

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

IMPACT DE GOUTTELETTE ET CHANGEMENT DE PHASE PAR LA MÉTHODE DE  
BOLTZMANN SUR RÉSEAU

SAMI AMMAR

DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE  
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION  
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIAE DOCTOR  
(GÉNIE MÉCANIQUE)

MAI 2017

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée :

IMPACT DE GOUTTELETTE ET CHANGEMENT DE PHASE PAR LA MÉTHODE DE  
BOLTZMANN SUR RÉSEAU

présentée par : AMMAR Sami

en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiae Doctor

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

M. REGGIO Marcelo, Ph. D., président

M. TRÉPANIÉ Jean-Yves, Ph. D., membre et directeur de recherche

M. ÉTIENNE Stéphane, Doctorat, membre

M. BENNACER Rachid, Ph. D., membre externe

## DÉDICACE

*À ma famille,*

## REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier mon directeur de recherche, Pr Jean-Yves Trépanier, pour m'avoir accordé sa confiance et donné l'opportunité de faire ce projet. Je vous remercie également pour l'autonomie que vous m'avez laissée pour explorer plusieurs axes de recherche et votre soutien sans faille durant ces années.

Je tiens aussi à remercier les membres du jury, les professeurs Marcelo Reggio, Stéphane Étienne, Rachid Bennacer, pour avoir accepté d'évaluer cette thèse.

Je manifeste ma reconnaissance au Conseil de Recherches en Sciences Naturelles et en Génie (CRSNG) sans lequel ce projet n'aurait pas eu lieu.

Je tiens à remercier, Martin Gariépy et Benoit Malouin, pour vos conseils et les nombreuses conversations qu'on a pu avoir. Votre amitié est appréciée. Par le fait même, je tiens à remercier Sébastien Leclaire pour ces précieux conseils et pour m'avoir partagé ces connaissances sur la méthode de Boltzmann sur réseau. Je remercie également tous mes collègues et principalement Guillaume Pernaudat, Clément Legros et Soheil Namvar pour leurs discussions des plus agréables.

Enfin, je tiens à remercier mes parents pour leur patience, leur soutien et leur dévouement sans quoi je ne serai pas là aujourd'hui.

## RÉSUMÉ

Les écoulements multiphasiques avec changement de phase et transfert de chaleur interviennent dans de nombreuses applications industrielles et processus naturels. Malgré le développement rapide des outils numériques, la simulation numérique d'écoulements fluides à plusieurs phases immiscibles demeure un défi en raison de la difficulté inhérente à suivre les interfaces. Habituellement, pour résoudre ce type d'écoulement, des méthodes numériques basées sur les équations de Navier Stokes couplées à des méthodes lagrangiennes ou eulériennes sont utilisées. Cependant, ces dernières décennies, la méthode Boltzmann sur réseau est apparue comme une méthode prometteuse pour simuler les écoulements à géométrie complexe et à plusieurs phases.

Dans ce contexte, l'objectif principal de cette thèse est de développer un modèle multiphasique 3D basé sur la méthode de Boltzmann sur réseau capable d'étudier l'impact d'une gouttelette sur une surface et de traiter les changements de phase. Pour ce faire, le modèle pseudo-potentiel de Shan & Chen pour la simulation d'écoulement à plusieurs phases et plusieurs composants est utilisé comme point de départ.

Cette recherche doctorale est organisée autour de trois thèmes afin de mettre en évidence les contributions. Des cas tests sont réalisés afin de valider les améliorations apportées au modèle et des applications physiques sont proposées. Le premier thème apporte une amélioration au modèle pseudo-potentiel en découplant la tension de surface et la densité. Le tenseur de pression du modèle 3D est modifié pour permettre un ajustement de la tension de surface tout en préservant la consistance thermodynamique. Dans ce thème, l'étude de l'impact d'une gouttelette sur une surface sèche et mouillée est analysée. Le thème 2 généralise la méthode de modification du tenseur de pression aux cas d'écoulements à plusieurs composants, dont la viscosité des fluides est différente. Il permet de simuler des écoulements à ratios de densité et de viscosité élevés. Enfin, le thème 3 ajoute les effets thermiques au modèle multiphasique à plusieurs composants. Le changement de phase et les échanges de chaleur entre composants sont étudiés.

Pour chacun des thèmes, un article scientifique a été rédigé et soumis à un journal. Ces articles sont présentés dans le corps de ce document sous forme de chapitre.

## ABSTRACT

Multiphase flows with phase change and heat transfer occur in many industrial applications and natural processes. Despite the rapid development of numerical tools, the numerical simulation of fluid flows with multiple immiscible phases remains a challenge because of the inherent difficulty for tracking the interfaces. Usually, to solve this type of flows, numerical methods based on Navier Stokes equations coupled with Lagrangian or Eulerian methods are used. However, in recent decades, the Boltzmann method has emerged as a promising approach for simulating complex geometry flows and multiphase flows.

In this context, the main objective of this thesis is to develop a 3D multiphase model based on the Boltzmann method which can study droplet impingement on a surface and analyze the phase change. To do this, the pseudo-potential model of Shan & Chen for simulating multiple phases and components flows is used as a starting point.

This doctoral research is organized around three themes in order to highlight the contributions of this thesis. Test cases are carried out to validate the improvements made to the model and physical applications are proposed. The first theme improves the pseudo-potential model by decoupling the surface tension and the density. The pressure tensor of the 3D model is modified to allow an adjustment of the surface tension while preserving the thermodynamic consistency. In this topic, the study of the impingement of a droplet on a dry and wet surface is analyzed. Theme 2 generalizes the modification of the pressure tensor to cases of multi-component flows with different fluid viscosities. It allows simulating flows with high density and viscosity ratios. Finally, the theme 3 adds thermal effects to the multiphase multi-component model. Phase change and heat exchanges between components are studied.

For each of the themes, a scientific article was written and submitted to a journal. These articles are presented in this document as a chapter.

## TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE.....	III
REMERCIEMENTS .....	IV
RÉSUMÉ.....	V
ABSTRACT.....	VI
TABLE DES MATIÈRES.....	VII
LISTE DES TABLEAUX .....	XII
LISTE DES FIGURES .....	XIII
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS.....	XVI
LISTE DES ANNEXES .....	XVII
CHAPITRE 1 INTRODUCTION.....	1
CHAPITRE 2 REVUE CRITIQUE DE LA LITTÉRATURE .....	4
2.1 Modélisation et simulation numérique de l'interaction goutte-surface.....	4
2.1.1 Mécanismes d'impact goutte-paroi .....	4
2.1.2 Études expérimentales.....	7
2.1.3 Simulations numériques .....	8
2.2 Frontières des connaissances de la méthode de Boltzmann sur réseau.....	11
2.2.1 Méthode de Boltzmann sur réseau .....	11
2.2.2 Modèles multiphasiques .....	16
CHAPITRE 3 DÉMARCHE.....	21
3.1 Thème 1 : Ajustement de la tension de surface dans un modèle multiphasique tridimensionnel.....	21
3.1.1 Contribution 1 .....	21
3.1.2 Applications .....	23

3.2	Thème 2 : Tension de surface variable dans un écoulement multiphase multicomposant à ratio de densité et de viscosité élevé.....	24
3.2.1	Contribution 2 .....	24
3.2.2	Applications .....	26
3.3	Thème 3 : Ajustement de la tension de surface dans un modèle multiphasique tridimensionnel.....	27
3.3.1	Contribution 3 .....	28
3.3.2	Applications .....	29
CHAPITRE 4 ARTICLE 1: A MULTIPHASE THREE-DIMENSIONAL MULTI-RELAXATION TIME (MRT) LATTICE BOLTZMANN MODEL WITH SURFACE TENSION ADJUSTMENT.....		31
4.1	Abstract .....	31
4.2	Introduction .....	32
4.3	Numerical model .....	34
4.3.1	3D single and multiple relaxation-time LBM model .....	34
4.3.2	The pseudo-potential model .....	39
4.3.3	Equations of state .....	39
4.3.4	Higher order isotropy .....	40
4.3.5	Adjustment of the surface tension.....	41
4.3.6	Total force .....	44
4.4	Applications and results .....	45
4.4.1	Analysis of spurious currents .....	45
4.4.2	Validation of Laplace's law .....	46
4.4.3	Thermodynamic consistency.....	49
4.4.4	Contact angle.....	50



4.4.5	Droplet Oscillation .....	51
4.4.6	Droplet impingement on a dry wall.....	53
4.4.7	Droplet impact on a wet surface.....	60
4.5	Conclusion.....	63
CHAPITRE 5 ARTICLE 2: A MULTI-COMPONENT THREE-DIMENSIONAL MULTI-RELAXATION TIME (MRT) LATTICE BOLTZMANN MODEL AT HIGH DENSITY AND VISCOSITY RATIOS.....		64
5.1	Abstract .....	64
5.2	Introduction .....	64
5.3	Numerical model.....	67
5.3.1	3D multiple relaxation-time LBM model.....	67
5.3.2	The pseudo- potential model.....	71
5.3.3	Incorporation of a realistic state equation .....	72
5.3.4	Thermodynamic inconsistency.....	73
5.3.5	Adjustment of the surface tension in the multi-component model .....	74
5.4	Applications and Results.....	76
5.4.1	Analysis of thermodynamic consistency.....	76
5.4.2	Laplace's law .....	77
5.4.3	Poiseuille flow.....	80
5.4.4	Droplet Oscillation .....	83
5.4.5	Droplet falling under the effect of gravity and the buoyant force.....	85
5.5	Conclusion.....	90
CHAPITRE 6 ARTICLE 3: A THERMAL MULTI-COMPONENT MULTI-RELAXATION TIME (MRT) LATTICE BOLTZMANN MODEL WITH PHASE CHANGE AND HEAT EXCHANGE.....		92

6.1	Abstract .....	92
6.2	Introduction .....	92
6.3	Multiphase multi-component model .....	94
6.3.1	Explicit forcing (EF) for multiphase multi-component flows.....	94
6.3.2	Interaction force .....	98
6.3.3	Peng Robinson equation of state .....	99
6.3.4	Thermodynamic inconsistency.....	99
6.3.5	Adjustment of the surface tension in the multi-component model .....	100
6.4	Thermal model for multiphase multi-component flows.....	101
6.4.1	Thermal model for single component .....	101
6.4.2	Coupling of the thermal model with the multi-component model.....	102
6.4.3	Treatment of phase change.....	103
6.4.4	Heat exchange between the components.....	105
6.5	Applications and results .....	106
6.5.1	Rayleigh Bénard convection .....	106
6.5.2	Thermal Poiseuille.....	109
6.5.3	Thermodynamic Consistency .....	112
6.5.4	Thermal conduction in two component flow .....	114
6.5.5	Droplet Evaporation .....	115
6.5.6	Bubble growth and migration from a superheated surface .....	119
6.6	Conclusion.....	123
CHAPITRE 7	DISCUSSION GÉNÉRALE .....	124
7.1	Limitations .....	124
CHAPITRE 8	CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS .....	127

8.1	Recommandations .....	127
	BIBLIOGRAPHIE .....	130
	ANNEXES.....	142

**LISTE DES TABLEAUX**

Table 4.1: Weights for isotropy order of 6, 8, 10 in 3D case [55] .....	41
Table 4.2: Maximum amplitude of the spurious velocity $ u _{\max}$ for different isotropic order .....	46
Table 5.1: Comparaison des tensions de surface numériques et expérimentales à différentes températures .....	80
Table 5.2: Comparison between numerical and empirical Reynolds numbers .....	88
Table 5.3: Numerical and empirical drag coefficients for different Eötvös and Morton numbers	89

## LISTE DES FIGURES

Figure 2.1: Régimes d'impact de gouttes sur une surface [9].....	5
Figure 4.1: Convergence .....	48
Figure 4.2: Pressure difference across the interface according to the inverse of the radius .....	48
Figure 4.3: Numerical coexistence curves and coexistence curves given by the Maxwell construction .....	49
Figure 4.4a: Hydrophobic surface.....	50
Figure 4.4b: Neutral surface.....	50
Figure 4.4c: Hydrophilic surface.....	50
Figure 4.5: Contact angle in fonction $\rho_w$ parameter.....	51
Figure 4.6: Evolution of the normalized radius of the droplet in the horizontal direction for different viscosities $\nu$ , $\kappa = 0$ .....	53
Figure 4.7: Evolution of the normalized radius of the droplet in the horizontal direction for different tension surface parameters $\kappa$ , $\nu = 0.16$ .....	53
Figure 4.8: Snapshots of the droplet impact process on the dry wall.....	55
Figure 4.9: Spread factor during kinematic phase at different Re and We .....	56
Figure 4.10: Spread factor during kinematic phase at different Re and We .....	57
Figure 4.11: Comparison of maximum spread factor between our numerical results and prediction equation .....	58
Figure 4.12: Evolution of the spread factor for different $\kappa$ values.....	59
Figure 4.13: Influence of wettability on the spread factor .....	60
Figure 4.14: Simulation of the initial step.....	61
Figure 4.15: Evolution of the spread factor for different $\kappa$ values.....	62
Figure 5.1: Comparison between the numerical coexistence curve, the coexistence curve given by the Maxwell construction and the coexistence curve given by the NIST table .....	77

Figure 5.2: Verification of Laplace's law at different temperatures.....	79
Figure 5.3: Velocity profile with the original pseudo-potential model (left) and the improved model (right) for viscosity ratio 10 .....	81
Figure 5.4: Velocity profile with a viscosity ratio 100 (left) and a viscosity ratio 1000 (right) ....	82
Figure 5.5: Grid convergence for different viscosity ratios .....	82
Figure 5.6: Droplet oscillation from a deformed droplet of ellipsoid shape .....	83
Figure 5.7: Evolution of the normalized radius of the droplet in the horizontal direction for different viscosity ratio $\nu_2/\nu_1$ with $\kappa = 0$ .....	85
Figure 5.8: Evolution of the normalized radius of the droplet in the horizontal direction for different tension surface parameters $\kappa$ with $\nu_2/\nu_1 = 75$ .....	85
Figure 5.9: Reynolds number for different ratios of W/D.....	87
Figure 5.10: Evolution of the drag coefficient in function of dimensionless time for different Reynolds numbers .....	90
Figure 6.1: Temperature contours for $Ra = 10\ 000$ (a.) et $Ra = 100\ 000$ (c.). Stream function contours for $Ra = 10\ 000$ (b.) et $Ra = 100\ 000$ (d.).....	107
Figure 6.2: Evolution of growth or decrease rate for different Rayleigh numbers. ....	108
Figure 6.3: Evolution of Nusselt numbers as a function of Rayleigh number .....	109
Figure 6.4: Geometry of the problem.....	109
Figure 6.5: Comparison of the analytical and numerical velocity profile for $Re = 40$ and $Pr = 0.71$ .....	111
Figure 6.6: Non-dimensional temperature profiles for different cross-section $x/L$ .....	112
Figure 6.7: Comparison between the analytical and numerical profile temperature in fully developed regime .....	112
Figure 6.8: Convergence .....	113
Figure 6.9: Numerical coexistence curves and coexistence curves given by the Maxwell construction .....	114

Figure 6.10: Temperature profile at a cross section $x/L = 0.5$ .....	115
Figure 6.11: Geometric configuration.....	116
Figure 6.12: Snapshots of the evaporation process.....	117
Figure 6.13: Comparison between the normalized square diameter in time and the $D^2$ law for different $\kappa$ parameters .....	118
Figure 6.14: Comparison between the normalized square diameter in time and the $D^2$ law for different vaporization latent heat $L_v$ .....	119
Figure 6.15: Bubble growth and migration from a superheated surface.....	121
Figure 6.16: Departure diameter evolution in function of gravity amplitude $g$ .....	122
Figure A.1: Géométrie du problème .....	142
Figure A.2: Contour de température $\theta$ .....	143
Figure A.3: Contour de fraction liquide .....	143
Figure A.4: Évolution de la température $\theta$ .....	144
Figure A.5: Évolution de la fraction liquide .....	144

**LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS**

BGK	Bhatnagar, Gross et Krook
CFD	Computational Fluid Dynamics
DmQn	Réseau à m dimensions et à n vitesses microscopiques discrètes
EOS	Equation Of State
LBM	Lattice Boltzmann Method
LGCA	Lattice-Gaz Cellular Automata
Ma	Mach
MAC	Marker and Cell
MRT	Multi-Relaxation Time
nD	Réseau à n dimensions
NS	Équations Navier-Stokes
O(-)	De l'Ordre de (-)
Oh	Nombre d'Ohnesorge
Re	Nombre de Reynolds
VOF	Volume Of Fluid
We	Nombre de Weber



**LISTE DES ANNEXES**

Annexe A – Problème de Stefan .....142

## CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Depuis plusieurs décennies, les écoulements avec changement de phase et transfert de chaleur suscitent l'intérêt des chercheurs et des industriels puisque ces phénomènes physiques apparaissent dans de nombreuses applications industrielles et processus naturels, par exemple dans les échangeurs de chaleur, la climatisation, la réfrigération et le givrage.

Par exemple, le givrage sur un avion constitue un des problèmes majeurs pour la sécurité aérienne impliquant de nombreux phénomènes thermiques et multiphasiques [1]:

- l'impact des gouttelettes d'eau surfondues sur les surfaces de l'avion
- le ruissellement éventuel d'un film d'eau sur la surface
- la convection forcée exercée par l'écoulement d'air
- les changements de phase incluant vaporisation et solidification (de l'eau surfondue et de celle accumulée sur les surfaces)

Le développement rapide des outils numériques permet aujourd'hui de simuler l'accrétion de givre sur une aile d'avion. Le plus souvent, les méthodes numériques utilisées se basent sur des solutions macroscopiques qui résultent de la discrétisation des équations aux dérivées partielles. Ces outils numériques, en complément des tests en vol et en soufflerie, sont utilisés à des fins de certification. Par contre, ces outils numériques comportent de nombreuses étapes et ne simulent pas encore avec précision les phénomènes physiques liés à l'accrétion de givre dans toutes les conditions de givrage en vol.

La simulation numérique des écoulements thermiques et multiphasiques est apparue ces dernières années comme un véritable défi en raison de la difficulté inhérente à suivre les interfaces de fluide, la conservation de la masse et le traitement de la tension de surface. En parallèle, la méthode de Boltzmann sur réseau s'est développée et est maintenant une approche numérique prometteuse pour la simulation d'écoulements à géométrie complexe et à plusieurs phases [2-4]. Le succès des simulations basées sur la méthode de Boltzmann sur réseau est principalement dû à sa nature cinétique, permettant la simulation d'interface dynamique à l'échelle macroscopique. Dans ce contexte, cette recherche doctorale s'intéresse à la simulation d'impact et changement de phase de gouttelette par la méthode de Boltzmann sur réseau. Cette approche innovatrice viserait

à long terme à permettre la simulation de manière intégrée du processus complet de givrage à l'échelle de la gouttelette, en vue de mieux comprendre les phénomènes en jeu.

Au vu de l'état de l'art dans le développement de la méthode de Boltzmann sur réseau, la présente thèse propose plusieurs améliorations à la méthode pour accroître la précision et l'efficacité du schéma numérique dans la simulation d'écoulements tridimensionnelle avec changement de phase et échanges de chaleur. Ces améliorations sont vérifiées et validées à travers des cas tests qualitatifs et quantitatifs.

Cette thèse se subdivise en six sections: une revue critique de la littérature, une démarche divisée en trois thèmes afin de mettre en évidence les contributions scientifiques, une présentation de trois articles scientifique exposant les méthodes et résultats obtenus, une discussion générale sur l'ensemble de la recherche doctorale et enfin une conclusion. La revue critique de la littérature débute avec une brève explication sur la physique du givre, ensuite la modélisation et la simulation numérique de l'interaction goutte-paroi sont discutées et enfin la méthode de Boltzmann sur réseau est présentée. L'intérêt pour la méthode de Boltzmann sur réseau est expliqué. Cette thèse inclut dans le corps du document le contenu de trois articles scientifiques. La méthode employée et les résultats sont détaillés dans les chapitres 4,5 et 6. Chacun de ces chapitres correspond à un article scientifique:

- Le chapitre 4 s'intéresse à l'impact d'une gouttelette d'eau sur des surfaces sèches et mouillées. La simulation de la dynamique d'impact de la gouttelette est effectuée à partir d'un modèle de Boltzmann sur réseau amélioré capable d'ajuster la tension de surface indépendamment du ratio de densité. L'influence des paramètres physiques, de la tension de surface et de la mouillabilité est analysée.
- Le chapitre 5 est consacré à la simulation d'écoulements multiphasique à plusieurs composants. Une extension du modèle proposé dans le chapitre précédent au cas à plusieurs composants est présentée. La tension de surface et la densité sont découplées. Le modèle est capable de simuler des ratios de densité et de viscosité élevées ( $O(1000)$ ) et d'assurer la conservation du momentum.
- Le chapitre 6 traite des effets thermiques dans la simulation d'écoulement multiphasique à plusieurs composants. Le changement de phase et les échanges de chaleur sont désormais

pris en compte. Le problème d'évaporation d'une gouttelette et de croissance et départ d'une bulle à partir d'une surface surchauffée sont analysés.

Suite à la présentation des trois articles, une discussion générale sur les contributions et leurs limitations sera fournie dans le chapitre 7. Enfin, le chapitre 8 propose une conclusion qui expose quelques recommandations pour dissiper les limitations du modèle proposé.

## CHAPITRE 2 REVUE CRITIQUE DE LA LITTÉRATURE

Le givrage apparaît lors de l'impact de gouttes d'eau en surfusion sur la surface des avions. L'état de surfusion est un état métastable qui consiste à garder l'eau sous sa forme liquide alors que sa température est inférieure au point de solidification. Suite à l'impact avec la surface, la chaleur latente dégagée lors de la solidification fait augmenter très rapidement la température de la gouttelette jusqu'à 0 °C. En résumé, le givrage fait intervenir plusieurs phénomènes physiques reliés: l'impact de gouttelettes sur une surface, les effets thermiques et le changement de phase.

Dans ce contexte, la revue critique de littérature exposera dans un premier temps les phénomènes d'interaction goutte-paroi. La seconde partie de cette revue s'intéresse aux études expérimentales et numériques d'impact de gouttelettes sur une surface. Les avantages de la méthode de Boltzmann sur réseau énoncés précédemment conduisent à choisir cette approche pour simuler des écoulements avec changement de phase, d'autant plus qu'elle constitue une approche novatrice et permettrait possiblement de simuler avec précision les phénomènes physiques liés au changement de phase. La troisième section de cette revue est alors consacrée aux aspects fondamentaux de la méthode de Boltzmann sur réseau, à son application aux écoulements multiphasiques et à la présentation d'un modèle thermique avec changement de phase. Vers la fin de cette revue bibliographique, on identifiera trois objectifs qui seront détaillés par la suite au chapitre 3.

### 2.1 Modélisation et simulation numérique de l'interaction goutte-surface

Le givrage, suite à l'impact de gouttelettes, montre le besoin de mieux simuler et comprendre les interactions goutte-paroi. Cette section présente les régimes d'impact de gouttelettes sur une surface ainsi qu'une revue bibliographique des études expérimentales et numériques sur la dynamique d'impact.

#### 2.1.1 Mécanismes d'impact goutte-paroi

L'impact de gouttes sur une surface intervient dans plusieurs disciplines de l'ingénierie, comme le jet d'encre, le refroidissement de surfaces chaudes avec un pulvérisateur (comme les aubes d'une turbine), la pulvérisation par plasma [5-7], etc. Plusieurs mécanismes d'impact peuvent se

produire lorsqu'une gouttelette frappe une surface. Bai et Gosman [8, 9] identifient les différents régimes d'impact selon des conditions spécifiques :

- Pour de faibles vitesses d'impact et faible température de surface, la gouttelette frappant la surface conserve une forme sphérique.
- À faible vitesse d'impact, une couche d'air peut entraîner la gouttelette impactant une surface mouillée à rebondir après l'impact.
- Pour des vitesses de gouttelette modérées, un film d'eau se forme sur une surface sèche ou se mélange avec le fluide sur une surface mouillée.
- À des vitesses d'impact élevées se produit un éclaboussement de la gouttelette conduisant à la formation de gouttelettes secondaires autour de la zone d'impact.
- À de faible vitesse d'impact et température de surface élevée, la gouttelette à l'impact se désintègre en raison de l'ébullition rapide.
- À des vitesses d'impact modérées et des températures de surface élevées, les gouttelettes frappant la surface forment un film d'eau qui ensuite se désintègre dû aux instabilités thermodynamiques.

Les mécanismes d'impact de gouttes intervenant dans le cadre de la simulation d'accrétion de glace sont en particulier le dépôt, le rebondissement, l'étalement et l'éclaboussement. Ces différents régimes sont représentés sur la Figure 2.1.

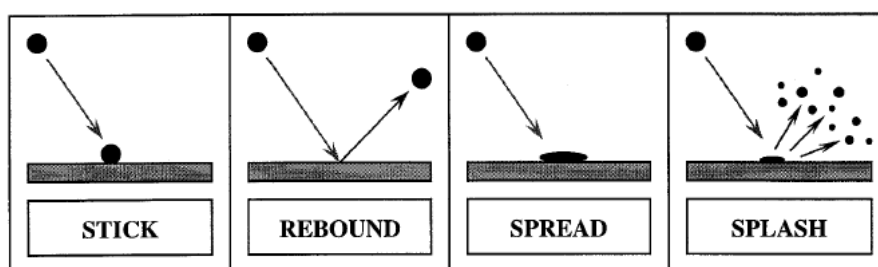


Figure 2.1: Régimes d'impact de gouttes sur une surface [9]

Les mécanismes d'interaction d'une goutte avec une surface dépendent de nombreux facteurs, liés aux propriétés de la gouttelette et de la surface. Les propriétés de la gouttelette comprennent, entre autres, la vitesse d'impact, la taille des gouttelettes, l'angle d'incidence, la température, la tension superficielle et la viscosité. Concernant la surface, la rugosité, la courbure et la taille du

film d'eau sur la surface constituent des caractéristiques influençant fortement le régime d'impact d'une goutte.

L'étude de la dynamique d'impact de gouttelette fait intervenir trois nombres adimensionnels importants: le nombre de Weber  $We$ , le nombre de Reynolds  $Re$  et le nombre d'Ohnesorge  $Oh$ . Le nombre de Weber représente le ratio de la force d'inertie sur la tension de surface, le nombre de Reynolds le ratio de la force d'inertie sur la force visqueuse et enfin le nombre de Ohnesorge est donné par le ratio de la racine carrée du nombre de Weber sur le nombre de Reynolds. Ces nombres adimensionnels sont définis par les expressions suivantes:

$$Re = \frac{\rho_L D U}{\mu_L} \quad (2.1)$$

$$We = \frac{\rho_L D U^2}{\sigma} \quad (2.2)$$

$$Oh = \frac{\mu}{\sqrt{D} \sigma \rho} = \frac{\sqrt{We}}{Re} \quad (2.3)$$

Où  $\rho_L$  est la densité de la gouttelette,  $\mu_L$  la viscosité de la gouttelette,  $\sigma$  la tension de surface, et  $D$  le diamètre de la gouttelette.

Par exemple, en vol, pour une gouttelette de vitesse 100 m/s et un diamètre de 1 mm, le nombre de Reynolds est de l'ordre de  $10^5$ , le nombre de Weber de l'ordre de 300 et le nombre d'Ohnesorge de l'ordre de 0.0002.

### **Transition dépôt-éclaboussure d'une gouttelette**

Lors de l'impact de type dépôt d'une gouttelette de diamètre initial  $D_0$  sur une surface, celle-ci s'étale pour atteindre son diamètre maximal  $D_{\max}$ , puis se rétracte sous l'effet capillaire jusqu'à atteindre sa forme à l'équilibre. Il existe une relation entre le ratio  $D_{\max}/D_0$  et les nombres de Reynolds et Weber. D'après l'analyse de Laan et al [10], lorsque les effets visqueux prédominent sur les effets capillaires,  $D_{\max}/D_0$  est proportionnel à  $Re^{1/5}$ . En revanche, si les effets capillaires prédominent sur les effets visqueux,  $D_{\max}/D_0$  est proportionnel à  $We^{1/4}$ . De nombreuses études [11-13] ont été menées pour formuler des corrélations sur le facteur d'étalement maximal  $D_{\max}/D_0$ .

Dans le cas de l'impact d'une gouttelette sur une surface sèche, des études expérimentales prédisent la transition dépôt-éclaboussure en fonction du nombre d'Ohnesorge et de Reynolds de la gouttelette impactante. Cossali et al [14] définit la limite entre les deux régimes par un paramètre d'éclaboussure  $K$  donnée par la relation suivante:

$$K = We Oh^{-0.4} \quad (2.4)$$

Lorsque  $K$  est supérieur à 57.7, l'éclaboussure se produit, sinon il s'agit d'un régime d'impact de type dépôt. Dans le cadre de ce projet, on se limitera à des paramètres pour lesquels, il n'y pas d'éclaboussure de la gouttelette. Seul le cas du dépôt sera abordé.

Dans le cas de l'impact d'une gouttelette sur une surface mouillée, Cossali et al [14] définit également la limite entre les deux régimes par un paramètre d'éclaboussure  $K_c$ . Ce paramètre est fonction de l'épaisseur relative du film  $\delta = h/D$ , où  $h$  est l'épaisseur du film et  $D$  le diamètre de la gouttelette. Le paramètre critique d'éclaboussure  $K_c$  est donné par la relation suivante:

$$K_c = 2100 + 5880. \delta^{1.44} \quad (2.5)$$

Pour un paramètre  $K$  supérieur à  $K_c$ , l'éclaboussure de la gouttelette se produit, dans le cas contraire il y a dépôt de la gouttelette.

### 2.1.2 Études expérimentales

Au début, les études menées sur la dynamique d'impact sur une surface étaient principalement expérimentales. Worthington [15] rapporte des observations expérimentales sur l'impact de gouttes de lait et de mercure sur du verre. Par la suite, Engel [16] vérifie les observations faites par Worthington en utilisant une caméra photographiant à haute vitesse pour décrire le processus d'impact. Ford et Furmidge [17] analysent précisément le phénomène en mettant en évidence les facteurs clés du processus d'impact, comme la tension de surface et la viscosité. Scheller et Bousfield [13] ont décidé de réaliser un enregistrement vidéo pour étudier les effets de la viscosité sur la dynamique d'impact. Les effets de la tension de surface ont également été étudiés dans les travaux de Zhang et al [18] et Mourougou-Candoni et al [19] qui utilisent un tensio-actif dans les liquides pour diminuer la tension de surface. L'ajout d'un agent tensio-actif favorisait l'étalement du liquide sur la surface.



### 2.1.3 Simulations numériques

Les deux types d'approches numériques les plus connues pour modéliser un écoulement multiphasique sont: les méthodes eulériennes (dites de capture) et les méthodes lagrangiennes (dites de suivi).

#### 2.1.3.1 Méthodes de capture d'interface

Les méthodes de capture représentent l'interface entre deux phases à l'aide d'un nombre fini de cellule. La position exacte de l'interface est reconstruite numériquement. On distingue trois méthodes développées utilisant cette approche de capture de l'interface: Marker and Cell (MAC), la méthode volume de fluide (VOF) et la méthode level set.

Harlow et Shannon [20] réalisent la première étude d'impact de gouttelette sur une surface en utilisant cette approche avec la méthode de Marker and Cell. La méthode Marker and Cell résout les équations de Navier Stokes sur un maillage eulérien [21]. Des marqueurs de particules lagrangien sont utilisés pour identifier les deux fluides. Pour une cellule de calcul non coloré par le marqueur, la cellule correspond au fluide 1, dans le cas contraire au fluide 2. Pour une cellule identifiée avec un marqueur de particule, mais adjacente à une cellule vide, la cellule correspond à une cellule d'interface. Cependant, leurs études ne tiennent pas compte des effets visqueux et de la tension de surface et le facteur d'étalement maximal lors de l'impact de la goutte n'est pas calculé [20]. Plus tard, Tsurutani et al [22] proposent une version modifiée de la méthode appelée 'Marker and Cell simplifié' (SMAC) pour étudier la dynamique d'impact d'une goutte sur une surface chaude. La viscosité et la tension de surface sont prises en compte dans ces travaux. Cependant, les phénomènes de convection et d'évaporation sont négligés dans leur modèle. Les simulations numériques ont été réalisées en utilisant les coordonnées cylindriques et en supposant une déformation axisymétrique de la gouttelette. Les résultats obtenus sont en accord avec les données expérimentales pour un même nombre de Reynolds et nombre de Weber. L'inconvénient majeur de cette méthode est qu'elle coûte cher en calcul puisqu'elle demande de suivre les particules marquées et un grand nombre de cellules de calcul est nécessaire pour déterminer précisément l'interface entre les deux fluides [23].

Une autre méthode numérique, appelée volume de fluide (VOF), proposée par Hirt et Nichols, en 1981, permet la simulation d'écoulement multiphasique non miscible [24]. Cette méthode définit

une fonction discrète représentant la fraction volumique d'un des deux fluides et est calculée dans chaque volume de contrôle. Cette grandeur varie entre 0 et 1 et permet de connaître le fluide (fluide 1 ou 2) occupant un volume de contrôle donné. En effet, lorsque la valeur est 0 ou 1, alors seulement un des deux fluides occupe le volume de contrôle. Dans le cas où la fraction volumique est comprise entre 0 et 1, alors le volume de contrôle contient l'interface. La fraction volumique est ainsi définie sur la maille puis transportée par la suite par le champ de vitesse.

Cette méthode permet de localiser l'interface entre deux fluides sur un maillage statique, mais ne résout pas l'écoulement. La méthode VOF, comme celle du Marker and Cell est appliquée sur un maillage eulérien. Les équations de mouvement sont déterminées par les équations de Navier-Stokes standard et l'équation de continuité est utilisée pour assurer la conservation de la masse. L'équation d'énergie peut être traitée séparément pour déterminer le champ de température [21].

Cependant, des effets parasites peuvent apparaître lorsqu'on souhaite décrire des frontières dont l'épaisseur est de l'ordre de la maille du calcul. Ce problème est relié à l'approche eulérienne de la méthode et peut être évité en raffinant le maillage. Mais un maillage fin ne permet pas d'éliminer les courants parasites se formant lorsque le ratio de densité entre les deux fluides est important.

Les deux méthodes précédentes présentent un ordre de précision du premier ordre. Rider et Kothe [25] propose alors une méthode appelée la construction d'interface linéaire par morceau (en anglais Reconstructing volume tracking) pour gagner un ordre de précision en espace.

Comme les deux méthodes numériques présentées jusqu'à présent s'appliquent sur des maillages statiques, une difficulté se pose lorsque l'interface entre les deux fluides présente de grandes déformations. Fukai et al [26] apportent alors une solution en utilisant une méthode d'élément fini pour simuler la dynamique d'impact de gouttelette. Comparé aux précédentes études, l'approche lagrangienne est utilisée pour simuler avec précision le déplacement d'une interface déformée. Ce modèle tient compte des effets d'inertie, visqueux, tension de surface et de gravité. Plus tard, il étudie l'influence d'une surface mouillée sur le processus d'impact et montre que ce facteur affecte la dynamique d'impact et conduit à la formation d'une couronne autour de la zone d'impact [27].

Dans la catégorie des méthodes de capture, la méthode level set est la plus récente. Cette méthode développée par Mulder et al [28] définit une fonction interface, appelé fonction level set  $\phi$ . La

courbe de niveau  $\varphi = 0$  définit l'interface recherchée. Ainsi, lorsque  $\varphi$  est positif, il s'agit du fluide 1 et lorsque  $\varphi$  est négatif, on retrouve le fluide 2.

Le déplacement de l'interface est obtenu par la résolution d'une équation de convection dans un champ de vitesse donné. Cependant, cette méthode n'est pas encore appliquée dans la simulation d'écoulement multiphasique, puisque les erreurs numériques dissipatives engendrées par la résolution de l'équation de transport ne permettent pas d'assurer la conservation de la masse. Cette méthode est similaire à celle de VOF.

### **2.1.3.2 Méthode de suivi d'interface**

Au lieu de reconstruire l'interface, les méthodes lagrangienne permettent de suivre l'interface entre les différentes phases de l'écoulement. Initialement proposée par Glimm et al [29], Haler et al [30] utilise le processus de suivi d'interface, appelé FronTier pour étudier la dynamique d'impact de gouttelette à haute vitesse de l'ordre de 500 m/s sur un substrat rigide [30]. Ils montrent que les effets de compressibilité dominant dans le processus d'impact et l'éclaboussement de la gouttelette. Une onde de choc est observée au contact de la gouttelette.

### **2.1.3.3 Méthode de Boltzmann sur réseau**

Ces dernières années, la méthode de Boltzmann sur réseau s'est développée pour la simulation d'écoulements fluides. La littérature recense déjà plusieurs modèles pour simuler des écoulements multiphasiques [3, 31, 32]. Cette méthode est relativement simple à implémenter et est idéale pour la parallélisation.

Dans le cadre de notre projet, l'avantage de cette méthode est certain puisque nous envisageons de simuler l'impact de gouttelette et le changement de phase de manière intégré, ce qui évite ainsi d'utiliser plusieurs approches, comme dans les codes de simulation existants. Cette méthode est présentée dans la section suivante. Les modèles multiphasiques basées sur la méthode de Boltzmann sur réseau et leur application pour simuler la dynamique d'impact d'une gouttelette sont aussi discutés.

## 2.2 Frontières des connaissances de la méthode de Boltzmann sur réseau

Cette section traite de l'équation de Boltzmann et de sa discrétisation pour obtenir le modèle de Boltzmann sur réseau. La description de la méthode est similaire à celle qu'on peut retrouver dans la littérature. Ensuite, une revue critique des modèles multiphasiques basés sur la méthode de Boltzmann sur réseau est présentée. Le modèle pseudo-potentiel de Shan-Chen est choisi pour résoudre les écoulements multiphasiques. Cependant, ce modèle souffre de quelques faiblesses qui seront discutées afin de mieux mettre en évidence les contributions de cette thèse.

### 2.2.1 Méthode de Boltzmann sur réseau

La méthode de Boltzmann sur réseau tire son origine de la théorie sur les automates cellulaires de gaz sur réseau (LGCA). Cette théorie décrit le mouvement des particules sur un réseau en reproduisant sa dynamique moléculaire. Elle repose sur deux étapes principales : la collision et la propagation. Lorsque plusieurs particules arrivent sur un même nœud du réseau, la phase de collision prédit l'interaction entre ces particules et le changement de direction. La phase de propagation est suivie de la phase de collision et permet le déplacement de chaque particule vers son nœud voisin suivant sa direction de vitesse. Dans le cadre de la méthode de Boltzmann sur réseau, les  $n_{k,i}$  particules d'un sous domaine  $\Omega_k$  de vitesse  $\vec{c}_i$  sont définis par une fonction de distribution de particules  $f(\vec{x}, \vec{c}_i, t)$  telle que  $n_{k,i} = n_0 \int f(\vec{x}, \vec{c}_i, t) d\vec{x} d\vec{c}$  donne, à un instant  $t$  donné, le nombre de particules se trouvant dans le domaine  $\Omega_k$  de portion  $dx$  autour de  $x$  avec une plage vitesse  $\vec{c}_i + d\vec{c}$ . La variation du nombre de particules entre deux instants est exprimée par l'équation:

$$f(\vec{x} + \vec{c} dt, \vec{c}, t + dt) d\vec{x} d\vec{c} = f(\vec{x}, \vec{c}, t) d\vec{x} d\vec{c} + Q(f) d\vec{x} d\vec{c} dt \quad (2.6)$$

Avec  $Q(f)$  l'opérateur de collision interparticulaire.

En divisant par  $d\vec{x} d\vec{c} dt$  et en prenant la limite quand  $dt$  tend vers 0, cette équation correspond à l'équation de transport de Boltzmann :

$$\frac{df}{dt} + \vec{c} \cdot \nabla_x f = Q(f) \quad (2.7)$$

Dans cette équation, seule la collision entre particules est prise en compte sans aucune force externe. Si une force externe intervient, l'équation de transport de Boltzmann devient:

$$\frac{df}{dt} + \vec{c} \nabla_x f + F \nabla_c f = Q(f) \quad (2.8)$$

À partir des fonctions de distribution, il est désormais possible de déterminer les grandeurs macroscopiques, telles que la masse volumique, la quantité de mouvement et l'énergie interne par intégration dans l'espace des vitesses. On obtient respectivement la masse volumique, la vitesse et l'énergie interne par les expressions suivantes:

$$\rho(\vec{x}, t) = \int f(\vec{x}, \vec{c}, t) d\vec{c} \quad (2.9)$$

$$\rho \vec{u}(\vec{x}, t) = \int f(\vec{x}, \vec{c}, t) \vec{c} d\vec{c} \quad (2.10)$$

$$\rho \vec{e}(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} \int f(\vec{x}, \vec{c}, t) (\vec{c} - \vec{u})^2 d\vec{c} \quad (2.11)$$

La résolution numérique de l'équation de Boltzmann conduit à l'équation de Boltzmann à vitesses discrètes  $\vec{c}_i$  suivante:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{c}_i \frac{\partial f_i}{\partial \vec{x}} = Q_i \quad (2.12)$$

Avec  $\Delta x_i = c_i \Delta t$ , la discrétisation précédente de cette équation devient:

$$\frac{f_i(\vec{x}, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t)}{\Delta t} + \vec{c}_i \frac{f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t + \Delta t)}{\vec{c}_i \Delta t} = Q_i \quad (2.13)$$

Les membres de droite et de gauche représentent respectivement l'étape de collision et de propagation.

La difficulté de résolution de l'équation de transport de Boltzmann réside dans la non linéarité de l'opérateur de collision.

### 2.2.1.1 Opérateur BGK

L'expression complexe du terme de collision incite à utiliser des modèles. Le modèle de collision le plus simple est celui proposé par Bhatnagar, Gross et Krook, appelé BGK [33]. Il suppose que les détails des collisions binaires ne sont pas d'intérêt lorsqu'on s'intéresse aux quantités moyennes, comme la masse volumique et la vitesse macroscopique [33].

Bhatnagar, Gross et Krook [33] propose de considérer le terme de collision comme une évolution vers un état d'équilibre et est donné par:

$$\Omega_i = -\omega[f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)] \quad (2.14)$$

Et si on prend  $\Delta x = \Delta t = 1$ , l'équation de Boltzmann sur réseau devient alors:

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = -\omega[f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)] \quad (2.15)$$

Avec  $\omega$  le taux de relaxation.

Afin de retrouver les équations de Navier-Stokes, le choix de la distribution d'équilibre est important. Comme la méthode de Boltzmann sur réseau permet la simulation d'écoulement fluide incompressible, à faible nombre de Mach, la fonction de distribution d'équilibre est approximée à partir d'un développement en série de la distribution de Maxwell. En considérant une température constante, on effectue le développement au deuxième ordre en  $u$  pour obtenir:

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\vec{c}^2}{2RT}\right) \left[1 + \frac{\vec{c} \cdot \vec{u}}{RT} + \frac{(\vec{c} \cdot \vec{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT}\right] \quad (2.16)$$

Une approximation d'ordre 2 de l'équation de Navier-Stokes est obtenue avec cette fonction de distribution d'équilibre.

Qian et al [34] a proposé une forme discrète de la fonction de distribution à l'équilibre:

$$f_i^{eq} = W_i \rho \left[1 + \frac{c_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{u_\alpha u_\beta}{2c_s^2} \left(\frac{c_{i\alpha} c_{i\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta}\right)\right] \quad (2.17)$$

Avec  $c_s = \sqrt{RT}$  et  $W_i$  un poids dépendant de la direction de vitesse.

En portant la fonction de distribution  $f$  dans les équations (1) et (2), He et al [35] obtiennent les poids  $W_i$  pour effectuer l'intégration numérique.

On obtient finalement les grandeurs macroscopiques par sommation des fonctions de distribution discrètes  $f_i$  :

$$\rho = \sum_i f_i \quad (2.18)$$

$$\rho \vec{u} = \sum_i f_i \vec{c}_i \quad (2.19)$$

$$e = \frac{1}{2} \sum_i |c_i|^2 f_i \quad (2.20)$$

### 2.2.1.2 Opérateur MRT

La méthode de Boltzmann sur réseau à temps de relaxation multiple (MRT) est apparue dans les années 1990. La méthode permet de contrôler chaque temps de relaxation afin d'obtenir une stabilité accrue.

Dans le modèle présenté à la section précédente, l'opérateur de collision BGK définit un même temps de relaxation pour chaque grandeur physique. Ce modèle restrictif va à l'encontre de la réalité et conduit Lallemand et al [36] à développer un nouveau modèle basé sur des temps de relaxation multiples où chaque moment, c'est-à-dire chaque grandeur physique possède son temps caractéristique. Le modèle consiste à associer le vecteur  $\vec{f} = (f_0, f_1 \dots f_8)^t$  des fonctions de distribution au vecteur des moments  $\vec{m} = (m_0, m_1 \dots m_8)^t$ . De cette manière, chaque moment  $m_\alpha$  (avec  $\alpha = 0, 1 \dots 8$ ) est défini comme une combinaison linéaire des fonctions de distribution.

Le passage de l'espace engendré par les moments vers l'espace engendré par les fonctions de distribution est effectué par une opération matricielle telle que  $\vec{m} = M \vec{f}$ . Chaque composante du vecteur des moments correspond à une grandeur physique. Pour le modèle D2Q9, on a :

$$\vec{m} = (\rho \quad e \quad \chi \quad j_x \quad q_x \quad j_y \quad q_y \quad \Pi_{xx} \quad \Pi_{xy})^t \quad (2.21)$$

Où  $\rho$  représente la densité,  $e$  l'énergie cinétique,  $\chi$  le carré de l'énergie cinétique,  $j_x$  la quantité de mouvement selon x,  $q_x$  le flux de chaleur selon x,  $j_y$  la quantité de mouvement selon y,  $q_y$  le flux de chaleur selon y,  $\Pi_{xx}$  les contraintes visqueuses tangentiels et  $\Pi_{xy}$  les contraintes visqueuses normales.

L'opérateur de collision défini doit assurer la conservation de la masse volumique et la quantité de mouvement. Ces quantités doivent être égales avant et après collision. Ils correspondent aux moments de la fonction de distribution, et sont appelés les moments conservés [36]. Ces moments correspondent à  $m_1$ ,  $m_4$  et  $m_6$ :

$$\begin{aligned} m_1 &= f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 \\ m_4 &= f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8 \\ m_6 &= f_2 - f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8 \end{aligned} \quad (2.22)$$

Les autres moments, appelés moments non conservés tendent après relaxation vers une valeur d'équilibre, qui est fonction seulement des grandeurs conservées. Ces moments sont déterminés comme une combinaison linéaire des moments de la fonction de distribution  $f_i$ .

On peut alors réécrire l'équation de Boltzmann sur réseau comme la relaxation des moments au lieu de la relaxation des fonctions de distribution :

$$\tilde{m} = m - s(m - m^{eq})$$

Avec  $s$  le taux de relaxation.

Il est important de noter que l'étape de collision dans ce modèle est effectuée dans l'espace des moments, mais l'étape de propagation est similaire à l'opérateur BGK. En raison de sa stabilité numérique accrue comparée à l'opérateur BGK, l'opérateur de collision MRT est utilisé dans ce projet doctoral.

### 2.2.1.3 Développement de Chapman-Enskog

À partir de l'équation de Boltzmann, le développement de Chapman-Enskog permet de rétablir les équations macroscopiques décrivant un phénomène. Par ailleurs, ce développement permettra de déterminer les coefficients de transport, en autres la viscosité et la conductivité en fonction des caractéristiques moléculaires.



Le lecteur est amené à se référer à la littérature [37] concernant le développement de Chapman-Enskog conduisant aux équations de Navier-Stokes et à l'équation de diffusion.

### 2.2.2 Modèles multiphasiques

Une première classe de modèles pour la simulation d'écoulement à plusieurs phases est celui de Rothmann et Keller [31], obtenu à partir du modèle de couleur des automates cellulaires de gaz sur réseau. Ils utilisent deux fonctions de distribution pour représenter deux fluides: un de couleur rouge et l'autre bleu. À chaque pas de temps, l'interface entre les deux fluides est calculée. La séparation de phase est réalisée par l'interaction répulsive basée sur le gradient de couleur. Le processus de recoloration permet aux fluides colorés de se déplacer vers les fluides du même genre. La tension de surface est appliquée aux fluides comme une force externe. La littérature recense un certain nombre d'applications utilisant cette méthode, telles que l'écoulement à travers les milieux poreux [38], et les instabilités de Rayleigh-Taylor [39]. Cependant, ce procédé présente des inconvénients. Le premier est que le processus de recoloration est artificiel et ne possède aucun sens physique. Le deuxième est que le calcul est fastidieux, puisque la position de l'interface et la tension de surface sont déterminées à chaque pas de temps. De plus, le modèle devient instable pour des ratios de densité élevée en raison des courants parasites. Récemment, les travaux de Leclaire et al [40-42] proposent de corriger certains problèmes liés à cette approche en apportant des solutions au modèle proposé par Reis et al [43]. Ils apportent des modifications théoriques et numériques au modèle et modifient l'opérateur de recoloriage pour minimiser les courants parasites aux interfaces et rendre possible la simulation d'écoulements multiphasiques à ratio de densité élevée [42].

Une deuxième classe de méthodes est la méthode de Swift et al [44] qui est basée sur une approche thermodynamique. Le modèle de Swift et al [44], appelé aussi modèle de l'énergie libre, est capable de simuler non seulement les systèmes gaz-liquide, mais aussi les liquides binaires avec différentes viscosités [45]. Cependant, le modèle est incapable de simuler des problèmes à ratios de densité et de viscosité élevés. Seuls, les travaux d'Inamuro et al [46] ont réussi à simuler des ratios de densité de  $O(1000)$  par une méthode de projection basée sur l'énergie libre, mais cette méthode demande la résolution de l'équation de Poisson à chaque pas de temps qui devient coûteux en calcul. Ce modèle souffre également du problème d'invariance galiléenne qui spécifie que les résultats ne devraient pas dépendre de la vitesse du système dans

son ensemble [47]. Ce problème a été résolu par l'introduction de termes supplémentaires à la fonction d'équilibre [48]. Le modèle est thermodynamiquement cohérent même s'il introduit des courants parasites autour d'une gouttelette, ce qui peut être résolu par une meilleure discrétisation du terme de tension de surface.

Enfin, une autre méthode pour la simulation d'écoulements à plusieurs phases est le modèle pseudo-potentiel de Shan et Chen [3]. Le modèle impose une interaction non locale entre les particules. Cette force supplémentaire à chaque site du réseau est utilisée pour approximer les effets de l'interaction moléculaire à l'échelle microscopique. Même, si la quantité de mouvement totale est conservée sur l'ensemble du domaine de calcul, elle en demeure moins localement à cause de ces interactions. Par conséquent, un champ de vitesse parasite existe toujours à l'interface.

Bien que cette méthode présente quelques limites, elle a été appliquée à la résolution d'un très large éventail de problèmes. Elle est capable de simuler différents problèmes multiphasiques comme la formation de gouttelettes [49], la rupture d'une gouttelette dans une soufflerie [50], la formation de micro-gouttelettes dans un canal en forme de T [51], et l'écoulement polyphasique thermique, tels que le processus d'ébullition [52]. Deux principales études s'intéressent à l'impact d'une gouttelette sur une surface. La première, celle de Mukherjee et Abraham [53], utilise un modèle de Boltzmann axisymétrique pour simuler l'impact d'une gouttelette sur une surface avec un ratio de densité de 10. Il montre qu'une gouttelette impactant une surface hydrophobe peut complètement décoller de la surface. Dans une autre étude, Gupta et al [54] représente le diamètre d'étalement des gouttelettes à différents nombres de Reynolds et Weber, mais toujours pour un ratio de densité de 10. De manière générale, les faiblesses relatives au modèle pseudo-potentiel sont: le comportement non thermodynamique du schéma, les courants parasites autour de la gouttelette qui affectent la stabilité numérique et la précision, le ratio de densité limité de l'ordre de 60-70, le couplage entre les propriétés, comme la tension de surface et la densité. Mais ces dernières années, de nombreuses améliorations ont été recensées pour corriger certains de ces problèmes. Yuan et Schaefer [55] proposent d'introduire des équations d'états réels, par exemple l'équation d'état de Peng-Robinson et l'équation d'état de Carnahan-Starling, pour simuler des ratios de densité élevés ( $O(1000)$ ) et minimiser les courants parasites. Récemment, Zhang et al [56] applique l'équation d'état de Peng-Robinson pour la simulation de l'impact d'une gouttelette sur une surface sèche pour différents angles de contact. Cependant, le

ratio de viscosité entre les phases est de 1 et les vitesses parasites à l'interface demeurent une limitation de leur modèle. Pour réduire les courants parasites, Sbragaglia et al [57] augmentent l'ordre d'isotropie dans le calcul du gradient de la force d'interaction et ainsi suppriment les termes anisotropes d'ordre plus élevés.

En raison de sa popularité et de ses nombreuses qualités, nous avons choisi le modèle pseudo-potentiel comme base à nos développements avec comme objectif à long terme, la simulation de l'impact et le givrage de gouttelettes. La suite de cette section 2.2.2 est découpée en trois thèmes afin de mettre en évidence les objectifs spécifiques de cette thèse.

### **2.2.2.1 Thème 1: Découplage de la tension de surface et de la densité dans des problèmes 3D**

Un inconvénient du modèle pseudo-potentiel est la dépendance entre la tension de surface et la densité. Quand une équation d'état réaliste est utilisée suivant l'approche de Yuan et Schaefer [55], ratios de densité et tension de surface, changent lorsque la température varie. Li et al [58] propose alors d'ajouter un terme source à l'équation de Boltzmann 2D-MRT pour découpler la tension de surface et la densité. En parallèle, Kupershtokh et al [59] propose une combinaison linéaire de la valeur locale et moyenne du gradient dans le calcul de force d'interaction pour réduire l'inconsistance thermodynamique dans un écoulement multiphasique à simple composant. Finalement, Hu et al [60] applique l'approche de modification du tenseur de pression au modèle de Kupershtokh et al [59] . Comme, par nature, les problèmes sont tridimensionnels et que la généralisation au modèle 3D-MRT n'est pas directe, notre premier objectif est le suivant :

**Objectif 1** : Développer un modèle 3D-MRT capable d'ajuster la tension de surface et la densité en appliquant la méthode de modification du tenseur de pression. Ce modèle amélioré doit simuler à ratio de densité élevé l'impact de gouttelette sur une surface sèche et mouillée.

Les améliorations recensées dans la littérature pour corriger les faiblesses du modèle pseudo-potentiel original seront intégrées à notre modèle. Une équation d'état réel sera implémentée pour simuler des problèmes multiphasiques à ratio de densité élevée, l'ordre d'isotropie sera augmenté pour réduire les courants parasites aux interfaces et le calcul de la force d'interaction selon l'approche de Kupershtokh et al [59] sera appliqué pour préserver la consistance thermodynamique.

### 2.2.2.2 Thème 2: Découplage de la tension de surface et la densité dans des écoulements à plusieurs composants

La littérature montre que la plupart des modèles multiphasiques sont limités à la simulation d'écoulements dont le ratio de viscosité est égal à 1. Cependant, pour modéliser de façon précise la dynamique d'écoulement d'un système à deux phases, il est essentiel d'avoir des viscosités cinématiques différentes pour un système à plusieurs phases. Basé sur le modèle pseudo-potentiel, Porter et al [61] propose un modèle multiphase à plusieurs composants capable de simuler des ratios de viscosité de  $O(1000)$ . Pour ce faire, les forces externes sont introduites à l'équation de Boltzmann-MRT plutôt qu'à travers la vitesse d'équilibre et une vitesse d'équilibre conservant la quantité de mouvement est substituée dans la fonction de distribution d'équilibre. Cependant, le couplage entre la tension de surface et le ratio demeure une contrainte. De plus, la consistance thermodynamique n'est pas assurée. Pour dissiper ces limitations, notre second objectif est le suivant:

**Objectif 2** : Généraliser la méthode de modification du tenseur de pression au cas à plusieurs composants. Le modèle amélioré doit assurer la simulation 3D d'écoulements à plusieurs composants pour des ratios de densité et de viscosité de  $O(1000)$  tout en préservant la consistance thermodynamique.

### 2.2.2.3 Thème 3: Changement de phase et échange de chaleur

Les deux premiers thèmes traitent d'un écoulement isotherme. Pour introduire le changement de phase, l'utilisation d'un modèle thermique est requise. Pour un écoulement à simple phase, les méthodes pour résoudre des problèmes thermiques peuvent être regroupées en deux catégories : le modèle à plusieurs vitesses [62, 63] et le modèle à scalaire passif [64, 65]. Le modèle à plusieurs vitesses consiste à rajouter des vitesses supplémentaires dans la discrétisation de la vitesse et inclure les termes de hautes vitesses dans la distribution d'équilibre pour résoudre l'équation d'énergie. Cependant, ce modèle est numériquement instable [66, 67]. Le modèle à scalaire passif [64, 65] utilise une deuxième fonction de distribution. Une fonction de distribution résout la dynamique de l'écoulement tandis que l'autre permet de déterminer l'évolution de la température. Ce modèle est basé sur l'hypothèse que la dissipation visqueuse et le travail de compression peuvent être négligés pour les fluides incompressibles et donc la température est donnée par l'équation d'advection-diffusion.

Plusieurs progrès ont été réalisés pour réduire les faiblesses du modèle pseudo-potentiel dans la simulation d'écoulements à plusieurs phases et plusieurs composants. Cependant, pour la plupart des applications [3, 68-70], la simulation d'écoulements à plusieurs phases et plusieurs composants s'effectuent dans le cas isotherme et les quelques études qui tiennent compte des effets thermiques restent peu satisfaisantes. Récemment, Ikeda et al [71] propose un modèle 2D à plusieurs phases et plusieurs composants qui tient compte des effets thermiques. Mais, le changement de phase et les échanges de chaleurs entre composants ne sont pas étudiés. Dans ce contexte, notre troisième objectif est le suivant:

**Objectif 3** : Intégrer les effets thermiques au modèle multiphasique à plusieurs composants pour simuler le changement de phase et les échanges de chaleur entre composants dans des problèmes 3D.

## **CHAPITRE 3 DÉMARCHE**

Ce chapitre s'articule autour de trois thèmes. Il résume l'ensemble des contributions de cette thèse. Pour chaque thème, l'objectif est rappelé. La démarche pour atteindre chaque objectif est discutée en deux parties: contribution et applications. La contribution met en évidence, d'un point de vue théorique, les avancées apportées au modèle pseudo-potentiel. Les applications mettent l'emphase, d'une part, sur l'amélioration des résultats numériques pour des cas tests classiques et d'autre part, la capacité du modèle à simuler des problèmes d'ingénierie. Les équations, la méthodologie, et les résultats numériques sont fournis plus en détail dans les chapitres 4, 5 et 6.

### **3.1 Thème 1 : Ajustement de la tension de surface dans un modèle multiphasique tridimensionnel**

#### **3.1.1 Contribution 1**

Par nature, les différents aspects d'un système multiphasique, tel que la tension de surface l'équation d'état et l'épaisseur de l'interface sont les manifestations du potentiel d'interaction entre les particules et ces propriétés sont naturellement couplées. Par exemple, dans le modèle pseudo-potentiel original, un couplage entre la tension de surface et la densité apparait. Cependant, d'un point de vue pratique pour simuler des problèmes d'ingénierie, il paraît intéressant d'avoir un schéma numérique où ces propriétés sont ajustées indépendamment les unes des autres.

Pour découpler la tension de surface de la densité, Li et al [58] propose de modifier le tenseur de pression en ajoutant un terme source à l'équation de Boltzmann 2D-MRT. Cependant, comme les problèmes multiphasiques sont par nature tridimensionnels, une extension du modèle 2D-MRT au cas 3D-MRT est proposée dans ce thème. L'objectif est alors de:

#### **Découpler la tension de surface et la densité dans la simulation d'écoulement multiphasique tridimensionnelle**

L'article inclus au chapitre 4 répond à cet objectif.

Comparé à un modèle 2D, il y a des différences importantes dans le développement d'un modèle 3D. Ces différences sont discutées en détail au chapitre 4. En résumé, la modification du tenseur

de pression est effectuée par l'ajout d'un terme source  $C$  dans l'équation de Boltzmann MRT, comme suit :

$$m^* = m - S(m - m^{eq}) + \delta_t \left( I - \frac{\Lambda}{2} \right) S + C \quad (3.1)$$

Une généralisation à trois dimensions des équations macroscopiques correspondant à la méthode de modification du tenseur de pression est également développée dans le chapitre 4.

Conformément à l'expansion de Chapman-Enskog, l'expression du terme source  $C$  est obtenue et est fonction de  $\mathbf{Q}$  dont l'expression est donnée par la relation suivante (**p.57-60, section 4.3.5**):

$$\mathbf{Q} = \kappa \left[ (1 - A)\psi(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^{18} w(|\mathbf{e}_\alpha|^2) [\psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha) - \psi(\mathbf{x})] \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha + \frac{1}{2} A \sum_{\alpha=1}^{18} w(|\mathbf{e}_\alpha|^2) [\psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha)^2 - \psi(\mathbf{x})^2] \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \right] \quad (3.2)$$

Le paramètre  $\kappa$  variant entre 0 et 1 est utilisé pour ajuster la tension de surface. Plus la valeur de  $\kappa$  est grande, plus la tension de surface est petite. Pour une valeur de  $\kappa = 0$ , le tenseur de pression du modèle pseudo-potentiel original est retrouvé. Le paramètre  $A$ , quant à lui, est ajusté pour assurer la consistance thermodynamique.

La présence de courants parasites aux interfaces est un problème commun à de nombreux modèles multiphasiques [45, 57, 72]. Ces courants parasites perturbent le champ de vitesse et causent des instabilités numériques. Sbragaglia et al [57] suggère d'augmenter l'ordre d'isotropie dans le calcul du gradient de la force d'interaction. Cette approche est alors introduite dans notre modèle. L'influence de l'opérateur de collision MRT sur l'amplitude des vitesses parasites est analysée afin de déterminer l'ordre d'isotropie optimal permettant la réduction significative des courants parasites tout en conservant un temps de calcul raisonnable.

Enfin, l'équation d'état réelle de Carnahan-Starling est incorporée dans la masse effective pour simuler des écoulements à ratio de densité élevé sur une large gamme de température.

### 3.1.2 Applications

Pour vérifier et valider les améliorations proposées au modèle, divers cas tests ont été effectués. En résumé, les applications effectuées sont les suivantes :

- Analyse des courants parasites (**p.62-63, section 4.4.1**)

Pour différents ordres d'isotropie, l'amplitude des vitesses parasites est mesurée sur une gouttelette liquide à l'équilibre dans un environnement gazeux. L'influence de l'opérateur de collision SRT et MRT et de l'ordre d'isotropie sur les courants parasites a été analysée.

- Loi de Laplace (**p.63-64, section 4.4.2**)

Pour une gouttelette en équilibre dans un environnement gazeux, la pression de la phase liquide diffère de la phase gazeuse. La loi de Laplace définit la différence de pression en fonction de la tension de surface et du rayon de la gouttelette. Pour valider cette propriété, une série de simulations a été effectuée en modifiant le rayon d'une gouttelette statique dans un environnement gazeux. Lorsque l'équilibre entre la gouttelette et l'environnement gazeux est atteint, la différence de pression entre l'intérieur et l'extérieur de la gouttelette est mesurée.

- Vérification de la consistance thermodynamique (**p.66, section 4.4.3**)

Une série de simulations sur une gouttelette statique à différentes températures  $T$  est effectuée pour vérifier la consistance thermodynamique du modèle. Les densités d'équilibre obtenues par le modèle proposé sont ensuite comparées aux densités d'équilibres obtenues par la construction de Maxwell.

- Angle de contact (**p.67-68, section 4.4.4**)

Pour obtenir différents angles de contact, la force d'interaction entre la gouttelette et la paroi est ajustée via la densité fictive  $\rho_w$ .

- Oscillation d'une gouttelette déformée (**p.68-70, section 4.4.5**)

L'influence de la viscosité et de la tension de surface sur la dynamique d'oscillation d'une gouttelette déformée est analysée. Une gouttelette déformée de forme ellipsoïdale est initialement placée au centre d'un environnement gazeux. Le second mode d'oscillation est ainsi excité. La gouttelette oscille jusqu'à prendre une forme sphérique à l'équilibre. La période d'oscillation obtenue est ensuite comparée à la solution analytique de Miller et Scriven [73].



- Impact d'une gouttelette sur une surface sèche (p.70-77, section 4.4.6)

Initialement, une gouttelette est placée au centre d'un environnement gazeux et une force de gravité est appliquée pour simuler la chute et l'impact de la gouttelette sur une surface sèche. Les nombres de Reynolds et de Weber sont choisis pour simuler un régime d'impact de type étalement.

L'effet du paramètre  $\kappa$  (Eq.(3.2)) sur la dynamique d'impact a été analysé et l'effet de la mouillabilité de la surface a été étudié pour trois types de surfaces: hydrophile, neutre et hydrophobe.

- Impact d'une gouttelette sur une surface mouillée (p.77-80, section 4.4.7)

Ce cas test est similaire au cas test précédent, mais cette fois-ci l'impact de la gouttelette s'effectue sur une surface mouillée. Encore une fois, les paramètres de simulation sont choisis pour simuler un régime d'impact de type étalement. L'influence du paramètre  $\kappa$  (Eq.(3.2)) sur le processus d'impact est de nouveau étudié.

## **3.2 Thème 2 : Tension de surface variable dans un écoulement multiphase multicomposant à ratio de densité et de viscosité élevé.**

### **3.2.1 Contribution 2**

Le thème 2 constitue une extension du thème 1 au cas à plusieurs composants. Il résout le problème d'interdépendance entre la tension de surface et la densité du modèle pseudo-potentiel à plusieurs composants. L'objectif associé à ce thème est alors de:

**Ajuster la tension de surface indépendamment du ratio de densité dans un écoulement à plusieurs composants afin de généraliser la méthode de modification du tenseur de pression à des ratios de viscosité élevés.**

L'article inclus au chapitre 5 répond à cet objectif.

La simulation d'écoulements à plusieurs composants immiscibles est effectuée grâce au modèle Explicit Forcing (EF) de Porter et al [61] basé sur le modèle pseudo-potentiel. La dépendance de

la densité et la tension de surface sur la viscosité cinématique qui n'avait pas été résolue dans le thème précédent sont corrigées dans ce modèle. De plus, celui-ci offre l'avantage de simuler des ratios de viscosité élevés ( $O(1000)$ ).

La méthode de modification du tenseur de pression est généralisée au cas d'écoulements à plusieurs phases et plusieurs composants. La tension de surface et la densité sont découplées tout en conservant la consistance thermodynamique. Pour chaque composant  $\sigma$ , un terme source  $\mathcal{C}^\sigma$  est ajouté à l'équation de Boltzmann sur réseau MRT. Un terme additionnel apparaît alors dans les équations macroscopiques :

$$NS_{new} = NS_{original} - \nabla \left[ \kappa \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}} c_s^4}{6} ((\psi^\sigma \Delta \psi^{\bar{\sigma}} + \psi^{\bar{\sigma}} \Delta \psi^\sigma) I - \nabla \psi^\sigma \nabla \psi^{\bar{\sigma}}) \right] \quad (3.3)$$

Le nouveau tenseur de pression est donné par l'expression suivante :

$$\mathbf{P} = c_s^2 \left[ (\rho_\sigma + \rho_{\bar{\sigma}}) + G_{\sigma\bar{\sigma}} \psi^\sigma \psi^{\bar{\sigma}} + \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}} c_s^2}{6} (3 + \kappa) (\psi^\sigma \Delta \psi^{\bar{\sigma}} + \psi^{\bar{\sigma}} \Delta \psi^\sigma) \right] I + \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}} c_s^4}{6} (1 - \kappa) \nabla \psi^\sigma \nabla \psi^{\bar{\sigma}} \quad (3.4)$$

Lorsque  $\kappa = 0$ , le modèle pseudo-potentiel original à plusieurs composants est retrouvé. La tension de surface est ajustée en variant le paramètre  $\kappa$  sur une plage de valeur comprise entre 0 et 1. Plus la valeur de  $\kappa$  augmente, plus la tension de surface diminue.

Dans le cas à plusieurs composants, la force d'interaction est composée de deux termes. Un premier terme représente l'interaction entre les particules d'un même composant et un deuxième terme modélise l'interaction entre les particules de différents composants. Le modèle original utilise une sommation restreinte sur les nœuds voisins et les nœuds voisins les plus proches pour le calcul du gradient. La force d'interaction présente alors un ordre d'isotropie de 4. Chaque voisin possède une contribution qui est pondérée par un coefficient  $w$  fonction de la norme de la vitesse discrète. Basés sur les résultats établis dans le thème 1, nous proposons d'utiliser un ordre d'isotropie de 8 dans le calcul du gradient afin de réduire les vitesses parasites à l'interface entre deux composants. L'opérateur de collision MRT avec un ordre d'isotropie de 8 favorise davantage la réduction des courants parasites.

Kupershtokh et.al [59] propose une combinaison linéaire de la valeur locale et moyenne du gradient pour réduire l'inconsistance thermodynamique dans un écoulement multiphasique à simple composant. Cette nouvelle expression de la force d'interaction fournit des densités

d'équilibre compatible avec celles données par la construction de Maxwell. Une approche similaire est développée pour calculer la force d'interaction interne  $F_{\sigma\sigma}$  d'un système à plusieurs composants:

$$F_{\sigma\sigma} = -\beta G_{\sigma\sigma} c_s^2 \psi_\sigma(x) \sum_{\alpha} \psi^\sigma(x + e_\alpha) e_\alpha - \frac{(1-\beta)}{2} G_{\sigma\sigma} c_s^2 \sum_{\alpha} \psi^\sigma(x + e_\alpha) e_\alpha \quad (3.5)$$

Le coefficient  $\beta$  de cette équation est ajusté pour réduire l'inconsistance thermodynamique. La valeur  $\beta$  dépend de l'équation d'état utilisée.

Pour terminer, l'équation d'état d'un gaz réel de Peng Robinson est introduite dans la masse effective  $\psi^\sigma$  de chaque composant pour permettre la simulation d'écoulement à ratio de densité élevé. Cette équation d'état est utilisée en raison de sa grande flexibilité à simuler différents fluides.

### 3.2.2 Applications

Les améliorations apportées au modèle de Porter et al sont vérifiées et validées sur des cas test qualitatifs et quantitatifs.

- Consistance thermodynamique (p.93-94, section 5.4.1)

Un cas test standard est de vérifier la consistance thermodynamique en comparant les densités d'équilibre obtenues numériquement avec ceux donnés par la construction de Maxwell. Pour différentes températures, une série de simulation est alors réalisée pour mesurer les densités d'équilibre d'un système composé d'une gouttelette d'eau et de la vapeur d'eau.

- Loi de Laplace (p.94-97, section 5.4.2)

Pour vérifier la loi de Laplace, une série de simulation est effectuée en changeant le rayon de la gouttelette à différentes températures. Initialement, une gouttelette liquide est placée au centre du domaine. Lorsque l'équilibre est atteint, la différence de pression entre l'intérieur et l'extérieur est mesurée. Les valeurs de densités d'équilibre sont ensuite converties dans les unités physiques réelles. Pour ce faire, le concept des propriétés réduites est utilisé. Les valeurs numériques de tension de surface dans les unités physiques sont aussi comparées aux données publiées dans la table NIST [74].

- Écoulement de Poiseuille dans un système à deux composants (p.97-99, section 5.4.3)

Un écoulement de Poiseuille à deux composants entre deux plaques parallèles est simulé pour valider la capacité du modèle à simuler des ratios de densité et de viscosité élevés. L'avantage de ce cas test est que la solution analytique est connue. Ce cas test permet également de vérifier la conservation du momentum.

- Dynamique d'oscillation d'une gouttelette déformée (p.102-108, section 5.4.4)

Une gouttelette déformée de la forme d'un ellipsoïde est initialement placée au centre du domaine. Le mode 2 est ici excité. La gouttelette déformée oscille jusqu'à atteindre une forme sphérique à l'équilibre. La période d'oscillation est comparée à la solution analytique de Miller et Scriven [73].

- Chute d'une gouttelette sous l'effet de la gravité (p.102-108, section 5.4.5)

L'étude de la tombée d'une gouttelette dans un environnement au repos est réalisée. Une gouttelette initialement placée dans un milieu au repos tombe sous l'effet de la gravité et de la force de flottaison. La vitesse de chute de la gouttelette augmente pour atteindre une vitesse maximale. À la vitesse maximale, le nombre de Reynolds est calculé et comparé aux corrélations empiriques [75].

L'accélération devient nulle lorsque la vitesse maximale est atteinte et il y a donc équilibre entre la force de flottaison et la force de traînée. Cet équilibre permet d'exprimer le coefficient de traînée. Le coefficient de traînée numérique est ensuite comparé aux corrélations empiriques [75].

### **3.3 Thème 3 : Ajustement de la tension de surface dans un modèle multiphasique tridimensionnel**

Les thèmes 1 et 2 s'intéressent à la simulation d'écoulement à plusieurs phases et plusieurs composants que dans le cas isotherme. Cependant, en vue de progresser vers notre but à long terme, les effets thermiques deviennent non négligeables et doivent être pris en compte, comme dans des problèmes d'évaporation et de condensation.

L'objectif associé à ce thème est alors de :

### Ajouter les effets thermiques au modèle multiphasique à plusieurs composants afin de pouvoir simuler le changement de phase et des échanges de chaleur entre composants

L'article inclus au chapitre 6 répond à cet objectif :

#### 3.3.1 Contribution 3

Le modèle Explicit Forcing et le modèle scalaire passif sont combinés pour résoudre respectivement la dynamique d'écoulement et la température. Pour la première fois, le changement de phase et les échanges de chaleur entre composants sont tous les deux pris en compte. Comme la plupart des systèmes multiphasiques réels présentent un ratio de densité de l'ordre de 1000 (par exemple un système air-eau), l'équation d'état de Peng Robinson est introduite dans le modèle pour simuler des écoulements à ratios de densité élevée. L'inconsistance thermodynamique du modèle pseudo-potential est réduite en effectuant une combinaison linéaire de la valeur locale et moyenne du gradient dans le calcul de la force d'interaction interne. L'augmentation de l'ordre d'isotropie dans la force d'interaction est également appliquée pour réduire les courants parasites à l'interface. En résumé, l'ensemble des améliorations apportées au modèle proposé dans le thème 2 sont utilisées pour résoudre la dynamique de l'écoulement.

Pour traiter le changement de phase, un terme source  $\Phi^\sigma$  est ajouté à l'équation de température pour chaque composant  $\sigma$  [76]. Comme pour la densité, l'opérateur de collision MRT est utilisé pour résoudre la température et ainsi améliorer la stabilité numérique du modèle. Basée sur la relation thermodynamique de l'entropie, l'expression du terme source  $\Phi^\sigma$  a été obtenue et s'exprime comme suit:

$$\phi^\sigma = T^\sigma \left[ 1 - \frac{1}{\rho_\sigma c_v^\sigma} \left( \frac{\partial p^\sigma}{\partial T^\sigma} \right)_{\rho_\sigma} \right] \nabla \cdot u^\sigma \quad (3.6)$$

Le terme source  $\Phi^\sigma$  est ensuite exprimé en fonction de la chaleur latente de vaporisation  $L_v^\sigma$  afin de le découpler de l'équation d'état. Comme la chaleur latente de vaporisation  $L_v^\sigma$  se définit comme suit:

$$L_v^\sigma = T^\sigma \left( \frac{\partial p^\sigma}{\partial T^\sigma} \right)_{v^\sigma} (v_v^\sigma - v_l^\sigma) \quad (3.7)$$

Le terme source  $\phi^\sigma$  peut alors s'exprimer en fonction de la chaleur latente de vaporisation  $L_v^\sigma$ :

$$\phi^\sigma = \left[ T^\sigma - \frac{1}{\rho_\sigma c_v^\sigma} \frac{L_v^\sigma}{(v_v^\sigma - v_l^\sigma)} \right] \nabla \cdot \mathbf{u}^\sigma \quad (3.8)$$

Ainsi, n'importe quelle valeur de chaleur latente de vaporisation  $L_v^\sigma$  peut être imposée indépendamment de l'équation d'état utilisé.

Pour modéliser l'échange de chaleur entre les composants, un autre terme source  $\phi^{\sigma\bar{\sigma}}$  est ajouté à l'équation de température. Son expression est donnée par :

$$\phi^{\sigma\bar{\sigma}} = \frac{h^{\sigma\bar{\sigma}} S^\sigma (T^{\bar{\sigma}} - T^\sigma)}{\rho_\sigma c_p^\sigma} \quad (3.9)$$

Pour tenir compte de l'échange de chaleur entre composants, la fonction de distribution d'équilibre pour la température est modifiée et est donnée par:

$$g_\alpha^{\sigma,eq} = w_\alpha (T^\sigma + \Delta t \phi^{\sigma\bar{\sigma}}) \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}^{\sigma,eq}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}^{\sigma,eq})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^{\sigma,eq} \cdot \mathbf{u}^{\sigma,eq}}{2c_s^2} \right] \quad (3.10)$$

### 3.3.2 Applications

Pour valider le modèle thermique multicomposant proposé, la conduction thermique dans un écoulement à 2 phases, l'évaporation d'une gouttelette liquide et la migration thermocapillaire d'une bulle sont étudiées.

- Consistance thermodynamique (p.129-131, section 6.5.3)

La validation de notre modèle débute encore une fois par la vérification de la consistance thermodynamique. Une gouttelette d'eau à l'équilibre dans de la vapeur d'eau est simulée à différentes températures. Les densités d'équilibres obtenues numériquement sont comparées à ceux obtenus par la construction de Maxwell.

- Conduction thermique dans un écoulement à deux fluides (p.131-132, section 6.5.4)

La simulation de la conduction dans deux fluides immiscibles compris entre deux plaques parallèles est effectuée. Les fluides simulés sont l'eau à l'état liquide et l'état vapeur. Une surface chaude et froide est respectivement imposée sur la paroi inférieure et supérieure du domaine.

- Évaporation d'une gouttelette (p.132-136, section 6.5.5)

L'objectif de ce cas test est de valider la capacité de notre modèle à simuler le changement de phase dans un écoulement initialement composé deux composants immiscibles. Une gouttelette d'eau à l'équilibre est initialement placée au centre d'un domaine composé de vapeur d'eau. Lorsque l'équilibre entre les deux composants est atteint, la température de la paroi supérieure est augmentée. Un transfert de chaleur par conduction se produit alors entre la paroi chauffée et l'interface de la gouttelette liquide. La diminution du diamètre de la gouttelette dans le temps est comparée à la loi  $D^2$ . L'influence de la chaleur de vaporisation sur la vitesse d'évaporation est également étudiée.

- Croissance et migration d'une bulle à partir d'une surface surchauffée (p.136-139, section 6.5.5)

Pour valider davantage, la capacité du modèle à simuler le changement de phase et les échanges de chaleur entre composants, la croissance et la migration d'une bulle à partir d'une surface surchauffée est simulée. Initialement, une petite bulle est placée sur la paroi inférieure dans un milieu environnant composé d'eau liquide à une température de saturation. Sur la plaque inférieure, un point de surchauffe est créé au centre de la plaque. L'influence de la gravité sur le diamètre de départ de la gouttelette est analysée.

## **CHAPITRE 4    ARTICLE 1: A MULTIPHASE THREE-DIMENSIONAL MULTI-RELAXATION TIME (MRT) LATTICE BOLTZMANN MODEL WITH SURFACE TENSION ADJUSTMENT**

Sami Ammar, Guillaume Pernaudat, and Jean-Yves Trépanier, Manuscript published to Journal of Computational Physics (April 2017).

### **4.1 Abstract**

The interdependence of surface tension and density ratio is a weakness of pseudo-potential based lattice Boltzmann models (LB). In this paper, we propose a 3D multi-relaxation time (MRT) model for multiphase flows at large density ratios. The proposed model is capable of adjusting the surface tension independently of the density ratio. We also present the 3D macroscopic equations recovered by the proposed forcing scheme. A high order of isotropy for the interaction force is used to reduce the amplitude of spurious currents. The proposed 3D-MRT model is validated by verifying Laplace's law and by analyzing its thermodynamic consistency and the oscillation period of a deformed droplet. The model is then applied to the simulation of the impact of a droplet on a dry surface. Impact dynamics are determined and the maximum spread factor calculated for different Reynolds and Weber numbers. The numerical results are in agreement with data published in the literature. The influence of surface wettability on the spread factor is also investigated. Finally, our 3D-MRT model is applied to the simulation of the impact of a droplet on a wet surface. The propagation of transverse waves is observed on the liquid surface.

**Keywords:** Multiphase flow, MRT Lattice Boltzmann, Three-dimension, Adjustable surface tension, Large density ratios



## 4.2 Introduction

Multiphase flows occur in a large spectrum of fluid flow problems. However, the numerical simulation of multiphase flows is relatively difficult because of the complexity of the physical phenomena involved. Traditionally, the resolution of multiphase flow has been performed using the Navier-Stokes equations coupled with Eulerian or Lagrangian methods to define the position of the interface between the phases. The most common methods to capture the interfaces are: the Volume of Fluid method [24, 25, 77] and the Level Set method [78, 79]. These methods capture the interface between two phases through a variable number of cells. For the Lagrangian method, the interface between different phases of the flow is explicitly obtained and can be tracked during the solution.

In recent decades, the lattice Boltzmann method (LBM) has emerged as an alternative to simulating multiphase flows [68]. This numerical method is an extension of cellular automata and uses distribution functions. LBM is now a popular alternative to conventional Computational Fluid Dynamics (CFD) methods to solve fluid flow problems with complex physics. The linearity of the propagation operators makes its implementation straightforward [40]. In the particular case of multiphase flows, it avoids reconstruction or tracking of the interface since the interface between phases appears automatically during the solution process. The interface is characterized by the variation of fluid densities and has a width of a few lattice nodes.

Several variants of multiphase flow models based on the lattice Boltzmann method have been developed. The first, known as Rothman and Keller [80], uses a color gradient to separate and model the interface between phases. The second is the pseudo-potential model [3] which uses a non-local interaction between particles to simulate the spontaneous segregation of the phase. The third variant is the free energy model proposed by Swift et al. [44, 45] for which specialized collision rules are applied to ensure that the system converges to the minimum of the free energy functional [40].

Because of its simplicity and versatility, the pseudo-potential model proposed by Shan and Chen [3, 81] is one of the most popular multiphase lattice Boltzmann models. The general idea behind this model is to use a pseudo-potential that depends on the local fluid density to represent the microscopic interactions at the mesoscopic scale. Thus, if the intensity of interaction  $g$  (function of temperature) is below a critical value ( $g < g_c$ ), automatic phase separation occurs,

resulting in a low-density phase and a high density phase. In the opposite case, when the value of the intensity of interaction is greater than the critical value, the coexistence of both liquid and gas is not possible [82]. This automatic segregation is an important feature of the pseudo-potential model and makes it very attractive to many users. In view of its effectiveness and its ability to represent the underlying microscopic physics, this approach has been chosen in the present work.

However, the original pseudo-potential model has some limitations. First, it suffers from a density ratio limit between phases. Increasing the density ratio involves an increase in spurious currents which increases the risk of numerical instabilities. To overcome this limitation, in recent decades several modifications have been proposed in the literature: the isothermal equation of state can be replaced by a realistic equation of state (EOS) [55, 59]; the isotropic order of the gradient operator can be increased [57, 72]; or, finally, the width of the interface can be increased [57]. A second limitation is the dependency between the surface tension and the density ratio [57]. For example, when introducing a realistic equation of state as in Yuan and Schaefer's method [55], both the density ratio and surface tension vary with the temperature since temperature is the only free parameter. In order to tune the surface tension independently of the density ratio, Sbragaglia et al. [57] developed a multi-range potential where he proposes to add a second force term into the interaction force. There are now two tunable parameters and, therefore, the surface tension and density ratio can be controlled separately. However, in a recent study, Huang et al. [83] reported that the density ratio is considerably modified when the multi-range potential is used to adjust the surface tension. Li et al. [58] explain the reasoning through theoretical and numerical analyses of the multi-range potential: the mechanical stability condition varies according to two parameters of the multi-range potential which results in a violation of the thermodynamic consistency. To adjust the surface tension independently, Li et al. [58] then proposed an alternative approach which consisted of modifying the pressure tensor of the pseudo-potential model based on the 2D multiple relaxation time (MRT) model. Compared to Sbragaglia's model [57], this model gave a density distribution independent of other properties and allowed the surface tension to change over a wide range of values.

In parallel, to improve the stability of the pseudo-potential model, Kupershtokh et al. [59, 70, 84] showed that the calculation of the interaction force plays an important role in preserving the thermodynamic consistency. They reduced the thermodynamic inconsistency of the Van der Waals EOS by combining the local approximation and the mean-value approximation for the

calculation of the interaction force. They also found that this interaction force allowed extension of the stable temperature range and reduced spurious currents [82]. Finally, in order to adjust the surface tension, Hu et al. [60] proposed modifying the pressure tensor of Kupershtokh's model in a 2D-MRT operator.

Since multiphase problems are three-dimensional by nature, in the present work we set out to develop a 3D-MRT model in which the surface tension could be adjusted by modifying the pressure tensor. Our new model is an extension of Hu's model to a 3D-MRT model based on the D3Q19 lattice. There are major differences in the development of a 2D-MRT model and a 3D-MRT model, which are discussed in Section 2. We present the theoretical development of our 3D-MRT model by detailing the force term and source term. We also give the macroscopic equations of multiphase flow for the 3D case. The Chapman Enskog analysis was used to provide the relationship between the moment bases and force terms including the surface tension force. To limit spurious currents, we apply a high isotropy order of the interaction force into the 3D-MRT model and perform an analysis of the spurious currents versus the isotropic order. The new pseudo-potential model is capable of simulating 3D problems at large density ratios with adjustable surface tension while maintaining the thermodynamic consistency and limiting spurious currents. Finally, we apply the proposed 3D-MRT model in the case of the droplet impact on a dry and wet surface.

The rest of the paper is organized as follows. Section 2 describes our numerical 3D-MRT multiphase model. The methods applied in order to increase the ratio density, decrease the spurious currents, ensure thermodynamic consistency and adjust the surface tension are presented in this section. In Section 3, applications for 3D-MRT model are presented and the results compared to literature. Finally, Section 4 presents our conclusions.

## **4.3 Numerical model**

### **4.3.1 3D single and multiple relaxation-time LBM model**

The lattice Boltzmann method is a mesoscopic method for solving fluid flow. It uses distribution functions to calculate macroscopic quantities such as density, momentum and energy. Using the Guo force scheme [85], the lattice Boltzmann equation can be written as follows:

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = \Omega_\alpha + \delta_t F_\alpha \quad (4.1)$$

Where  $f_\alpha$  is the distribution function along the  $\alpha^{\text{th}}$  direction at a node  $\mathbf{x}$  and time  $t$ ,  $\vec{e}_\alpha$  is the discrete velocity in the  $\alpha^{\text{th}}$  direction,  $\delta_t$  is the time step,  $F_\alpha$  represents the forcing term and  $\Omega_\alpha$  is the collision operator.

For the single relaxation-time collision operator of Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) type [34], the collision operator  $\Omega_\alpha$  is defined as:

$$\Omega_\alpha = -\frac{\delta_t}{\tau} (f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (4.2)$$

Where  $f_\alpha^{eq}(\vec{x}, t)$  is the equilibrium distribution function and  $\tau$  the relaxation time. The equilibrium distribution function  $f_\alpha^{eq}(\vec{x}, t)$  can be written as follows:

$$f_\alpha^{eq} = \rho w_\alpha \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}}{2c_s^2} \right] \quad (4.3)$$

Where  $w_\alpha$  is the weighting factor. In the present study, the D3Q19 lattice is used for the 3D simulations. The discrete velocity and the weighting factor for the D3Q19 lattice are given by:

$$\begin{aligned} & [\mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_4, \mathbf{e}_5, \mathbf{e}_6, \mathbf{e}_7, \mathbf{e}_8, \mathbf{e}_9, \mathbf{e}_{10}, \mathbf{e}_{11}, \mathbf{e}_{12}, \mathbf{e}_{13}, \mathbf{e}_{14}, \mathbf{e}_{15}, \mathbf{e}_{16}, \mathbf{e}_{17}, \mathbf{e}_{18}] \\ & = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.4)$$

And

$$w_\alpha = \begin{cases} 1/3, & \alpha = 0; \\ 1/18, & \alpha = 1, 2, \dots, 6; \\ 1/36, & \alpha = 7, 8, \dots, 18; \end{cases} \quad (4.5)$$

The collision operator BGK uses a single relaxation time for all physical quantities. In order to improve relaxation, D'Humières [86] developed a model based on multiple relaxation times, where each physical quantity has its own characteristic time. The impact of using the MRT operator is an improved numerical stability. The MRT collision operator  $\Omega_\alpha$  is defined as [87]:

$$\Omega_\alpha = -(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{M})_{\alpha\beta}(f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (4.6)$$

Where  $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{M}$  is the collision matrix. For the D3Q19 lattice, the transformation matrix  $\mathbf{M}$  is given by [86]:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -30 & -11 & -11 & -11 & -11 & -11 & -11 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 \\ 12 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -4 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 4 & 0 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 4 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & -1 & -1 & 2 & -1 & -1 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 \\ 0 & -4 & 2 & 2 & -4 & 2 & 2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 2 & 0 & -2 & 2 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

And the diagonal matrix  $\mathbf{\Lambda}$  of relaxation parameters is given by:

$$\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(s_1, s_2, s_3, s_4, s_5, s_6, s_7, s_8, s_9, s_{10}, s_{11}, s_{12}, s_{13}, s_{14}, s_{15}, s_{16}, s_{17}, s_{18}, s_{19}) \quad (4.8)$$

$s_1, s_4, s_6$  and  $s_8$  correspond to the relaxation parameters associated with invariants  $\rho, j_x, j_y, j_z$  respectively and therefore, the value of these parameters does not matter. The relaxation parameter  $s_2$  is related to the bulk viscosity and the relaxation parameters  $s_{10}, s_{12}, s_{14}, s_{15}$  and  $s_{16}$  are related to the viscosity.  $s_{11}, s_{13}, s_{17}, s_{18}$  and  $s_{19}$  are free parameters.

Unlike the BGK collision operator, the MRT collision operator is calculated in the moment space. The distribution function  $f$  and the equilibrium distribution function  $f^{eq}$  are transferred in moments space after multiplication by the transformation matrix  $\mathbf{M}$  as follows:  $\mathbf{m} = \mathbf{M}f$  and  $\mathbf{m}^{eq} = \mathbf{M}f^{eq}$ . Therefore, the lattice Boltzmann equation (Eq. (1)) in the moment space can be written as:

$$\mathbf{m}^* = \mathbf{m} - \mathbf{S}(\mathbf{m} - \mathbf{m}^{eq}) + \left(I - \frac{\mathbf{\Lambda}}{2}\right)\mathbf{S} \quad (4.9)$$

Where  $I$  is the unit tensor, and the equilibrium moments  $\mathbf{m}^{eq}$  are given by:

$$\mathbf{m}^{eq} = \begin{bmatrix} -11\rho + 19 \frac{\rho}{j_x^2 + j_y^2 + j_z^2} \\ 3\rho - \frac{11}{2} \frac{\rho}{j_x^2 + j_y^2 + j_z^2} \\ \frac{j_x}{2} \\ -\frac{2}{3}j_x \\ \frac{j_y}{2} \\ -\frac{2}{3}j_y \\ \frac{j_z}{2} \\ -\frac{2}{3}j_z \\ \frac{2j_x^2 - (j_y^2 + j_z^2)}{\rho} \\ -\frac{1}{2} \frac{2j_x^2 - (j_y^2 + j_z^2)}{\rho} \\ \frac{j_y^2 - j_z^2}{\rho} \\ \frac{j_x j_y}{\rho} \\ \frac{j_y j_z}{\rho} \\ \frac{j_x j_z}{\rho} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

Where  $j_x = \rho u_x$ ,  $j_y = \rho u_y$ ,  $j_z = \rho u_z$  are the momentum of x, y, and z directions respectively.

The force term in the moment space is given by:

$$\mathbf{MF}' = \left( \mathbf{I} - \frac{\Lambda}{2} \right) \mathbf{S} \quad (4.11)$$

Where  $\mathbf{S}$  is given by:

$$S = \begin{bmatrix} 0 \\ 38(u_x F_x + u_y F_y + u_z F_z) \\ -11(u_x F_x + u_y F_y + u_z F_z) \\ F_x \\ -\frac{2}{3}F_x \\ F_y \\ -\frac{2}{3}F_y \\ F_z \\ -\frac{2}{3}F_z \\ 2(2u_x F_x - u_y F_y - u_z F_z) \\ -2u_x F_x + u_y F_y + u_z F_z \\ 2(u_y F_y - u_z F_z) \\ -u_y F_y + u_z F_z \\ u_y F_x + u_x F_y \\ u_z F_y + u_y F_z \\ u_z F_x + u_x F_z \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

With  $F^2 = F_x^2 + F_y^2 + F_z^2$ .

The bulk viscosity  $\xi$  and the kinematic viscosity in the MRT model are given by:

$$\xi = \frac{2}{9} \left( \frac{1}{s_2} - \frac{1}{2} \right) \quad (4.13)$$

And

$$\nu = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{s_\beta} - \frac{1}{2} \right), \beta = 10, 12, 14, 15, 16 \quad (4.14)$$

Finally, the macroscopic density and velocity are calculated by:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^N f_\alpha(\mathbf{x}, t) \quad (4.15)$$

$$\rho \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{e}_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) + \frac{\mathbf{F}}{2} \quad (4.16)$$

### 4.3.2 The pseudo-potential model

We base our 3D-MRT multiphase model on the pseudo-potential model. For the present work, Kupershtokh's model [14] is selected. Compared to the original pseudo-potential model, this one reduce spurious currents and thermodynamic inconsistency [14]. The interaction force of Kupershtokh's model is given by:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -A \frac{G}{2} \psi(\mathbf{x}) c_s^2 \sum_{\alpha=1}^{18} w(|\mathbf{e}_{\alpha}|^2) U(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha}) \mathbf{e}_{\alpha} - \frac{1-A}{2} G \psi(\mathbf{x}) c_s^2 \sum_{\alpha=1}^{18} w(|\mathbf{e}_{\alpha}|^2) \psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha}) \mathbf{e}_{\alpha} \quad (4.17)$$

Where  $\psi$  is the interaction potential (also called effective mass) that depends on the local fluid density.  $U(\mathbf{x}, t)$  is the potential function equal to  $G\psi(\mathbf{x}, t)^2/2$ , and  $A$  is a parameter which can be adjusted to reduce the thermodynamic inconsistency. The mechanical stability condition is given as  $\epsilon = -2\alpha/\beta$ . The values of  $\alpha$  and  $\beta$  depend on parameter  $A$  and are given by  $\alpha = 3A$  and  $\beta = 3$

### 4.3.3 Equations of state

Various equations of state (EOS) including: the Van der Waals (VdW) EOS, the Redlich Kwong (R-K) EOS, the Peng-Robinson (P-R) EOS and the Carnahan-Starling (C-S) EOS, were analyzed in Yuan and Schaefer's study [55]. They showed that the C-S EOS enabled the maximum density ratio over a wide stable temperature range while minimizing the spurious currents around the interface. In fact, high density ratios in the order  $O(1000)$  were reached. Thus, C-S EOS is used in the present multiphase model. The C-S EOS is given by:

$$p = \rho RT \frac{1 + b\rho/4 + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3} - a\rho \quad (4.18)$$

Where  $a = 0.4963(RT_c)^2/p_c$ ,  $b = 0.1873RT_c/p_c$ .  $T_c$  and  $p_c$  are respectively the critical temperature and critical pressure. In the present study, the parameters are fixed  $a = 1$ ,  $b = 4$ ,



$R = 1$  [55]. The corresponding critical temperature and pressure values were, respectively,  $T_c = 0.094325$  and  $p_c = 0.0044$ .

The interaction potential is defined as a function of the pressure, as follows:

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{Gc_s^2} (p - \rho c_s^2)} \quad (4.19)$$

Substituting Eq. (4.18) into Eq. (4.19), the effective mass becomes:

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{Gc_s^2} (\rho RT \frac{1 + b\rho/4 + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3} - a\rho - \rho c_s^2)} \quad (4.20)$$

#### 4.3.4 Higher order isotropy

Sbragaglia et al. [57] has shown that spurious currents result from a lack of isotropy in the interaction force [57]. He proposed reducing the spurious currents by increasing the isotropic order. The extended interaction potential method proposed by Sbragaglia et al. is implemented in the present work.

To achieve a higher isotropy order, the interaction force requires a larger number of neighboring nodes. Applying a Taylor expansion to  $\psi(\vec{x} + \vec{e}_\alpha)$ , the interaction force is rewritten as follows [57]:

$$F_f = -G\psi(x)c_s^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} E^{(n+1)} \nabla^n \psi(x) \quad (4.21)$$

With:

$$E^{(n)} = E_{i_1 \dots i_n}^{(n)} = \sum_{n=0}^N w(|e_\alpha|^2) e_\alpha^{i_1} e_\alpha^{i_2} \dots e_\alpha^{i_n} \quad (4.22)$$

Where  $N$  is the neighboring nodes number used. The odd tensor  $E^{(2n+1)}$  was zero. Table 4.1 gives the weights  $w(|e_\alpha|^2)$  as a function of the isotropic order in the 3D case. In the present study, all simulations, except those in section 3.1, are performed with an isotropic order of 8.

Table 4.1: Weights for isotropy order of 6, 8, 10 in 3D case [57]

Tensor	$w(1)$	$w(2)$	$w(3)$	$w(4)$	$w(5)$	$w(6)$	$w(8)$	$w_{221}(9)$	$w_{300}(9)$	$w(10)$	$w(11)$
$E^{(6)}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{60}$	$\frac{1}{120}$							
$E^{(8)}$	$\frac{4}{45}$	$\frac{1}{21}$	$\frac{2}{105}$	$\frac{5}{104}$	$\frac{1}{315}$	$\frac{1}{630}$	$\frac{1}{5040}$				
$E^{(10)}$	$\frac{352}{5355}$	$\frac{38}{1071}$	$\frac{271}{14280}$	$\frac{139}{14280}$	$\frac{53}{10710}$	$\frac{5}{2142}$	$\frac{41}{85680}$	$\frac{1}{4284}$	$\frac{1}{5355}$	$\frac{1}{10710}$	$\frac{1}{42840}$

We note that the weights for velocities  $|e_\alpha|^2 = 9$  must be chosen based on the x, y, z directions in space [57].

### 4.3.5 Adjustment of the surface tension

To our knowledge, no 3D multiphase model allows a change in surface tension without a change in the density distribution, which affects thermodynamic consistency. In the present work, we propose an extension of the 2D-MRT model of Hu et al. [60] to a 3D-MRT model based on the D3Q19 lattice in order to decouple the surface tension and the density distribution while respecting thermodynamic consistency.

Following Li et al. [58], we modify the pressure tensor by adding a source term  $C$  to the MRT-lattice Boltzmann equation (Eq. (4.9)) as follows:

$$m^* = m - S(m - m^{eq}) + \delta_t \left( I - \frac{\Lambda}{2} \right) S + C \quad (4.23)$$

This new approach allows us to adjust the surface tension independently and avoid affecting the mechanical stability condition and thus modifying the density distribution. The thermodynamic consistency is respected by adjusting the parameter  $A$  in the source  $C$  term (Eq. (4.17)).

Based on the study of Hu et al. [60], we derive a generalization of the three-dimensional macroscopic equations which satisfy pressure tensor modification:

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u_x) + \partial_y(\rho u_y) + \partial_z(\rho u_z) = 0 \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho u_x) + \partial_x(\rho u_x u_x) + \partial_y(\rho u_x u_y) + \partial_z(\rho u_x u_z) &= -\partial_x(\rho c_s^2) + F_x \\ &+ \partial_x \left[ 2v \left( \partial_x(\rho u_x) - \frac{1}{3} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) + \xi \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right] \\ &+ \partial_y \left( v \left( \partial_x(\rho u_x) + \partial_y(\rho u_x) \right) \right) + \partial_z \left( v \left( \partial_x(\rho u_z) + \partial_z(\rho u_x) \right) \right) \\ &+ \partial_x \left[ \kappa \left( \left( \frac{Gc^4}{6} (\psi \nabla^2 \psi + A(\nabla \psi)^2) \right) \mathbf{I} - \frac{Gc^4}{6} (\psi \nabla \nabla \psi + A(\nabla \psi)^2) \right) \right] \\ &+ O(\partial^5) \end{aligned} \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho u_y) + \partial_x(\rho u_y u_x) + \partial_y(\rho u_y u_y) + \partial_z(\rho u_y u_z) &= -\partial_y(\rho c_s^2) + F_y \\ &+ \partial_x \left( v \left( \partial_x(\rho u_y) + \partial_y(\rho u_y) \right) \right) \\ &+ \partial_y \left[ 2v \left( \partial_y(\rho u_y) - \frac{1}{3} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) + \xi \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right] \\ &+ \partial_z \left( v \left( \partial_x(\rho u_z) + \partial_z(\rho u_x) \right) \right) \\ &+ \partial_y \left[ \kappa \left( \left( \frac{Gc^4}{6} (\psi \nabla^2 \psi + A(\nabla \psi)^2) \right) \mathbf{I} - \frac{Gc^4}{6} (\psi \nabla \nabla \psi + A(\nabla \psi)^2) \right) \right] \\ &+ O(\partial^5) \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned}
\partial_t(\rho u_z) + \partial_x(\rho u_z u_x) + \partial_y(\rho u_z u_y) + \partial_z(\rho u_z u_z) &= -\partial_z(\rho c_s^2) + F_z \\
&+ \partial_x \left( v(\partial_x(\rho u_z) + \partial_z(\rho u_x)) \right) \\
&+ \partial_z \left( v(\partial_x(\rho u_z) + \partial_z(\rho u_x)) \right) \\
&+ \partial_z \left[ 2v \left( \partial_z(\rho u_z) - \frac{1}{3} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right) + \xi \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right] \\
&- \partial_z \left[ \kappa \left( \left( \frac{Gc^4}{6} (\psi \nabla^2 \psi + A(\nabla \psi)^2) \right) \mathbf{I} - \frac{Gc^4}{6} (\psi \nabla \nabla \psi + A(\nabla \psi)^2) \right) \right] \\
&+ O(\partial^5)
\end{aligned} \tag{4.27}$$

The parameter  $\kappa$ , varying from 0 to 1, is used to adjust the surface tension. According to Eqs (25)-(27), the new pressure tensor is defined as:

$$\nabla \cdot \mathbf{P}_{new} = \nabla \cdot \mathbf{P} - \kappa \left( \left( \frac{Gc^4}{6} (\psi \nabla^2 \psi + A(\nabla \psi)^2) \right) \mathbf{I} - \frac{Gc^4}{6} (\psi \nabla \nabla \psi + A(\nabla \psi)^2) \right) \tag{4.28}$$

Where

$$\nabla \cdot \mathbf{P} = \nabla \cdot (\rho c_s^2 \mathbf{I}) - \mathbf{F} \tag{4.29}$$

When  $\kappa$  is set to 0, we retrieve the pressure tensor of the pseudo-potential model without surface tension adjustment. In the present model, the new tensor pressure introduces the term  $\frac{Gc^4}{6} (1 - \kappa) (\psi \nabla \nabla \psi + A(\nabla \psi)^2)$  which determines the surface tension. Thus, when  $\kappa$  increases over the value range from 0 to 1, the surface tension decreases to approach zero.

According to the Chapman-Enskog analysis [88], the 3D-MRT source term  $C$  is given by:

$$C = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{2}{5}s_v(Q_{xx} + Q_{yy} + Q_{zz}) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -s_v(2Q_{xx} - Q_{yy} - Q_{zz}) \\ 0 \\ -s_v(Q_{yy} - Q_{zz}) \\ 0 \\ -s_v Q_{xy} \\ -s_v Q_{yz} \\ -s_v Q_{xz} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

The terms  $Q_{xx}$ ,  $Q_{yy}$ ,  $Q_{zz}$ ,  $Q_{xy}$ ,  $Q_{xz}$  and  $Q_{yz}$  are calculated from the following equation [60]:

$$\mathbf{Q} = \kappa \left[ (1 - A)\psi(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^{18} w(|\mathbf{e}_\alpha|^2) [\psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha) - \psi(\mathbf{x})] \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha + \frac{1}{2}A \sum_{\alpha=1}^{18} w(|\mathbf{e}_\alpha|^2) [\psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha)^2 - \psi(\mathbf{x})^2] \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \right] \quad (4.31)$$

### 4.3.6 Total force

The total force  $\mathbf{F}$  acting on a fluid particle is the sum of all forces: the fluid-fluid interaction force  $F_f$  (Eq. (4.17)), the fluid-solid interaction force  $\mathbf{F}_w$  (Eq. (30)) and the gravity force  $\mathbf{F}_g$  (Eq. (31)).

When a fluid is in contact with a wall, the fluid-solid interaction force is calculated as follows [89]:

$$\mathbf{F}_w(\mathbf{x}) = -G_w \psi(\mathbf{e}_\alpha) \sum_{\alpha=1}^{18} w(|\mathbf{e}_\alpha|^2) \psi(\rho_w) s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha) \mathbf{e}_\alpha \quad (4.32)$$

Where  $s$  is a parameter, which is equal to 1 for a solid node and 0 for a fluid node. Here, we set the parameter  $G_w$  to -1 and  $\rho_w$  is varied to achieve different contact angles and surface wettability. The surface wettability is the subject of some research studies [90-93]. The contact angle between a fluid and a solid wall is a measure of wetting surface (hydrophilic) or non-wetting surface (hydrophobic). If the angle contact is less than  $90^\circ$ , the droplet has a tendency to spread easily over the surface, which is referred to as a hydrophilic surface. Otherwise, if the contact angle is greater than  $90^\circ$ , the contact surface of the droplet over the surface is minimal, referred to, in this case, as a hydrophobic surface.

Finally, the gravity force is implemented as follows:

$$\mathbf{F}_g = \rho \mathbf{g} \quad (4.33)$$

## 4.4 Applications and results

In this section, we present the results of applying the 3D-MRT model as developed in various test cases. The model is evaluated by an analysis of spurious currents, by validation of Laplace's law, verification of the thermodynamic consistency and an analysis of the oscillation dynamics of a deformed droplet. Finally, 3D applications of the model are made. The simulation and analysis of a liquid droplet impacting on dry and wet surfaces are performed. In all simulations, the parameter  $A$  in Eq. (4.17) is set at  $A = -0.55$  and the parameter  $\kappa$  in Eq. (4.29) is set as,  $\kappa = 0$ , except in section 4.4.2.

### 4.4.1 Analysis of spurious currents

The analysis of spurious currents is made by simulating a droplet in equilibrium in a domain with no gravity. Physically, the velocity of the liquid droplet and the surrounding gas should be zero, but numerically spurious currents occur at the interface of the droplet. Compared to the single relaxation time (SRT) operator, Yu et al. [94] showed that spurious currents can be reduced considerably by using the MRT collision operator. In this section, we analyze the influence of the isotropic order on our 3D MRT model. A  $64 * 64 * 64$  domain is used. For each

simulation, a liquid droplet of initial radius  $R = 15 lu$  is placed in the center of the domain. Periodic conditions were imposed in all directions. The density ratio was  $\rho_l/\rho_g \approx 40$ , which correspond to a reduced temperature  $T/T_c = 0.72$ . In the MRT model, the relaxation parameters  $s_1, s_4, s_6$  and  $s_8$  and the free parameters  $s_9, s_{11}, s_{13}, s_{17}, s_{18}$  and  $s_{19}$  are set to 1.0. The relaxation parameters  $s_2, s_3, s_5, s_7, s_9$  are set to 1.1. The initial density of the field is given by:

$$\rho(x, y, z) = \frac{\rho_{liq} + \rho_{gaz}}{2} - \frac{\rho_{liq} - \rho_{gaz}}{2} \tanh\left(\frac{2(r - R)}{W}\right) \quad (4.34)$$

With  $r = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2 + (z - z_c)^2}$

Where  $(x_c, y_c, z_c)$  corresponds to the center of the domain.  $W$  is the initial interface width and is fixed at 3 units. The initialization of density using Eq. (32) allows a smooth transition of the density distribution and avoided numerical instability in early iterations [83]. The maximum amplitude of the spurious velocity is measured for different isotropic orders to use both the SRT and MRT operators. The results are given in Table 4.2.

Table 4.2: Maximum amplitude of the spurious velocity  $|u|_{max}$  for different isotropic order

	4 <sup>th</sup> order isotropy	6 <sup>th</sup> order isotropy	8 <sup>th</sup> order isotropy	10 <sup>th</sup> order isotropy
SRT	0.009449	0.007382	0.004635	0.004312
MRT	0.003842	0.0006909	0.0003455	0.0003126

For the same isotropy order, it can be seen that the MRT model considerably reduced the maximum amplitude of the spurious velocity compared to the SRT model. For both collision operators, the 10<sup>th</sup> order isotropy is the best choice. However, we observe that the decrease spurious velocity is not significative compared to the 8<sup>th</sup> order isotropy. Thus, the 8<sup>th</sup> order isotropy is used for the remainder of the paper.

#### 4.4.2 Validation of Laplace's law

In the case of a three-dimensional droplet, Laplace's law is written as:

$$\Delta p = p_{in} - p_{out} = \frac{2\sigma}{R} \quad (4.35)$$

Where  $\sigma$  is the surface tension,  $R$  is the radius of the droplet and  $p_{in}$  and  $p_{out}$  are, respectively, the pressure inside and outside the droplet. To verify Laplace's law, a series of simulations are performed by changing the radius of a static droplet as in [58]. The density ratio is  $\rho_l/\rho_g \approx 1000$  which corresponded to a reduced temperature  $T/T_c = 0.56$ . The liquid droplet of initial radius  $R_0$  is placed in the center of the domain. Periodic boundary conditions are imposed in all directions. The density is initialized using Eq. (4.34). When equilibrium is reached after 10 000 time-steps, the pressure difference between the inside and the outside of the droplet is measured. We assume that equilibrium is reached when  $\max |\rho^{n+1} - \rho^n| < 10^{-6}$ . Figure 4.1 illustrates the convergence. The pressure differences for different values of the free parameter  $\kappa$  (Eq. (4.29)) with  $8 < R < 30$  are shown in Fig. Figure 4.2. The markers represent the results from the numerical simulation and the solid lines represent the linear fit associated. The slope of the line gives the surface tension according to Laplace's equation. At  $\kappa = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 0.95$ , the slopes are, respectively, equal to 0.3016, 0.2262, 0.1509, 0.0754, 0.0151 and the coefficients of determination of the linear fit are, respectively, 0.9985, 0.9971, 0.9985, 0.9996, 0.9997. The numerical results are in agreement with the linear fit. The pressure difference across the interface of the droplet is proportional to the inverse of the radius of the droplet as Laplace law's law. In addition, the results demonstrate the ability of the model to adjust the surface tension independently of density ratios and therefore without affecting the thermodynamic consistency.



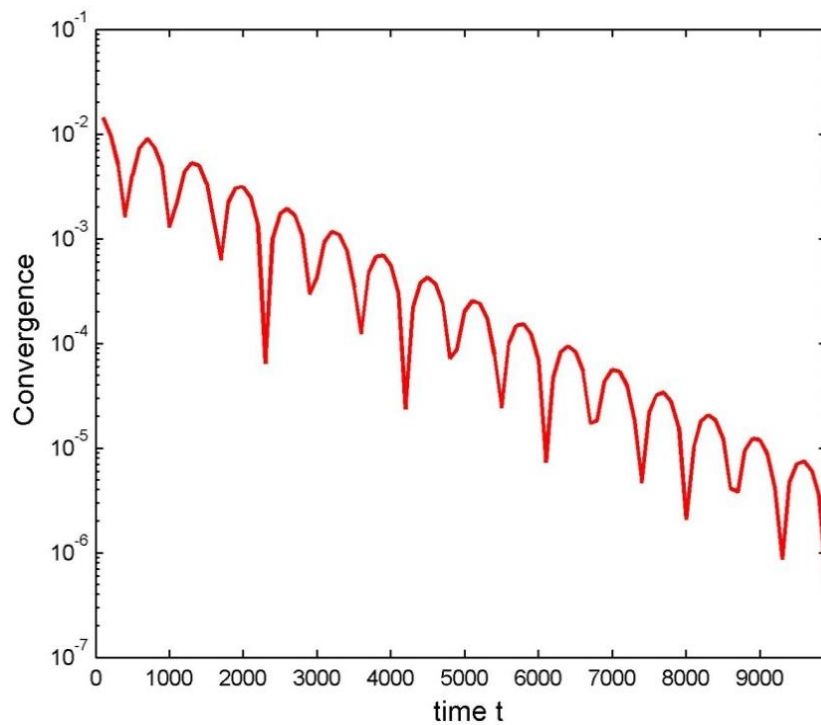


Figure 4.1: Convergence

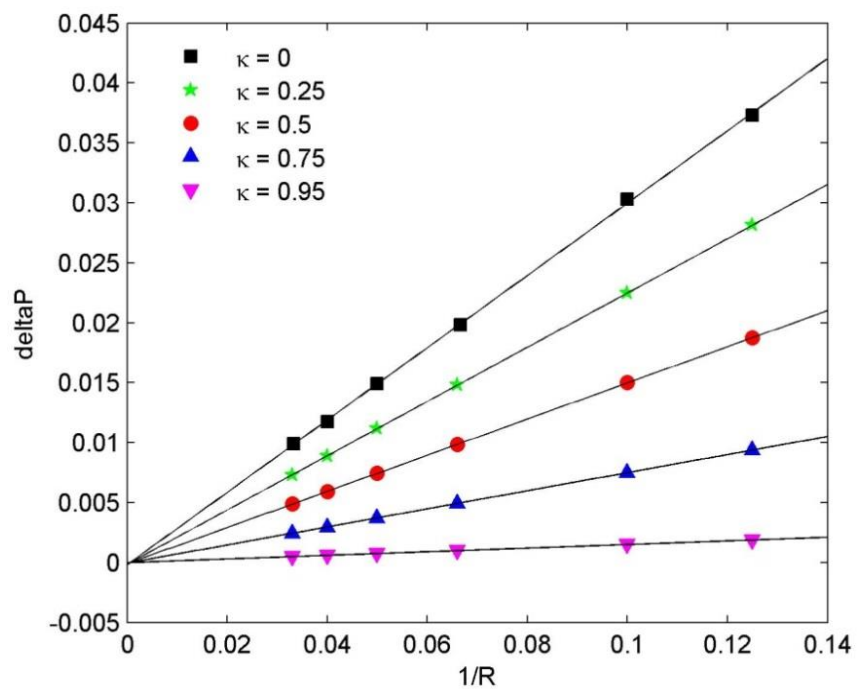


Figure 4.2: Pressure difference across the interface according to the inverse of the radius

### 4.4.3 Thermodynamic consistency

A second test to validate our model consists of verifying its thermodynamic consistency. A series of simulations on a static droplet at different temperatures  $T$  is performed as in [95]. Numerical coexistence curve is compared with the coexistence curve obtained by the Maxwell construction. A  $64*64*64$  domain is used. For each simulation, a static droplet of radius  $r = 15$  lu is placed at the center of the domain. Periodic boundary conditions are defined in all directions. The surface tension parameter  $\kappa$  is set to  $\kappa = 0$ . The coexistence curves are shown in Fig. Figure 4.3. It is demonstrated that the results of the simulation obtained with  $A = -0.55$  are in good agreement with the coexistence curve obtained by the Maxwell construction of the liquid and vapor branches. Thus, the ability of the 3D-MRT model to simulate high density ratios while ensuring the thermodynamic consistency is confirmed.

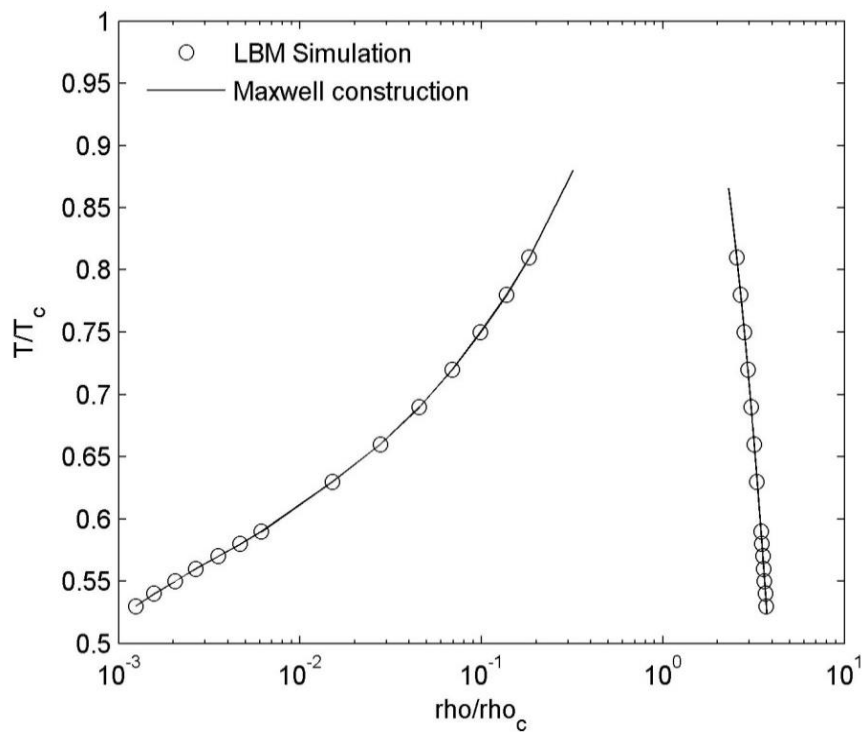


Figure 4.3 : Numerical coexistence curves and coexistence curves given by the Maxwell construction

#### 4.4.4 Contact angle

This section presents the results of studies on the contact angle between a liquid droplet and a solid wall. By varying the parameter  $\rho_w$ , different contact angles and also different wettability surfaces, hydrophilic, neutral, or hydrophobic are obtained. For each simulation, a liquid droplet of radius  $R = 15$  lu is initialized tangent to the bottom wall. The domain size is  $64 \times 64 \times 64$ . Periodical conditions are defined on all sides of the domain and half bounce back boundary conditions were defined on the top and bottom. Figure 4.4 represents a density field at  $Nz=32$  corresponding to the central plane of the domain.

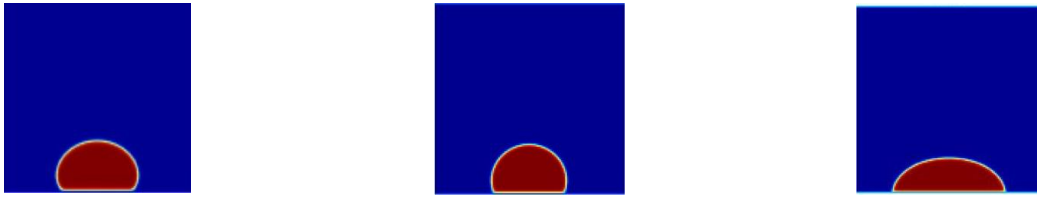


Figure 4.4a: Hydrophobic surface    Figure 4.4b: Neutral surface    Figure 4.4c: Hydrophilic surface

When equilibrium is reached, the contact angle is measured. It is determined geometrically based on [91]. From the base  $b$ , height  $h$  and radius  $r$  of the droplet, the contact angle  $\theta$  is calculated using the expression:

$$\theta = \pi - \arctan\left(\frac{b/2}{r-h}\right) \quad (4.36)$$

Where the radius  $r$  of the droplet is calculated using:

$$r = \frac{4h^2 + b^2}{8h} \quad (4.37)$$

The contact angles measured for the hydrophobic surface, neutral surface and hydrophilic surface are respectively  $\theta_w = 112^\circ$ ,  $\theta_w = 90^\circ$ ,  $\theta_w = 78^\circ$ . Figure 4.5 shows the relationship between the contact angle  $\theta$  and the parameter  $\rho_w$ . The contact angle varies linearly with the parameter  $\rho_w$ .

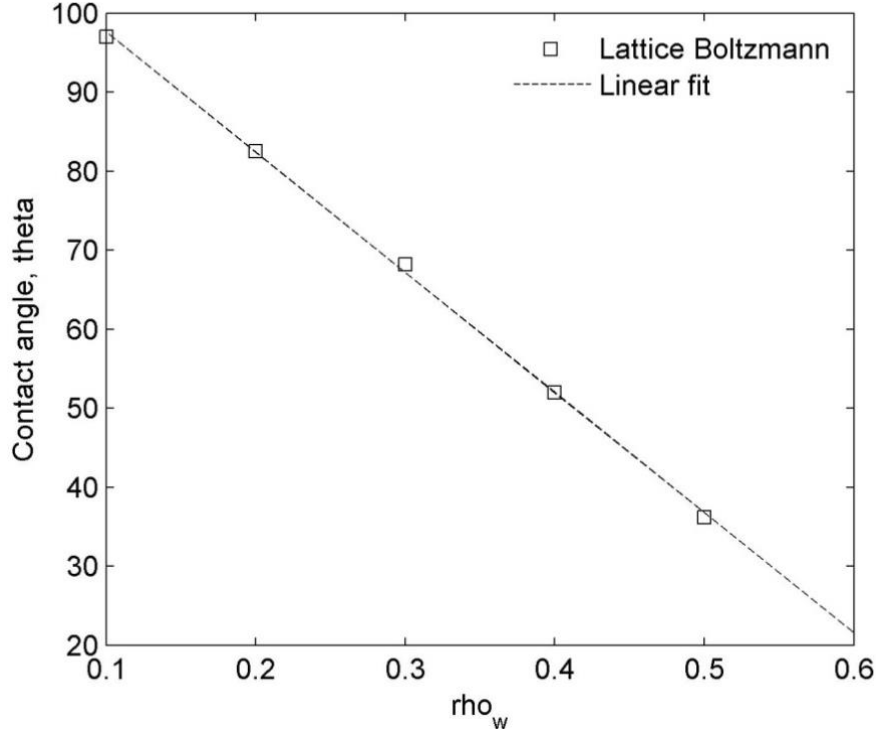


Figure 4.5: Contact angle in function  $\rho_w$  parameter

#### 4.4.5 Droplet Oscillation

We then studied the dynamic problem of droplet oscillation. Initially, a deformed droplet of ellipsoid shape is placed at the center of the domain and the surface of the droplet is given by the equation:

$$\frac{(x - x_c)^2}{R^2} + \frac{(y - y_c)^2}{R^2} + \frac{(z - z_c)^2}{3R^2} = 1 \quad (4.38)$$

Where  $(x_c, y_c, z_c)$  is the center of the deformed droplet and  $R$  was its radius. The domain size is  $64 \times 64 \times 64$  and the radius  $R$  is fixed at  $R = 15$  lu. Periodic boundary conditions are imposed in all directions. Under the effect of surface tension and viscosity, the deformed droplet oscillates until it reaches a spherical shape at equilibrium. The frequency for the  $n^{\text{th}}$  oscillation mode of a droplet is given by the analytical solution of Miller and Scriven [73]:

$$\omega_n = \omega_n^* - \frac{1}{2}\chi\omega_n^{*\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\chi^2 \quad (4.39)$$

where  $\omega_n$  is the angular response frequency and  $\omega_n^*$  is Lamb's natural resonance frequency given by [96]:

$$(\omega_n^*)^2 = \frac{n(n+1)(n-1)(n+2)}{R_d^3 [n\rho_g + (n+1)\rho_l]} \sigma \quad (4.40)$$

Where  $R_d$  is the equilibrium radius of the droplet and  $\sigma$  is the surface tension. The parameter  $\chi$  was given by:

$$\chi = \frac{(2n+1)^2 (\mu_l \mu_g \rho_l \rho_g)^{\frac{1}{2}}}{2^{\frac{1}{2}} R_d [n\rho_g + (n+1)\rho_l] \left[ (\mu_l \rho_l)^{\frac{1}{2}} + (\mu_g \rho_g)^{\frac{1}{2}} \right]} \quad (4.41)$$

Where  $\mu_l$  and  $\mu_g$  are, respectively, the dynamic viscosities of the liquid and the gas phases. Using the initial condition given by Eq. (4.38), the second oscillation mode ( $n = 2$ ) is excited. Figure 4.6 illustrates the evolution of the normalized radius  $R/R_0$  of the droplet in the horizontal direction for different viscosities  $\nu$ .  $R$  is the radius of the center of the droplet at the interface in the horizontal direction and  $R_0$  is the radius of the droplet at equilibrium. Under the effect of viscous dissipation, the oscillation amplitude decreases. It is also observed that the droplet returns to its spherical shape after a longer period when the viscosity is decreased. For the second oscillation mode, we compare the analytical oscillation period  $T = 2\pi/\omega_n$  obtained by Eq. (4.40) and the oscillation period calculated by our model. For viscosities  $\nu = 0.08$  and  $\nu = 0.16$ , the analytical oscillation periods are  $T_a = 1639$  lu/s and  $T_a = 1702$  lu/s and the numerical oscillation periods are  $T_n = 1575$  lu/s and  $T_n = 1625$  lu/s respectively. Thus, the difference is 3.9% and 4.5% respectively. These differences are consistent with those obtained in [58, 60]. In addition, to validate our results, we compare the oscillation period ratios  $T^{\nu=0.16}/T^{\nu=0.08}$  in the analytical and numerical case. In the analytic and numerical case, the oscillation period ratios are 1.0384 and 1.0317. The numerical results are in good agreement with the analytical results. In a second step, we study the influence of surface tension on dynamic oscillations by varying the surface tension parameter  $\kappa$ . The viscosity is chosen to be 0.16. Figure 4.7 illustrates the evolution of the radius of the droplet in the horizontal direction for different surface tension parameters  $\kappa$ . For the viscosity  $\nu = 0.16$  and the parameter  $\kappa = 0.5$ , the numerical and analytical oscillation periods are  $T_a = 1775$  lu/s and  $T_n = 1868$  lu/s respectively. The difference is less than 5%. We obtain

oscillation period ratios  $T^{\kappa=0.5}/T^{\kappa=0}$  in the analytical and numerical case of 1.0429 and 1.1495 respectively. The results are acceptable. Thus, by increasing the surface tension parameter, the surface tension decreases and therefore, the oscillation period becomes longer. For a given viscosity, the influence of the viscosity increases when the surface tension is decreased.

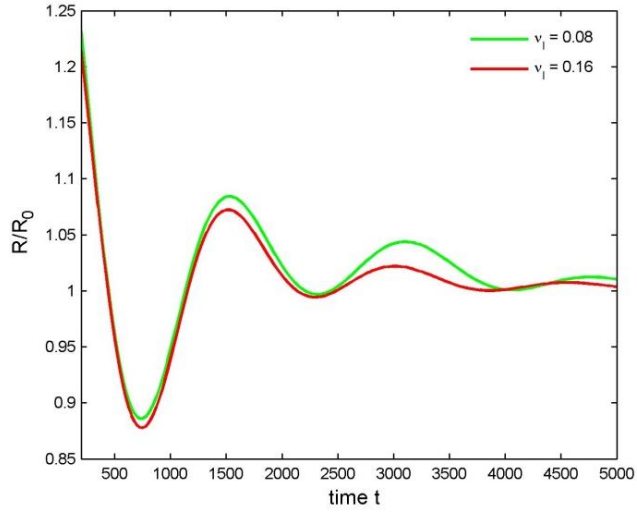


Figure 4.6: Evolution of the normalized radius of the droplet in the horizontal direction for different viscosities  $v$ ,  $\kappa = 0$

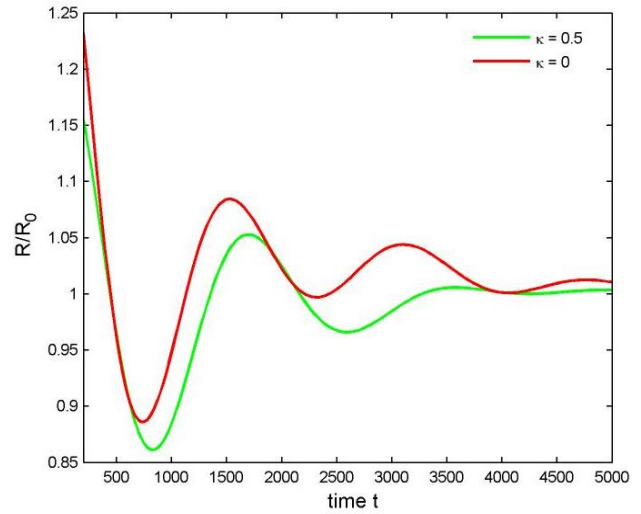


Figure 4.7: Evolution of the normalized radius of the droplet in the horizontal direction for different tension surface parameters  $\kappa$ ,  $v = 0.16$

#### 4.4.6 Droplet impingement on a dry wall

In this section, the result of applying the new 3D-MRT model to the problem of a droplet impacting on a dry surface is presented. The domain size  $104 \times 104 \times 104$  is used. A droplet of radius  $r = 15$  lu is initially placed in the center of the domain. Periodical boundary conditions are defined on all sides of the domain and half bounce back conditions are defined on the top and bottom boundaries. The density ratio is  $\rho_l/\rho_g \approx 1000$  which correspond to a reduced temperature  $T/T_c = 0.56$ . The gravity force is imposed to simulate the fall of the droplet on the lower wall.

The study of droplet impact on a solid wall is based on three dimensionless parameters: the Reynolds number (Re), the Weber number (We) and the Ohnesorge (Oh) number and are defined by:

$$Re = \frac{\rho_L D U^2}{\mu_L} \quad (4.42)$$

$$We = \frac{\rho_L D U}{\sigma} \quad (4.43)$$

$$Oh = \frac{\mu}{\sqrt{D} \sigma \rho} = \frac{\sqrt{We}}{Re} \quad (4.44)$$

Where  $\rho_L$  is the liquid density,  $\mu_L$  the liquid dynamic viscosity,  $\sigma$  the surface tension, and  $D$  is the diameter of the liquid droplet. The Reynolds number  $Re$  represents the ratio of inertia force to viscous forces and the Weber number represents the droplet kinetic energy on the impact to the surface tension energy. The Ohnesorge number is a combination of Weber and Reynolds numbers.

In general, two impact regimes can occur at the impact of a droplet on a dry surface: the spreading or the splashing. Mundo et al. [97] defined the transition between the two impact regimes based on the Ohnesorge number and Reynolds number by  $K = Oh \cdot Re^{1.25}$  with  $K_{limit} = 57.7$ . For values of  $K$  below  $K_{limit}$ , the spreading of the droplet occurs, while for higher values, the splashing forms.

In the present paper, the simulation of the liquid droplet impacting on the dry wall is performed for  $Re = 148$  and  $We = 32.4$ . The parameter  $K$  is equal to 19.8 which is below the limit value, the spreading of the droplet on the surface is then observed as shown in Fig. Figure 4.8. The snapshots showing the time evolution of the droplet shape corresponding to different dimensionless times are shown in this Fig. Figure 4.8. This dimensionless time was defined by  $t^* = tU/D$  with  $U$  the impact velocity,  $D$  the droplet diameter and  $t$  the time. Shortly after the impact, at  $t^* = 0.092$ , the droplet resembles a truncated sphere. The droplet continues to fall and spread in all directions. A lamella is formed at  $t^* = 0.682$ , which reaches its maximum spreading and then retracts.

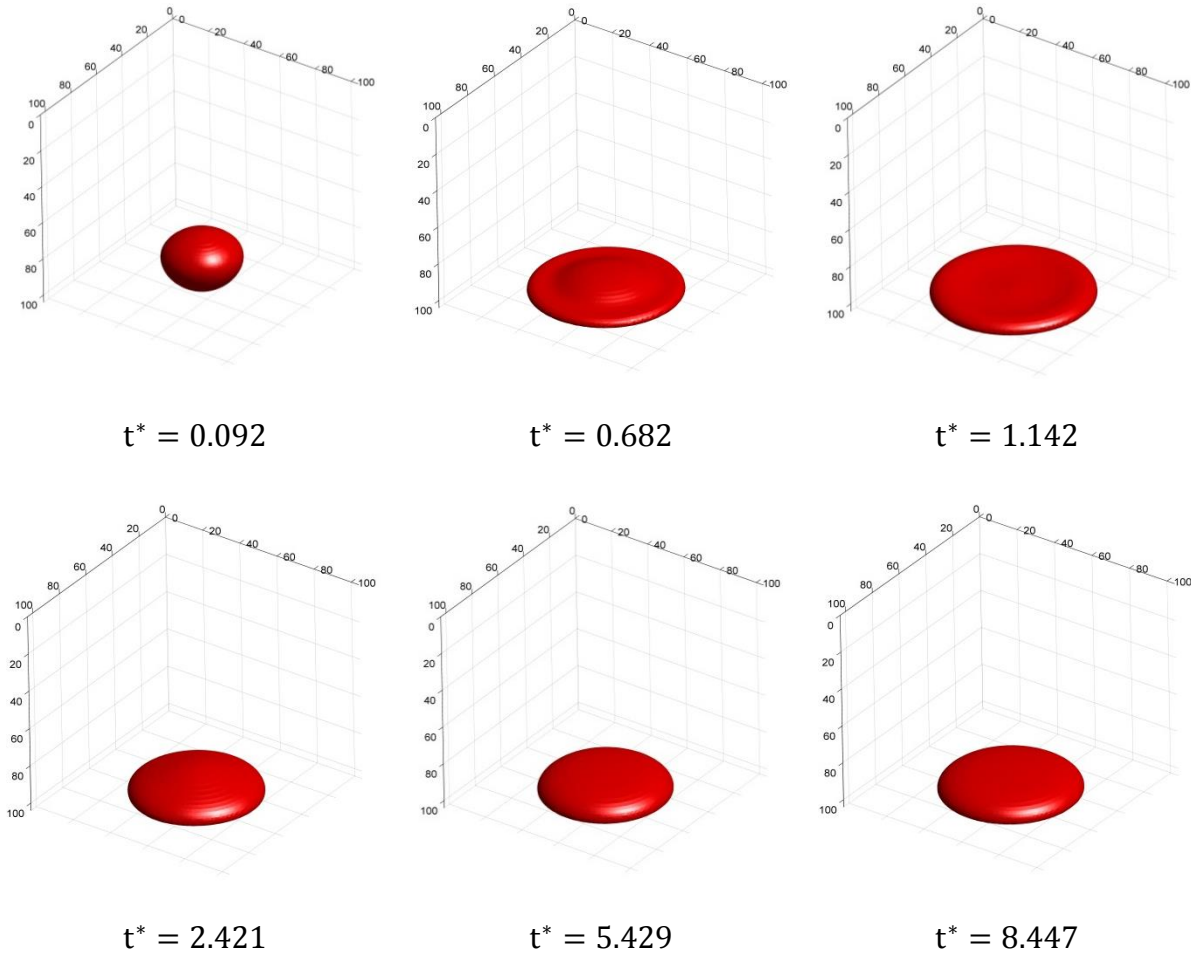


Figure 4.8: Snapshots of the droplet impact process on the dry wall

After a series of oscillations between spreading and retracting, the liquid drop reaches an equilibrium state.

The maximum spread factor defined as the ratio of the spreading film diameter on the wall to the initial droplet diameter  $D$  is calculated as a function of dimensionless time  $t^*$ . The spread factor evolution is shown in Fig. Figure 4.9 for  $Re = 148$ ,  $We = 32.4$  and  $\theta_w \approx 90^\circ$ . This evolution is divided into four distinct phases: the kinematic phase, the spreading phase, the relaxation phase and the equilibrium phase [98]. The kinematic phase corresponds to the first-time interval during the impingement of the droplet on the wall. It is conducted up to a dimensionless time  $t^* = 0.1$ . During this phase, the inertia force predominates and the liquid droplet resembles a truncated sphere. Figure 4.10 represents the spread factor evolution during the kinematic phase of four different cases with varying  $Re$  and  $We$  number. This shows that, in the kinematic phase, the



spread factor is independent of the physical properties  $Re$  and  $We$  but depends only on the dimensionless time  $t^*$ . A curve fit  $D^* = 2.2t^{0.5}$  of our numerical spread factor is also shown in Fig. Figure 4.10. Rioboo et al. [98] showed that the spread factor is proportional to  $t^{0.5}$  with a coefficient of 2.8 determined from experimental data. The results obtained from our LBM model are in agreement with the experimental results of Rioboo et al. [98].

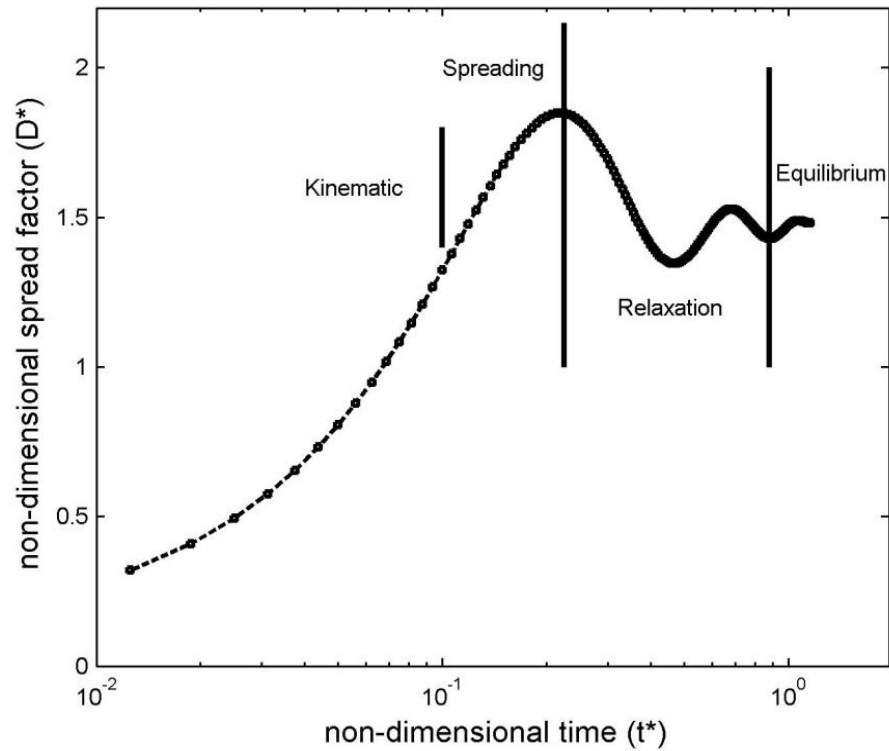


Figure 4.9: Evolution of spread factor

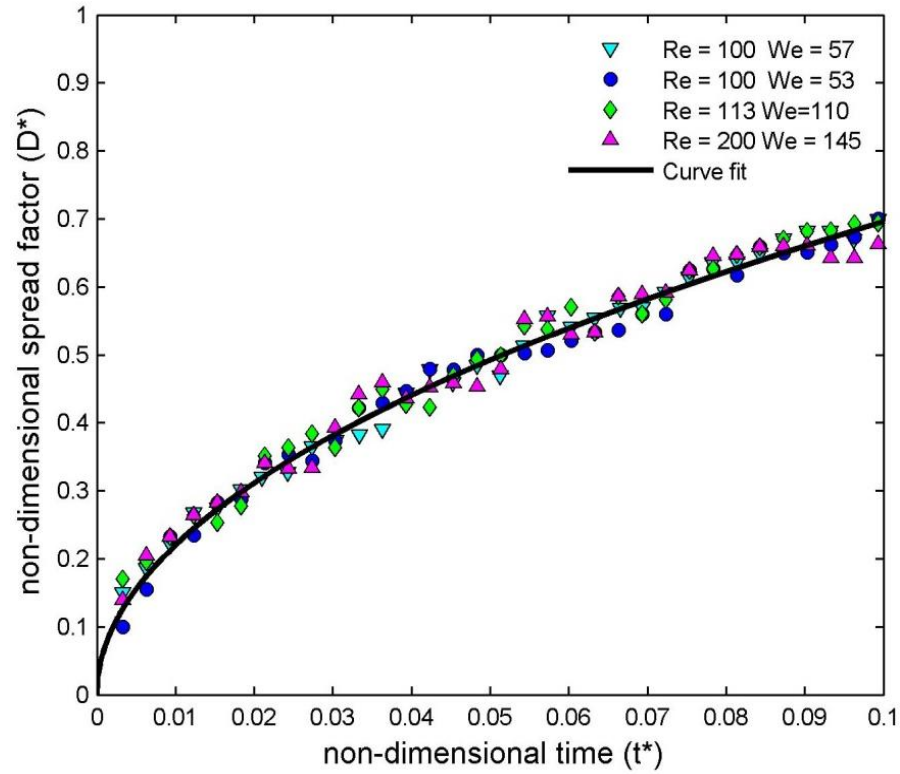


Figure 4.10: Spread factor during kinematic phase at different  $Re$  and  $We$

Contrary to the kinematic phase, the maximum spread factor depends on the  $Re$  and  $We$  number. Figure 4.11 shows the comparison between the maximum spread factor obtained from our LBM model and results from the literature [11-13]. The numerical results are well in agreement.

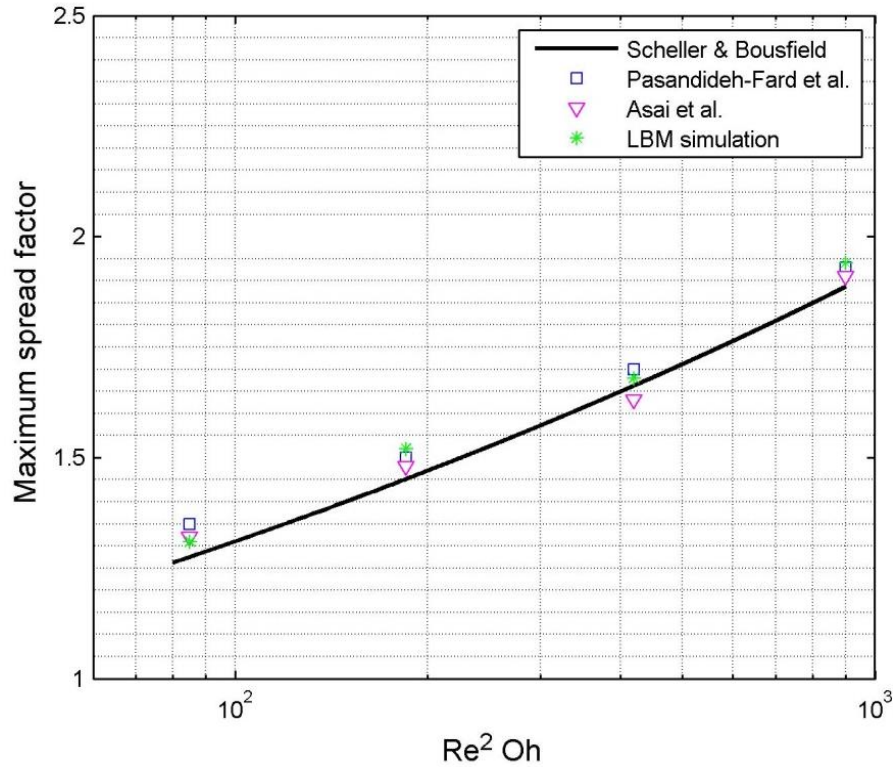


Figure 4.11: Comparison of maximum spread factor between our numerical results and prediction equation

The influence of the parameter  $\kappa$  on the dynamic impact of a droplet on a dry surface is analyzed by maintaining the Reynolds number and the contact angle at 148 and  $92^\circ$  respectively. Increasing the  $\kappa$  value decreases the surface tension and thus increases the Weber number. Using values of  $\kappa$  equal to 0, 0.5, 0.95, we obtain respectively Weber number of 32, 48 and 61. Figure 4.12 shows that the evolution of the impact process of the droplet is similar to the different values of  $\kappa$ . A maximum spread factor of 1.85, 1.89 and 1.92 was obtained respectively for  $\kappa$  equal to 0, 0.5, 0.95. Thus, the influence of  $\kappa$  and therefore the Weber number on the maximum spread factor is relatively weak. This result is consistent with the study of Ref [98]. In general, the increase in  $\kappa$  shows no significant increase of the spread factor in the case of the spread of the droplet on the wall. The reason is that the viscous force plays a major role in the flow. However, a significant decrease in the surface tension may change the impact regime and leads to the splashing of the droplet.

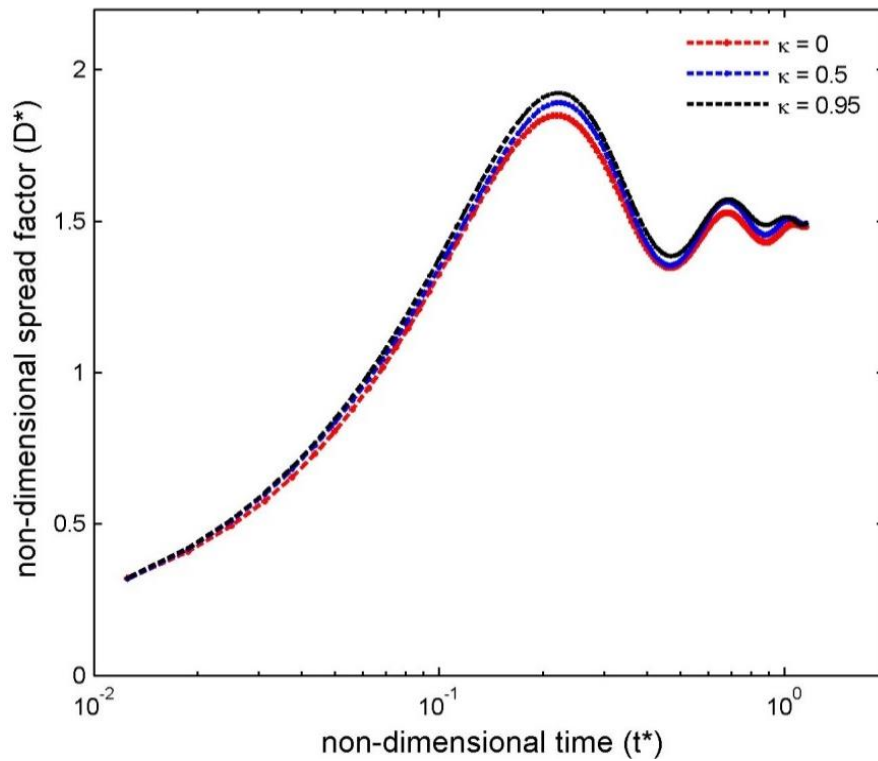


Figure 4.12: Evolution of the spread factor for different  $\kappa$  values

Finally, we analyze the effect of surface wettability on the spread factor. Figure 4.13 illustrates the spread factor time evolution for different surface wettability. Three types of surfaces are studied: hydrophilic, neutral, hydrophobic, with contact angles  $\theta_w = 61^\circ$ ,  $\theta_w = 90^\circ$ ,  $\theta_w = 103^\circ$  respectively. The three curves representing the spread factor are similar during the kinematics phase (before  $t^* = 0.1$ ), indicating that the wettability has a weak effect during this phase. However, during the spreading phase (after  $t^* = 0.1$ ), differences are more important, particularly in the maximum spread factor. With a hydrophilic surface, the largest spread factor is achieved with a maximum of 2.3. For the hydrophobic surface, the spread factor is the lowest with a maximum of 1.5. In addition, more intense oscillations are observed during the relaxation phase for a hydrophobic surface and the equilibrium is reached later. On the other hand, for a hydrophilic surface, equilibrium is achieved rapidly with little oscillations. In conclusion, the surface wettability influences the spread factor and also the time required to reach equilibrium.

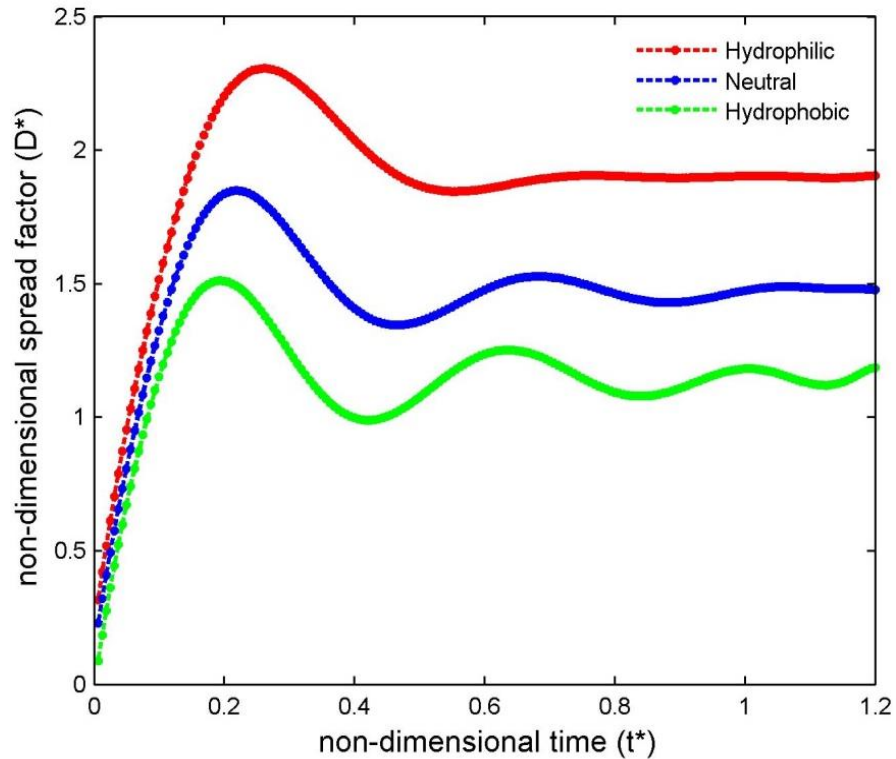


Figure 4.13: Influence of wettability on the spread factor

#### 4.4.7 Droplet impact on a wet surface

The problem of liquid droplet impacting a wet surface is encountered in many engineering applications, such as the ink-jet printer, or the spray injection in internal combustion engines [99, 100]. For the impact of a droplet on a wet surface, the Reynolds number  $Re$ , Weber number  $We$ , Ohnesorge number  $Oh$  are also important physical parameters.

Experimental tests [101, 102] have shown that two situations may arise in this problem: the droplet spreading in the liquid film or the splash of the droplet. The transition between the spreading and the splashing of the droplet depends on the normal speed, the diameter of the droplet, the surface tension, and the viscosity. Overall, studies [103, 104] show that a small liquid film thickness promotes the splashing while a thick liquid film delays its appearance and enhances the coalescence of the droplet with the liquid fluid layer. Several correlations [14, 103, 104] are present in the literature to determine the transition, but the most complete study is the work of Cossali et al. [14] who propose a correlation depending on the dimensionless thickness

of the liquid film  $\delta = h/D$ , where  $h$  is the thickness of the liquid layer and  $D$  the diameter of the droplet. This correlation is given by  $K' = We.Oh^{-0.4}$  with  $K'_{limit} = 2100 + 5880.\delta^{1.44}$ . For values of  $K'$  below  $K'_{limit}$  the spreading of the droplet occurs, while for higher values, the splashing forms. In addition, studies of Rioboo et al. [101] show that for values of  $K'$  between 100 and 1000, the spread of the droplet spread is observed.

In the present test case, the Reynolds number and the Weber number are set at 120 and 33 respectively. The dimensionless thickness  $\delta$  is set to 0.53, giving a value  $K' = 111$  which is less than  $K'_{limit} = 4478$ . Initially, a liquid droplet of radius  $r = 15$  lu was placed in the center of the domain, as illustrated in Fig. Figure 4.14.

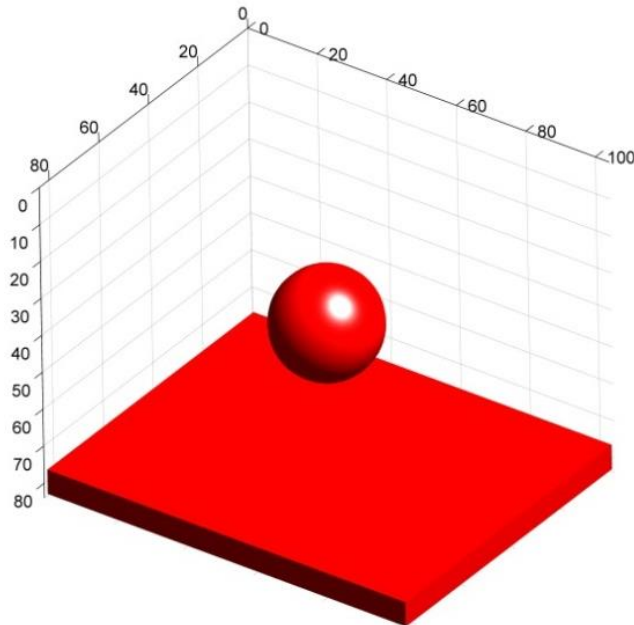


Figure 4.14: Simulation of the initial step

The 3D-MRT model is applied, and an  $84 * 84 * 104$  domain is used. The density ratio is  $\rho_l/\rho_g \approx 1000$  which corresponded to a reduced temperature  $T/T_c = 0.56$ . The gravity force is imposed. Periodical boundary conditions are defined on all sides of the domain and half bounce back conditions are defined on the top and bottom boundaries. The impact process of a droplet on a film liquid is shown in Fig. Figure 4.15. We observe the spreading droplet on the liquid film and the transverse wave's propagation on the surface. The transverse waves propagate in the radial

direction. After a considerable time, the droplet disappears and the final solution is a stationary fluid.

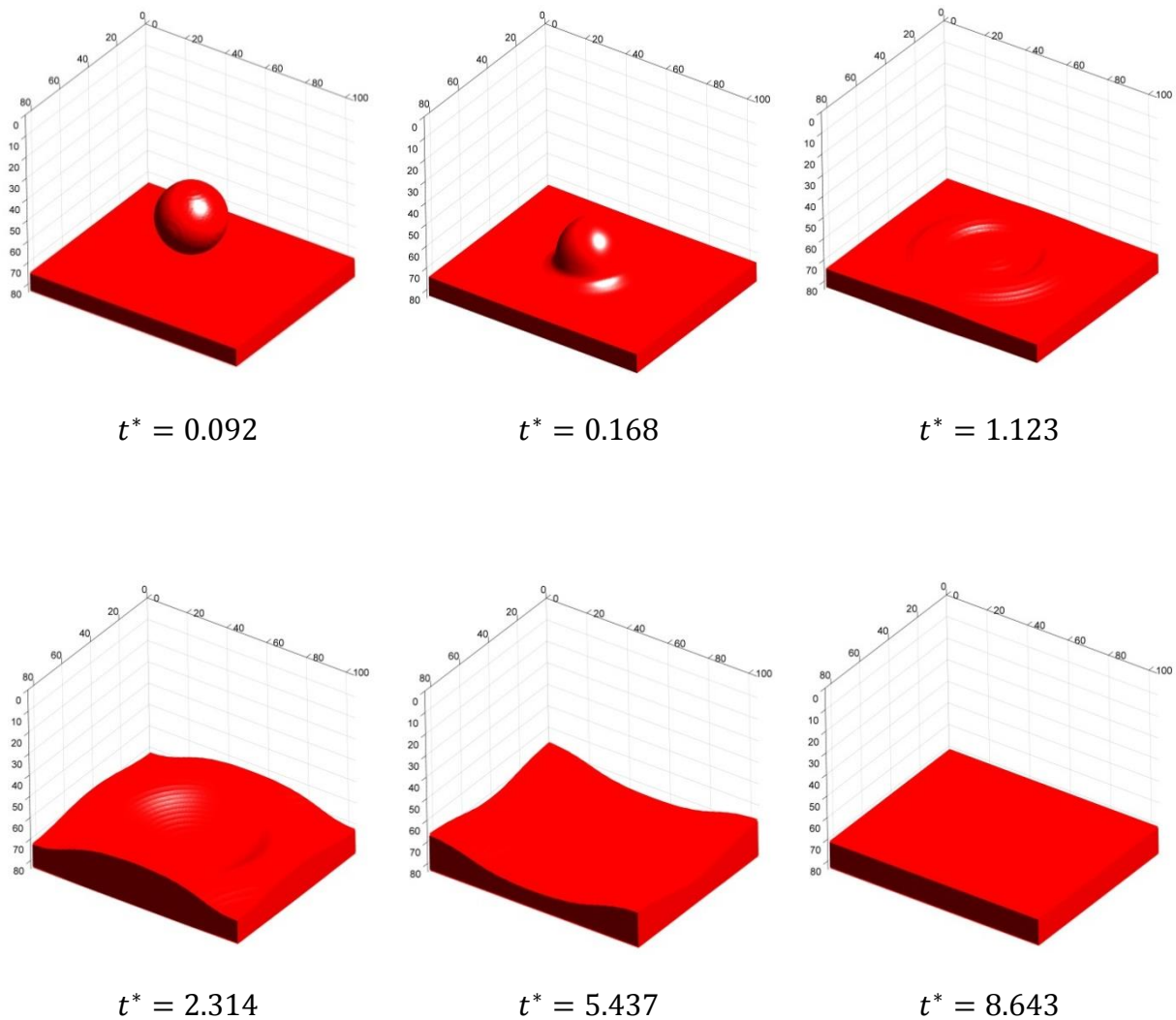


Figure 4.15: Evolution of the spread factor for different  $\kappa$  values

The influence of  $\kappa$  on the dynamic impact of a droplet on a wet surface is studied by measuring the dimensionless fluid height moved  $e = h_{max}/D$ .  $h_{max}$  is the maximum height of the liquid film moved and  $D$  the diameter of the droplet. The Reynolds number is set to 120. For  $\kappa$  values equal to 0, 0.5 and 0.95, the dimensionless height  $e$  obtained is respectively 1.4, 1.47 and 1.47. Between  $\kappa = 0$  and  $\kappa = 0.5$ , the increase of the maximum height of the liquid film is only 5%, but remains similar to the values of  $\kappa = 0.5$  and  $\kappa = 0.95$ . The influence of  $\kappa$  on the maximum height

of the fluid moved is relatively low. Capillary effects predominate on the inertia of the droplet and oppose fluid movement. However, as demonstrated by Ramirez et al. [49], the surface tension may play an important role in the case of the impact of a droplet with a splash. It has shown that the reduction in surface tension would lead to the increase of secondary droplets and a decrease in their diameter.

## 4.5 Conclusion

In the present study, we propose a new 3D-MRT multiphase LBM model with variable surface tension. An analysis of the spurious velocity for different isotropic order is made and showed the influence of isotropy orders when the MRT operator is used. It is demonstrated that an order of isotropy of 8 is sufficient to achieve acceptable accuracy. The 3D-MRT model is validated through Laplace's law and is able to simulate a high density ratio between two phases while maintaining thermodynamic consistency. In addition, the surface tension is adjustable without change to the density ratio. The oscillation dynamics of a deformed droplet are studied, and the numerical results are in agreement with the analytical solution. The relationship between the contact angle  $\theta_w$  and the parameter  $\rho_w$  is found to follow a linear trend. The model is used to simulate the droplet impact on a dry surface and is able to represent the four phases of the droplet impact process: kinematic, spreading, relaxation and equilibrium. It is shown that the kinematic phase is only a function of dimensionless time and not physical properties. The results of the simulation are in agreement with the experimental data of Rioboo et al. [98]. In addition, the influence of surface wettability on the maximum spread factor is identified. A hydrophilic surface led to a higher spread factor and equilibrium is reached more quickly. For a hydrophobic surface, the time to reach equilibrium is longer. Finally, the model is applied to the simulation of the droplet impact on a wetted surface and we observe the transverse wave's propagation on the surface.

## Acknowledgements

This work was supported by Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC), under grant number RGPIN-2016-06427.



## **CHAPITRE 5 ARTICLE 2: A MULTI-COMPONENT THREE-DIMENSIONAL MULTI-RELAXATION TIME (MRT) LATTICE BOLTZMANN MODEL AT HIGH DENSITY AND VISCOSITY RATIOS**

Sami Ammar, Guillaume Pernaudat, and Jean-Yves Trépanier, Manuscript accepted in Special Issue for ICMMES-2016 for publication in *Computers & Fluids* (January 2017).

### **5.1 Abstract**

The coupling between the surface tension and the density ratio remains a weakness of the original pseudo-potential model based lattice Boltzmann method (LBM). In this work, we propose an improved three-dimensional multi-relaxation time (MRT) model for multi-components multiphase flows at large density and viscosity ratios which preserves the thermodynamic consistency. The improved model offers the possibility of adjusting the surface tension and the viscosity independently of the density ratio. The independence between the properties is then ensured. An isotropy order of 8 is used for the calculation of the interaction force to reduce spurious currents. The proposed model is validated by verifying Laplace's law, two fluids Poiseuille flow and the oscillation dynamics of a deformed droplet. Finally, the influence of the viscosity and the surface tension is investigated on a falling droplet under the buoyancy forces effect. The numerical Reynolds number and the numerical drag coefficient are in agreement with empirical correlations.

Keywords: Multicomponent, MRT Lattice Boltzmann, Three-dimension, Adjustable surface tension, Large density ratios, Large viscosity ratios

### **5.2 Introduction**

Numerical simulation of multi-components multiphase flows has emerged in recent years but challenges remain because of the difficulty to follow the fluid interfaces, to respect the conservation of mass and to treat the surface tension.

Traditionally, CFD methods for capturing or tracking interfaces are applied to simulate multi-components multiphase flows. The front-capturing methods, like Volume of Fluid (VOF) [24] and level-set method [105], track the movement of the flow and then capture the interface. The

exact position of the interface is then built numerically. The front-tracking methods, like boundary-fitted grid method [106] and Boundary Element Method (BEM) [107], track directly the position of the interface between the different phases.

However, in recent decades, the lattice Boltzmann method has been developed and appears as a promising approach to simulate multi-components multiphase flows [3, 39, 44]. The success of multi-components multiphase simulations based on the lattice Boltzmann method is mainly due to its kinetic nature allowing for the simulation of a dynamic interface at the macroscopic scale. Compared to traditional CFD methods, it can easily incorporate the microscopic interactions without capturing or monitoring the interface between components and phases. The multi-components multiphase models based on the lattice Boltzmann method are organized into the following categories: the color-gradient model, the pseudo-potential model, the free energy model and the mean-field model.

Due to its simplicity and versatility, the pseudo-potential model, proposed by Shan- Chen [3, 81], is the most popular, despite some drawbacks. These latter include the thermodynamic inconsistency, the limited density and viscosity ratio ( $O(10)$ ), the dependence between the properties (for example the density ratio and the surface tension coupling), and the spurious currents at the interface. Improvements have been proposed to resolve some of these limitations. The increase of the isotropy order in the interaction force allows to reduce the intensity of spurious currents at the interface [57], and the incorporation of realistic equations of state (EOS) allows to simulate density ratios of order  $O(1000)$  [55]. Methods to incorporate the interaction force into the pseudo-potential model were developed to improve the numeric stability [83, 108]. To reduce the thermodynamic inconsistency, Kupershtok et al. [59] proposed to combine the local approximation and the mean-value approximation for the calculation of the interaction force. Sbragaglia [57] developed the multirange model to adjust the surface tension independently of the density ratio. The approach consists to add a second term to the interaction force where two parameters are set to adjust the surface tension and the density ratio independently. However, Li et.al [58] showed through a theoretical and numerical analysis that the thermodynamic consistency is violated in the multirange model, since the mechanical stability condition depends on these two parameters. They proposed to modify the pressure tensor by adding an additional term to the MRT lattice Boltzmann equation. The additional term is a

function of a parameter allowing for variation of the surface tension in the case of a single component multiphase problem.

Concerning the multi-component multiphase models, the literature shows that most of the simulated problems are limited to viscosity ratios of 1 [109] or fewer than 16 [61, 110, 111]. Porter et al. [61] then proposed a multi-component model where the viscosity and density ratios are adjusted independently and allows simulating a wide range of kinematic viscosity ratios. External forces are introduced into the MRT lattice Boltzmann equation for each component rather than through the equilibrium velocity and a new equilibrium velocity was defined to conserve the momentum [61]. However, the proposed multi-component model does not permit to adjust the surface tension independently of density ratio.

In this present work, we propose an improved multi-component three-dimensional model capable of large density and viscosity ratio simulations, while maintaining the independence between the properties and preserving the thermodynamic consistency. From Porter's model [61], we propose to modify the pressure tensor to decouple the surface tension and the density ratio, in a method similar to Li et al. [58] but in the context of multi-components problems. The Peng-Robinson EOS is used to simulate high density ratios ( $O(1000)$ ) and the isotropy order is increased to reduce the spurious currents. Finally, the interaction force between the particles of the same fluid is calculated by combining the local approximation and the mean-value approximation to preserve the thermodynamic consistency.

The paper is organized as follows. Section 2 describes our numerical 3D-MRT multi-component multiphase model. The methods applied in order to increase the density and viscosity ratio, to decrease the spurious currents, to ensure the thermodynamic consistency and to ensure the independence of the properties are presented in this section. In Section 3, applications and results of our new 3D-MRT are presented and validated. Finally, Section 4 presents some conclusions.

## 5.3 Numerical model

### 5.3.1 3D multiple relaxation-time LBM model

We based our model on the explicit forcing (EF) model [61] with the MRT collision operator. The MRT collision operator is used because of its improved stability compared to the BGK collision operator [86]. In the original pseudo-potential model, the momentum correction due to external forces is incorporated in the equilibrium velocity. But, in the EF model, the force term is directly introduced into the lattice Boltzmann equation for each component [61]. The lattice Boltzmann equation is:

$$f_{\alpha}^{\sigma}(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) - f_{\alpha}^{\sigma}(\vec{x}, t) = \Omega_{\alpha}^{\sigma} + \frac{\delta_t}{2} (F_{\alpha}^{\sigma}(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) + F_{\alpha}^{\sigma}(\vec{x}, t)) \quad (5.1)$$

where  $f_{\alpha}^{\sigma}$  is the distribution function along the  $\alpha^{\text{th}}$  direction at a node  $\mathbf{x}$  and time  $t$ ,  $\vec{e}_{\alpha}$  is the discrete velocity in the  $\alpha^{\text{th}}$  direction,  $\delta_t$  is the time step,  $F_{\alpha}^{\sigma}$  represents the discret forcing term defined by:

$$F_{\alpha}^{\sigma} = \frac{\mathbf{EF}^{\sigma}(\mathbf{e}_{\alpha} - \mathbf{u}^{\sigma,eq})}{\rho_{\sigma}c_s^2} f_{\alpha}^{\sigma,eq} \quad (5.2)$$

Where  $\mathbf{EF}^{\sigma}$  is the external force total, given by:

$$\mathbf{EF}^{\sigma} = \mathbf{F}_{\sigma\sigma} + \mathbf{F}_{\sigma\bar{\sigma}} + \mathbf{F}_{\sigma,s} + \mathbf{F}_{\sigma,g} \quad (5.3)$$

Where  $\mathbf{F}_{\sigma\sigma}$ ,  $\mathbf{F}_{\sigma\bar{\sigma}}$ ,  $\mathbf{F}_{\sigma,s}$  and  $\mathbf{F}_{\sigma,g}$  are the interaction force between molecules of the same component, the interaction force between the molecules of different components, the fluid-solid force and the gravity force respectively. Unlike the original pseudo-potential model, the equilibrium velocity  $\mathbf{u}^{\sigma,eq}$  is calculated as follows [61]:

$$\mathbf{u}^{\sigma,eq} = \sum_{\sigma} s_c^{\sigma} \rho^{\sigma} \mathbf{u}^{\sigma} / \sum_{\sigma} s_c \rho^{\sigma} \quad (5.4)$$

The relaxation parameter  $s_c^{\sigma}$  corresponds to the conserved moments (density and momentum) and should be nonzero. The density  $\rho^{\sigma}$  and the velocity  $\mathbf{u}^{\sigma}$  of  $\sigma^{\text{th}}$  component are calculated as follows:

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{\sigma} \quad \rho^{\sigma} \mathbf{u}^{\sigma} = \sum_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} f_{\alpha}^{\sigma} + \frac{F^{\sigma}}{2} \quad (5.5)$$

The MRT collision operator  $\Omega_{\alpha}^{\sigma}$  is defined as follows [87]:

$$\Omega_{\alpha}^{\sigma} = -(M^{-1} \Lambda^{\sigma} M)_{\alpha\beta} (f_{\alpha}^{\sigma}(\vec{x}, t) - f_{\alpha}^{\sigma, eq}(\vec{x}, t)) \quad (5.6)$$

Where  $M^{-1} \Lambda^{\sigma} M$  is the collision matrix and the equilibrium distribution function  $f_{\alpha}^{\sigma, eq}$ :

$$f_{\alpha}^{\sigma, eq} = \rho_{\sigma} w_{\alpha} \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}_{\sigma}^{eq}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}_{\sigma}^{eq})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}_{\sigma}^{eq} \cdot \mathbf{u}_{\sigma}^{eq}}{2c_s^2} \right] \quad (5.7)$$

where  $w_{\alpha}$  is the weighting factor. In the present study, the D3Q19 lattice is used for the 3D simulations. The discrete velocity and the weighting factor for the D3Q19 lattice are:

$$[\mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_4, \mathbf{e}_5, \mathbf{e}_6, \mathbf{e}_7, \mathbf{e}_8, \mathbf{e}_9, \mathbf{e}_{10}, \mathbf{e}_{11}, \mathbf{e}_{12}, \mathbf{e}_{13}, \mathbf{e}_{14}, \mathbf{e}_{15}, \mathbf{e}_{16}, \mathbf{e}_{17}, \mathbf{e}_{18}] \\ = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

and

$$w_{\alpha} = \begin{cases} 1/3, & \alpha = 0; \\ 1/18, & \alpha = 1, 2, \dots, 6; \\ 1/36, & \alpha = 7, 8, \dots, 18; \end{cases} \quad (5.9)$$

And the transformation matrix  $M$  is defined as [86]:

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -30 & -11 & -11 & -11 & -11 & -11 & -11 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 \\ 12 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -4 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 4 & 0 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 4 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & -1 & -1 & 2 & -1 & -1 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 \\ 0 & -4 & 2 & 2 & -4 & 2 & 2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 2 & 0 & -2 & 2 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

And the diagonal matrix  $\Lambda^\sigma$  of relaxation parameters for a component  $\sigma$  is given by:

$$\Lambda^\sigma = \text{diag}(s_1^\sigma, s_2^\sigma, s_3^\sigma, s_4^\sigma, s_5^\sigma, s_6^\sigma, s_7^\sigma, s_8^\sigma, s_9^\sigma, s_{10}^\sigma, s_{11}^\sigma, s_{12}^\sigma, s_{13}^\sigma, s_{14}^\sigma, s_{15}^\sigma, s_{16}^\sigma, s_{17}^\sigma, s_{18}^\sigma, s_{19}^\sigma) \quad (5.11)$$

$s_1, s_4, s_6$  and  $s_8$  correspond to the relaxation parameters associated with conserved moments  $\rho, j_x, j_y, j_z$  respectively and therefore, the value of these parameters does not matter. The relaxation parameter  $s_2$  is related to the bulk viscosity and the relaxation parameters  $s_{10}, s_{12}, s_{14}, s_{15}$  and  $s_{16}$  are related to the viscosity.  $s_{11}, s_{13}, s_{17}, s_{18}$  and  $s_{19}$  are free parameters.

The bulk viscosity  $\xi^\sigma$  and the kinematic viscosity  $\nu^\sigma$  in the MRT model for a component  $\sigma$  are given by:

$$\xi^\sigma = \frac{2}{9} \left( \frac{1}{s_2^\sigma} - \frac{1}{2} \right) \quad (5.12)$$

And

$$\nu^\sigma = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{s_\beta^\sigma} - \frac{1}{2} \right), \beta = 10, 12, 14, 15, 16 \quad (5.13)$$

Using the MRT collision operator, the distribution function  $f^\sigma$  and the  $f^{\sigma, \text{eq}}$  equilibrium distribution function are transferred in moments space after the multiplication by the transformation matrix  $M$ , as follows  $\mathbf{m}^\sigma = Mf^\sigma$  and  $\mathbf{m}^{\sigma, \text{eq}} = Mf^{\sigma, \text{eq}}$ . Therefore, the lattice Boltzmann equation in moment space (Eq. 13) can be written as:

$$\mathbf{m}^{\sigma*} = \mathbf{m}^{\sigma} - \Lambda^{\sigma}(\mathbf{m}^{\sigma} - \mathbf{m}^{\sigma,eq}) + \left( \mathbf{I} - \frac{\Lambda^{\sigma}}{2} \right) \mathbf{F}^{\sigma} \quad (5.14)$$

Where  $\mathbf{I}$  is the unit tensor, and  $\mathbf{m}^{eq}$  the equilibrium moments such as:

$$\mathbf{m}^{\sigma,eq} = \begin{bmatrix} -11\rho + 19 \frac{\rho}{j_x^2 + j_y^2 + j_z^2} \\ 3\rho - \frac{11j_x^2 + j_y^2 + j_z^2}{2} \frac{\rho}{\rho} \\ \frac{j_x}{2} \\ -\frac{2}{3}j_x \\ \frac{j_y}{2} \\ -\frac{2}{3}j_y \\ \frac{j_z}{2} \\ -\frac{2}{3}j_z \\ \frac{2j_x^2 - (j_y^2 + j_z^2)}{\rho} \\ -\frac{1}{2} \frac{12j_x^2 - (j_y^2 + j_z^2)}{\rho} \\ \frac{j_y^2 - j_z^2}{\rho} \\ \frac{j_x j_y}{\rho} \\ \frac{j_y j_z}{\rho} \\ \frac{j_x j_z}{\rho} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

Where  $j_x = \rho u_x$ ,  $j_y = \rho u_y$ ,  $j_z = \rho u_z$  are the momentum for a component  $\sigma$  in x, y, and z directions respectively.

The total density and velocity of the fluid mixture are:

$$\rho = \sum_{\sigma} \sum_i f_i^{\sigma} \quad , \quad \mathbf{u} = \sum_{\sigma} \rho^{\sigma} \mathbf{u}^{\sigma} / \sum_{\sigma} \rho^{\sigma} \quad (5.16)$$

### 5.3.2 The pseudo- potential model

The original model for multiphase multi-component was developed by Shan-Chen [3, 81]. An approach by potential interaction between particles is introduced. The potential for local interaction involves an effective mass and a coefficient controlling the strength of the potential. In the multi-component case, the interaction force is composed of two parts. The first  $F_{\sigma\sigma}$  represents the interaction between particles of the same component and the second interaction  $F_{\sigma\bar{\sigma}}$  between the particles of different components. The two continuous expressions of these two forces are [3]:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\sigma\sigma} &= -G_{\sigma\sigma} c_s^2 \psi^{\sigma}(\mathbf{x}) \nabla \psi^{\sigma}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{F}_{\sigma\bar{\sigma}} &= -G_{\sigma\bar{\sigma}} c_s^2 \psi^{\bar{\sigma}}(\mathbf{x}) \nabla \psi^{\sigma}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (5.17)$$

The discrete gradient calculation is performed using neighbors of the nodes. In the original model, the gradient is calculated with a small sum on nearest and next nearest neighbors. The interaction force then has an isotropy order of 4. Each neighbor has a contribution which is weighted by a coefficient  $w(\|\mathbf{e}_{\alpha}\|^2)$  according to the standard of the discrete velocity. Discrete expressions of these forces are:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\sigma\sigma} &= -G_{\sigma\sigma} c_s^2 \psi^{\sigma}(\mathbf{x}) \sum_i w(\|\mathbf{e}_{\alpha}\|^2) \psi^{\sigma}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha}) \mathbf{e}_{\alpha} \\ \mathbf{F}_{\sigma\bar{\sigma}} &= -G_{\sigma\bar{\sigma}} c_s^2 \psi^{\bar{\sigma}}(\mathbf{x}) \sum_i w(\|\mathbf{e}_{\alpha}\|^2) \psi^{\sigma}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha}) \mathbf{e}_{\alpha} \end{aligned} \quad (5.18)$$



The  $G$  coefficient represents the intensity of interaction between the particles. When  $G < 0$ , an attractive force between particles is represented and when  $G > 0$ , a repulsive force.  $\psi(x)$  is the effective mass which is a function of the local density. Sbragaglia et al. [57] proposed to reduce the spurious currents at the interface by increasing the isotropic order in the interaction force. In this work, we used the isotropy order of 8 for both the original pseudo-potential model and our model.

If the problem involves the contact of a fluid component with a solid surface, the surface of the fluid interaction force must be taken into account. The expression is as follows:

$$\mathbf{F}_w^\sigma(\mathbf{x}) = -G_w^\sigma \psi(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^N w(|\mathbf{e}_\alpha|^2) \rho_w s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha) \mathbf{e}_\alpha \quad (5.19)$$

Where  $s$  is a function which is equal to 1 for solid nodes and 0 for fluid nodes. By setting  $G_w^\sigma$  and the fictive density  $\rho_w$ , we can obtain different contact angles  $\rho_w$ . The force of gravity is expressed as follows:

$$\mathbf{F}_g = \rho^\sigma \mathbf{g} \quad (5.20)$$

### 5.3.3 Incorporation of a realistic state equation

Yuan and Schaefer [55] proposed to introduce a realistic state equation to increase the density ratio. Different equations of state (EOS) were analyzed: the Van der Waals EOS, Redlich-Kwong, Peng-Robinson and Carnahan-Starling. The Peng-Robinson equation of state is based on three parameters: the critical temperature  $T_c$ , the critical pressure  $p_c$  and the acentric factor  $\omega$ . The parameter  $\omega$  gives some flexibility in the simulation of different fluids [112]. In addition, it has been shown that this equation of state allows a significant reduction in spurious currents flow for a single component [55]. Therefore, the Peng-Robinson equation of state is used in this work for the multi-component multiphase flow simulation. The pressure of each component  $p_\sigma$  is calculated as follows:

$$p_\sigma = \frac{\rho_\sigma R_\sigma T_\sigma}{1 - b_\sigma \rho_\sigma} - \frac{a_\sigma \alpha(T_\sigma) \rho_\sigma^2}{(1 + 2b_\sigma \rho_\sigma - b_\sigma^2 \rho_\sigma^2)} \quad (5.21)$$

Here  $\alpha(T_\sigma)$  is given by:

$$\alpha(T_\sigma) = \left[ 1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2) \left( 1 - \sqrt{\frac{T_\sigma}{T_c}} \right) \right]^2 \quad (5.22)$$

And R the specific gas constant,  $T_c$  the critical temperature,  $p_\sigma$  the pressure of component  $\sigma$ , and  $\rho_\sigma$  the density of component  $\sigma$ . The factors a and b are expressed as follows:

$$a = \frac{0.45724R^2T_c^2}{p_c} \quad (5.23)$$

$$b = \frac{0.0778RT_c}{p_c}$$

The parameters of the equation are set at  $a = 2/49$ ,  $b = 2/21$  and  $R = 1$  as in Ref [55].

The incorporation of the equation of state in the pseudo-potential model is made from the effective mass  $\psi_\sigma$  as follows:

$$\psi_\sigma(x) = \sqrt{\frac{2(p_\sigma - \rho c_s^2)}{G_{\sigma\sigma} c_s^2}} \quad (5.24)$$

### 5.3.4 Thermodynamic inconsistency

To reduce the thermodynamic inconsistency, Kupershtokh et.al [59] offer to combine the local approximation and the mean-value approximation for the calculation of the interaction force between molecules of the same component. This new expression of the interaction force can give the equilibrium densities consistent with those given by the Maxwell construction. The improved version of the interaction force is used for the intern interaction force  $F_{\sigma\sigma}$  :

$$F_{\sigma\sigma} = -\beta G_{\sigma\sigma} c_s^2 \psi_\sigma(x) \sum_\alpha \psi^\sigma(x + e_\alpha) e_\alpha - \frac{(1 - \beta)}{2} G_{\sigma\sigma} c_s^2 \sum_\alpha \psi^{\sigma^2}(x + e_\alpha) e_\alpha \quad (5.25)$$

This new equation also allows the reduction of spurious currents. The isotropy order of 8 is used in the calculation of the interaction force. The  $\beta$  coefficient is adjusted to reduce the thermodynamic inconsistency. With the Peng-Robinson equation of state, the  $\beta$  value was set at 1.16. This  $\beta$  value depends on the used state equation.

### 5.3.5 Adjustment of the surface tension in the multi-component model

To our knowledge, no 3D multi-component model is able to adjust the surface tension without changing the density ratio. However, in the case of a multiphase model, Li et al. [58] proposed a method to adjust the surface tension by modifying the pressure tensor by adding a C source term in the MRT lattice Boltzmann equation. This approach allows decoupling the surface tension and the density distribution while respecting the thermodynamic consistency. Based on this method, we propose to change the pressure tensor in the case of a multi-component model to adjust the surface tension independently of density ratio. In the case of two components, the assembly of macroscopic equations consists of a continuity equation for each component and an equation of a motion for the total fluid momentum. These equations are given by:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (5.26)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla \cdot \mathbf{P} + \nabla \cdot (\mu(\tau) \nabla \mathbf{u} + \mu(\tau) \nabla \mathbf{u}^T) \quad (5.27)$$

Where  $\mathbf{u}$  is the total velocity of the fluid and  $\mathbf{P}$  is the pressure tensor. The kinematic viscosity is  $\nu(\tau) = c_s^2(\tau - 1/2)$  and therefore the dynamic viscosity is  $\mu(\tau) = \rho\nu(\tau)$ . The pressure tensor in the momentum equation is:

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = c_s^2 \left[ (\rho_\sigma + \rho_{\bar{\sigma}}) + G_{\sigma\bar{\sigma}} \psi^\sigma \psi^{\bar{\sigma}} + c_s^2 \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}}}{2} \psi^\sigma \Delta \psi^{\bar{\sigma}} + c_s^2 \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}}}{2} \psi^{\bar{\sigma}} \Delta \psi^\sigma \right] I \\ - c_s^4 G_{\sigma\bar{\sigma}} \nabla \psi^\sigma \nabla \psi^{\bar{\sigma}} \end{aligned} \quad (5.28)$$

By applying the method of modifying the pressure tensor, a  $C^\sigma$  source term is added to the MRT lattice Boltzmann equation:

$$\mathbf{m}^{\sigma*} = \mathbf{m}^\sigma - \Lambda^\sigma(\mathbf{m}^\sigma - \mathbf{m}^{\sigma,eq}) + \left(\mathbf{I} - \frac{\Lambda^\sigma}{2}\right)\mathbf{F}^\sigma + \mathbf{C}^\sigma \quad (5.29)$$

Where the source term  $\mathbf{C}^\sigma$  is given by:

$$\mathbf{C}^\sigma = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{2}{5}s_v(Q_{xx}^\sigma + Q_{yy}^\sigma + Q_{zz}^\sigma) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -s_v(2Q_{xx}^\sigma - Q_{yy}^\sigma - Q_{zz}^\sigma) \\ 0 \\ -s_v(Q_{yy}^\sigma - Q_{zz}^\sigma) \\ 0 \\ -s_vQ_{xy}^\sigma \\ -s_vQ_{yz}^\sigma \\ -s_vQ_{xz}^\sigma \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.30)$$

The terms  $Q_{xx}^\sigma, Q_{yy}^\sigma, Q_{zz}^\sigma, Q_{xy}^\sigma, Q_{xz}^\sigma$  and  $Q_{yz}^\sigma$  are calculated from the following equation:

$$\mathbf{Q}^\sigma = \kappa \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}}}{2} \psi^\sigma(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^{18} w(|\mathbf{e}_\alpha|^2) [\psi^{\bar{\sigma}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha) - \psi^{\bar{\sigma}}(\mathbf{x})] \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \quad (5.31)$$

From an analysis of Chapman Enskog, an additional term appears in the macroscopic equations:

$$NS_{new} = NS_{original} - \nabla \left[ \kappa \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}} c_s^4}{6} \left( (\psi^\sigma \Delta \psi^{\bar{\sigma}} + \psi^{\bar{\sigma}} \Delta \psi^\sigma) \mathbf{I} - \nabla \psi^\sigma \nabla \psi^{\bar{\sigma}} \right) \right] \quad (5.32)$$

The discrete form of the new tensor pressure will be given by:

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = c_s^2 \left[ (\rho_\sigma + \rho_{\bar{\sigma}}) + G_{\sigma\bar{\sigma}}\psi^\sigma\psi^{\bar{\sigma}} + \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}}c_s^2}{6}(3 + \kappa)(\psi^\sigma\Delta\psi^{\bar{\sigma}} + \psi^{\bar{\sigma}}\Delta\psi^\sigma) \right] I \\ + \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}}c_s^4}{6}(1 - \kappa)\nabla\psi^\sigma\nabla\psi^{\bar{\sigma}} \end{aligned} \quad (5.33)$$

When  $\kappa = 0$ , the original form of pressure tensor of multi-component model is retrieved. Moreover, one can observe that the surface tension decreases when  $\kappa$  increases in the value range from 0 to 1.

## 5.4 Applications and Results

In this section, we present the results of applying the 3D-MRT model for various test cases. The model is then evaluated by the verification of the thermodynamic consistency, a validation of Laplace's law, a validation of two fluids Poiseuille flow for large viscosity and density ratios. The dynamic oscillation dynamics of a deformed droplet is investigated by analyzing the influence of viscosity ratios and the surface tension. Finally, we interested the dynamics of a falling droplet under gravity and buoyancy force effects.

### 5.4.1 Analysis of thermodynamic consistency

The thermodynamic consistency is validated through a series of simulation on a droplet at different temperatures  $T$  as in Ref [95]. In each simulation, a droplet of radius  $r = 15$  lu is placed at the center of the computational domain. Periodic conditions are imposed in all directions. We propose to simulate liquid water and steam water which corresponds to an accentric factor of  $\omega = 0.3443$ . The parameter surface tension  $\kappa$  in Eq. (5.31) is set as  $\kappa = 0$ . Figure 5.1 compares the numerical coexistence curve, the coexistence curve obtained by the Maxwell construction and the coexistence curve from experimental data. A slight deviation of the experimental data can be observed compared to the numerical equilibrium densities and those obtained by the Maxwell construction. However, the numerical results are good in agreement with the coexistence curve obtained by the construction of Maxwell for  $\beta = 1.16$ . In this way, the ability of the model to simulate high density ratios while preserving the thermodynamic consistency is verified.

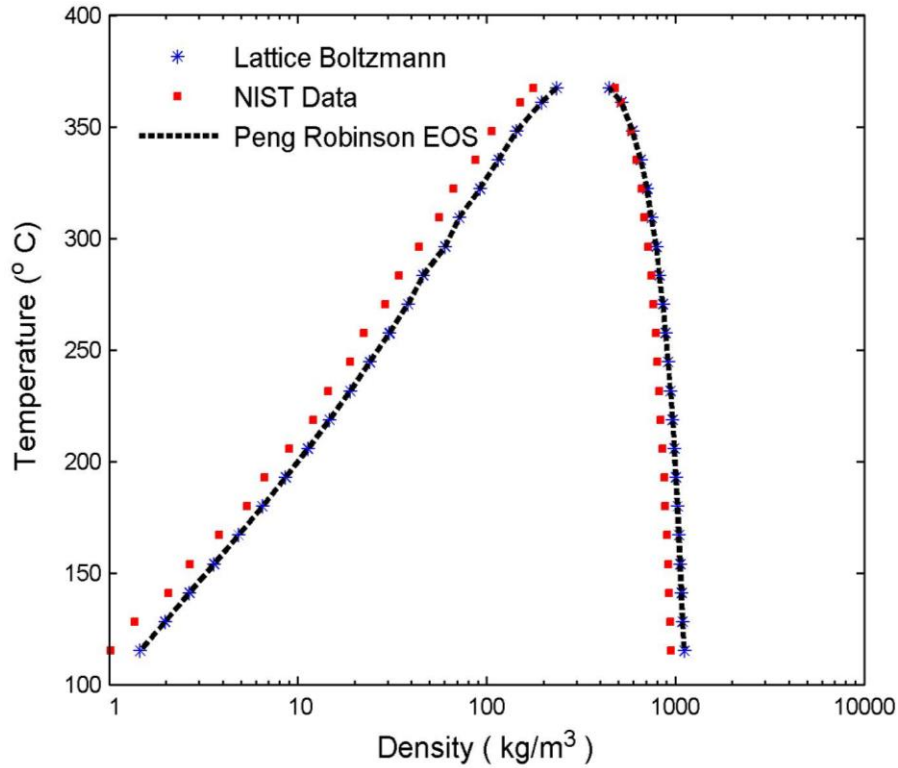


Figure 5.1: Comparison between the numerical coexistence curve, the coexistence curve given by the Maxwell construction and the coexistence curve given by the NIST table

### 5.4.2 Laplace's law

We propose to validate the Laplace law by calculating the pressure difference between the inside and outside of a static droplet. Laplace's law in the three-dimensional case can be written:

$$\Delta p = p_{in} - p_{out} = \frac{2\sigma}{R} \quad (5.34)$$

Where  $\sigma$  is the surface tension,  $R$  the radius of the droplet,  $p_{in}$  and  $p_{out}$  are the pressure inside and outside of the droplet respectively. To verify Laplace's law, a series of simulation is performed by changing the radius of the droplet at different temperatures. Initially, a liquid droplet is placed at the center of the computational domain of  $64*64*64$  lattice units. Periodic conditions are applied in all directions. The parameter surface tension  $\kappa$  is set as  $\kappa = 0$ . When equilibrium is reached the pressure difference between the inside and the outside is measured.

The values of equilibrium densities and pressure are then converted into physical units. To do this, we use the concept of reduced properties:

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad \rho_r = \frac{\rho}{\rho_c} \quad p_r = \frac{p}{p_c} \quad (5.35)$$

Where the indices  $r$  and  $c$  represent the reduced and critical properties. The reduced properties should be equal regardless to the unit system used. We deduce that:

$$\rho^{real} = \frac{\rho^{lu}}{\rho_c^{lu}} \rho_c^{real} \quad p^{real} = \frac{p^{lu}}{p_c^{lu}} p_c^{real} \quad T^{real} = \frac{T^{lu}}{T_c^{lu}} T_c^{real} \quad (5.36)$$

Where *real* and *lu* indices represent the properties respectively in real physical units and lattice units.

Figure 5.2 shows the pressure difference at various temperatures with  $10 < R < 30$ . The markers correspond to numerical results and the solid line of linear fit associates. According to Laplace's law, the pressure difference varies linearly with the pressure and the slope of the line gives the surface tension. At different temperatures  $T = 115 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $180 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $205 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $245 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $335 \text{ }^\circ\text{C}$ , the slopes are respectively 49.99, 37.93, 32.94, 24.73, 5.81 and coefficients of determination 0.9995, 0.9987, 0.9994, 0.9994, 0.9998. The results are in good agreement with the linear fit.

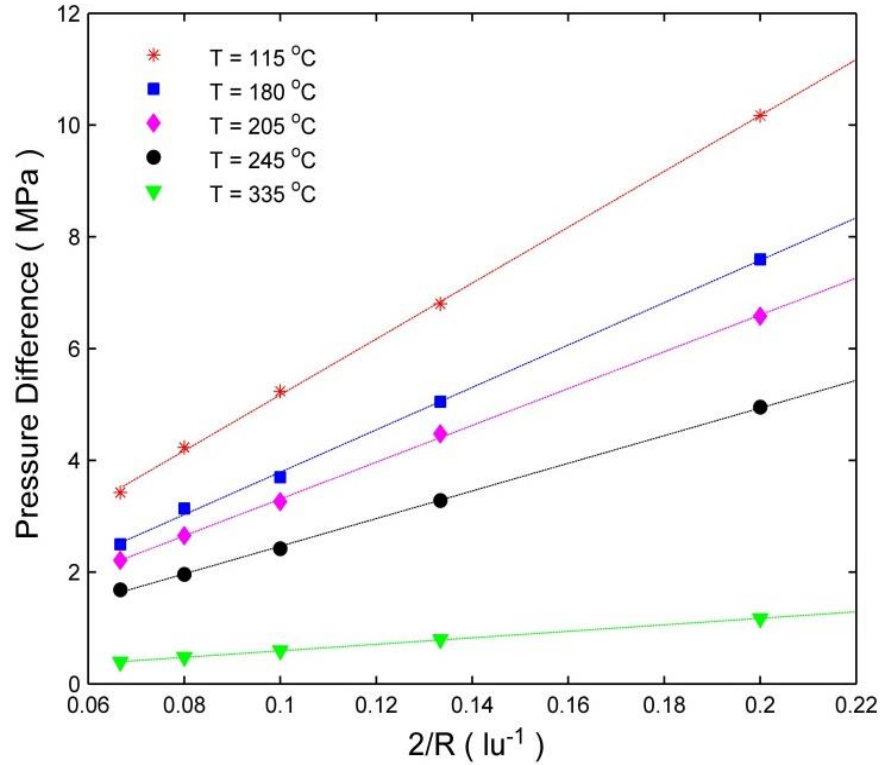


Figure 5.2: Verification of Laplace's law at different temperatures

We propose to compare the surface tensions obtained numerically with surface tension obtained from the NIST data [113]. To convert, the surface tension from MPa.lu to Pa.m, we introduce a scaling factor SF as in Ref [69]:

$$\sigma_{num}(MPa \cdot lu) = f \sigma_{exp}(Pa \cdot m) \quad (5.37)$$

Applying a scaling factor FS= 900, the numerical surface tension in the physical units are in accordance with the surface tensions from the NIST table. Table 1 compares values of numerical and experimental surface tensions. The maximum error is of the order of 1%. The numerical results are therefore acceptable.



Table 5.1: Comparaison des tensions de surface numériques et expérimentales à différentes températures

T (°C)	$\sigma_{\text{num}} * 10^{-3}$ N/m	$\sigma_{\text{exp}} * 10^{-3}$ N/m	$\Delta\sigma/\sigma$ %
115	55.65	55.97	0.57
180	41.87	42.19	0.76
205	36.5	36.55	0.14
245	27.48	27.24	0.88
335	6.54	6.61	1.05

### 5.4.3 Poiseuille flow

The two fluids Poiseuille flow between two parallel plates is used to validate our model for high density and kinematic viscosity ratios. We simulate two immiscible fluids moving in the x direction under the effect of a pressure gradient G. The two plates are located at the position  $y = -1$  to  $y = 1$ . The continuity of the velocity and viscous constraints are satisfied at the interface. From the Navier Stokes equations, an analytical solution in continuous operation is obtained and depends for different dynamic viscosity ratios as:

$$u(y) = \begin{cases} \frac{G}{2\mu_2} \left( y^2 - \frac{\mu_1 - \mu_2}{\mu_1 + \mu_2} y - \frac{2\mu_2}{\mu_1 + \mu_2} \right), & y \geq 0 \\ \frac{G}{2\mu_1} \left( y^2 - \frac{\mu_1 - \mu_2}{\mu_1 + \mu_2} y - \frac{2\mu_1}{\mu_1 + \mu_2} \right), & y < 0 \end{cases} \quad (5.38)$$

$\mu_1$  and  $\mu_2$  being the dynamic viscosities of the fluids 1 and 2 respectively. The velocity profile depends also on the dynamic viscosity ratio  $M = \frac{\mu_2}{\mu_1} = \frac{\nu_2 \rho_2}{\nu_1 \rho_1}$ . At walls, bounce-back boundaries conditions were imposed and periodic boundary conditions in the x and z were applied. In the x and z, a number of 16 nodes was used and an N number of nodes in the y direction. The density ratio is set to 405, corresponding to a reduced temperature of 0.64. The velocity profile will be normalized with the maximum velocity.

Figure 5.3 shows a comparison of the velocity profile between the original pseudo-potential model and our model for a kinematic viscosity ratio of 10. The dynamic viscosity ratio  $M$  is 40.5190. A number of nodes  $N = 64$  in the y direction has been chosen. In the case of pseudo-original potential model, we observe that the numerical solution does not match the analytical solution. The momentum is not conserved. A high interaction force is required to separate the two components. However, a strong interaction is the source of strong spurious currents causing

numerical instabilities. The error in velocity is especially important when the viscosity ratio is high and numerical instability occurs for a viscosity ratio of 18. Unlike the original model, the proposed model gives a numerical velocity profile in agreement with the analytical velocity. The new equilibrium velocity allows conserving the momentum. This model is in this sense an improvement.

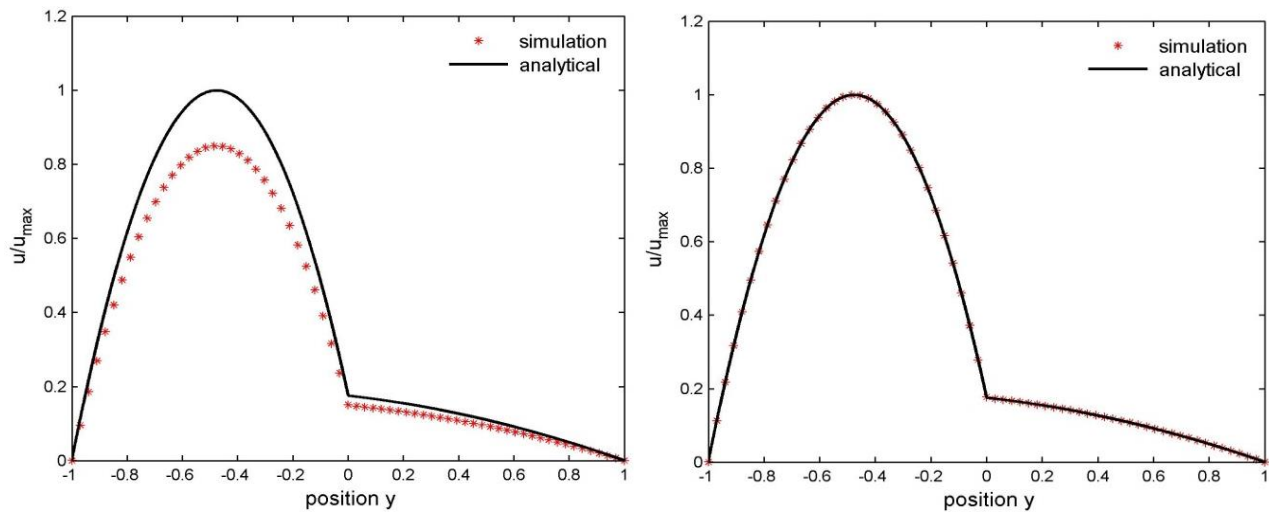


Figure 5.3: Velocity profile with the original pseudo-potential model (left) and the improved model (right) for viscosity ratio 10

Figure 5.4 gives a comparison between the analytical solution and the numerical solution obtained with the improved model for different kinematic viscosity ratios. For a kinematic viscosity ratio of 100 and 1000, the ratio dynamic viscosity ratio  $M$  is 4.0519 and 0.4052 respectively. The analytical and numerical results are in good agreement.

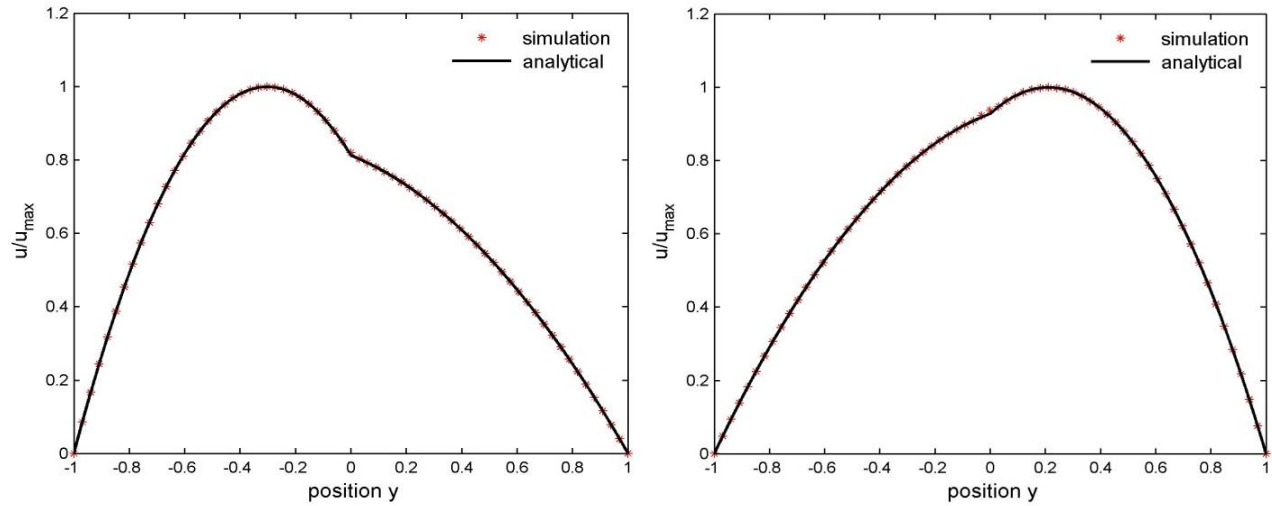


Figure 5.4: Velocity profile with a viscosity ratio 100 (left) and a viscosity ratio 1000 (right)

Finally, a mesh study was performed. Figure 5.5 gives the relative error according to the grid spacing  $h = 2 / N$  with  $N = 16, 32, 64, 128$  after 2500 iterations. As the viscosity ratio decreases, the error decreases. The size of the mesh affects the diffuse nature of the interface and thus would reduce spurious currents at the interface.

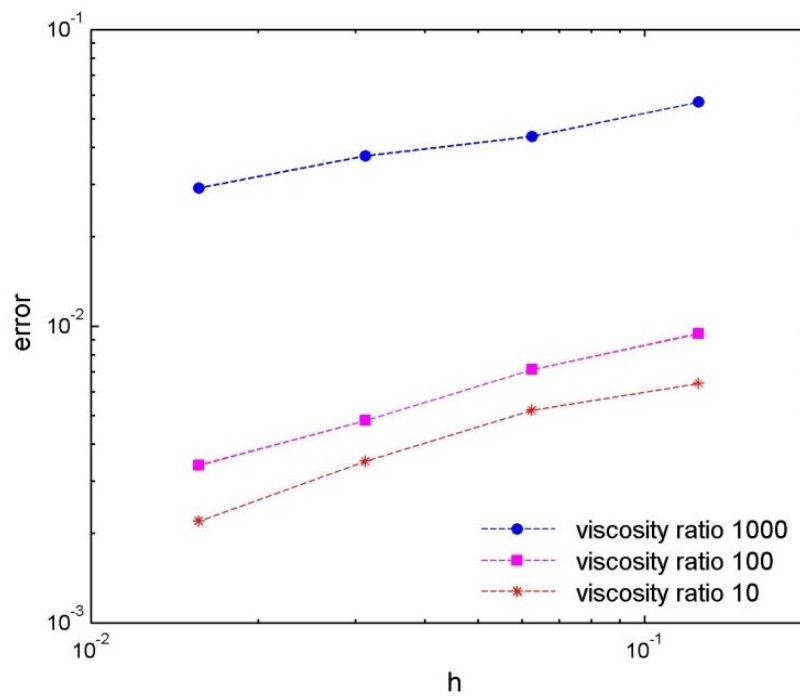


Figure 5.5: Grid convergence for different viscosity ratios

### 5.4.4 Droplet Oscillation

We now study in the dynamic problem of droplet oscillation. Initially, a deformed droplet of ellipsoid shape is placed at the center of the domain. A computational domain with  $64 \times 64 \times 64$  nodes is chosen. The radius of the droplet is fixed  $r = 15$  lu. Periodic boundary conditions are imposed in all directions. Figure 5.6 shows the deformation of a droplet at different times for  $v_2 / v_1 = 50$  and  $\kappa = 0$ . Under the effect of surface tension and viscosity, the deformed droplet oscillates until it reaches a spherical shape at equilibrium.

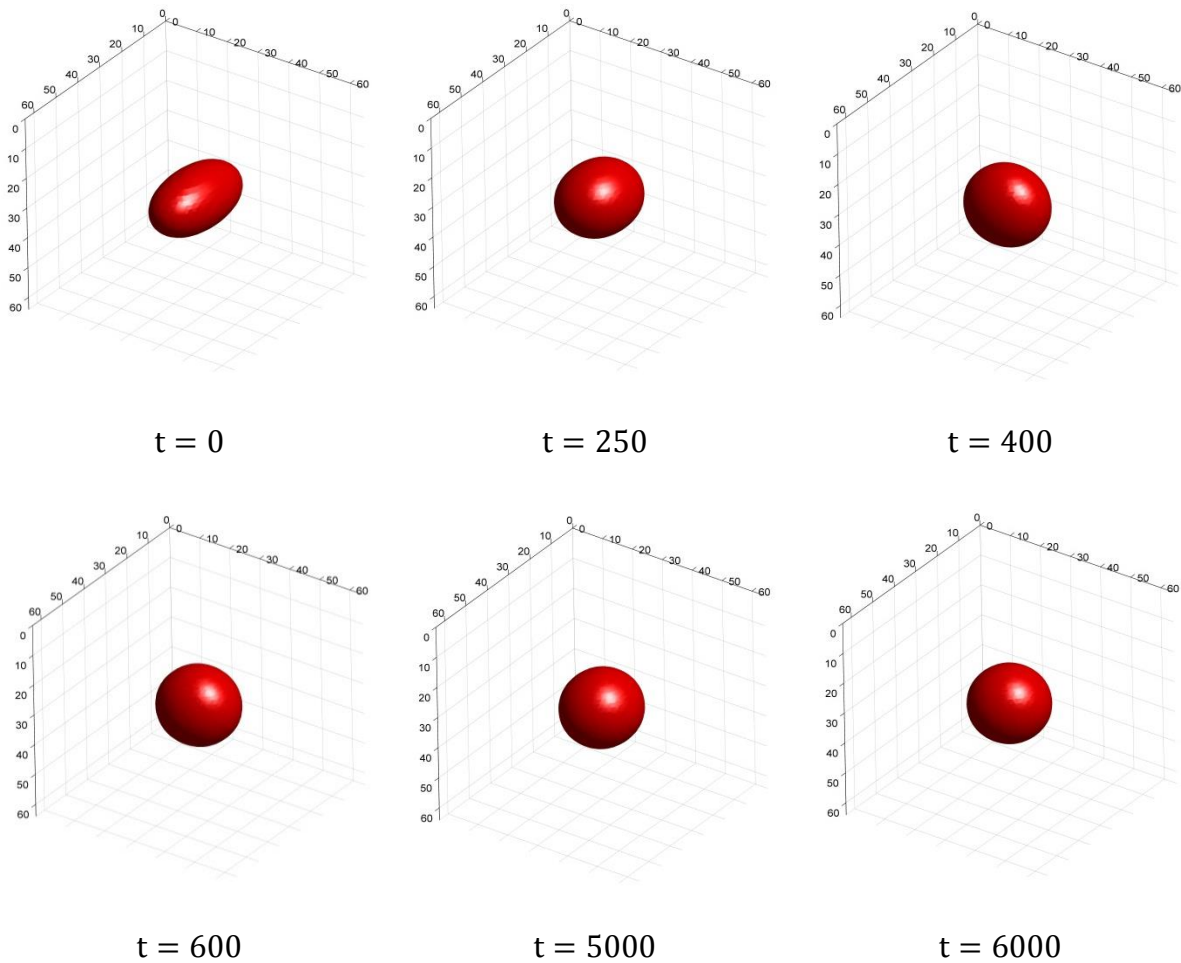


Figure 5.6: Droplet oscillation from a deformed droplet of ellipsoid shape

The frequency for the  $n^{\text{th}}$  oscillation mode of a droplet is given by the analytical solution of Miller and Scriven [73]:

$$\omega_n = \omega_n^* - \frac{1}{2}\chi\omega_n^{*\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\chi^2 \quad (5.39)$$

where  $\omega_n$  is the angular response frequency and  $\omega_n^*$  is Lamb's natural resonance frequency given by [96]:

$$(\omega_n^*)^2 = \frac{n(n+1)(n-1)(n+2)}{R_d^3[n\rho_2 + (n+1)\rho_1]} \sigma \quad (5.40)$$

where  $R_d$  is the equilibrium radius of the droplet and  $\sigma$  is the surface tension. The parameter  $\chi$  was given by:

$$\chi = \frac{(2n+1)^2(\mu_1\mu_2\rho_1\rho_2)^{\frac{1}{2}}}{2^{\frac{1}{2}}R_d[n\rho_2 + (n+1)\rho_1] \left[ (\mu_1\rho_2)^{\frac{1}{2}} + (\mu_2\rho_2)^{\frac{1}{2}} \right]} \quad (5.41)$$

where  $\mu_1$  and  $\mu_2$  are, respectively, the dynamic viscosities of the fluid 1 (droplet) and the fluid 2 (medium). In our case, the second oscillation mode ( $n = 2$ ) is excited. Figure 5.7 illustrates the evolution of the normalized radius  $R/R_0$  of the droplet in the horizontal direction for different viscosities ratios  $v_2/v_1$  and  $\kappa = 0$ .  $R$  is the radius of the center of the droplet at the interface in the horizontal direction and  $R_0$  is the radius of the droplet at equilibrium. Under the effect of viscous dissipation, the oscillation amplitude decreases. In fact, it is observed that the droplet returns to its spherical shape after a longer time period when the viscosity ratio is increased. For the second oscillation mode, we compare the analytical oscillation period  $T = 2\pi/\omega_n$  obtained by Eq. (5.39) and the oscillation period calculated numerically. For viscosities ratios  $v_2/v_1 = 50$  and  $v_2/v_1 = 75$ , the analytical oscillation periods are  $T_a = 1577$   $\mu\text{s}$  and  $T_a = 1516$   $\mu\text{s}$  and the numerical oscillation periods are  $T_n = 1525$   $\mu\text{s}$  and  $T_n = 1457$   $\mu\text{s}$  respectively. Thus, the difference is 3.4% and 3.9 % respectively. These differences are consistent with those obtained in [58, 60]. In addition, to validate our results, we compare the oscillation period ratios  $T^{v_2/v_1=50}/T^{v_2/v_1=75}$  in the analytical and numerical case. In the analytic and numerical case, the oscillation period ratios are 1.0382 and 1.0405. The numerical results are in agreement with the analytical results. In a second step, we study the influence of surface tension on dynamic oscillations by varying the surface tension parameter  $\kappa$ . The viscosity ratio is fixed at  $v_2/v_1 = 75$ . Figure 5.8 illustrates the evolution of the radius of the droplet in the horizontal direction for

different surface tension parameters  $\kappa$ . With the parameter  $\kappa = 0.5$ , the analytical and numerical oscillation periods are  $T_a = 1536$  lu/s and  $T_n = 1466$  lu/s respectively. The difference is 5%. We obtain oscillation period ratios  $T^{\kappa=0.5}/T^{\kappa=0}$  in the analytical and numerical case of 1.0132 and 1.006 respectively. The results are acceptable. Thus, by increasing the surface tension parameter, the surface tension decreases and therefore, the oscillation period becomes slightly longer. For a given viscosity, the influence of the viscosity increases when the surface tension is decreased.

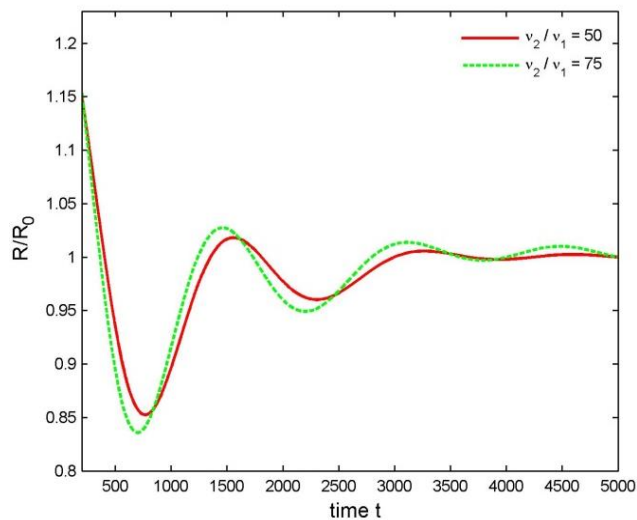


Figure 5.7: Evolution of the normalized radius of the droplet in the horizontal direction for different viscosity ratio  $v_2/v_1$  with  $\kappa = 0$

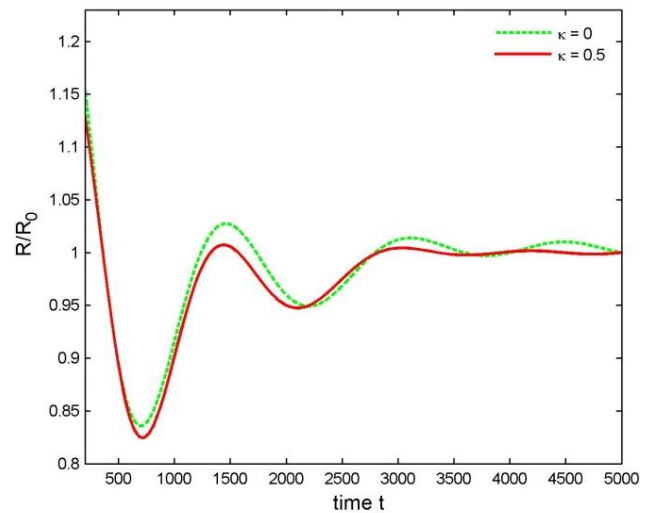


Figure 5.8: Evolution of the normalized radius of the droplet in the horizontal direction for different tension surface parameters  $\kappa$  with  $v_2/v_1 = 75$

#### 5.4.5 Droplet falling under the effect of gravity and the buoyant force

In this section, our model is applied to the study of a falling droplet in a medium at rest. Important parameters in this simulation are: the densities of two fluids  $\rho_l$  and  $\rho_g$ , the viscosities of two fluids  $\mu_l$  and  $\mu_g$ , the surface tension  $\sigma$ , the gravitational acceleration  $g$ , the initial diameter of the droplet  $D$ . The influence of the viscosity of the two fluids and the surface tension is analyzed based on the following dimensionless numbers:

$$Eo = \frac{g \Delta\rho D^2}{\sigma} \quad (5.42)$$

$$Mo = \frac{g \Delta\rho \rho_g^2 v_g^4}{\sigma^3} \quad (5.43)$$

$$Re = \frac{v_T D}{v_g} \quad (5.44)$$

Where  $\Delta\rho = \rho_l - \rho_g$  is the density difference between the two fluids and  $v_T$  the terminal velocity of the droplet. For all simulations, periodic conditions are imposed in x and z directions and bounce-back conditions are applied to the walls in the y direction. Initially, a droplet of diameter D is placed in the domain at rest. Under the effect of gravity and the buoyant force, the droplet falls. To consider the buoyancy force due to the density difference between the two fluids, the effective buoyancy force  $F^{e,\sigma}$  is introduced:

$$\mathbf{F}^{e,l} = \rho^l \mathbf{g}_{applied} \quad (5.45)$$

Because of the difference in density, we have:

$$\mathbf{F}_{net,g} = \mathbf{g}_{eff} (\rho_l - \rho_g) \quad (5.46)$$

We therefore deduce that:

$$\mathbf{g}_{applied} = \frac{\mathbf{g}_{eff} (\rho_l - \rho_g)}{\rho_l} \quad (5.47)$$

$\mathbf{g}_{applied}$  represents gravitational acceleration used in the simulations and applied to the droplet.  $\mathbf{g}_{eff}$  represents the physical gravitational acceleration. Thus, by applying the value  $\mathbf{g}_{applied}$  and  $\rho_l$ , we take into account buoyancy effects.

### *Effects of walls*

We propose to study the effects of solid walls on the Reynolds number. Initially, a spherical droplet of radius  $R = 12$  lu is placed in the domain. The simulation is performed with a Eötvös number  $Eo = 0.48$  and a Morton number  $Mo = 5e-7$ . Different  $N_x / D$  ratios are chosen to study the effect of the walls.  $N_x$  represents the number of nodes in the x direction. Figure 5.9 shows the evolution of the Reynolds number based on the ratio  $N_x / D$ . The Reynolds number becomes

independent of the width of the domain for a ratio  $W/D = 6$ . The difference on the Reynolds number for a ratio of  $W/D = 6$  and  $W/D = 7$  is negligible, since it is less than 0.2%. For all the simulations, we therefore choose a domain such as the width is  $W/D = 6$ , in that case the wall effects are ignored [75].

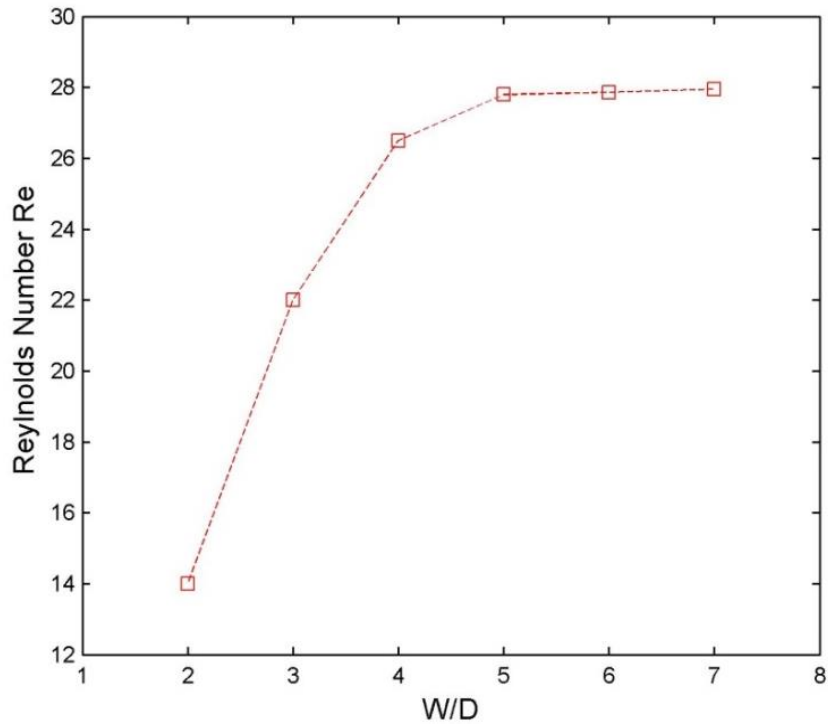


Figure 5.9: Reynolds number for different ratios of  $W/D$

### *Drag coefficient of falling droplet*

To ensure low deformation and avoid the breakup of the droplet, the Eötvös number should remain low. Indeed, the droplet retains its spherical shape during its fall, when the surface tension force is sufficiently high. The surface tension is adjusted from the parameter  $k$  in the Eq (5.31). As the droplet falls, the velocity of the droplet increases to reach a terminal velocity  $v_T$ . At this terminal velocity, we calculate the numerical Reynolds number and we compare it to empirical correlations of a falling droplet given in Ref [75]:



$$Re = \begin{cases} 0.776 \frac{Eo^{0.66}}{Mo^{0.28}} ; & Eo < 164 Mo^{\frac{1}{6}} \\ 1.37 \frac{Eo^{0.55}}{Mo^{0.26}} ; & Eo \geq 164 Mo^{\frac{1}{6}} \end{cases} \quad (5.48)$$

Table 5.2 gives the Reynolds numbers for different Eötvös and Morton numbers. As shown in the correlation, the Reynolds number decreases with the Eötvös number. The numerical Reynolds numbers are consistent with the empirical correlations, since the maximum deviation is 2%.

Table 5.2: Comparison between numerical and empirical Reynolds numbers

$Eo$	$Mo$	$Re^{num}$	$Re^{exp}$
0.224	1.16e-8	47.54	48.19
0.046	2.3e-10	49.68	50.82
0.318	3.83e-7	22.24	22.81
0.0343	1.31e-9	25.18	25.72

When the terminal velocity of the droplet is reached, the acceleration becomes zero and there is a balance between buoyancy forces  $F_g$  and the drag force  $D$ . The balance is given by:

$$\frac{4}{3}\pi R^3 (\rho_l - \rho_g) \frac{4}{3} = \frac{1}{2}\rho_l v_T^2 (4\pi R^2) C_D \quad (5.49)$$

We therefore deduce that:

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{gD}{v_T^2} \frac{\Delta\rho}{\rho_l} \quad (5.50)$$

From the terminal velocity  $v_T$  obtained numerically, we calculate the drag coefficient using Eq. (5.50). The numerical drag coefficient is then compared with empirical correlation given in Ref [75]:

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0.1935 Re^{0.6305}) ; \quad 20 \leq Re \leq 260 \quad (5.51)$$

Table 5.3 gives the numerical and empirical drag coefficients for different Eötvös and Morton numbers. We chose a small Eötvös number to allow the droplet to retain its spherical shape and thus compared the numerical drag coefficient to the empirical correlation of a falling spherical droplet. The numerical results are in agreement with the empirical correlation. The maximum relative error is less of 1%.

Table 5.3: Numerical and empirical drag coefficients for different Eötvös and Morton numbers

Eo	Mo	$C_D^{\text{num}}$	$C_D^{\text{exp}}$	Error
0.224	1.16e-8	2.5979	2.5721	1.0 %
0.046	2.3e-10	2.5484	2.5237	0.98 %
0.318	3.83e-7	3.4802	3.4753	0.14 %
0.0343	1.31e-9	3.2991	3.2965	0.16 %

Figure 5.10 shows the evolution of the drag coefficient in function of dimensionless time  $t^* = t / \sqrt{\frac{D}{g}}$ . For different Reynolds numbers, the drag coefficient shows a downward trend and converges for a time  $t^* \approx 8$ . In addition, the drag coefficient increases as the Reynolds number decrease.

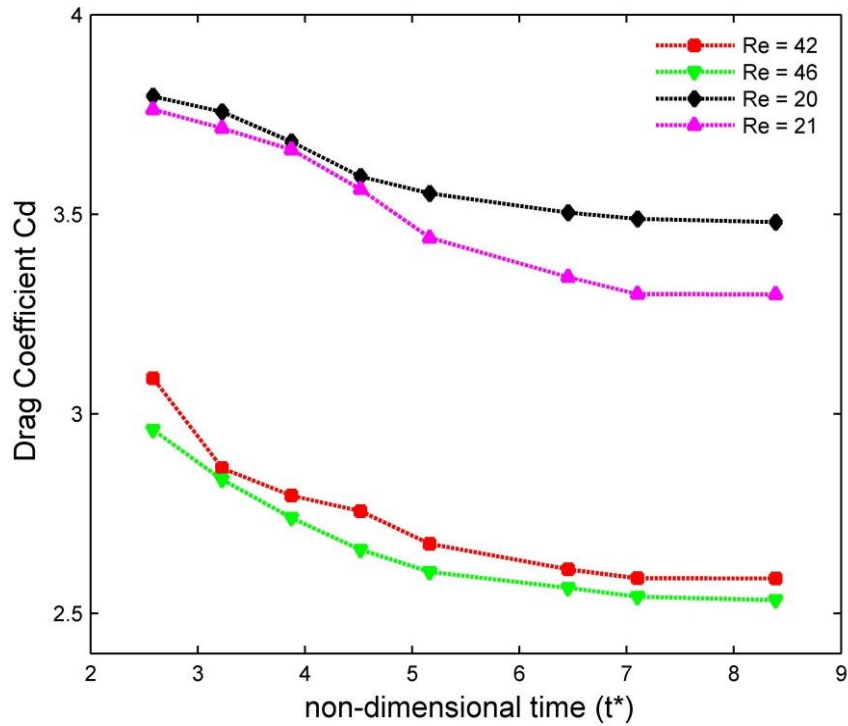


Figure 5.10: Evolution of the drag coefficient in function of dimensionless time for different Reynolds numbers

## 5.5 Conclusion

In this paper, an improved 3D-MRT multi-component multiphase LBM model with variable surface tension was proposed. This model provides a decoupling between the properties. The independence between the density ratio with the viscosity and the surface tension is verified. The model is capable to simulate high density and viscosity ratios while maintaining the thermodynamic consistency for multi-components multiphase flows. The 3D-MRT model is validated through the Laplace's law and the surface tension obtained numerically is consistent with the NIST data. The two fluids Poiseuille flow has been validated and the momentum is conserved compared to the original pseudo-potential model. The influence of viscosity and surface tension on the dynamic oscillation of a deformed droplet was investigated. The oscillation periods obtained numerically are in agreement with the analytical results. Under the effect of viscous dissipation, the oscillation amplitude of a deformed droplet decreases and by decreasing the surface tension, the oscillation period becomes longer. Finally, the influence of the viscosity

and the surface tension of a droplet falling under the buoyancy forces effect were studied. The Reynolds number and drag coefficient obtained are in agreement with the empirical correlations.

### **Acknowledgements**

This work was supported by Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC), under grant number RGPIN-2016-06427.

## CHAPITRE 6 ARTICLE 3: A THERMAL MULTI-COMPONENT MULTI-RELAXATION TIME (MRT) LATTICE BOLTZMANN MODEL WITH PHASE CHANGE AND HEAT EXCHANGE

Sami Ammar, Guillaume Pernaudat, and Jean-Yves Trépanier, Manuscript submitted to International Journal of Heat and Mass Transfer (March 2017).

### 6.1 Abstract

In the present work, a 3D-MRT lattice Boltzmann model is proposed to simulate phase change and heat exchange in multi-component multiphase flows. The model is based on an improved version of the original pseudo-potential model. The explicit forcing model is used to simulate high viscosity ratios and Peng Robinson's equation of state is implemented to simulate high density ratios. The source term for simulating the phase change is decoupled from the equation of state. The vaporization latent heat can be imposed directly in the source term independently of the equation of state used. An order of isotropy of 8 in the interaction force is also chosen to reduce spurious currents at the interface. The model is applied to thermal conduction in a 2-phase system problem, evaporation process of a liquid droplet and finally the growth and migration of a bubble from a superheated surface. The evolution diameter of liquid droplet in the evaporation process satisfies to  $D^2$  law. The influence of the vaporization latent heat was also studied. Finally, our results in the simulation of growth and the migration of a bubble are in agreement with the literature. The departure diameter of the bubble is well proportional to  $g^{-1/2}$ .

Keywords: Multi-component, Thermal, MRT Lattice Boltzmann, Phase change, Heat exchange

### 6.2 Introduction

Traditionally, CFD methods such as interface capture [24, 114] and tracking interface [115, 116] methods are used to simulate multiphase and multi-component flows. However, in recent decades the lattice Boltzmann method has emerged as an alternative approach to simulating complex geometries multiphase and multi-component flows [32, 117, 118]. Compared to more traditional CFD methods, the LBM is able to incorporate microscopic interactions easily without

capturing or tracking the interface between phases and components. Several multiphase models were then developed and can be grouped according to the following categories: the color model [43, 80, 119], the pseudo-potential model [3, 81, 107, 120], the free energy model [44, 45].

The color model [39, 119] represents each phase by a color. The source term is obtained by a calculation of a color gradient. However, this method suffers from a lack of isotropy of the surface tension. The free energy model proposed by Swift et al. [44, 45] uses collision rules which ensure the evolution of the system towards the minimum of the free energy functional. This model does not respect the Galilean invariance and is not able to simulate large variations in densities. However, it offers the advantage of producing thin interface with two lattice units.

Despite some drawbacks, the pseudo-potential model [3, 81, 120] is the most popular. It uses a interaction force between the distribution functions to simulate the microscopic interactions and thus automatically separates the phases. The thermodynamic inconsistency, the limited density and viscosity ratio, the dependence between the properties, the spurious currents at the interface are the weaknesses of the original pseudo-potential model [82]. Kuperstokh et al. [59] proposes to reduce the thermodynamic inconsistency by combining the local approximation and the mean-value approximation. The introduction of a real equation of state into the pseudo-potential model proposed by Yuan and Schaefer [55] offers several advantages since it allows to increase the density ratio while minimizing the thermodynamic inconsistency. The increase of the isotropy order in the calculation of the interaction force can significantly reduce the spurious currents at the interface. Finally, in order to break the interdependence between the surface tension and the density, Li et al [58] proposes to modify the pressure tensor by adding an additional term to the 2D-MRT lattice Boltzmann equation for a single-component multiphase flow. This term is function of a kappa parameter which is adjusted to vary the surface tension independently of the density. Porter et al. [61] proposes a multi-component multi-phase model based on the pseudo-potential model capable of achieving viscosity ratios of the order of 1000. The external forces are introduced in the MRT lattice Boltzmann equation rather than in equilibrium velocity. In the Porter's model [61], a new equilibrium velocity is defined and then substituted in the equilibrium distribution function to ensure the momentum conservation.

These many advances [55, 57-59, 61] have been made to reduce the weaknesses of the original pseudo-potential model in the simulation of multiphase and multi-component flows. However,

for most applications, the multiphase and multi-component flow simulation is performed in the isothermal case and few studies [52, 121] which take into account the temperature effects remain unsatisfactory. In a flow where there is a phase change, as in the process of evaporation or condensation, the thermal effects can become important and must be taken into account.

For a single-phase flow, methods for solving thermal problems can be grouped into two categories: the multispeed approach [66, 67] and the passive-scalar approach [36, 65, 122]. The multi-speed approach involves adding additional speeds and including high-speed terms in the equilibrium distribution to solve energy conservation. However, this model is numerically unstable [66, 67]. The passive scalar approach considers the temperature as a scalar transported by the velocity. This model is based on the assumption that viscous dissipation and compression heat can be neglected for incompressible fluids and therefore the temperature is given by the advection-diffusion equation.

In the present work, we propose a 3D thermal multiphase multi-components model with phase change and heat transfer. The explicit forcing (EF) model and the passive scalar model are coupled to solve flow dynamics and temperature, respectively. In addition, the phase transition and heat transfer between the components are taken into account in our model. The development of the source term to simulate the phase change in a multi-component system is given. Since most real multiphase systems have a density ratio of  $O(1000)$ , for example an air-water system, the Peng Robinson equation (PR EOS) is incorporated for the multi-component multiphase flow simulation at high density ratios. The thermodynamic inconsistency of the pseudo-potential model is reduced by combining the local approximation and the mean-value approximation. Finally, the increase of the isotropy order in the interaction force is also implemented to reduce parasitic currents at the interface.

## **6.3 Multiphase multi-component model**

### **6.3.1 Explicit forcing (EF) for multiphase multi-component flows**

The explicit forcing (EF) model [61] with MRT collision operator is used in our model. The MRT collision operator is used because of its improved stability compared to the BGK collision

operator. In the EF model, the term force is directly introduced into the discrete lattice Boltzmann equation for each component. The discrete lattice Boltzmann equation for a component  $\sigma$  is:

$$f_{\alpha}^{\sigma}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) - f_{\alpha}^{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \Omega_{\alpha}^{\sigma} + \delta_t F_{\alpha}^{\sigma} \quad (6.1)$$

where  $f_{\alpha}^{\sigma}$  is the distribution function along the  $\alpha^{\text{th}}$  direction at a node  $\mathbf{x}$  and time  $t$ ,  $\vec{e}_{\alpha}$  is the discrete velocity in the  $\alpha^{\text{th}}$  direction,  $\delta_t$  is the time step,  $F_{\alpha}^{\sigma}$  represents the forcing term and  $\Omega_{\alpha}$  is the collision operator.

The MRT collision operator is defined as follows [86]:

$$\Omega_{\alpha} = -(M^{-1}\Lambda^{\sigma}M)_{\alpha\beta}(f_{\alpha}^{\sigma}(\vec{x}, t) - f_{\alpha}^{\sigma,eq}(\vec{x}, t)) \quad (6.2)$$

Where  $M^{-1}\Lambda M$  is the collision matrix and the equilibrium distribution function  $f_{\alpha}^{\sigma,eq}$  is given by:

$$f_{\alpha}^{\sigma,eq} = \rho_{\sigma} w_{\alpha} \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}_{\sigma}^{eq}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}_{\sigma}^{eq})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}_{\sigma}^{eq} \cdot \mathbf{u}_{\sigma}^{eq}}{2c_s^2} \right] \quad (6.3)$$

where  $w_{\alpha}$  is the weighting factor. The D3Q19 lattice is used for our 3D simulations. The discrete velocity and the weighting factor for the D3Q19 lattice are given by:

$$\begin{aligned} & [\mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_4, \mathbf{e}_5, \mathbf{e}_6, \mathbf{e}_7, \mathbf{e}_8, \mathbf{e}_9, \mathbf{e}_{10}, \mathbf{e}_{11}, \mathbf{e}_{12}, \mathbf{e}_{13}, \mathbf{e}_{14}, \mathbf{e}_{15}, \mathbf{e}_{16}, \mathbf{e}_{17}, \mathbf{e}_{18}] \\ & = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (6.4) \end{aligned}$$

And

$$w_{\alpha} = \begin{cases} 1/3, & \alpha = 0; \\ 1/18, & \alpha = 1, 2, \dots, 6; \\ 1/36, & \alpha = 7, 8, \dots, 18; \end{cases} \quad (6.5)$$

And the transformation matrix M is given by [86]:



$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -30 & -11 & -11 & -11 & -11 & -11 & -11 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 & 8 \\ 12 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -4 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 4 & 0 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 4 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & -1 & -1 & 2 & -1 & -1 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 \\ 0 & -4 & 2 & 2 & -4 & 2 & 2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 & 1 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 2 & 0 & -2 & 2 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

And the diagonal matrix  $\Lambda^\sigma$  of relaxation parameters for a component  $\sigma$  is given by:

$$\Lambda^\sigma = \text{diag}(s_1^\sigma, s_2^\sigma, s_3^\sigma, s_4^\sigma, s_5^\sigma, s_6^\sigma, s_7^\sigma, s_8^\sigma, s_9^\sigma, s_{10}^\sigma, s_{11}^\sigma, s_{12}^\sigma, s_{13}^\sigma, s_{14}^\sigma, s_{15}^\sigma, s_{16}^\sigma, s_{17}^\sigma, s_{18}^\sigma, s_{19}^\sigma) \quad (6.7)$$

The relaxation parameters  $s_{11}, s_{13}, s_{17}, s_{18}$  and  $s_{19}$  are free parameters.  $s_1, s_4, s_6$  and  $s_8$  correspond to the relaxation parameters associated with conserved moments  $\rho, j_x, j_y, j_z$  respectively and therefore, the value of these parameters does not matter. The relaxation parameter  $s_2$  is related to the bulk viscosity and the relaxation parameters  $s_{10}, s_{12}, s_{14}, s_{15}$  and  $s_{16}$  are related to the viscosity. The bulk viscosity  $\xi^\sigma$  and the kinematic viscosity  $\nu^\sigma$  in the MRT model for a component  $\sigma$  are given by:

$$\xi^\sigma = \frac{2}{9} \left( \frac{1}{s_1^\sigma} - \frac{1}{2} \right) \quad (6.8)$$

And

$$\nu^\sigma = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{s_\beta^\sigma} - \frac{1}{2} \right), \beta = 10, 12, 14, 15, 16 \quad (6.9)$$

Using the MRT collision operator, the distribution function  $f^\sigma$  and the  $f^{\sigma, \text{eq}}$  equilibrium distribution function are transferred in moment space after the multiplication by the transformation matrix  $M$ , as follows  $\mathbf{m}^\sigma = Mf^\sigma$  and  $\mathbf{m}^{\sigma, \text{eq}} = Mf^{\sigma, \text{eq}}$ . Therefore, the lattice Boltzmann equation in moment space can be written as [86]:

$$\mathbf{m}^{\sigma*} = \mathbf{m}^{\sigma} - \Lambda^{\sigma}(\mathbf{m}^{\sigma} - \mathbf{m}^{\sigma,eq}) + \left( \mathbf{I} - \frac{\Lambda^{\sigma}}{2} \right) \mathbf{F}^{\sigma} \quad (6.10)$$

Where  $\mathbf{I}$  is the unit tensor, and the equilibrium moments  $\mathbf{m}^{eq}$  are given in Ref [86].

The discrete forcing term  $F_{\alpha}^{\sigma}$  in Eq. (6.10) is defined as follows:

$$F_{\alpha}^{\sigma} = \frac{\mathbf{E}\mathbf{F}^{\sigma}(\mathbf{e}_{\alpha} - \mathbf{u}^{\sigma,eq})}{\rho_{\sigma}c_s^2} f_{\alpha}^{\sigma,eq} \quad (6.11)$$

Where  $\mathbf{E}\mathbf{F}^{\sigma}$  is the external force total. The force total  $\mathbf{E}\mathbf{F}^{\sigma}$  is given by:

$$\mathbf{E}\mathbf{F}^{\sigma} = \mathbf{F}_{\sigma\sigma} + \mathbf{F}_{\sigma\bar{\sigma}} + \mathbf{F}_{\sigma,s} + \mathbf{F}_{\sigma,g} \quad (6.12)$$

Where  $\mathbf{F}_{\sigma\sigma}$  is the interaction force between molecules of the same component,  $\mathbf{F}_{\sigma\bar{\sigma}}$  the interaction force between the molecules of different components,  $\mathbf{F}_{\sigma,g}$  the fluid-solid force and the gravity force. Unlike the original pseudo-potential model, the equilibrium velocity  $\mathbf{u}^{\sigma,eq}$  is defined as follows [61]:

$$\mathbf{u}^{\sigma,eq} = \sum_{\sigma} s_c^{\sigma} \rho^{\sigma} \mathbf{u}^{\sigma} / \sum_{\sigma} s_c \rho^{\sigma} \quad (6.13)$$

The relaxation parameter  $s_c^{\sigma}$  corresponds to the conserved moments (density and momentum) and should be non-zero.  $\rho^{\sigma}$  and  $\mathbf{u}^{\sigma}$  are respectively the density and the velocity of  $\sigma^{\text{th}}$  component respectively and are calculated as follows:

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{\sigma} \quad \rho^{\sigma} \mathbf{u}^{\sigma} = \sum_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} f_{\alpha}^{\sigma} + \frac{\mathbf{F}^{\sigma}}{2} \quad (6.14)$$

The total density and velocity of the fluid mixture are:

$$\rho = \sum_{\sigma} \sum_i f_i^{\sigma} \quad , \quad \mathbf{u} = \sum_{\sigma} \rho^{\sigma} \mathbf{u}^{\sigma} / \sum_{\sigma} \rho^{\sigma} \quad (6.15)$$

### 6.3.2 Interaction force

The original multiphase and multi-component model [81] uses an approach by potential interaction between molecules. In the multi-component case, the interaction force is composed of two parts:  $F_{\sigma\sigma}$  and  $F_{\sigma\bar{\sigma}}$ .  $F_{\sigma\sigma}$  is the interaction between molecules of the same component and  $F_{\sigma\bar{\sigma}}$  the interaction between the molecules of different components [81].

In the original model, the gradient in the interaction force is calculated with a small sum on neighboring nodes and closest neighboring nodes. The interaction force then has an isotropy order of 4. Each neighbor has a contribution which is weighted by a coefficient  $w(\|\mathbf{e}_\alpha\|^2)$  according to the standard of the discrete velocity. The forces are given by:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\sigma\sigma} &= -G_{\sigma\sigma} c_s^2 \psi^\sigma(\mathbf{x}) \sum_i w(\|\mathbf{e}_\alpha\|^2) \psi^\sigma(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha) \mathbf{e}_\alpha \\ \mathbf{F}_{\sigma\bar{\sigma}} &= -G_{\sigma\bar{\sigma}} c_s^2 \psi^\sigma(\mathbf{x}) \sum_i w(\|\mathbf{e}_\alpha\|^2) \psi^{\bar{\sigma}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha) \mathbf{e}_\alpha \end{aligned} \quad (6.16)$$

The coefficient  $G$  represents the strength of interaction between the particles.  $\psi(\mathbf{x})$  is the effective mass which is a function of the local density.

The extended interaction potential method proposed by Sbragaglia et al. [57] is implemented in the present work to reduce the spurious currents. In a previous study, we showed that the 8<sup>th</sup> order isotropy is sufficient to decrease significative spurious velocity. The gradient in the interaction force is then calculated with an 8<sup>th</sup> order isotropy.

If there is interaction between the fluid component and the wall, the interaction force with walls must be taken into account [82]:

$$\mathbf{F}_w^\sigma(\mathbf{x}) = -G_w^\sigma \psi^\sigma(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^N w(|\mathbf{e}_\alpha|^2) \rho_w^\sigma s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha) \mathbf{e}_\alpha \quad (6.17)$$

Where  $s$  is a function which is equal to 1 for solid nodes and 0 for fluid nodes. We can be adjusted the fictive density  $\rho_w^\sigma$  or  $G_w^\sigma$  to get different contact angles.

The external force as the gravity force is given by:

$$F_g = \rho^\sigma g \quad (6.18)$$

### 6.3.3 Peng Robinson equation of state

The Peng-Robinson's equation of state is used for the simulation of multiphase multi-component flows at large density ratios. This equation of state gives some flexibility in the simulation of different fluids. The pressure of each component  $p_\sigma$  is calculated as follows [55]:

$$p_\sigma = \frac{\rho_\sigma R_\sigma T_\sigma}{1 - b_\sigma \rho_\sigma} - \frac{a_\sigma \alpha(T_\sigma) \rho_\sigma^2}{(1 + 2b_\sigma \rho_\sigma - b_\sigma^2 \rho_\sigma^2)} \quad (6.19)$$

With such expression for  $\alpha(T)$ :

$$\alpha(T_\sigma) = \left[ 1 + (0.37464 + 1.54226\omega_\sigma - 0.26992\omega_\sigma^2) \left( 1 - \sqrt{\frac{T_\sigma}{T_c^\sigma}} \right) \right]^2 \quad (6.20)$$

With  $R$  constant specific gas, the critical temperature  $T_c$ ,  $p_\sigma$  the pressure of component  $\sigma$ , and  $\rho_\sigma$  the density of component  $\sigma$ . The factors  $a$  and  $b$  are expressed as follows:

$$a_\sigma = \frac{0.45724R^2 T_c^{\sigma 2}}{p_c^\sigma} \quad (6.21)$$

$$b_\sigma = \frac{0.0778RT_c}{p_c^\sigma}$$

### 6.3.4 Thermodynamic inconsistency

Kupershtokh et.al [59] proposed to combine the local approximation and the mean-value approximation for the calculation of the interaction force between particles of the same component in order to reduce the thermodynamic inconsistency. The improved version of the interaction force is implemented for the interaction force  $F_{\sigma\sigma}$  :

$$F_{\sigma\sigma} = -\beta G_{\sigma\sigma} c_s^2 \psi_\sigma(x) \sum_{\alpha} \psi^\sigma(x + e_\alpha) e_\alpha - \frac{(1-\beta)}{2} G_{\sigma\sigma} c_s^2 \sum_{\alpha} \psi^\sigma(x + e_\alpha) e_\alpha \quad (6.22)$$

The  $\beta$  coefficient is adjusted to reduce the thermodynamic inconsistency. With the Peng Robinson equation of state, the  $\beta$  value was set at 1.16. This  $\beta$  value depends on the used equation of state.

### 6.3.5 Adjustment of the surface tension in the multi-component model

In a previous study, we have proposed to modify the pressure tensor to break the interdependence between the surface tension and the density. We have decoupled surface tension and density in the case of multiphase multi-component flows. Thus, the surface tension was adjusted independently of the density ratio. A source term  $C^\sigma$  was then added to the MRT lattice Boltzmann equation:

$$\mathbf{m}^{\sigma*} = \mathbf{m}^\sigma - \Lambda^\sigma (\mathbf{m}^\sigma - \mathbf{m}^{\sigma,eq}) + \left( \mathbf{I} - \frac{\Lambda^\sigma}{2} \right) \mathbf{F}^\sigma + \mathbf{C}^\sigma \quad (6.23)$$

Where the source term  $\mathbf{C}^\sigma$  is given by:

$$\mathbf{c}^\sigma = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{2}{5}s_v(Q_{xx}^\sigma + Q_{yy}^\sigma + Q_{zz}^\sigma) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -s_v(2Q_{xx}^\sigma - Q_{yy}^\sigma - Q_{zz}^\sigma) \\ 0 \\ -s_v(Q_{yy}^\sigma - Q_{zz}^\sigma) \\ 0 \\ -s_v Q_{xy}^\sigma \\ -s_v Q_{yz}^\sigma \\ -s_v Q_{xz}^\sigma \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.24)$$

The terms  $Q_{xx}^\sigma, Q_{yy}^\sigma, Q_{zz}^\sigma, Q_{xy}^\sigma, Q_{yz}^\sigma$  and  $Q_{xz}^\sigma$  are calculated by:

$$\mathbf{Q}^\sigma = \kappa \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}}}{2} \psi^\sigma(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^{18} w(|\mathbf{e}_\alpha|^2) [\psi^{\bar{\sigma}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha) - \psi^{\bar{\sigma}}(\mathbf{x})] \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \quad (6.25)$$

When  $\kappa = 0$ , we find the original form of pressure tensor of multi-component model. Moreover, we can observe that the surface tension decreases when  $\kappa$  increases in the value range from 0 to 1.

## 6.4 Thermal model for multiphase multi-component flows

### 6.4.1 Thermal model for single component

In a thermal system, the temperature evolution verifies the following equation:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\alpha \nabla T) + \Phi \quad (6.26)$$

The viscous and compressive heating effects are neglected in Eq. (6.26).  $\mathbf{u}$  is the velocity of the fluid and  $\alpha$  the thermal diffusivity. Details on the form of the source term  $\Phi$  are given in the following sections. In the passive scalar model, a distribution function is used to determine the density and a second distribution function to determine the temperature distribution. As the density, the temperature distribution function satisfies the discrete Boltzmann lattice equation given by:

$$g_\alpha(\vec{x} + \vec{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - g_\alpha(\vec{x}, t) = - \frac{g_\alpha(\vec{x}, t) - g_\alpha^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau_T} \quad (6.27)$$

Where  $\tau_T$  is the relaxation time related to the thermal diffusivity by the relation:

$$\alpha = c_s^2(\tau_T - 1/2)\Delta t \quad (6.28)$$

The equilibrium distribution function  $g_\alpha^{eq}$  is given by the following expression:

$$g_\alpha^{eq} = w_\alpha T \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}^{eq}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}^{eq})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^{eq} \cdot \mathbf{u}^{eq}}{2c_s^2} \right] \quad (6.29)$$

Finally, the temperature is obtained by summation of the distribution functions in all directions:

$$T = \sum_\alpha g_\alpha \quad (6.30)$$

In the following sections, we propose a thermal multi-component model. The phase change and heat exchange between components are taken into account in our model.

### 6.4.2 Coupling of the thermal model with the multi-component model

The temperature equation (Eq. (6.26)) is solved for each component and therefore a temperature distribution function  $g_\alpha^\sigma$  for each component is defined. The equilibrium distribution function  $g_\alpha^{\sigma,eq}$  is calculated from the equilibrium velocity:

$$\mathbf{u}^{\sigma,eq} = \frac{\mathbf{F}_{\sigma\sigma} + \mathbf{F}_{\sigma\bar{\sigma}}}{2\rho_\sigma} \quad (6.31)$$

The equilibrium distribution function for a component  $\sigma$  can then be written:

$$g_{\alpha}^{\sigma,eq} = w_{\alpha} T^{\sigma} \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}^{\sigma,eq}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}^{\sigma,eq})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^{\sigma,eq} \cdot \mathbf{u}^{\sigma,eq}}{2c_s^2} \right] \quad (6.32)$$

### 6.4.3 Treatment of phase change

A source term  $\Phi^{\sigma}$  responsible for the phase change is present in the temperature equation (Eq. (6.26)). Gong et al. [76] proposed a thermal multiphase model with phase transitions liquid-vapor. Based on this approach, we propose an extension to the case of thermal multiphase multi-component flows with phase change. However, the MRT collision operator is used here to solve the temperature and thus allow an improved numerical stability. The new MRT lattice Boltzmann equation of temperature for a component  $\sigma$  is given by:

$$n^{\sigma*} = n^{\sigma} - S(n^{\sigma} - n^{\sigma,eq}) + \Delta t w_{\alpha} \Phi^{\sigma} \quad (6.33)$$

Following the procedure given in Ref [123], we propose to derive the source term for a component  $\sigma$  in the equation. The thermodynamic relation of the entropy gives:

$$T^{\sigma} ds^{\sigma} = c_v^{\sigma} dT^{\sigma} - \frac{T}{\rho_{\sigma}^2} \left( \frac{\partial p_{\sigma}}{\partial T^{\sigma}} \right)_{\rho_{\sigma}} d\rho^{\sigma} \quad (6.34)$$

The balance equation of the entropy gives:

$$\rho_{\sigma} T^{\sigma} \frac{ds^{\sigma}}{dt} = \nabla \cdot (k^{\sigma} \nabla T^{\sigma}) \quad (6.35)$$

Where  $k^{\sigma}$  is the thermal conductivity and  $\alpha^{\sigma} = \frac{k^{\sigma}}{\rho_{\sigma} c_v^{\sigma}}$  is the thermal diffusivity of component  $\sigma$ .

Substituting Eq. (6.34) in Eq. (6.35), we obtain:

$$\frac{dT_{\sigma}}{dt} = \nabla \cdot (\alpha^{\sigma} \nabla T_{\sigma}) + \frac{T_{\sigma}}{\rho_{\sigma}^2} \left( \frac{\partial p_{\sigma}}{\partial T^{\sigma}} \right)_{\rho_{\sigma}} \frac{d\rho^{\sigma}}{dt} \quad (6.36)$$



The definition of the particular derivative  $\frac{dT^\sigma}{dt} = \frac{\partial T^\sigma}{\partial t} + \mathbf{u}^\sigma \cdot \nabla T^\sigma$  is used in Eq. (6.36) and we have:

$$\frac{\partial T_\sigma}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}^\sigma T_\sigma) = \nabla \cdot (\alpha^\sigma \nabla T_\sigma) + \frac{T_\sigma}{\rho_\sigma^2} \left( \frac{\partial p_\sigma}{\partial T_\sigma} \right)_{\rho_\sigma} \frac{d\rho^\sigma}{dt} + T_\sigma \nabla \cdot \mathbf{u}^\sigma \quad (6.37)$$

From the continuity equation, we can give an expression for the particular derivative  $\frac{d\rho^\sigma}{dt}$ :

$$\frac{d\rho^\sigma}{dt} = -\rho^\sigma \nabla \cdot \mathbf{u}^\sigma \quad (6.38)$$

By substituting Eq.(6.38) in Eq.(6.37) and by identification with the Eq.(6.26), we obtain the form of a source term  $\Phi^\sigma$ :

$$\Phi^\sigma = T_\sigma \left[ 1 - \frac{1}{\rho_\sigma c_v^\sigma} \left( \frac{\partial p_\sigma}{\partial T_\sigma} \right)_{\rho_\sigma} \right] \nabla \cdot U^\sigma \quad (6.39)$$

As Peng Robinson's equation of state is used in our model.  $\left( \frac{\partial p_\sigma}{\partial T_\sigma} \right)_{\rho_\sigma}$  is obtained as follows:

$$\left( \frac{\partial p_\sigma}{\partial T_\sigma} \right)_{\rho_\sigma} = \frac{\rho_\sigma R_\sigma T_\sigma}{1 - b_\sigma \rho_\sigma} - \frac{a_\sigma \rho_\sigma^2}{(1 + 2b_\sigma \rho_\sigma - b_\sigma^2 \rho_\sigma^2)} \left( \frac{\partial \alpha(T_\sigma)}{\partial T_\sigma} \right)_{\rho_\sigma} \quad (6.40)$$

Where:

$$\left( \frac{\partial \alpha(T_\sigma)}{\partial T_\sigma} \right)_{\rho_\sigma} = -\alpha(T_\sigma) \left[ (0.37464 + 1.54226\omega_\sigma - 0.26992\omega_\sigma^2) \frac{1}{\sqrt{T_c T_\sigma}} \right] \quad (6.41)$$

We propose now to derive the source term  $\Phi^\sigma$  in Eq.(6.39) in function of the vaporization latent heat  $L_v^\sigma$ . The Clausius-Clapeyron relation describes the phase transition process. In the case of a liquid-vapor phase transition, the specific entropy variation  $\Delta s^\sigma$  is given by:

$$\Delta s^\sigma = \left( \frac{\partial p_\sigma}{\partial T_\sigma} \right)_{v^\sigma} (v_v^\sigma - v_l^\sigma) \quad (6.42)$$

Where  $v_v^\sigma = \frac{1}{\rho_v^\sigma}$  and  $v_l^\sigma = \frac{1}{\rho_l^\sigma}$  represent the specific volume of the liquid phase  $l$  and the vapor phase  $v$  respectively. By definition, the vaporization latent heat is  $L_v = T\Delta s$ , we deduce from Eq.(6.42) that:

$$L_v^\sigma = T^\sigma \left( \frac{\partial p_\sigma}{\partial T_\sigma} \right)_{v^\sigma} (v_v^\sigma - v_l^\sigma) \quad (6.43)$$

Thus, the vaporization latent heat depends on state equation. However, by isolating  $\left( \frac{\partial p^\sigma}{\partial T^\sigma} \right)_{v^\sigma}$  from Eq.(6.43) and substituting it in Eq.(6.38), we have:

$$\phi^\sigma = \left[ T_\sigma - \frac{1}{\rho_\sigma c_v^\sigma} \frac{L_v^\sigma}{(v_v^\sigma - v_l^\sigma)} \right] \nabla \cdot u^\sigma \quad (6.44)$$

This new term  $\phi^\sigma$  is thus decoupled from the state equation. The vaporization latent heat can then be adjusted independently of the state equation used. The vaporization latent heat for different fluids is given in Ref [74].

#### 6.4.4 Heat exchange between the components

This section aims to introduce the source term  $\phi^{\sigma\bar{\sigma}}$  modelling the heat exchange between the components  $\sigma$  and  $\bar{\sigma}$ . This source term is added to Eq.(6.26). A new expression in Ref [124] is used to recalculate the temperature for each component  $\sigma$  in order to take account of the heat exchange between the components  $\sigma$  and  $\bar{\sigma}$ :

$$T_\sigma^{eq} = T_\sigma + \Delta t \phi^{\sigma\bar{\sigma}} \quad (6.45)$$

Where:

$$\phi^{\sigma\bar{\sigma}} = \frac{h^{\sigma\bar{\sigma}} S^\sigma (T_{\bar{\sigma}} - T_\sigma)}{\rho_\sigma c_p^\sigma} \quad (6.46)$$

Where  $S^\sigma$  the specific surface of phase  $\sigma$  inside the domain is,  $h^{\sigma\bar{\sigma}}$  is the heat transfer coefficient between component  $\sigma$  and component  $\bar{\sigma}$ . The heat transfer coefficient  $h^{\sigma\bar{\sigma}}$  between component  $\sigma$  and component  $\bar{\sigma}$  can be determined from the heat transfer correlations [125] for spherical geometry in a flow .

The equilibrium distribution function for the temperature in Eq.(6.32) is then modified by:

$$g_\alpha^{\sigma,eq} = w_\alpha(T_\sigma + \Delta t\phi^{\sigma\bar{\sigma}}) \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}^{\sigma,eq}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}^{\sigma,eq})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^{\sigma,eq} \cdot \mathbf{u}^{\sigma,eq}}{2c_s^2} \right] \quad (6.47)$$

## 6.5 Applications and results

In this section, we propose applications of our 3D-MRT thermal multiphase multi-component model through various test cases. Applications of the single phase and single component model are first presented. The Rayleigh-Bénard convection in a rectangular container and the flow of thermal Poiseuille are studied. For the thermal multi-component model, the thermal conduction in a two components flow, the evaporation of a liquid droplet and the growth and migration of a bubble from a superheated wall are analyzed. For all simulations, the relaxation parameters  $s_1, s_4, s_6$  and  $s_8$  and the free parameters  $s_9, s_{11}, s_{13}, s_{17}, s_{18}$  and  $s_{19}$  are set to 1.0 in the MRT operator. The relaxation parameters  $s_2, s_3, s_5, s_7$  and  $s_9$  are set to 1.1.

### 6.5.1 Rayleigh Bénard convection

Rayleigh-Bénard convection is a standard test case to validate a single phase thermal model. This test case simulates a flow caused by the expansion of a fluid and the buoyancy effects. Initially, a static fluid in a rectangular geometry is heated from the bottom wall and a low temperature is maintained on the top wall. A superheated point is applied to the center of the bottom wall. The temperature difference between the two walls increases and the conduction becomes unstable for any small disturbance.

In the present simulation, a computational domain  $102*52*52$  is used. Bounce-back boundary conditions for velocity and Zou-He conditions for temperature are imposed on the upper and lower surface of the rectangular domain. Periodic conditions are imposed in other directions. The simulation is carried out with air whose properties are  $Pr = 0.71$  and  $v_{air} = 1.5*10^{-5}$  at  $20^\circ C$ . Two

non-dimensional parameters are important in this simulation: the Rayleigh number and the Prandtl number. Kinematic viscosity, thermal conductivity and thermal relaxation time are determined by the fluid relaxation parameter  $\tau$ , the Rayleigh number  $Ra$  and the Prandtl number. Figure 6.1 represents the simulation of the Rayleigh-Bénard convection for  $Ra = 10\,000$  and  $Ra = 100\,000$  with  $Pr = 0.71$  at a half position in the  $z$  direction .

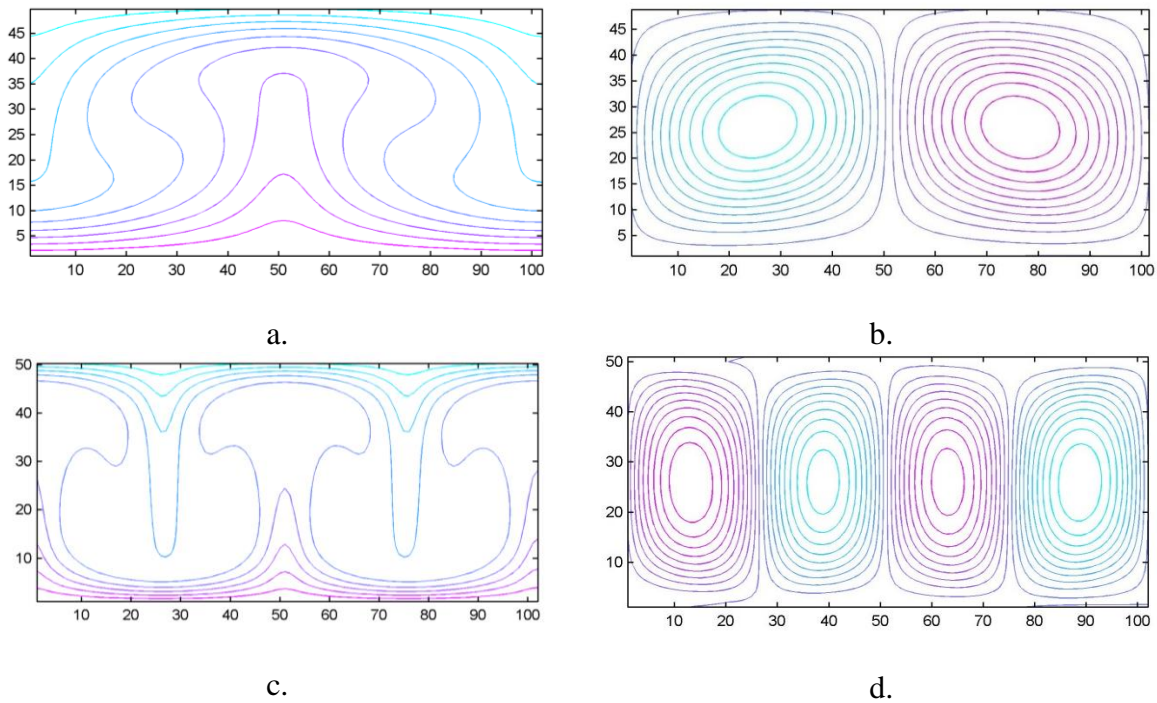


Figure 6.1: Temperature contours for  $Ra = 10\,000$  (a.) et  $Ra = 100\,000$  (c.). Stream function contours for  $Ra = 10\,000$  (b.) et  $Ra = 100\,000$  (d.)

Figure 6.1a and Figure 6.1c represents the temperature contour for  $Ra = 10\,000$  and  $Ra = 100\,000$  respectively. Figure 6.1b and Figure 6.1d represents the current function for  $Ra = 10\,000$  and  $Ra = 100\,000$  respectively. The air near the bottom plate heats up, its density becomes lower and therefore the hot air has an upward movement. The colder air close to the upper plate is denser and then has a downward movement. This results in a circulation of the air corresponding to the natural convection as observed in Figure 6.1. Convection predominates over conduction when the Rayleigh number is increased.

The linear stability theory shows that the critical Rayleigh number is  $Ra_c = 1707.76$ . We propose to validate the critical Rayleigh number by calculating the growth or decrease rate of the maximum vertical velocity for different Rayleigh numbers  $Ra = 1680, 1690, 1700, 1710$ . Figure

6.2 gives the evolution of growth or decrease rate for various Rayleigh numbers. A linear interpolation allows then determining the critical Rayleigh number  $Ra_c$  corresponding to a growth or decrease rate of the vertical velocity equal to zero. The critical Rayleigh number obtained is  $Ra_c = 1704.5$ . The error relative is of 0.19%. Thus, the numerical critical Rayleigh number  $Ra_c$  is in agreement with the theory of linear stability.

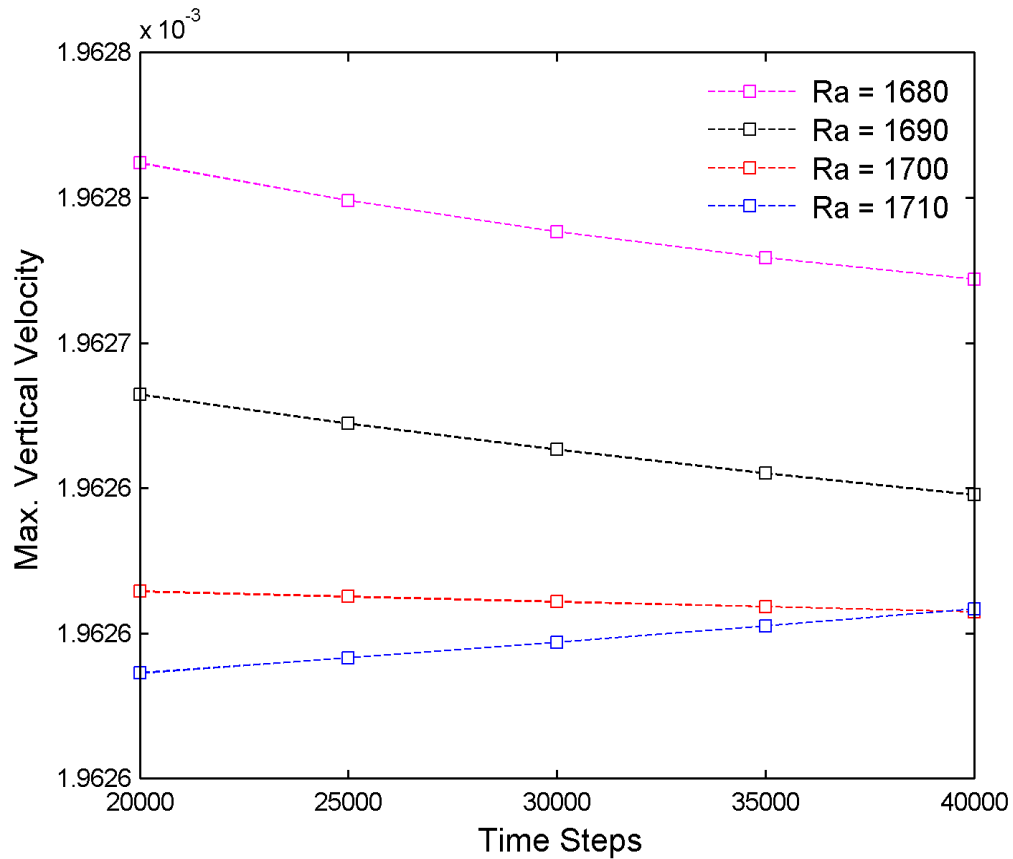


Figure 6.2: Evolution of growth or decrease rate for different Rayleigh numbers

Figure 6.3 shows the evolution of Nusselt number  $Nu$  as a function of Rayleigh number for Prandtl number  $Pr = 0.71$ . The Nusselt number was obtained numerically for  $Ra = 5000, 10\ 000, 20\ 000, 30\ 000, 50\ 000$  and  $100\ 000$ . The numerical Nusselt numbers are compared with the empirical formulation  $Nu = 1.56 (Ra / Ra_c)^{0.296}$  [65]. Despite a slight deviation for high Rayleigh numbers, the numerical results are consistent with the empirical correlation.

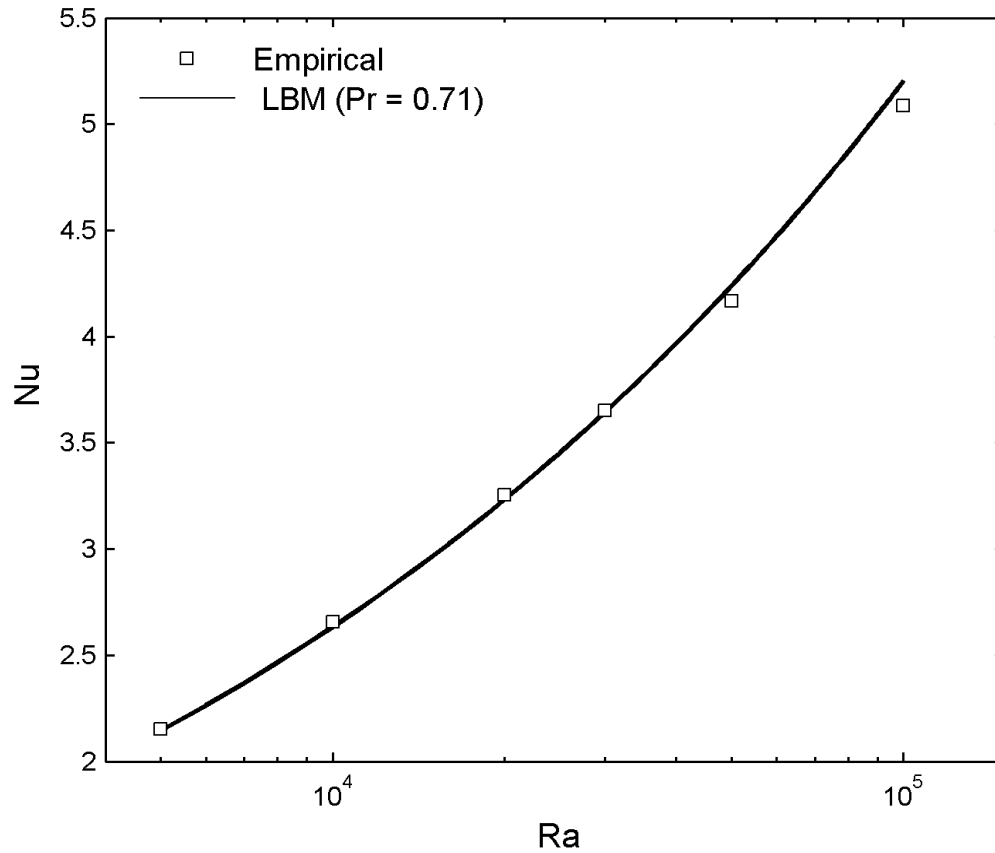


Figure 6.3: Evolution of Nusselt numbers as a function of Rayleigh number

### 6.5.2 Thermal Poiseuille

Poiseuille flow between two parallel plates distant from a height  $H$  is simulated. The thermal effects are taken into account in this test case. The geometry problem is shown in Figure 6.4.

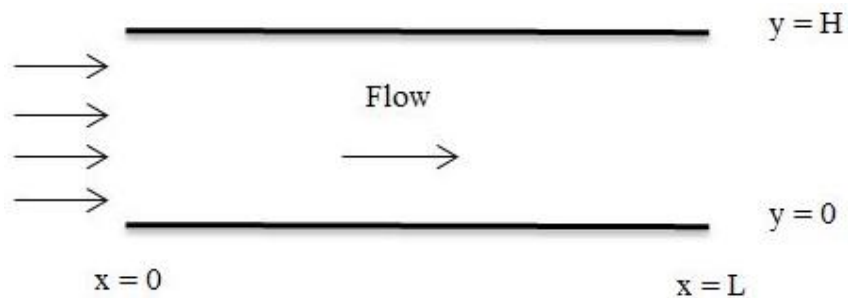


Figure 6.4: Geometry of the problem

Bounce-back boundaries conditions are imposed on the top and bottom walls. Zou-He boundary condition is used to impose a uniform velocity at the inlet of the domain. In other directions, periodic conditions are imposed. The temperature is analyzed as a function of the non-dimensional temperature  $\theta = \frac{T-T_w}{T_0-T_w}$ .  $T_0$  and  $T_w$  represent the temperature at the inlet of the domain and the temperature at the walls respectively. Zou-He boundary conditions are applied to impose the non-dimensional temperature at 1 and 0 at the entrance of the domain and walls respectively. The domain size used is  $100*2000*10$ . For our simulations, a Reynolds number  $Re = 40$  and a Prandtl number  $Pr = 0.71$  are chosen. The advantage of this test case is that the analytical solution for velocity and temperature are known. In laminar regime and for a fully developed flow, the velocity profile is given by the following equation:

$$u(y) = \frac{4u_{max}}{H^2} y(H - y) \quad (6.48)$$

And the temperature profile is given by the following equation:

$$T(y) = T_w + \frac{\mu u_{max}}{4\alpha} \left( 1 - \frac{y^4}{L^4} \right) \quad (6.49)$$

Where  $\alpha$  the thermal diffusivity and  $\mu$  is the dynamic viscosity of the fluid. Figure 6.5 shows the analytical and numerical velocity profile at a half position in the z direction. The results are in agreement with an error of 0.23%.

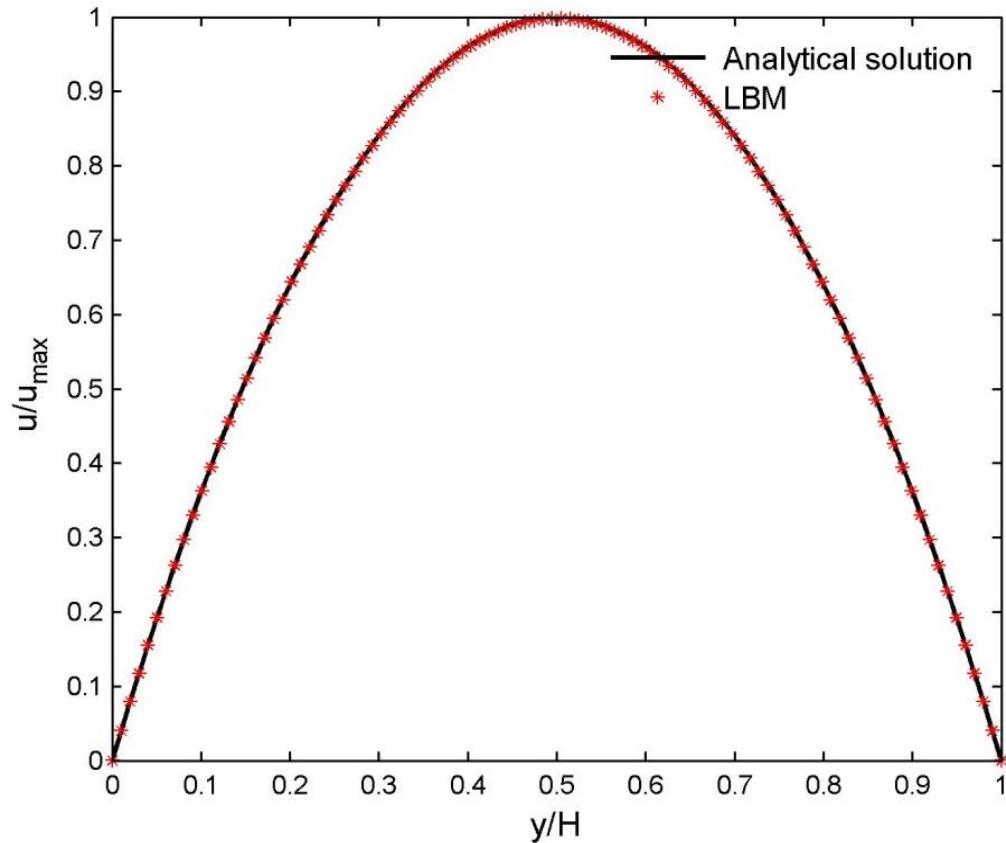


Figure 6.5: Comparison of the analytical and numerical velocity profile for  $Re = 40$  and  $Pr = 0.71$

Figure 6.6 shows the temperature profile for different cross-section  $x/L$ . It is shown that the temperature deviation between  $x/L = 0.6$  and  $x/L = 0.7$  is 0.7%. The flow is then considered fully developed from  $x/L = 0.7$ . The numerical solution of the profile temperature in fully developed regime is compared with the analytical solution in Figure 6.7. The results are in agreement with an error of 0.64%.



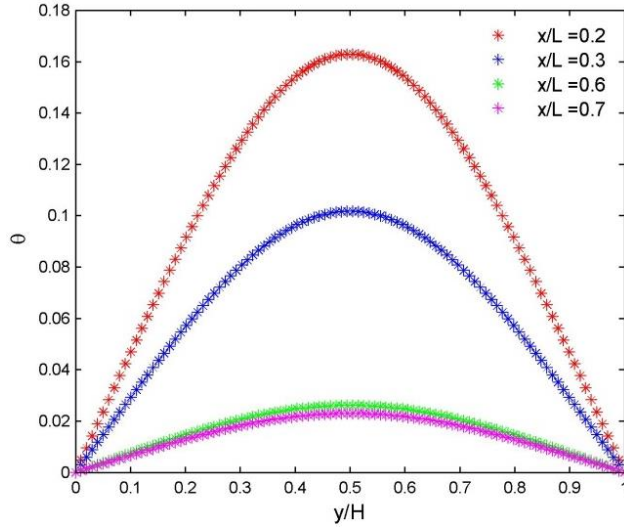


Figure 6.6: Non-dimensional temperature profiles for different cross-section  $x/L$

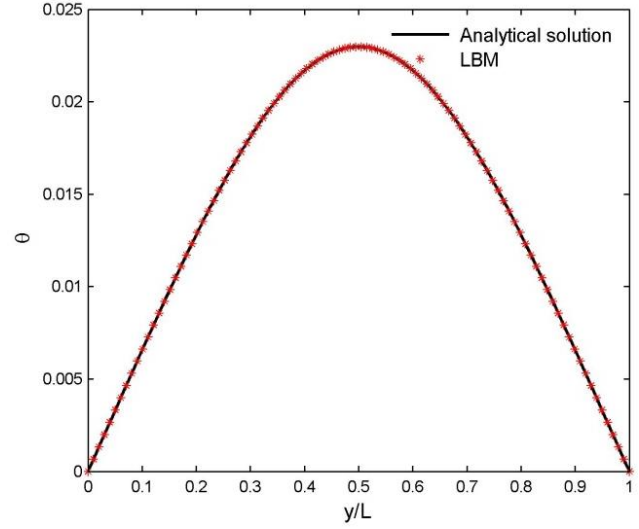


Figure 6.7: Comparison between the analytical and numerical profile temperature in fully developed regime

### 6.5.3 Thermodynamic Consistency

In order to validate our thermal multi-component model, we propose first to verify the thermodynamic consistency. A series of simulations of a liquid droplet suspended in water vapor is performed. For water, the accentric factor is equal to  $\omega = 0.3443$ , the critical temperature  $T_c = 374.1$  °C and the critical pressure  $p_c = 22.064$  MPa. For each simulation, a droplet of liquid water is initially placed at the center of the domain. The initial density of the domain is given by:

$$\rho(x, y, z) = \frac{\rho_{liq} + \rho_{gaz}}{2} - \frac{\rho_{liq} - \rho_{gaz}}{2} \tanh\left(\frac{2(r - R)}{W}\right) \quad (6.50)$$

where  $r = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2 + (z - z_c)^2}$ .  $(x_c, y_c, z_c)$  corresponds to the center of the domain.  $W$  is the initial interface width and is fixed at 3 units. The initialization of density using Eq.(6.50) allows a smooth transition of the density distribution and avoids numerical instability in early iterations [83]. A computational domain  $64*64*64$  is considered. Periodic conditions are imposed in all directions. The  $\beta$  parameter in Eq.(6.22) is set to 1.16. When equilibrium is reached after 9300 time-steps, the equilibrium density of the liquid droplet and the water vapor are measured. We assume that equilibrium is reached when  $\max |\rho^{n+1} - \rho^n| < 10^{-6}$ . Figure 6.8

illustrates the convergence. Figure 6.9 shows the numerical coexistence curve and the coexistence curve obtained by the Maxwell construction. The temperature  $T$  ( $^{\circ}\text{C}$ ) as a function of the reduced density  $\rho_r$  is plotted. The reduced density  $\rho_r$  corresponds to the density ratio  $\rho_r = \frac{\rho}{\rho_c}$ . A good agreement between the two coexistence curves is observed. Thus, our model is able to simulate high density ratios while preserving the thermodynamic consistency.

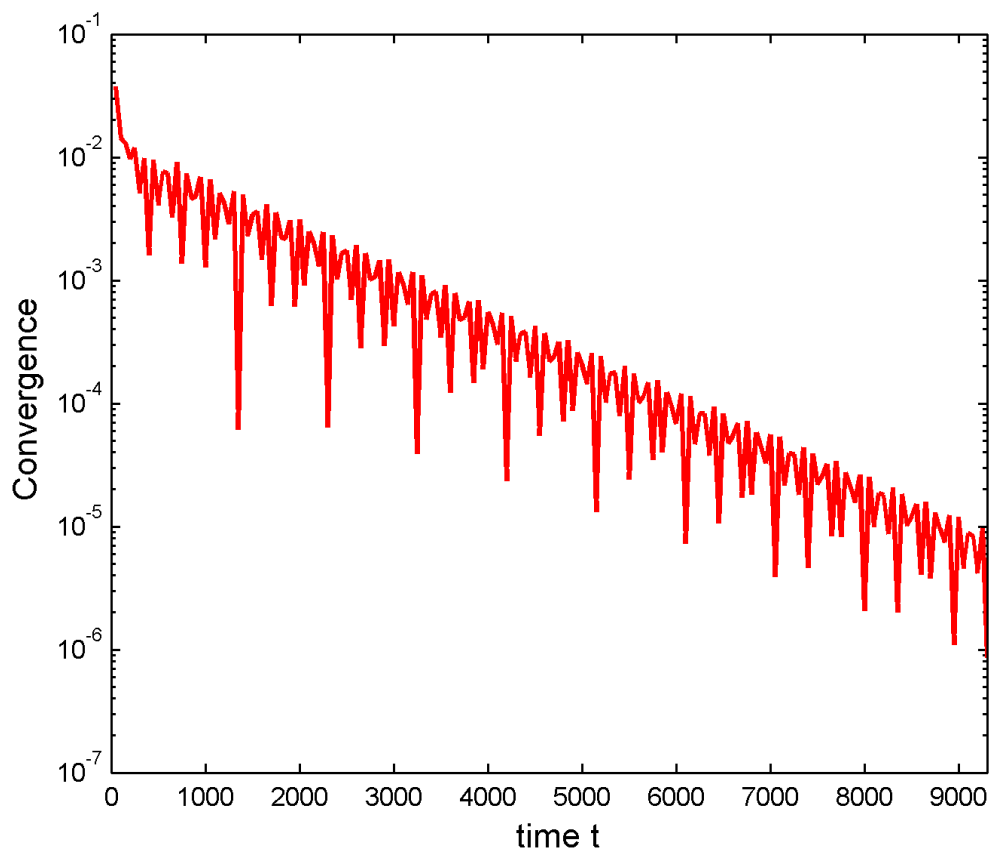


Figure 6.8: Convergence

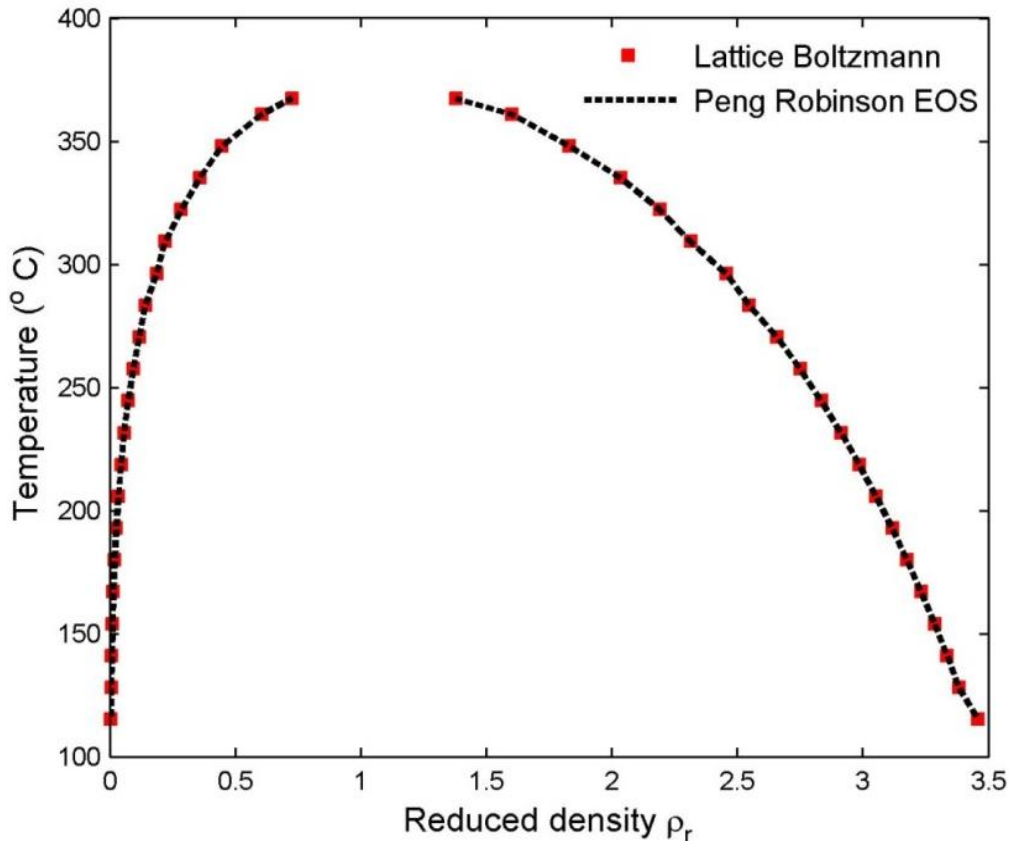


Figure 6.9: Numerical coexistence curves and coexistence curves given by the Maxwell construction

#### 6.5.4 Thermal conduction in two component flow

Thermal conduction in a two-phase flow is the first test case to validate our thermal multi-component model. The simulation of the conduction in two immiscible fluids between two parallel plates of height  $H$  is performed. The simulated fluid is water in the liquid and vapor phase. The accentric factor  $\omega$  in Peng Robinson's equation of state is then set to  $\omega = 0.3443$ . A computational domain  $100 \times 200 \times 32$  is used. Bounce-back boundaries conditions for the velocity and Zou-He boundaries conditions for temperature are imposed on the lower and upper wall of the domain. The upper and lower walls have a temperature equal to  $219^\circ\text{C}$  and  $310^\circ\text{C}$  respectively corresponding to a reduced temperature equal to  $T_r = 0.75$  and  $T_r = 0.90$ . In other directions, periodic boundary conditions are imposed. In steady state, the temperature profile at a cross section  $x/L = 0.5$  and at a half position in the  $z$  direction is shown in Figure 6.10. A linear

temperature profile is obtained in the two layers of fluids. The linearity of the profile temperature is even preserved through the diffuse interface. The result obtained is then consistent with the theory of heat transfer. Thus, the simulation of thermal conduction confirms that the coupling between the thermal model and the multi-component multiphase model was performed correctly.

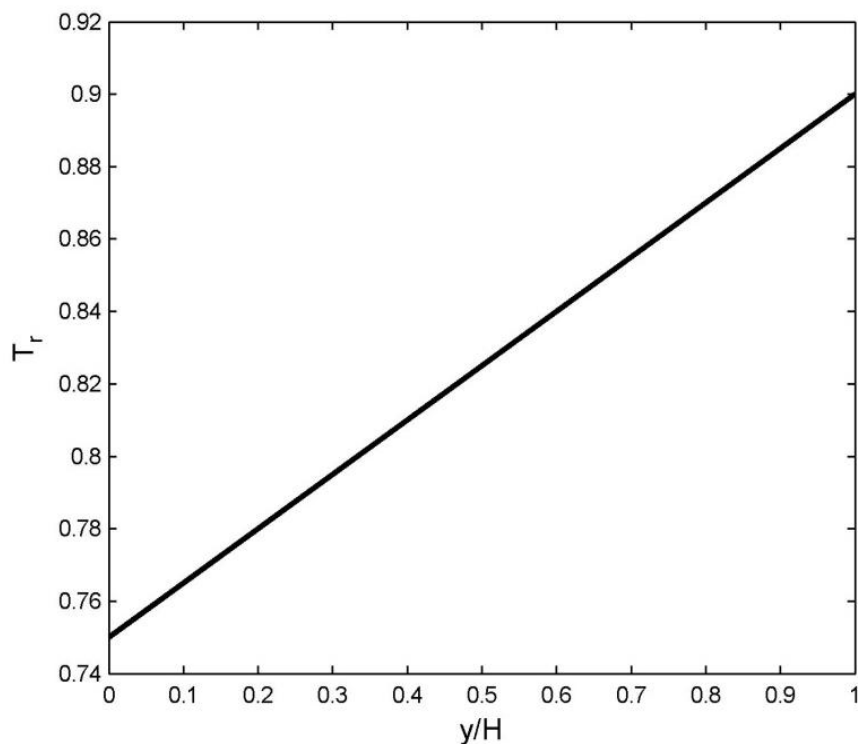


Figure 6.10: Temperature profile at a cross section  $x/L = 0.5$

### 6.5.5 Droplet Evaporation

Evaporation of a liquid droplet is now analyzed. The goal is to validate the ability of our model to simulate the phase change in a two components immiscible flow. A stationary droplet of water of radius  $r = 17 \text{ lu}$  is placed initially at the center of the computational domain. The environment of the liquid droplet is water vapor. Figure 6.11 shows the geometric configuration.

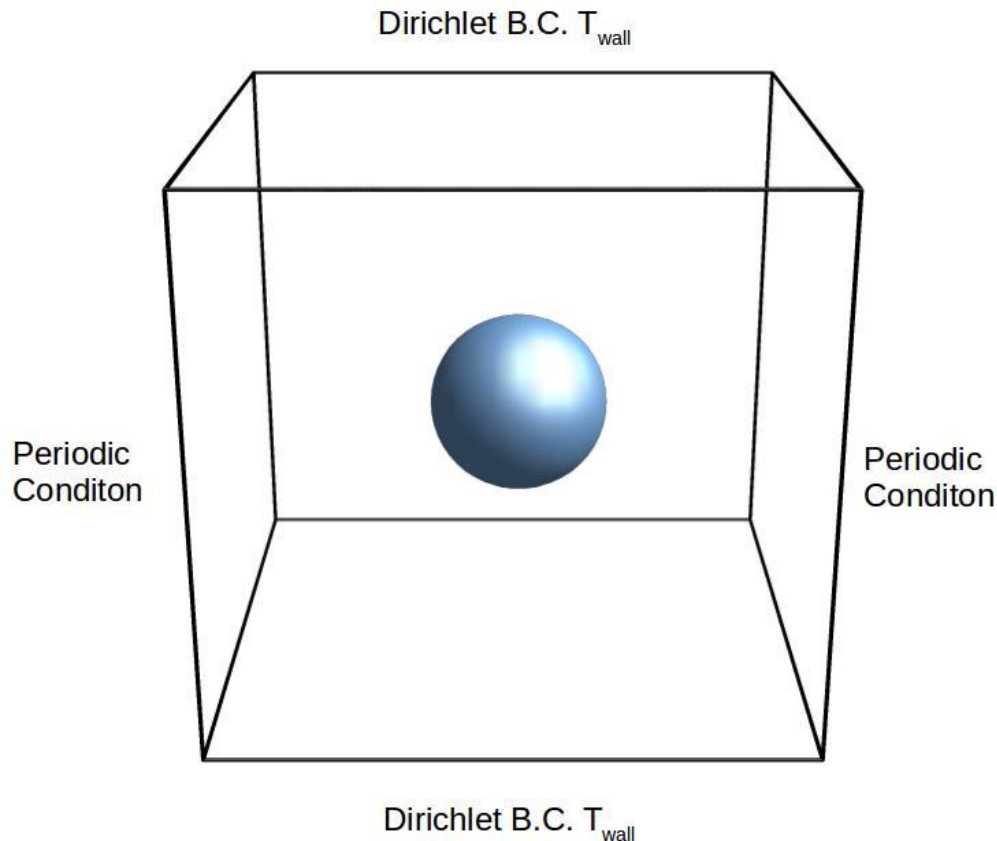


Figure 6.11: Geometric configuration

A domain size  $64*64*64$  is used for the simulations. Periodic conditions are imposed in all directions. The equilibrium densities for liquid and vapor water are respectively  $\rho_d = 1117 \text{ kg/m}^3$  and  $\rho_g = 1.44 \text{ kg/m}^3$  corresponding to a saturation temperature  $T_{sat} = 115 \text{ }^\circ\text{C}$ . The liquid droplet is first equilibrated with the surrounding water vapor at the saturation temperature  $T_{sat}$ . When the equilibrium between the two components is reached, the temperature of the upper and lower wall is increased by imposing Dirichlet boundaries conditions  $T_{wall} = T_{sat} + T_{superheat}$ .  $T_{superheat}$  represents the increase in temperature at the walls and is fixed at  $85 \text{ }^\circ\text{C}$ . Conduction heat transfer then takes place between the heated walls and the surrounding vapor and then between the surrounding vapor and the liquid droplet. Thus, the liquid droplet warms up and the evaporation process begins. Figure 6.12 shows the evolution of the phase change process. Over time, the droplet will retract until it evaporates. We observe flow dynamics in the radial direction.

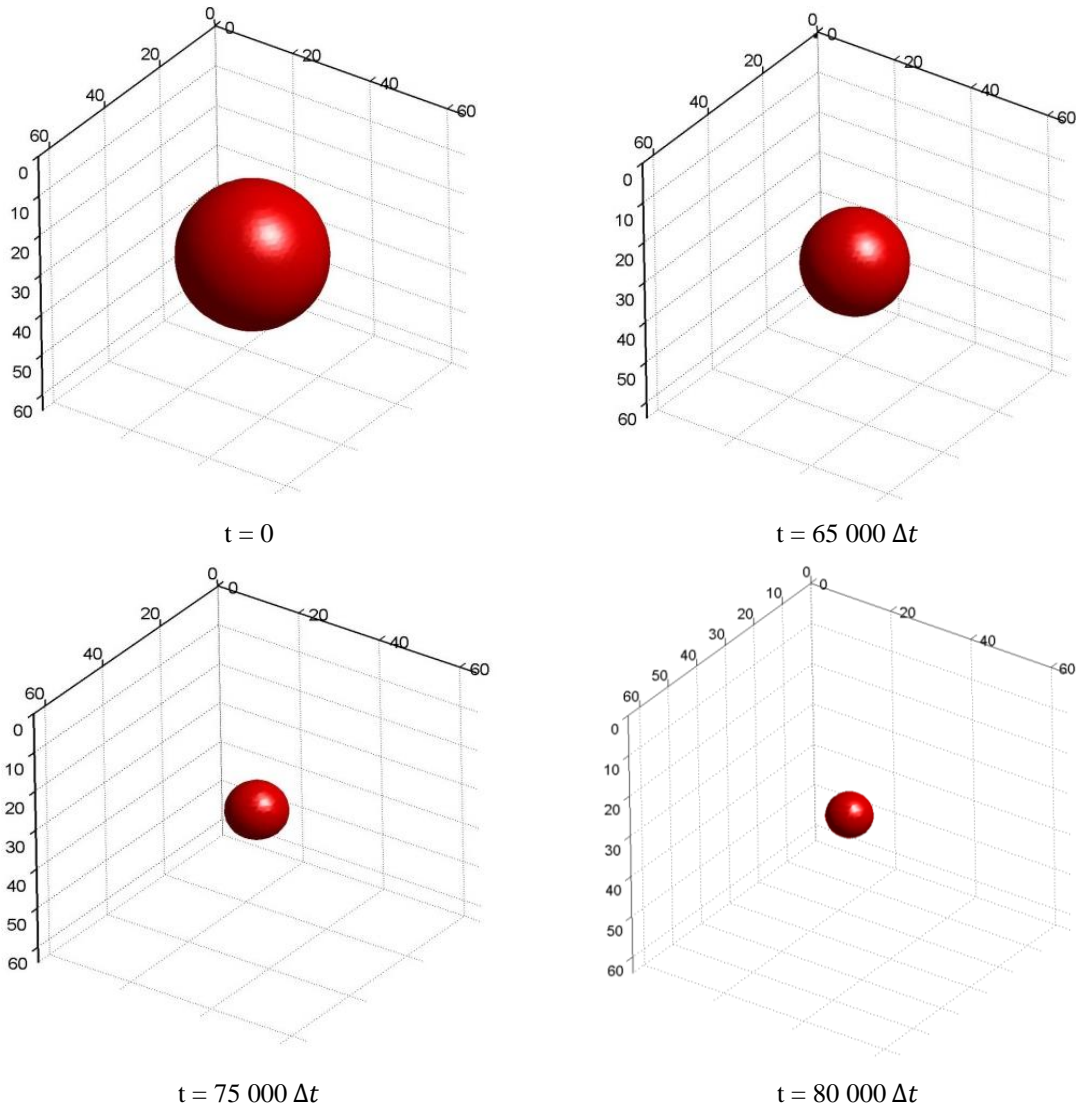


Figure 6.12: Snapshots of the evaporation process

We observe a flow dynamics in the radial direction. Evaporation of the static droplet occurs only because of the diffusion. Figure 6.13 compares the diameter evolution of the liquid droplet during the evaporation process for different  $\kappa$  values.  $\kappa$  is adjusted in Eq. (6.25) to obtain different surface tension independently of the density ratio. We recall that an increase in  $\kappa$  decreases the surface tension. We observe that the droplet diameter decreases according to the  $D^2$  law independently of the surface tension. The increase in the isotropy order in the interaction force (isotropy order of 8) allows to reduce significantly the parasitic velocities at the liquid-vapor interface and thus to minimize the advection. However, a slight deviation from the  $D^2$  law is

observed when kappa decreases. When  $\kappa$  is small, the diffusion is more important. An increase in the interface thickness is then observed what may explain this deviation.

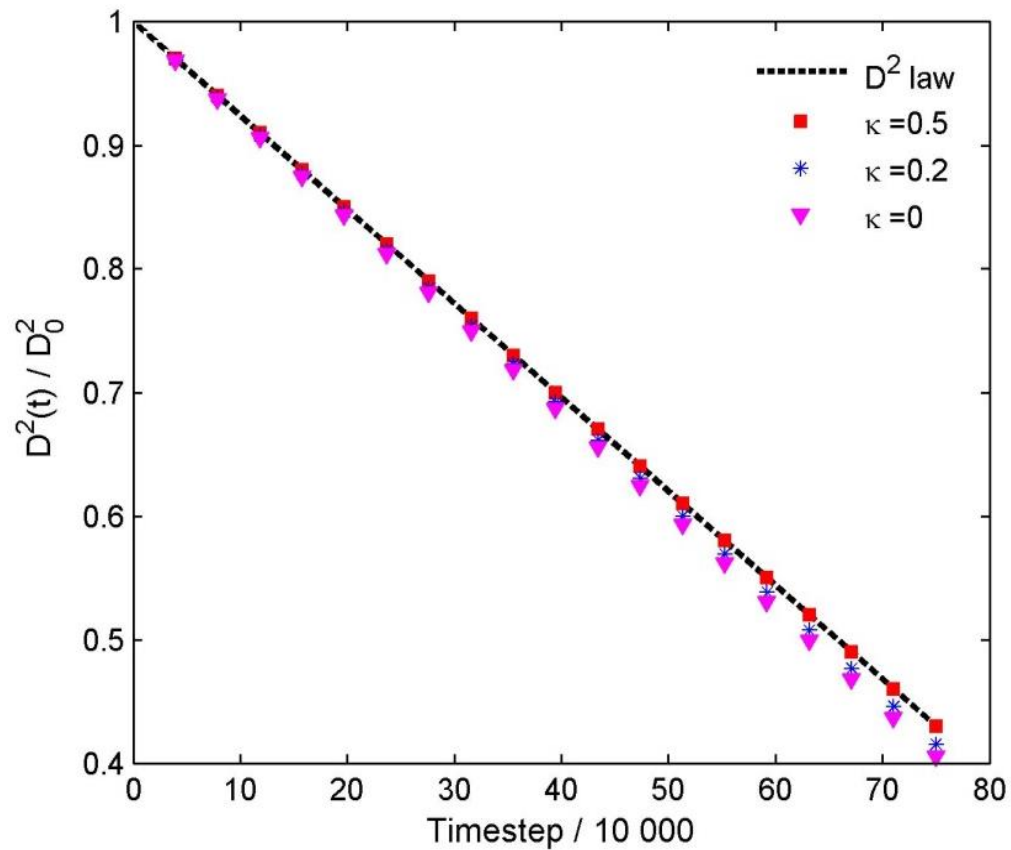


Figure 6.13: Comparison between the normalized square diameter in time and the  $D^2$  law for different  $\kappa$  parameters

Figure 6.14 compares the evolution of the droplet diameter with the  $D^2$  law for different vaporization latent heat  $L_v$ .

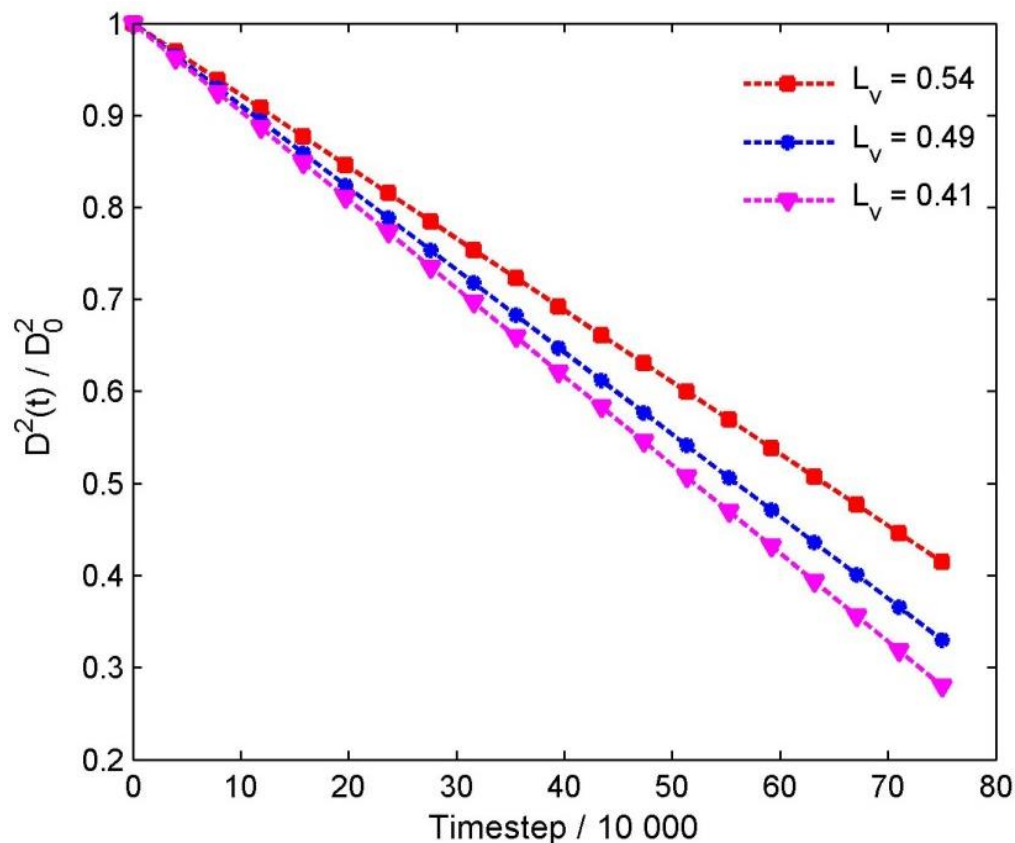


Figure 6.14: Comparison between the normalized square diameter in time and the  $D^2$  law for different vaporization latent heat  $L_v$

In all cases, the droplet diameter decreases according to the  $D^2$  law. However, the evaporation rate is observed to be slower when the vaporization latent heat is increased. The droplet diameter decreases less rapidly. Greater heat transfer would be required to allow a faster phase change. This test case highlights the ability of our model to simulate phase change and heat exchange between components of a flow.

### 6.5.6 Bubble growth and migration from a superheated surface

We propose now to simulate the growth and migration of a bubble from a superheated wall. Our goal is to further validate the phase change process of the proposed model. A domain size study was first performed to analyze the interaction between the bubble and the lateral surfaces. The computational domain would only affect the rising velocity of the bubble. As in Ref [123], a computational domain  $150 \times 300 \times 42$  is used to obtain results independent of the grid. This domain



is initialized by liquid water at a saturation temperature  $T_{sat} = 244^{\circ}\text{C}$  and a small bubble is placed in the center of the bottom wall. Bounce back conditions for the velocity and Zero Gradient for temperature is imposed on the bottom wall. The temperature of the lower plate is imposed at  $T = 300^{\circ}\text{C}$  and a pressure condition corresponding to the saturation pressure  $p_{sat} = 3.56\text{ MPa}$  of the liquid water is imposed on the upper wall. On the bottom wall, an overheating point is also created in this center. Figure 6.15 shows the bubble growth and then its migration. At first, the bubble begins to grow. A neck gradually forms under the buoyancy effect. When the bubble diameter reaches its maximum, the bubble detaches leaving a bubble fragment in contact with the bottom wall. The bubble continues its rising gradually under the buoyancy effect.

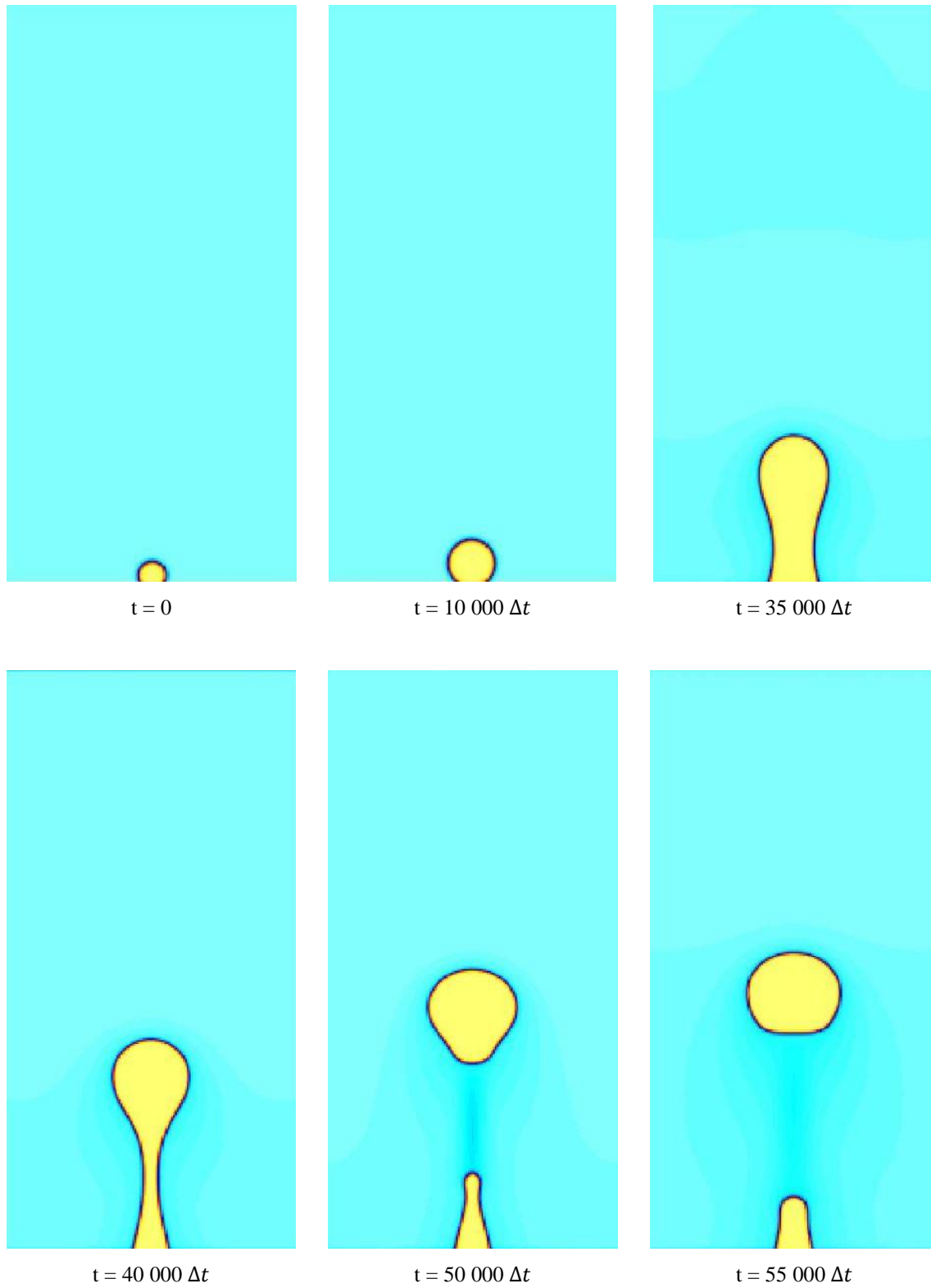


Figure 6.15: Bubble growth and migration from a superheated surface

We propose to analyze the gravity effect on the departure diameter of the bubble. A series of simulations is then performed at different gravity amplitude  $|g|$ . Figure 6.16 shows the departure diameter evolution the as a function of the amplitude of the gravity  $|g|$ .

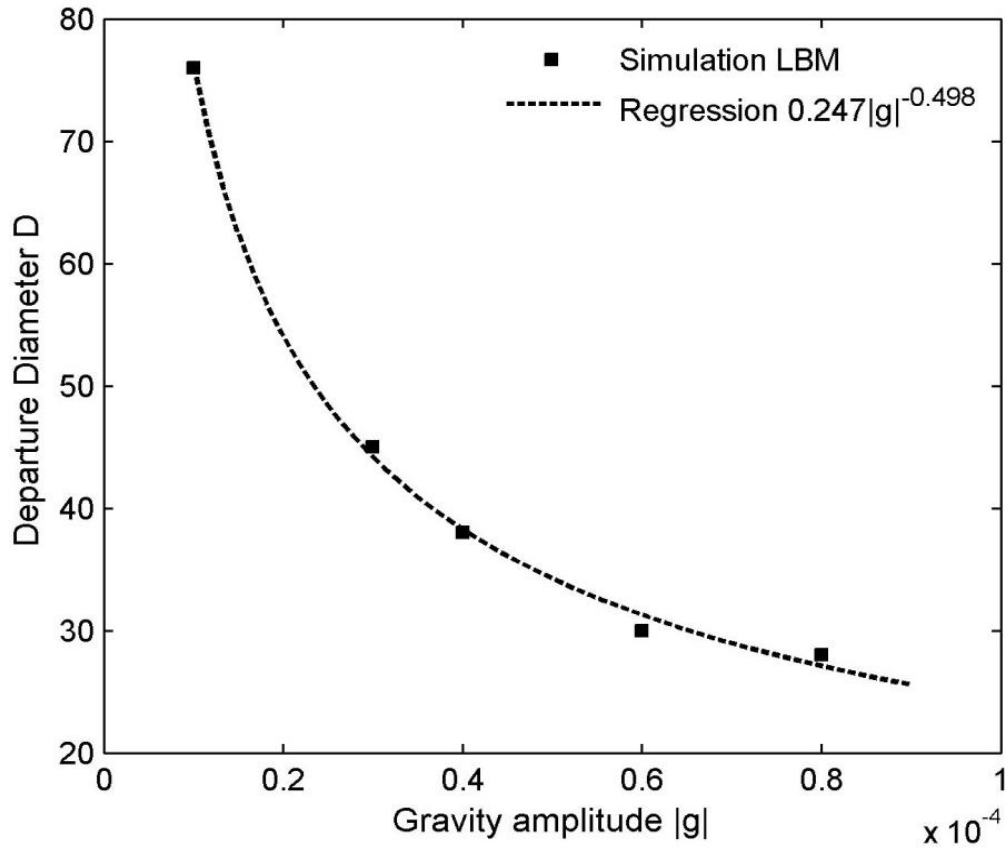


Figure 6.16: Departure diameter evolution in function of gravity amplitude  $|g|$

In Ref [126], the relationship between the gravity amplitude and the departure diameter of the bubble is established as follows:

$$D \sim |g|^{-0.5} \quad (6.51)$$

In Fig. Figure 6.16, the regression in solid line shows that the departure diameter is proportional  $|g|^{-0.498}$  with a proportionality coefficient equal to 0.247. Thus, our simulation results are in agreement with the relationship in Eq.(6.51).

## 6.6 Conclusion

In this paper, we propose a 3D-MRT Boltzmann lattice model with phase change and heat transfer for a multiphase multi-component system. The form of the source term to simulate the phase change in the case of multi-component flows is given. Heat exchanges between components are also taken into account in this work. An improved version of the original pseudo-potential model is used in our model. An isotropy order of 8 is used in the interaction force to reduce spurious currents, the Peng Robinson state equation is incorporated to simulate high density ratios and the explicit forcing model is implemented to simulate high ratios viscosity. In our model, the surface tension can be adjusted independently of the density. The proposed model was evaluated by verifying the thermodynamic consistency. An analysis of the thermal conduction, the evaporation of a liquid droplet and finally the growth and migration of a bubble from a superheated surface are carried out in this paper. It has been shown that the reduction of the droplet diameter in the evaporation process follows a  $D^2$  law. The influence of vaporization heat was also investigated. Finally, it is validated that the departure diameter of a bubble of a heated surface is well proportional to  $|g|^{-0.5}$ .

## Acknowledgements

The authors thank Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada for their financial support (NSERC), under grant number RGPIN-2016-06427.

## CHAPITRE 7 DISCUSSION GÉNÉRALE

Dans cette thèse, trois problématiques sont traitées. En premier lieu, l'incapacité du modèle pseudo-potentiel à ajuster la tension de surface indépendamment de la densité dans la simulation 3D d'écoulements multiphasiques est corrigée en modifiant le tenseur de pression. La tension de surface et la densité sont désormais contrôlées séparément tout en conservant la consistance thermodynamique. Le modèle amélioré a été appliqué à l'analyse de l'impact d'une gouttelette sur des surfaces sèche et mouillée pour des ratios de densité élevés. Par la suite, la méthode de modification du tenseur de pression a été généralisée à la simulation d'écoulements à plusieurs phases et plusieurs composants. Le modèle permet de résoudre des écoulements multiphasiques dont le ratio de densité et de viscosité est de  $O(1000)$ . Finalement, les effets thermiques sont ajoutés au modèle afin de simuler le changement de phase liquide-vapeur et les échanges de chaleur entre composants. Un terme source est ajouté à l'équation de température pour traiter ce changement de phase. Son expression a été développée et obtenue en fonction de la chaleur latente de vaporisation afin de la découpler de l'équation d'état des gaz réel. L'évaporation d'une gouttelette et la croissance d'une bulle à partir d'une surface surchauffée ont été simulées et analysées. La résolution des trois problématiques constitue les contributions de cette thèse. Le présent chapitre discute des limitations du modèle proposé.

### 7.1 Limitations

Le modèle pseudo-potentiel à plusieurs phases et plusieurs composants a été amélioré en corrigeant certaines de ses faiblesses et en incorporant des phénomènes physiques plus complexes. Cependant, certaines limitations subsistent pour pouvoir simuler à long terme l'impact et le givrage de gouttelettes sur un avion.

- Faible nombre de Reynolds

Pendant un vol, un avion rencontre des gouttelettes dont le nombre de Reynolds est de l'ordre  $10^5$  et le nombre de Weber de l'ordre de 300. Le paramètre d'éclaboussure dans l'Éq.(2.4) est donc de l'ordre de 9500 et l'éclaboussure de la gouttelette se produit dans ce type d'application. Cependant, dans notre modèle, seuls des paramètres de simulation correspondant au dépôt de la gouttelette peuvent être simulés. Pour des hauts nombres de Reynolds, le modèle devient instable malgré que l'opérateur de collision MRT soit appliqué. Contrairement à l'opérateur de collision

SRT, l'opérateur MRT permet d'ajuster la viscosité cinématique et la viscosité volumique séparément. Les moments sont relaxés individuellement et sont ensuite convertis en fonction de distribution. Cet opérateur permet de maintenir la viscosité volumique suffisamment grande pour dissiper les fluctuations de densité tout en minimisant la viscosité de cisaillement pour des nombres de Reynolds élevé. Les paramètres de relaxation sont ajustés par essai-erreur jusqu'à obtenir une stabilité optimal. Dans notre modèle, les paramètres de relaxation  $s_1, s_4, s_6$  and  $s_8$  et les paramètres libres  $s_9, s_{11}, s_{13}, s_{17}, s_{18}$  and  $s_{19}$  sont imposés à 1. Les paramètres de relaxation  $s_2, s_3, s_5, s_7, s_9$  sont choisis à 1.1. Ces paramètres permettent d'atteindre des nombres de Reynolds de 200 et des nombres de Weber de 100, mais ne permettent pas la simulation de nombre de Reynolds et de nombre de Weber élevé comme dans l'impact et givrage de gouttelette dans des conditions de vol. De plus, pour pouvoir capter les gouttelettes secondaires créées, suite à l'éclaboussure de gouttelettes, une discrétisation spatiale très fine est requise. Le nombre de nœuds dans un domaine 3D serait de l'ordre de  $Re^{9/4}$  et on peut montrer que le temps de calcul est proportionnel à  $Re^{11/4}$ . La simulation de l'éclaboussure de gouttelette conduirait à des coûts de calcul élevé [127, 128].

- Faible nombre de Mach

L'hypothèse de faible nombre de Mach constitue une restriction, puisqu'elle limite la simulation à des écoulements où les vitesses ne sont pas trop élevées. Cette hypothèse doit être considérée en permanence pour assurer la stabilité des simulations numériques et se traduit par un nombre de courant  $C$ :

$$C = \frac{u\Delta t}{\Delta x} < 1 \quad (7.1)$$

Comme le pas géométrique  $\Delta x$  est lié au pas de temps  $\Delta t$  par la relation  $\Delta x = e_i \Delta t$ , la condition sur le nombre de courant se réécrit  $C = Ma < 1$ , où  $Ma$  est le nombre de Mach. Cette condition de stabilité est directement vérifiée si la condition d'incompressibilité  $Ma \ll 1$  de la définition de la distribution d'équilibre est bien respectée. Comme, en pratique, la vitesse  $e_i$  est normalisée à 1, la condition d'incompressibilité et de nombre de Courant se traduit par une condition de vitesse  $u \ll 1$ .

Une extension du modèle proposé à des nombres de Mach plus élevés est à prévoir. Une solution serait de modifier la fonction de distribution d'équilibre pour l'adapter à des Mach élevés.

- Écoulement limité à deux phases

Dans le thème 3 de cette thèse, les effets thermiques sont intégrés au modèle multiphasique à plusieurs composants. Un modèle thermique est couplé au modèle pseudo-potentiel. Le modèle proposé est capable de simuler le changement de phase liquide-vapeur et les échanges de chaleur entre composants. Cependant, la simulation du changement de phase liquide-solide dans un écoulement liquide-gaz n'est pas possible. Une extension du modèle au cas à plusieurs phases est alors requise pour pouvoir simuler la solidification de gouttelettes. Mais, la généralisation du modèle à la simulation de trois phases n'est pas directe.

Dans un système composé d'une phase liquide et solide, l'équation de température doit être résolue pour chacune des deux phases. À l'interface des phases, la discontinuité du flux de chaleur et l'évolution du front de solidification sont liées par la condition de Stefan. Cependant, cette approche requiert un suivi de l'interface. Pour remédier à ce problème, une formulation enthalpique de l'équation de chaleur serait à envisager afin de s'affranchir du suivi du front de solidification. Un premier pas dans cette direction est inclus en Annexe 1.

## CHAPITRE 8 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

L'objectif de cette thèse est de développer un modèle multiphasique pour pouvoir simuler à long terme l'impact et le givrage de gouttelettes sur les surfaces d'un avion. En raison de sa popularité et sa facilité à être implémenté, le modèle multiphasique de Shan-Chen basé sur la méthode de Boltzmann sur réseau a été choisi pour être étudié tout au long de cette recherche doctorale. Comme, tout modèle numérique, ce dernier présente des avantages et des inconvénients. Les contributions et applications présentées dans le chapitre 3 ont permis de corriger certaines de ces faiblesses et d'élargir son champ d'application en vue de simuler la solidification de gouttelettes. Le modèle pseudo-potential proposé a été appliqué à divers cas tests qualitatifs et quantitatifs afin de mettre en évidence les améliorations apportées.

Le premier thème résout le problème d'interdépendance entre la tension de surface et la densité. La méthode de modification du tenseur de pression est appliquée pour découpler la tension de surface et la densité tout en préservant la consistance thermodynamique. Le modèle a été appliqué à l'impact d'une gouttelette sur une surface sèche et mouillée. Les résultats obtenus ont été comparés à des résultats expérimentaux et des corrélations publiés dans la littérature. Le second thème généralise la méthode de modification du tenseur de pression au cas d'écoulements multiphasique à plusieurs composants. L'objectif était de découpler la tension de surface et le ratio de densité dans la simulation de problème d'ingénierie tridimensionnelle à ratio de viscosité élevé. Enfin, dans le troisième thème, les effets thermiques sont ajoutés au modèle multiphasique à plusieurs composants développés dans le thème précédent. La transition de phase et les échanges de chaleur entre composants sont tous les deux pris en compte. Basée sur la relation thermodynamique de l'entropie, l'expression du terme source modélisant la transition de phase a été obtenue. La chaleur latente de vaporisation a été introduite dans ce terme source afin de le découpler de l'équation d'état des gaz réels. Le modèle proposé a été appliqué aux problèmes d'évaporation d'une gouttelette liquide et la croissance d'une bulle à partir d'une surface surchauffée.

### 8.1 Recommandations

Cette sous-section propose quelques recommandations pour résoudre les limitations du modèle énoncées dans le chapitre précédent.



Dans le modèle proposé, la simulation des écoulements multiphasiques à plusieurs composants est limitée à des faibles nombres de Reynolds et des faibles nombres de Weber ce qui restreint son application à la simulation de l'impact et givrage de gouttelettes sur un avion. L'ajustement par essai-erreur des paramètres de relaxation dans l'opérateur de collision MRT pour pouvoir simuler des nombres de Reynolds et de Weber élevé n'est pas adapté et ne garantit pas toujours la stabilité numérique du modèle. La stabilité numérique est d'autant plus affectée que le ratio de densité est élevé. Geier et al [129] montrent que les opérateurs de collision SRT et MRT deviennent instable lorsque le terme  $\Delta t/\tau$  s'approche de 2, où  $\tau$  le temps de relaxation. Pour pallier ce problème, ils proposent l'opérateur de collision cascade. Comme l'opérateur MRT, cet opérateur est basé sur un transfert des fonctions de distribution dans l'espace des moments, mais il n'utilise pas l'origine du système (vitesse nulle) comme référence inertielle, mais plutôt la vitesse du fluide. Cette approche augmente le degré d'invariance galiléenne et ainsi améliore la stabilité numérique. Pour valider sa méthode, l'opérateur a été appliqué à la simulation d'un écoulement autour d'une plaque rectangulaire à un  $Re = 1,4 \cdot 10^6$  [129]. Ainsi, cet opérateur présente de nombreux atouts pour permettre la résolution d'écoulement à nombre de Reynolds élevé dans un contexte de simulation de l'impact et givrage de gouttelettes sur un avion.

L'hypothèse de faible nombre de Mach est une autre limitation du modèle, puisqu'elle contraint la simulation à des écoulements où les vitesses ne sont pas trop élevées. Des travaux futurs pourraient, par exemple, modifier la fonction de distribution d'équilibre afin de l'adapter à des nombres de Mach élevés.

Trois phases liquide-solide-gaz interviennent dans la simulation du givrage de gouttelettes. Cependant, notre modèle est limité à la simulation d'écoulement de seulement deux phases: liquide et gaz. La généralisation du modèle à la simulation de trois phases immiscibles demeure un défi. Le problème de formation de givre dans un écoulement diphasique (liquide-gaz) est extrêmement complexe. Pour répondre à cette difficulté, une solution serait de coupler le modèle pseudo-potentiel à un modèle thermique basé sur une formulation enthalpique. Le modèle pseudo-potentiel résout la dynamique d'écoulement et la modèle enthalpique résout la transition de phase liquide-solide. La résolution de l'équation de température par cette approche a déjà été appliquée à la simulation d'écoulement à simple composant [130-132]. Dans cette méthode, un terme source est ajouté à l'équation de température pour modéliser la transition de phase. Ce

terme source est fonction de la chaleur latente de solidification et de la fraction liquide. La forme discrète de ce terme source est donnée par l'expression suivante:

$$\Phi_i = \omega_i \frac{L}{c_p} [f(t + \Delta t) - f(t)] \quad (8.1)$$

La fraction solide  $f$  est déterminée en fonction de l'enthalpie:

$$f = \begin{cases} 0 & H < H_s \\ \frac{H - H_s}{c_p} & H_s \leq H \leq H_s + L \\ 1 & H > H_s + L \end{cases} \quad (8.2)$$

Où  $H_s$  représente l'enthalpie de solidification du fluide. Si la fraction liquide  $f = 1$ , le nœud est totalement liquide. Si la fraction liquide  $f = 0$ , le nœud est totalement solide. Sinon, si  $0 < f < 1$ , le nœud correspond à une transition de phase. Une application de la formulation enthalpique au problème de Stefan est présentée en Annexe A.

Une lattice D3Q19 est utilisée pour résoudre les problèmes d'écoulements 3D. Deux fonctions de distributions par composants interviennent pour déterminer la dynamique de l'écoulement et la température. Le modèle développé a été réalisé en langage Matlab. La simulation de certains cas tests peut durer plus d'une journée. Il serait peut-être nécessaire de développer le modèle dans un environnement de travail en C pour obtenir un code de simulation numérique plus rapide d'exécution. Vers la fin de cette recherche doctorale, des essais pour implémenter ce modèle dans un langage C ont montré une augmentation de la vitesse de calcul par 6 sur une machine Intel(R) Core(TM) i7. Une autre solution serait aussi de paralléliser le code.

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] E. Radenac, G. G. de Segura Solay, R. Chauvin, and C. Laurent, "Simulations d'accrétion de glace sur un modèle d'étages de turboréacteur avec modélisation du ruissellement dû au dégivrage," in *Congrès français de thermique 2016*, 2016.
- [2] S. Hou, X. Shan, Q. Zou, G. D. Doolen, and W. E. Soll, "Evaluation of two lattice Boltzmann models for multiphase flows," *Journal of computational physics*, vol. 138, pp. 695-713, 1997.
- [3] X. Shan and H. Chen, "Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components," *Physical Review E*, vol. 47, p. 1815, 1993.
- [4] H. Zheng, C. Shu, and Y.-T. Chew, "A lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio," *Journal of computational physics*, vol. 218, pp. 353-371, 2006.
- [5] J. Oliver, "Initial stages of ink jet drop impaction, spreading and wetting on paper," *Tappi journal*, vol. 67, pp. 90-94, 1984.
- [6] C. Mundo, M. Sommerfeld, and C. Tropea, "Droplet-wall collisions: experimental studies of the deformation and breakup process," *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 21, pp. 151-173, 1995.
- [7] G. Trapaga and J. Szekely, "Mathematical modeling of the isothermal impingement of liquid droplets in spraying processes," *Metallurgical Transactions B*, vol. 22, pp. 901-914, 1991.
- [8] C. Bai and A. Gosman, "Development of methodology for spray impingement simulation," SAE Technical Paper1995.
- [9] R. Honsek, "Development of a Three-dimensional Eulerian Model of Droplet-wall Interaction Mechanisms," McGill University, 2005.
- [10] N. Laan, K. G. de Bruin, D. Bartolo, C. Josserand, and D. Bonn, "Maximum Diameter of Impacting Liquid Droplets," *Physical Review Applied*, vol. 2, p. 044018, 2014.
- [11] A. Asai, M. Shioya, S. Hirasawa, and T. Okazaki, "Impact of an ink drop on paper," *The Journal of imaging science and technology*, vol. 37, pp. 205-207, 1993.

- [12] M. Pasandideh-Fard, Y. Qiao, S. Chandra, and J. Mostaghimi, "Capillary effects during droplet impact on a solid surface," *Physics of Fluids (1994-present)*, vol. 8, pp. 650-659, 1996.
- [13] B. L. Scheller and D. W. Bousfield, "Newtonian drop impact with a solid surface," *AIChE Journal*, vol. 41, pp. 1357-1367, 1995.
- [14] G. Cossali, A. Coghe, and M. Marengo, "The impact of a single drop on a wetted solid surface," *Experiments in Fluids*, vol. 22, pp. 463-472, 1997.
- [15] A. Worthington, "On the forms assumed by drops of liquids falling vertically on a horizontal plate," *Proceedings of the royal society of London*, vol. 25, pp. 261-272, 1876.
- [16] O. G. Engel, "Waterdrop collisions with solid surfaces," *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, vol. 54, pp. 281-298, 1955.
- [17] R. Ford and C. Furmidge, "Impact and spreading of spray drops on foliar surfaces," *Soc Chem Ind Monogr*, vol. 25, pp. 417-32, 1967.
- [18] X. Zhang and O. A. Basaran, "Dynamic surface tension effects in impact of a drop with a solid surface," *Journal of colloid and interface science*, vol. 187, pp. 166-178, 1997.
- [19] N. Mourougou-Candoni, B. Prunet-Foch, F. Legay, M. Vignes-Adler, and K. Wong, "Retraction phenomena of surfactant solution drops upon impact on a solid substrate of low surface energy," *Langmuir*, vol. 15, pp. 6563-6574, 1999.
- [20] F. H. Harlow and J. P. Shannon, "The splash of a liquid drop," *Journal of Applied Physics*, vol. 38, pp. 3855-3866, 1967.
- [21] X. Gu, "Study of the Hydrodynamics of Droplet Impingement on a Dry Surface Using Lattice Boltzmann Method," University of Central Florida Orlando, Florida, 2009.
- [22] K. TSURUTANI, M. YAO, J. SENDA, and H. FUJIMOTO, "Numerical analysis of the deformation process of a droplet impinging upon a wall," *JSME international journal. Ser. 2, Fluids engineering, heat transfer, power, combustion, thermophysical properties*, vol. 33, pp. 555-561, 1990.
- [23] X. Gu, "Study Of The Hydrodynamics Of Droplet Impingement On A Dry Surface Using Lattice Boltzmann Method," 2009.

- [24] C. W. Hirt and B. D. Nichols, "Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries," *Journal of computational physics*, vol. 39, pp. 201-225, 1981.
- [25] W. J. Rider and D. B. Kothe, "Reconstructing volume tracking," *Journal of computational physics*, vol. 141, pp. 112-152, 1998.
- [26] J. Fukai, Z. Zhao, D. Poulikakos, C. M. Megaridis, and O. Miyatake, "Modeling of the deformation of a liquid droplet impinging upon a flat surface," *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics (1989-1993)*, vol. 5, pp. 2588-2599, 1993.
- [27] J. Fukai, Y. Shiiba, T. Yamamoto, O. Miyatake, D. Poulikakos, C. Megaridis, *et al.*, "Wetting effects on the spreading of a liquid droplet colliding with a flat surface: experiment and modeling," *Physics of Fluids (1994-present)*, vol. 7, pp. 236-247, 1995.
- [28] W. Mulder, S. Osher, and J. A. Sethian, "Computing interface motion in compressible gas dynamics," *Journal of computational physics*, vol. 100, pp. 209-228, 1992.
- [29] J. Glimm, J. W. Grove, X. L. Li, K.-m. Shyue, Y. Zeng, and Q. Zhang, "Three-dimensional front tracking," *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 19, pp. 703-727, 1998.
- [30] K. Haller, Y. Ventikos, D. Poulikakos, and P. Monkewitz, "Computational study of high-speed liquid droplet impact," *Journal of Applied Physics*, vol. 92, pp. 2821-2828, 2002.
- [31] A. K. Gunstensen and D. H. Rothman, "Lattice-Boltzmann studies of immiscible two-phase flow through porous media," *Journal of Geophysical Research: Solid Earth (1978-2012)*, vol. 98, pp. 6431-6441, 1993.
- [32] X. He, S. Chen, and R. Zhang, "A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh-Taylor instability," *Journal of computational physics*, vol. 152, pp. 642-663, 1999.
- [33] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, and M. Krook, "A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems," *Physical review*, vol. 94, p. 511, 1954.
- [34] Y. Qian, D. d'Humières, and P. Lallemand, "Lattice BGK models for Navier-Stokes equation," *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 17, p. 479, 1992.

- [35] X. He and L.-S. Luo, "Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier–Stokes equation," *Journal of Statistical Physics*, vol. 88, pp. 927-944, 1997.
- [36] P. Lallemand and L.-S. Luo, "Theory of the lattice Boltzmann method: Acoustic and thermal properties in two and three dimensions," *Physical Review E*, vol. 68, p. 036706, 2003.
- [37] E. H. Hauge, "Exact and Chapman-Enskog Solutions of the Boltzmann Equation for the Lorentz Model," *Physics of Fluids (1958-1988)*, vol. 13, pp. 1201-1208, 1970.
- [38] A. K. Gunstensen, "Lattice-Boltzmann studies of multiphase flow through porous media," Massachusetts Inst. of Tech., Cambridge, MA (United States)1992.
- [39] A. K. Gunstensen, D. H. Rothman, S. Zaleski, and G. Zanetti, "Lattice Boltzmann model of immiscible fluids," *Physical Review A*, vol. 43, p. 4320, 1991.
- [40] S. Leclaire, "Étude d'un modèle de Boltzmann sur réseau pour la simulation assistée par ordinateur des fluides à plusieurs phases immiscibles," École Polytechnique de Montréal, 2013.
- [41] S. Leclaire, M. Reggio, and J.-Y. Trépanier, "Isotropic color gradient for simulating very high-density ratios with a two-phase flow lattice Boltzmann model," *Computers & Fluids*, vol. 48, pp. 98-112, 2011.
- [42] S. Leclaire, M. Reggio, and J.-Y. Trépanier, "Numerical evaluation of two recoloring operators for an immiscible two-phase flow lattice Boltzmann model," *Applied Mathematical Modelling*, vol. 36, pp. 2237-2252, 2012.
- [43] T. Reis and T. Phillips, "Lattice Boltzmann model for simulating immiscible two-phase flows," *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 40, p. 4033, 2007.
- [44] M. R. Swift, W. Osborn, and J. Yeomans, "Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids," *Physical Review Letters*, vol. 75, p. 830, 1995.
- [45] M. R. Swift, E. Orlandini, W. Osborn, and J. Yeomans, "Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems," *Physical Review E*, vol. 54, p. 5041, 1996.

- [46] T. Inamuro, T. Ogata, S. Tajima, and N. Konishi, "A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences," *Journal of computational physics*, vol. 198, pp. 628-644, 2004.
- [47] R. R. Nourgaliev, T.-N. Dinh, T. Theofanous, and D. Joseph, "The lattice Boltzmann equation method: theoretical interpretation, numerics and implications," *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 29, pp. 117-169, 2003.
- [48] C. Pooley and K. Furtado, "Eliminating spurious velocities in the free-energy lattice Boltzmann method," *Physical Review E*, vol. 77, p. 046702, 2008.
- [49] A. Kuzmin, A. Mohamad, and S. Succi, "Multi-relaxation time lattice Boltzmann model for multiphase flows," *International Journal of Modern Physics C*, vol. 19, pp. 875-902, 2008.
- [50] B. Sehgal, R. Nourgaliev, and T. Dinh, "Numerical simulation of droplet deformation and break-up by lattice-Boltzmann method," *Progress in Nuclear Energy*, vol. 34, pp. 471-488, 1999.
- [51] Z. Yu, O. Hemminger, and L.-S. Fan, "Experiment and lattice Boltzmann simulation of two-phase gas-liquid flows in microchannels," *Chemical Engineering Science*, vol. 62, pp. 7172-7183, 2007.
- [52] R. Zhang and H. Chen, "Lattice Boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows," *Physical Review E*, vol. 67, p. 066711, 2003.
- [53] S. Mukherjee and J. Abraham, "Investigations of drop impact on dry walls with a lattice-Boltzmann model," *Journal of colloid and interface science*, vol. 312, pp. 341-354, 2007.
- [54] A. Gupta and R. Kumar, "Simulation of droplet flows using Lattice Boltzmann method," in *ASME 2008 6th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels*, 2008, pp. 397-407.
- [55] P. Yuan and L. Schaefer, "Equations of state in a lattice Boltzmann model," *Physics of Fluids (1994-present)*, vol. 18, p. 042101, 2006.

- [56] D. Zhang, K. Papadikis, and S. Gu, "Three-dimensional multi-relaxation time lattice-Boltzmann model for the drop impact on a dry surface at large density ratio," *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 64, pp. 11-18, 2014.
- [57] M. Sbragaglia, R. Benzi, L. Biferale, S. Succi, K. Sugiyama, and F. Toschi, "Generalized lattice Boltzmann method with multirange pseudopotential," *Physical Review E*, vol. 75, p. 026702, 2007.
- [58] Q. Li and K. Luo, "Achieving tunable surface tension in the pseudopotential lattice Boltzmann modeling of multiphase flows," *Physical Review E*, vol. 88, p. 053307, 2013.
- [59] A. Kupershtokh, D. Medvedev, and D. Karpov, "On equations of state in a lattice Boltzmann method," *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 58, pp. 965-974, 2009.
- [60] A. Hu, L. Li, and R. Uddin, "Surface Tension Adjustment in a Pseudo-Potential Lattice Boltzmann Model," *arXiv preprint arXiv:1412.7228*, 2014.
- [61] M. L. Porter, E. Coon, Q. Kang, J. Moulton, and J. Carey, "Multicomponent interparticle-potential lattice Boltzmann model for fluids with large viscosity ratios," *Physical Review E*, vol. 86, p. 036701, 2012.
- [62] Y. Chen, H. Ohashi, and M. Akiyama, "Thermal lattice Bhatnagar-Gross-Krook model without nonlinear deviations in macrodynamic equations," *Physical Review E*, vol. 50, p. 2776, 1994.
- [63] P. Pavlo, G. Vahala, and L. Vahala, "Higher order isotropic velocity grids in lattice methods," *Physical Review Letters*, vol. 80, p. 3960, 1998.
- [64] X. Shan, "Simulation of Rayleigh-Bénard convection using a lattice Boltzmann method," *Physical Review E*, vol. 55, p. 2780, 1997.
- [65] X. He, S. Chen, and G. D. Doolen, "A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit," *Journal of computational physics*, vol. 146, pp. 282-300, 1998.
- [66] G. R. McNamara, A. L. Garcia, and B. J. Alder, "Stabilization of thermal lattice Boltzmann models," *Journal of Statistical Physics*, vol. 81, pp. 395-408, 1995.



- [67] G. R. McNamara, A. L. Garcia, and B. J. Alder, "A hydrodynamically correct thermal lattice Boltzmann model," *Journal of Statistical Physics*, vol. 87, pp. 1111-1121, 1997.
- [68] S. Chen and G. D. Doolen, "Lattice Boltzmann method for fluid flows," *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 30, pp. 329-364, 1998.
- [69] P. K. Jain and A. Tentner, "A lattice Boltzmann framework to simulate boiling water reactor core hydrodynamics," *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 58, pp. 975-986, 2009.
- [70] A. L. Kupershtokh, "A lattice Boltzmann equation method for real fluids with the equation of state known in tabular form only in regions of liquid and vapor phases," *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 61, pp. 3537-3548, 2011.
- [71] M. Ikeda, P. Rao, and L. Schaefer, "A thermal multicomponent lattice Boltzmann model," *Computers & fluids*, vol. 101, pp. 250-262, 2014.
- [72] X. Shan, "Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice Boltzmann models," *Physical Review E*, vol. 73, p. 047701, 2006.
- [73] C. Miller and L. Scriven, "The oscillations of a fluid droplet immersed in another fluid," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 32, pp. 417-435, 1968.
- [74] A. H. Harvey, A. P. Peskin, and S. A. Klein, "NIST/ASME steam properties," *NIST Standard Reference Database*, vol. 10, 2000.
- [75] J. Clift and M. Grace, "Weber, Bubbles, Drops and Particles," ed: Academic Press, New York, 1978.
- [76] S. Gong and P. Cheng, "A lattice Boltzmann method for simulation of liquid-vapor phase-change heat transfer," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 55, pp. 4923-4927, 2012.
- [77] D. Gueyffier, J. Li, A. Nadim, R. Scardovelli, and S. Zaleski, "Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows," *Journal of computational physics*, vol. 152, pp. 423-456, 1999.
- [78] S. Osher, "Level set methods," in *Geometric level set methods in imaging, vision, and graphics*, ed: Springer, 2003, pp. 3-20.

- [79] J. Sethian and P. Smereka, "Level set methods for fluid interfaces," *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 35, pp. 341-372, 2003.
- [80] D. H. Rothman and J. M. Keller, "Immiscible cellular-automaton fluids," *Journal of Statistical Physics*, vol. 52, pp. 1119-1127, 1988.
- [81] X. Shan and G. Doolen, "Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction," *Journal of Statistical Physics*, vol. 81, pp. 379-393, 1995.
- [82] L. Chen, Q. Kang, Y. Mu, Y.-L. He, and W.-Q. Tao, "A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 76, pp. 210-236, 2014.
- [83] H. Huang, M. Krafczyk, and X. Lu, "Forcing term in single-phase and Shan-Chen-type multiphase lattice Boltzmann models," *Physical Review E*, vol. 84, p. 046710, 2011.
- [84] A. L. Kupershtokh, "Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations," *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 59, pp. 2236-2245, 2010.
- [85] Z. Guo, C. Zheng, and B. Shi, "Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method," *Physical Review E*, vol. 65, p. 046308, 2002.
- [86] D. d'Humières, "Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions," *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 360, pp. 437-451, 2002.
- [87] S. Mukherjee and J. Abraham, "A pressure-evolution-based multi-relaxation-time high-density-ratio two-phase lattice-Boltzmann model," *Computers & fluids*, vol. 36, pp. 1149-1158, 2007.
- [88] K. N. Premnath and J. Abraham, "Three-dimensional multi-relaxation time (MRT) lattice-Boltzmann models for multiphase flow," *Journal of computational physics*, vol. 224, pp. 539-559, 2007.
- [89] N. S. Martys and H. Chen, "Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method," *Physical Review E*, vol. 53, p. 743, 1996.

- [90] H. Huang, D. T. Thorne Jr, M. G. Schaap, and M. C. Sukop, "Proposed approximation for contact angles in Shan-and-Chen-type multicomponent multiphase lattice Boltzmann models," *Physical Review E*, vol. 76, p. 066701, 2007.
- [91] S. Schmieschek and J. Harting, "Contact angle determination in multicomponent lattice Boltzmann simulations," *arXiv preprint arXiv:0910.3915*, 2009.
- [92] X. Xing, D. L. Butler, and C. Yang, "A lattice Boltzmann based single-phase method for modeling surface tension and wetting," *Computational materials science*, vol. 39, pp. 282-290, 2007.
- [93] Y. Yan and Y. Zu, "A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows on partial wetting surface with large density ratio," *Journal of computational physics*, vol. 227, pp. 763-775, 2007.
- [94] Z. Yu and L.-S. Fan, "Multirelaxation-time interaction-potential-based lattice Boltzmann model for two-phase flow," *Physical Review E*, vol. 82, p. 046708, 2010.
- [95] B. Wen, Z. Qin, C. Zhang, and H. Fang, "Thermodynamic-consistent lattice Boltzmann model for nonideal fluids," *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 112, p. 44002, 2015.
- [96] H. Lamb, *Hydrodynamics*: Cambridge university press, 1932.
- [97] C. Mundo, M. Sommerfeld, and C. Tropea, "Experimental studies of the deposition and splashing of small liquid droplets impinging on a flat surface," *Proceedings of ICLASS-94*, pp. 134-141, 1994.
- [98] R. Rioboo, M. Marengo, and C. Tropea, "Time evolution of liquid drop impact onto solid, dry surfaces," *Experiments in Fluids*, vol. 33, pp. 112-124, 2002.
- [99] M. L. Sadley and D. A. Dean, "Fuel injection sytem employing solid-state injectors for liquid fueled combustion engines," ed: Google Patents, 1995.
- [100] M. Showalter, "Injection spray systems," ed: Google Patents, 1973.
- [101] R. Rioboo, C. Bauthier, J. Conti, M. Voue, and J. De Coninck, "Experimental investigation of splash and crown formation during single drop impact on wetted surfaces," *Experiments in Fluids*, vol. 35, pp. 648-652, 2003.

- [102] D. A. Weiss and A. L. Yarin, "Single drop impact onto liquid films: neck distortion, jetting, tiny bubble entrainment, and crown formation," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 385, pp. 229-254, 1999.
- [103] I. Roisman, L. Araneo, M. Marengo, and C. Tropea, "Evaluation of drop impingement models: experimental and numerical analysis of a spray impact," in *Thirteenth Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems ILASS-Europe, Florence, Italy*, 1999.
- [104] W. Samenfink, A. Elsäßer, K. Dullenkopf, and S. Wittig, "Droplet interaction with shear-driven liquid films: analysis of deposition and secondary droplet characteristics," *International journal of heat and fluid flow*, vol. 20, pp. 462-469, 1999.
- [105] J. A. Sethian, "Evolution, implementation, and application of level set and fast marching methods for advancing fronts," *Journal of computational physics*, vol. 169, pp. 503-555, 2001.
- [106] A. R. Wadhwa, J. Abraham, and V. Magi, "Hybrid compressible-incompressible numerical method for transient drop-gas flows," *AIAA journal*, vol. 43, pp. 1974-1983, 2005.
- [107] J. Hilbing, S. D. Heister, and C. Spangler, "A boundary-element method for atomization of a finite liquid jet," *Atomization and Sprays*, vol. 5, 1995.
- [108] Q. Li, K. Luo, and X. Li, "Forcing scheme in pseudopotential lattice Boltzmann model for multiphase flows," *Physical Review E*, vol. 86, p. 016709, 2012.
- [109] M. G. Schaap, M. L. Porter, B. S. Christensen, and D. Wildenschild, "Comparison of pressure-saturation characteristics derived from computed tomography and lattice Boltzmann simulations," *Water Resources Research*, vol. 43, 2007.
- [110] J. Chin, "Lattice Boltzmann simulation of the flow of binary immiscible fluids with different viscosities using the Shan-Chen microscopic interaction model," *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 360, pp. 547-558, 2002.
- [111] Q. Kang, D. Zhang, and S. Chen, "Displacement of a two-dimensional immiscible droplet in a channel," *Physics of Fluids (1994-present)*, vol. 14, pp. 3203-3214, 2002.

- [112] D. A. McQuarrie and J. D. Simon, *Molecular thermodynamics*: University Science Books Sausalito, CA, 1999.
- [113] A. P. P. A.H. Harvey, S.A. Klien, "NIST/ASME Steam Properties," 2004.
- [114] J. A. Sethian, *Level set methods and fast marching methods: evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science* vol. 3: Cambridge university press, 1999.
- [115] G. Ryskin and L. Leal, "Numerical solution of free-boundary problems in fluid mechanics. Part 1. The finite-difference technique," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 148, pp. 1-17, 1984.
- [116] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, *et al.*, "A front-tracking method for the computations of multiphase flow," *Journal of computational physics*, vol. 169, pp. 708-759, 2001.
- [117] I. Halliday, S. Thompson, and C. Care, "Macroscopic surface tension in a lattice Bhatnagar-Gross-Krook model of two immiscible fluids," *Physical Review E*, vol. 57, p. 514, 1998.
- [118] X. Q. Xing, D. L. Butler, S. H. Ng, Z. Wang, S. Danyluk, and C. Yang, "Simulation of droplet formation and coalescence using lattice Boltzmann-based single-phase model," *Journal of colloid and interface science*, vol. 311, pp. 609-618, 2007.
- [119] A. K. Gunstensen and D. H. Rothman, "Microscopic modeling of immiscible fluids in three dimensions by a lattice Boltzmann method," *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 18, p. 157, 1992.
- [120] X. Shan and H. Chen, "Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation," *Physical Review E*, vol. 49, p. 2941, 1994.
- [121] P. Yuan and L. Schaefer, "A Thermal Lattice Boltzmann Two-Phase Flow Model and Its Application to Heat Transfer Problems—Part 1. Theoretical Foundation," *Journal of Fluids Engineering*, vol. 128, pp. 142-150, 2006.
- [122] Y. Peng, C. Shu, and Y. Chew, "Simplified thermal lattice Boltzmann model for incompressible thermal flows," *Physical Review E*, vol. 68, p. 026701, 2003.

- [123] G. Hazi and A. Markus, "On the bubble departure diameter and release frequency based on numerical simulation results," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 52, pp. 1472-1480, 2009.
- [124] Y. Xuan, Q. Li, and M. Ye, "Investigations of convective heat transfer in ferrofluid microflows using lattice-Boltzmann approach," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 46, pp. 105-111, 2007.
- [125] T. L. Bergman, F. P. Incropera, D. P. DeWitt, and A. S. Lavine, *Fundamentals of heat and mass transfer*: John Wiley & Sons, 2011.
- [126] W. Fritz, "Maximum volume of vapor bubbles," *Phys. Z.*, vol. 36, pp. 379-384, 1935.
- [127] D. Beugre, "Etude de l'écoulement d'un fluide dans des géométries complexes rencontrées en Génie Chimique par la méthode de Boltzmann sur réseau," 2010.
- [128] A. N. Kolmogorov, "Précisions sur la structure locale de la turbulence dans un fluide visqueux aux nombres de Reynolds élevés," *Mécanique de la turbulence*, pp. 447-458, 1962.
- [129] M. Geier, A. Greiner, and J. G. Korvink, "Cascaded digital lattice Boltzmann automata for high Reynolds number flow," *Physical Review E*, vol. 73, p. 066705, 2006.
- [130] D. Chatterjee, "An enthalpy-based thermal lattice Boltzmann model for non-isothermal systems," *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 86, p. 14004, 2009.
- [131] D. Chatterjee and S. Chakraborty, "An enthalpy-based lattice Boltzmann model for diffusion dominated solid-liquid phase transformation," *Physics Letters A*, vol. 341, pp. 320-330, 2005.
- [132] W.-S. Jiaung, J.-R. Ho, and C.-P. Kuo, "Lattice Boltzmann method for the heat conduction problem with phase change," *Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals*, vol. 39, pp. 167-187, 2001.
- [133] D. Chatterjee, "Lattice Boltzmann Modeling for Melting/Solidification Processes," *Hydrodynamics-Optimizing Methods and Tools*, Prof. Harry Schulz (Ed.), ISBN: 978-953-307-712-3, InTech, 2011.

## ANNEXES

### ANNEXE A – PROBLÈME DE STEFAN

Cette étude préliminaire fournit un modèle de transfert thermique 3D-MRT basé sur une formulation enthalpique pour simuler le changement de phase liquide-solide. Cette section donne les détails du modèle et une validation au problème de Stefan.

Jiaung et al [132] propose un modèle lattice Boltzmann pour résoudre les problèmes de conduction de chaleur avec changement de phase et applique le modèle à des problèmes 1D/2D de fusion/solidification. Une formulation enthalpique est employée pour résoudre l'équation de chaleur. Nous proposons d'étendre ce modèle à la simulation de problèmes 3D dans l'optique à long terme de coupler ce modèle de changement de phase au modèle multiphasique à plusieurs composants déjà développé.

La formulation enthalpique de l'équation de chaleur dans le cas 3D est donnée par :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T - \frac{L}{c_p} \frac{\partial \phi}{\partial t}$$

La chaleur latente  $L$  de fusion/solidification apparait comme un terme source dans l'équation de chaleur.  $\phi$  représente la fraction de la phase liquide et varie entre 0 et 1. Si on note  $T_s$  et  $H_s$  respectivement la température et l'enthalpie de solidification du fluide, la relation entre l'enthalpie  $H$  et la température  $T$  est donnée par :

$$T = \begin{cases} \frac{H}{c_p} & H < H_s \\ T_s & H_s \leq H \leq H_s + L \\ \frac{H - L}{c_p} & H > H_s + L \end{cases}$$

Et la relation entre la fraction liquide  $\phi$  et la température est donnée par:

$$\phi = \begin{cases} 0 & H < H_s \\ \frac{H - H_s}{c_p} & H_s \leq H \leq H_s + L \\ 1 & H > H_s + L \end{cases}$$

La fraction liquide est résolue en même temps que la température

Jiaung et al [132] donne l'équation Boltzmann à résoudre pour étudier la conduction avec changement de phase. Un terme source est ajouté à l'équation lattice Boltzmann pour traiter le changement de phase liquide/solide, comme suit:

$$g_{\alpha}(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) - g_{\alpha}(\vec{x}, t) = -\frac{g_{\alpha}(\vec{x}, t) - g_{\alpha}^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau_T} - \Delta t \Phi_i$$

Où  $\Phi_i = \omega_i \Phi$  est la forme discrète du terme source et les  $\omega_i$  correspondent au poids d'intégration associé à la lattice D3Q19.  $\tau_T$  est le temps de relaxation relié à la diffusivité thermique par l'expression suivante:

$$\alpha = c_s^2(\tau_T - 1/2)\Delta t$$

En explicitant le terme source  $\Phi$ , la forme générale de l'équation s'écrit:

$$g_{\alpha}(\vec{x} + \vec{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) - g_{\alpha}(\vec{x}, t) = -\frac{g_{\alpha}(\vec{x}, t) - g_{\alpha}^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau_T} - \omega_i \frac{L}{c_p} [\phi(t + \Delta t) - \phi(t)]$$

Dans un système constitué de deux phases: liquide et solide, l'équation lattice Boltzmann précédente est résolue pour chacune des phases. À cause du terme source, une procédure itérative supplémentaire est effectuée à chaque pas de temps pour déterminer la fraction liquide locale dans toutes les cellules.

La fonction de distribution d'équilibre  $g_{\alpha}^{eq}(\vec{x}, t)$  est donnée par l'expression suivante:

$$g_{\alpha}^{eq}(\vec{x}, t) = w_{\alpha} T \left[ 1 + \frac{\vec{e}_{\alpha} \cdot \vec{u}^{eq}}{c_s^2} + \frac{(\vec{e}_{\alpha} \cdot \vec{u}^{eq})^2}{2c_s^4} - \frac{\vec{u}^{eq} \cdot \vec{u}^{eq}}{2c_s^2} \right]$$

Dans un problème, où seulement la conduction est présente, seule l'équation lattice Boltzmann d'énergie est résolue et la fonction de distribution d'équilibre  $g_{\alpha}^{eq}(\vec{x}, t)$  se simplifie :

$$g_{\alpha}^{eq}(\vec{x}, t) = w_{\alpha} T$$

### Cas test : Problème de Stefan

Le modèle thermique avec changement de phase a été appliqué au problème de Stefan. Ce cas test est choisi car il s'agit d'un cas test standard dont la solution associée à la température et la fraction liquide sont connues. Il s'agit d'un problème 1D, mais une lattice D3Q19 sera utilisé pour la résolution. Le modèle est utilisé pour simuler la solidification de l'eau liquide.



Un domaine de calcul  $601 \times 101 \times 10$  est utilisé. Initialement, la cavité rectangulaire est rempli d'eau à une température  $T_i = 5^\circ\text{C}$ . La frontière gauche est soumise à une température  $T_0 = -10^\circ\text{C}$  et les autres parois sont isolées. La température de solidification  $T_s$  est fixé à  $T_s = 0^\circ\text{C}$ . La figure ci-dessous illustre le problème

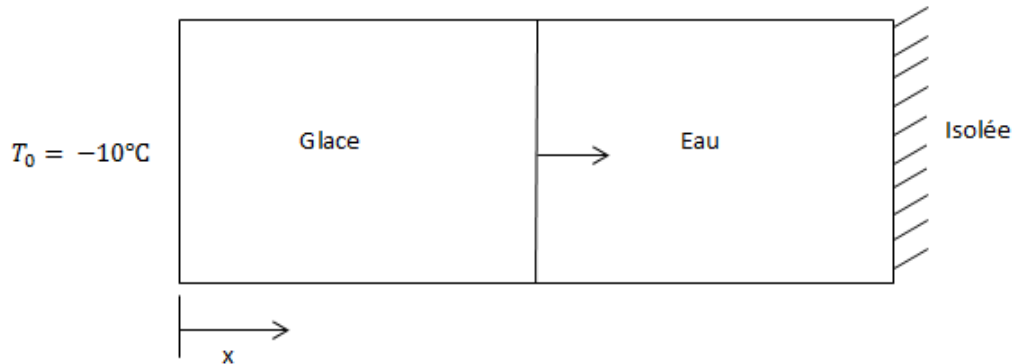


Figure B.1: Géométrie du problème

La table A.1 résume les propriétés physiques pour la simulation du problème de Stefan.

Table A.1: Propriétés physiques

	Densité ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )	Capacité calorifique ( $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ )	Conductivité thermique ( $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ )	Chaleur latente ( $\text{J}/\text{kg}$ )
Eau	997	4180	0.61	334 000
Glace	919	2000	2.3	

La solution analytique est fournie dans la littérature [133]. La Figure A.2 et A.3 donne respectivement le contour de température  $\theta = \frac{T - T_i}{T_i - T_0}$  et la fraction liquide. La Figure A.4 donne la comparaison entre la température adimensionnelle  $\theta = \frac{T - T_i}{T_i - T_0}$  obtenue numériquement et la solution de température analytique. La Figure A.5 donne une comparaison de la position du front

de solidification obtenue numériquement et analytiquement. Pour la température et pour la position du front de solidification, les solutions numériques et analytiques concordent, malgré une faible déviation au niveau de l'interface de changement de phase. Dans la solution analytique, l'interface est représentée par une épaisseur nulle, tandis que celle est représentée par quelques unités de réseau sur lesquelles la fraction liquide varie entre 0 et 1. Un nombre de nœuds plus élevé dans la direction de propagation du changement réduit l'épaisseur de l'interface.

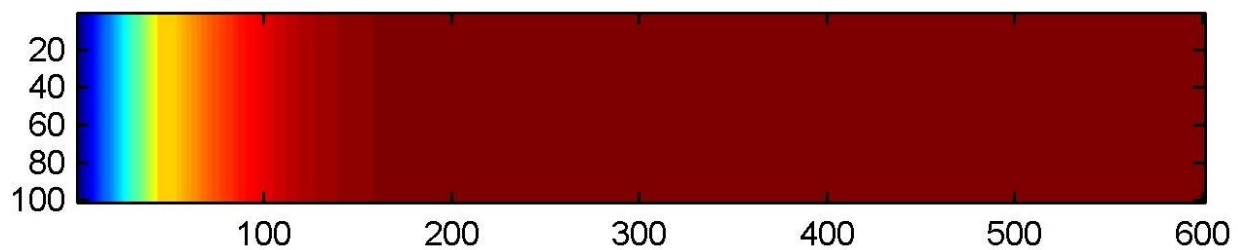


Figure A.2: Contour de température  $\theta$

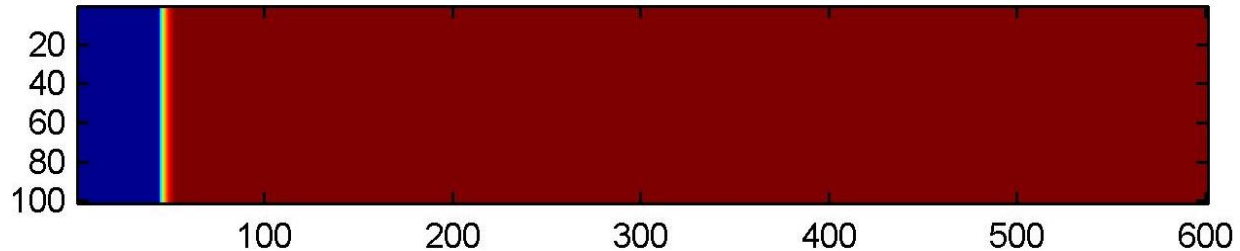


Figure A.3: Contour de fraction liquide

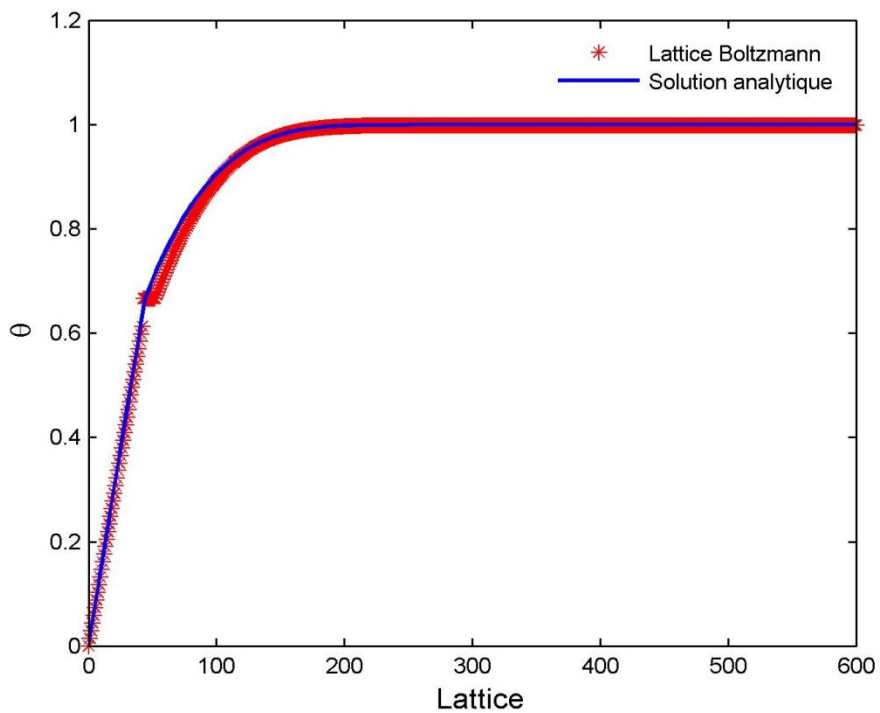
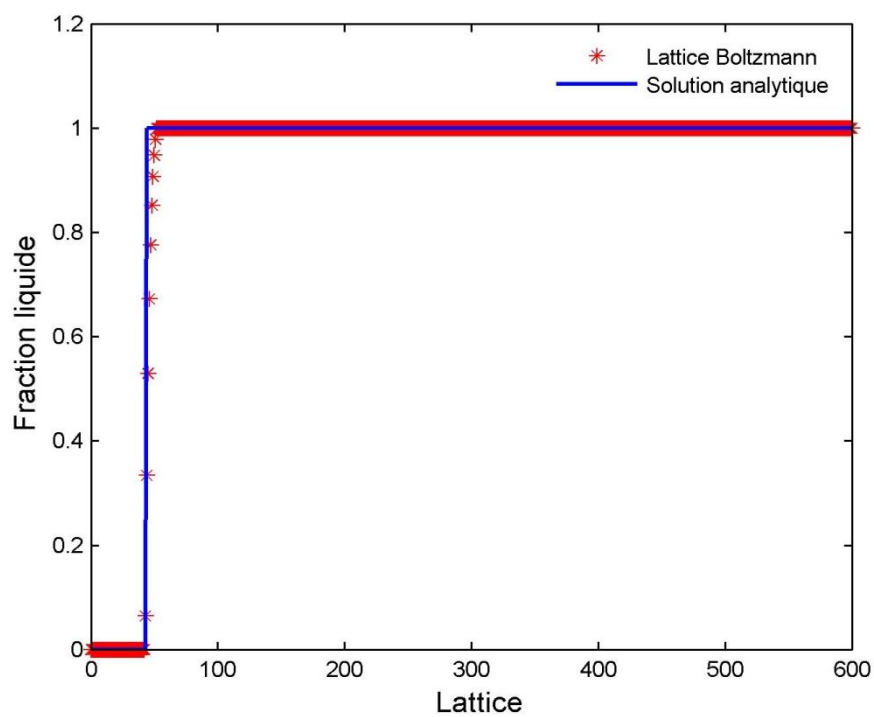
Figure A.4: Évolution de la température  $\theta$ 

Figure A.5: Évolution de la fraction liquide