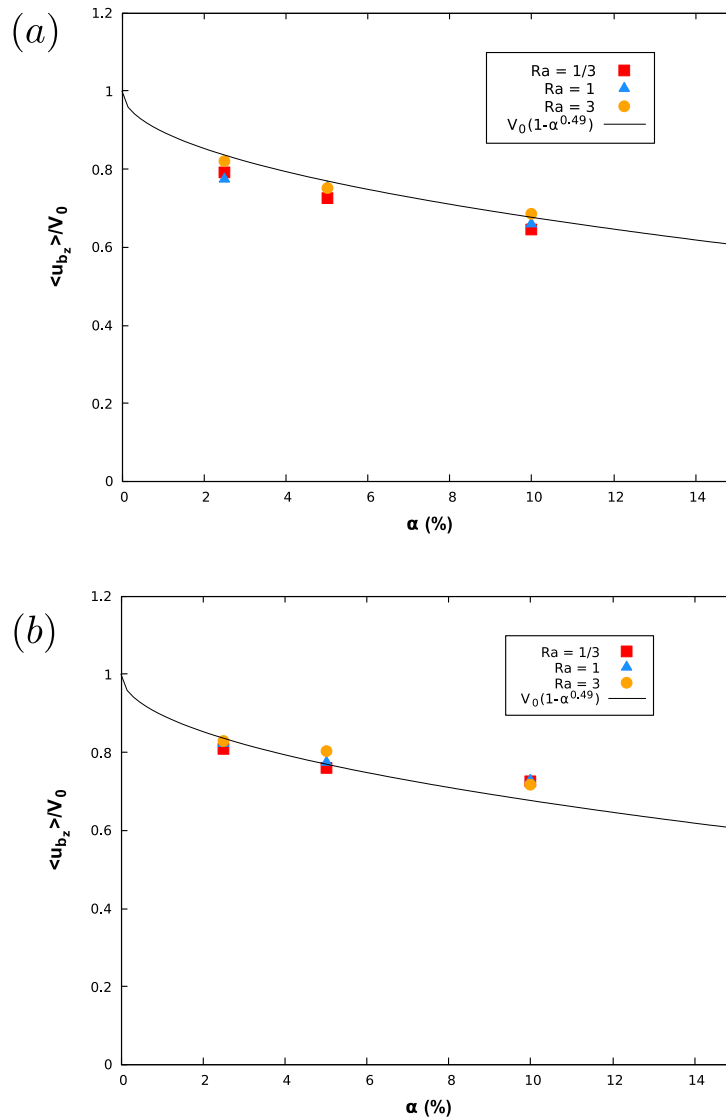


FIGURE 5.17: Normalized average rising velocity, (a) : small bubbles and (b) : large bubbles.

Variances $u_{b_z}^2$ of the bubble velocity are shown in Figure 5.18 for small and large bubbles. As observed in the PDFs of the bubble rising velocity (Figure 5.15), the influence of Ra for a given void fraction is confirmed : as Ra increases, the

variance decreases, for both small and large bubbles. As the void fraction increases, the variance increases for each value of Ra .

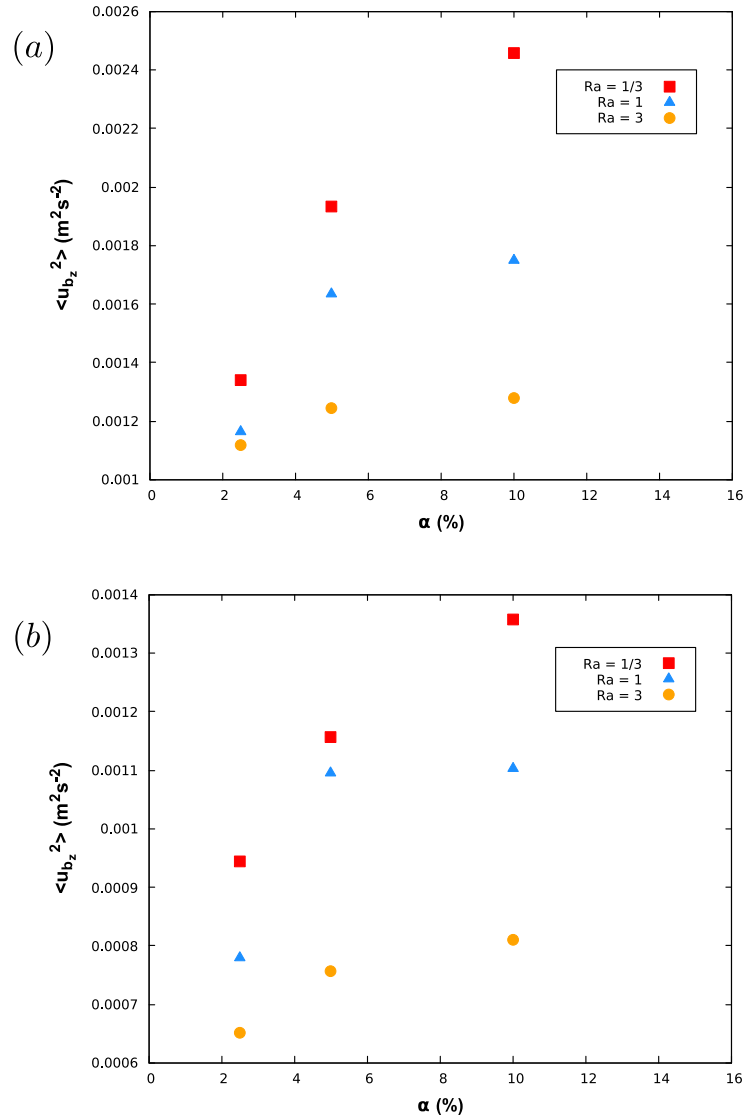


FIGURE 5.18: Variance of the rising velocity, (a) : small bubbles and (b) : large bubbles.

5.5 Conclusions

We first tested the main numerical parameters. The preliminary study validated the choice made on the dimensions of the computational domain. The study of the influence of the viscosity of penalization μ_p revealed it as non-effective in swarm of bubble configurations.

5.5. Conclusions

The reported simulations carried out for the monodisperse bubble swarm provide very good agreement with experiments making a clear confirmation of major results : the decay of the mean bubble velocity with the void fraction, a bubble agitation independent of the void fraction, and the liquid agitation in both horizontal and vertical direction. The results demonstrate the viability of the numerical tool for the simulations of bubbly flows. Despite the assumptions made on the bubbles (shape, non-deformability, elastic collisions) we were able to reproduce the main characteristic of bubble induced agitation.

The simulations performed for bidisperse swarm of bubbles provided new results. They shown the influence of the radius disparity on the variance and the average rising velocity of the bubble. A second study on bidisperse swarms shown that large and small bubbles average velocity decrease in agreement with the same law established for the monodisperse simulations.

Conclusions et perspectives

Les développements présentés dans cette thèse ont permis l'intégration d'un outil numérique de simulation d'écoulements à bulles selon un formalisme Euler-Lagrange dans NEPTUNE_CFD. Ce nouvel outil validé est d'ores et déjà opérationnel pour la simulation de configurations industrielles.

Nous avons dans un premier temps détaillé l'approche numérique permettant de caractériser localement sur la grille Eulérienne l'interface entre le liquide et les bulles. Cette caractérisation est effectuée via le calcul des fractions volumiques par une méthode VOF particulièrement adaptée au contexte de l'étude, les bulles étant sphériques et indéformables, et de ce fait leur interface est facilement paramétrable par une relation analytique. Ainsi, cette méthode permettra également à terme de traiter des inclusions ellipsoïdales. Le calcul des fractions fluides aux faces permet le calcul de la normale à la bulle. Ces deux grandeurs géométriques font office de pré-requis à l'imposition de la condition de glissement à l'interface. Nous avons ensuite décrit le formalisme Lagrangien régissant le déplacement des bulles au cours de la simulation, leurs interactions éventuelles correspondant à un modèle adapté de choc élastique, leurs interactions avec les conditions aux limites du domaine de calcul. Un algorithme de type Event-Driven permet un traitement rigoureux et chronologique de l'ensemble des évènements collisionnels au cours de la simulation.

Le nouveau formalisme Eulérien des équations de Navier-Stokes induit par l'ajout d'un terme de pénalisation à été présenté. Les aspects numériques généraux liés au code NEPTUNE_CFD ont été décrits (position des variables, traitement des conditions limites). L'ensemble des modifications (divergence, flux de masse, contrainte de cisaillement, gradient de pression) apportées à l'algorithme de NEPTUNE_CFD en vue d'imposer la condition de glissement à l'interface ont été détaillées. S'ajoutent à ces modifications des ajustements numériques supplémentaires indispensables au bon déroulement de la simulation (régularisation de la pression interne, régularisation du champ de vitesse global dans le direction d'ascension des bulles). Deux approches originales de la réalisation du couplage entre le liquide et les bulles ont été présentées. Cette formulation se base directement sur le formalisme pénalisé des équations de Navier-Stokes. Un paramètre d'entrée de l'étude est introduit : la viscosité de pénalisation, dont le rôle est d'homogénéiser le champ de vitesse interne aux bulles.

La première partie du processus de validation a été dédiée à la validation de l'imposition de la condition de glissement à l'interface. Nous avons désactivé la méthode de couplage afin de pouvoir imposer des comportements aux objets pénalisés. Le cas-test d'écoulement dans un canal courbe a permis de déterminer l'ordre de convergence de la méthode en norme L_1 (0.75 pour les composantes de vitesse, 2 pour la pression), qui à été par la suite confirmé par l'étude de l'écoulement potentiel autour du cylindre. La cas d'écoulement visqueux autour du cylindre a

Conclusions et perspectives

permis l'examen des contributions des modifications apportées à l'algorithme. La méthode numérique a également offert de très bons résultats sur des configurations dynamiques (écoulement dans un canal à parois défilantes, bulle en déplacement homogène à vitesse relative nulle avec le fluide), présageant de bons résultats pour la suite de la validation.

La deuxième partie du processus de validation vise à valider numériquement la formulation du couplage liquide-bulles. Nous avons choisi une configuration de bulle sphérique en ascension dans un liquide au repos. Dans cette configuration, la théorie décrit intégralement la dynamique de bulle, de son accélération initiale à l'instant où elle atteint sa vitesse terminale. L'étude de sensibilité au paramètre de viscosité de pénalisation ont révélé un fort conditionnement des résultats de simulation à ce paramètre numérique faisant ainsi office de paramètre de contrôle. Pour chaque Reynolds étudié ($Re = 17$ et $Re = 71$), nous avons été en mesure d'obtenir une correspondance entre la vitesse de la bulle et la vitesse terminale théorique. Les sillages des bulles fournis par nos simulations sont en bon accord avec la décroissance de la vitesse fluide loin de la bulle établie par la théorie.

L'étude préliminaire sur un nuage de bulles monodisperse a permis d'établir les dimensions minimales du domaine périodique dans lequel nous cherchions à réaliser nos simulations. Une étude de convergence a permis d'établir l'effet de raffinement en maillage sur les propriétés du fluide et des bulles. Une étude supplémentaire a permis d'établir la disparition de l'influence de la viscosité de pénalisation en configuration de nuage de bulles. Nous avons par la suite conclu le processus de validation. Les résultats des simulations en configurations de nuage de bulles sont en accord avec les résultats de l'étude expérimentale sur laquelle nous nous sommes basés. Deux résultats majeurs reproduits par nos simulations sont à souligner : la décroissance de la vitesse moyenne des bulles en fonction du taux de vide, une agitation du liquide indépendante de la fraction volumique. Ces résultats indiquent que malgré les hypothèses de simplification réalisées sur les inclusions (forme, indéformabilité, collisions élastiques), la méthode est capable de reproduire les caractéristiques principales de l'agitation induite.

Enfin, nous avons réalisé des simulations de nuages de bulles bidisperses selon deux approches. La première approche visait à comparer les caractéristiques de l'agitation induite en se basant sur une correspondance avec des simulations monodisperses (taux de vide et aire interfaciale identiques). L'agitation fluide est peu sensible à la disparité de rayon dans l'écoulement. Le principal effet de cette disparité est un ralentissement de la vitesse moyenne des bulles dans le nuage. La deuxième approche visait à étudier l'effet du ratio du taux de vide associé aux populations de bulles classées selon leur rayon. Les résultats indiquent que la décroissance des vitesses des deux populations de bulles suit la même loi de décroissance établie (et vérifiée par nos simulations) que dans le cas d'un nuage monodisperse.

Les perspectives de développement et de consolidation de la méthode sont nombreuses. Dans un premier temps, des statistiques supplémentaires sur l'écoulement peuvent être mesurées : tensions de Reynolds, corrélations des vitesses fluctuantes, fonctions d'autocorrélations Lagrangiennes, spectre de turbulence, forces exercées sur les bulles, accumulation préférentielle. Ces mesures statistiques permettront à terme des comparaisons avec d'autres expériences ou simulations. Dans un deuxième temps, la démarche de validation peut être étendue à des objets ellipsoïdaux. Leur intégration au nuage de bulles nous rapprocherait fortement des configurations industrielles, permettant également des comparaisons à des expériences plus intégrales. Cela nous permettrait également d'étudier le défaut de variance des vitesses de bulles en configuration de nuage de bulle observés lors de nos simulations. Ensuite, il faudra imaginer les conditions de simulation propres à fournir des informations statistiques de type effets séparés comme par exemple la force de traînée et la dispersion turbulente qui peuvent être obtenues dans un écoulement homogène ascendant, la force de portance qui sera obtenue en écoulement cisailé, la force de masse ajoutée devrait pouvoir être caractérisée en écoulement accéléré (en jouant par exemple sur la variation de la gravité). Le résultat final est la confrontation des statistiques « expérimentales » avec les modèles « à l'état de l'art » de NEPTUNE_CFD, la proposition éventuelles de nouvelles corrélations ou la correction de celles disponibles.

Bibliographie

- B. J. Alder and T. E. Wainwrigth. Studies in Molecular Dynamics. I. General Method. *Journal of Chemical Physics*, 31 :459–466, 1959.
- P. Angot, C-H. Bruneau, and P. Fabrie. A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. *Numerische Mathematik*, 81 (4) :497–520, 1999.
- B.S. Aubry, C. Niedergang, J. Cahouet, and G. Nicolas. A finite volume approach for 3d two phase flows in tube bundles : The 'thyc' code. In *Fourth international topical meeting on nuclear reactor thermal-hydraulics (NURETH-4). Proceedings. Vol. 2*, 1989.
- T.R. Auton. The lift force on a spherical body in a rotational flow. *Journal of fluid Mechanics*, 183 :199–218, 1987.
- H. Badreddine, Y. Sato, B. Niceno, and H.M. Prasser. Finite size Lagrangian particle tracking approach to simulate dispersed bubbly flows. *Chemical Engineering Science*, 122 :321–335, 2015.
- F. Barre and M. Bernard. The cathare code strategy and assessment. *Nuclear engineering and design*, 124(3) :257–284, 1990.
- G.K. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge university press, 1967.
- S. Bnà, S. Manservigi, R. Scardovelli, P. Yecko, and S. Zaleski. Numerical integration of implicit functions for the initialization of the vof function. *Computers & Fluids*, 113 :42–52, 2015.
- B. Bunner and G. Tryggvason. Dynamics of homogeneous bubbly flows part 1. rise velocity and microstructure of the bubbles. *Journal of Fluid Mechanics*, 466 : 17–52, 2002.
- J-P. Caltagirone and E. Arquis. Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d'une interface milieu fluide-milieu poreux : application la convection naturelle. *CR Acad. Sci. Paris II*, 299 :1–4, 1984.
- J-P. Caltagirone and E. Arquis. Recirculating flow in porous-media. *Comptes rendus de l'académie des sciences SERIE II*, 302(14) :843–846, 1986.
- J. Chahed and L. Masbernat. Forces interfaciales et turbulence dans les écoulements à bulles. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series IIB-Mechanics-Physics-Astronomy*, 326(10) :635–642, 1998.
- R. Clift, J.R. Grace, and M.E. Weber. *Bubbles, drops, and particles*. Courier Corporation, 2005.

- E. Climent. *Dispersion de bulles et modification du mouvement de la phase porteuse dans des écoulements tourbillonnaires*. PhD thesis, 1996.
- C. Corre, J-L. Estivalezes, S. Vincent, O. Simonin, and S. Glockner. Simulation of a Fluidized Bed Using a Hybrid Eulerian-Lagrangian Method for Particle Tracking. *Turbulence and Interactions, Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design*, 110 :103–110, 2009.
- S. L. Dance, E. Climent, and M. R. Maxey. Collision barrier effects on the bulk flow in a random suspension. *Physics of Fluids*, 16 :, 2004.
- A. Doradoux. *Simulation numérique d'écoulements diphasiques autour d'un solide mobile*. PhD thesis, Bordeaux, 2017.
- A. Etcheverlepo. *Développement de méthodes de domaines fictifs au second ordre*. PhD thesis, Université Sciences et Technologies-Bordeaux I, 2013.
- C. Garnier, M. Lance, and J.L. Marié. Measurement of local flow characteristics in buoyancy-driven bubbly flow at high void fraction. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 26(6) :811–815, 2002.
- J.R. Grace. Shapes and velocities of bubbles rising in infinite liquids. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 51(2) :116–120, 1973.
- A. Guelfi, D. Bestion, M. Boucker, P. Boudier, P. Fillion, M. Grandotto, J-M. Hérard, E. Hervieu, and P. Péturaud. Neptune : a new software platform for advanced nuclear thermal hydraulics. *Nuclear Science and Engineering*, 156(3) : 281–324, 2007.
- G.F. Hewitt. Critical heat flux in flow boiling. In *Proceedings of Sixth International Heat Transfer Conference*, pages 143–171, 1978.
- 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.
- M. A. Hopkins and M. Y. Louge. Inelastic microstructure in rapid granular flows of smooth disks. *Physics of Fluids*, A 3 (1) :, 1991.
- IAEA. *Accident Analysis for Nuclear Power Plants with Pressurized Water Reactors*. Number 30 in Safety Reports Series. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Vienna, 2003.
- A.M. Kamp, A.K Chesters, C. Colin, and J. Fabre. Bubble coalescence in turbulent flows : a mechanistic model for turbulence-induced coalescence applied to microgravity bubbly pipe flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 27 (8) :1363–1396, 2001.
- T. Kempe, M. Lennartz, S. Schwarz, and J. Fröhlich. Imposing the free-slip condition with a continuous forcing immersed boundary method. *Journal of Computational Physics*, 282 :183–209, 2015.

Bibliographie

- D. Kim and H. Choi. Immersed boundary method for flow around an arbitrarily moving body. *Journal of Computational Physics*, 212(2) :662–680, 2006.
- N. Kurul and M.Z. Podowski. Multidimensional effects in forced convection subcooled boiling. In *Proceedings of the Ninth International Heat Transfer Conference*, volume 2, pages 19–24. Hemisphere Publishing New York, 1990.
- G. Langlais. *Modélisation de la thermique et de la thermohydraulique dans un échangeur de réacteur de fusion thermonucléaire à l'aide du code GENEPI*. PhD thesis, 1999.
- D. Legendre. On the relation between the drag and the vorticity produced on a clean bubble. *Physics of Fluids*, 19(1) :018102, 2007.
- J. Magnaudet and I. Eames. The motion of high-reynolds-number bubbles in inhomogeneous flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 32(1) :659–708, 2000.
- N. Méchitoua, M. Boucker, J. Laviéville, J-M. Hérard, S. Pigny, and G. Serre. Neptune-CFD : an Unstructured FV Solver for two-phase Water/Vapor Flows Based on an Elliptic Oriented Fractional Step Method. *NURETH-10, Seoul, Oct. 5-9, 2003*.
- J.B. McLaughlin. Numerical simulation of bubble motion in water. *Journal of colloid and interface science*, 184(2) :614–625, 1996.
- R. Mei, J.F. Klausner, and C.J. Lawrence. A note on the history force on a spherical bubble at finite reynolds number. *Physics of fluids*, 6(1) :418–420, 1994.
- A. Merle, D. Legendre, and J. Magnaudet. Forces on a high-reynolds-number spherical bubble in a turbulent flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 532 :53–62, 2005.
- D.W. Moore. The rise of a gas bubble in a viscous liquid. *Journal of Fluid Mechanics*, 6(1) :113–130, 1959.
- C.S Peskin. Flow patterns around heart valves : a numerical method. *Journal of computational physics*, 10(2) :252–271, 1972.
- C.S Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of computational physics*, 25(3) :220–252, 1977.
- G. Riboux, F. Risso, and D. Legendre. Experimental characterization of the agitation generated by bubbles rising at high reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, 643 :509–539, 2010.
- F. Risso and K. Ellingsen. Velocity fluctuations in a homogeneous dilute dispersion of high-reynolds-number rising bubbles. *Journal of Fluid Mechanics*, 453 :395–410, 2002.

- I. Roghair, Y.M. Lau, N.G. Deen, H.M. Slagter, M.W. Baltussen, M.V.S Annaland, and J.A.M. Kuipers. On the drag force of bubbles in bubble swarms at intermediate and high reynolds numbers. *Chemical engineering science*, 66(14) : 3204–3211, 2011.
- A. Sarthou, S. Vincent, J-P. Caltagirone, and P. Angot. Eulerian–lagrangian grid coupling and penalty methods for the simulation of multiphase flows interacting with complex objects. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 56(8) :1093–1099, 2008.
- Il Won Seo and Chang Geun Song. Numerical simulation of laminar flow past a circular cylinder with slip conditions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 68(12) :1538–1560, 2012.
- H. Sigurgeirsson, A. Stuart, and W.L. Wan. Algorithms for Particle-Field Simulations with Collisions. *Journal of Computational Physics*, 172 :766–807, 2001.
- 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.
- A. Tomiyama, A. Sou, H. Minagawa, and T. Sakaguchi. Numerical analysis of a single bubble by vof method. *JSME International Journal Series B Fluids and Thermal Engineering*, 36(1) :51–56, 1993.
- A. Tomiyama, G.P. Celata, S. Hosokawa, and S. Yoshida. Terminal velocity of single bubbles in surface tension force dominant regime. *International Journal of Multiphase Flow*, 28(9) :1497–1519, 2002.
- I. Toumi, A. Bergeron, D. Gallo, E. Royer, and D. Caruge. Flica-4 : a three-dimensional two-phase flow computer code with advanced numerical methods for nuclear applications. *Nuclear Engineering and Design*, 200(1) :139–155, 2000.
- 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.
- G. Tryggvason, R. Scardovelli, and S. Zaleski. *Direct numerical simulations of gas–liquid multiphase flows*. Cambridge University Press, 2011.
- M. Uhlmann. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 209(2) :448–476, 2005.
- 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.

Bibliographie

- S. P. van der Pijl, A. Segal, C. Vuik, and P. Wesseling. A mass-conserving Level-Set method for modelling of multi-phase flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 47 : 339–361, 2005.
- S. Vincent, J.C.B De Motta, A. Sarthou, J.L Estivalezes, O. Simonin, and E. Climent. A lagrangian vof tensorial penalty method for the dns of resolved particle-laden flows. *Journal of Computational Physics*, 256 :582–614, 2014.
- D. Wunsch. Theoretical and numerical study of collision and coalescence - Statistical modeling approaches in gas-droplet turbulent flows. *Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse*, 2009.
- X. Yin and D.L. Koch. Lattice-boltzmann simulation of finite reynolds number buoyancy-driven bubbly flows in periodic and wall-bounded domains. *Physics of fluids*, 20(10) :103304, 2008.
- R. Zenit and D. Legendre. The coefficient of restitution for air bubbles colliding against solid walls in viscous liquids. *Physics of Fluids*, 21 :, 2009.
- R. Zenit, D.L. Koch, and A.S. Sangani. Measurements of the average properties of a suspension of bubbles rising in a vertical channel. *Journal of Fluid Mechanics*, 429 :307–342, 2001.

