



Faculté de génie
Département de génie mécanique

Mémoire

Évaluation des méthodes particulières pour l'étude et la génération d'un sillage de gouttes

David LAROCHE

Sherbrooke (Québec), Canada

5 août 2005

REMERCIEMENTS

Les personnes suivantes ont contribué d'une façon spéciale à la réalisation de mes travaux de recherche. Je tiens à les remercier particulièrement, car sans eux je n'aurais jamais vécu les deux années les plus fantastiques de ma vie.

Mes parents pour leur appui et leur support depuis l'enfance. Merci maman, merci papa pour avoir toujours cru en moi. Merci de m'avoir encouragé et supporté à votre façon afin que je réalise mes rêves. Sans vous je ne serais pas rendu ici présentement, merci mille et une fois!

Mes directeurs de recherche, Stéphane Cyr et Guy Payre, qui m'ont guidé durant mes travaux de recherche. Merci Stéphane pour m'avoir donné une liberté d'action si importante que j'ai développé une discipline personnelle hors du commun. Merci Guy pour m'avoir supporté inconditionnellement depuis le début. Sans votre appui, mon expérience de recherche n'aurait pas été si enrichissante, autant sur le plan humain que sur le plan technique.

Monsieur Jacques Dubois pour avoir piqué ma curiosité à l'endroit des études graduées et m'avoir donné le goût à la recherche scientifique. Merci Jacques pour avoir été, sûrement sans le savoir, un exemple de réussite scientifique à mes yeux.

Tous mes partenaires d'activités parascolaires telles que le snowboard, le wakeboard et le plein air qui m'ont accompagné dans les aventures qui remplissaient mes temps libres. Merci Maïtée, Mathieu, André, Simon, Steeve, Jean-François, Alexis, Dany, Patricia, Olivier et Geneviève pour ne nommer que ceux-là.

Merci à tous, je ne vous oublierai jamais et j'espère vous revoir bientôt!

RÉSUMÉ

Ces travaux de recherche présentent la construction d'un modèle de liquide particulaire en 2D dans le but de reproduire la génération d'un sillage de gouttes d'eau derrière une roue en rotation. La densité, la tension de surface, la compressibilité et la dynamique du liquide sont les paramètres physiques que l'étude tente de reproduire adéquatement lors des simulations.

Les interactions radiales qui apparaissent entre les particules du liquide sont définies en transposant les liens intermoléculaires de l'eau à l'échelle mésoscopique. Les interactions transverses entre les particules sont représentées par un terme visqueux similaire à la viscosité dynamique μ des équations de Navier-Stokes. Ce modèle est utilisé afin d'étudier l'évolution de la collision entre deux gouttes de liquide de $500\mu m$ de diamètre. Les résultats de ces simulations montrent que l'utilisation d'un modèle 2D restreint les modes de coalescence ou de séparation des gouttes à la suite de la collision. L'introduction d'une surface solide est réalisée en développant une fonction de paroi mathématique qui définit la force entre le liquide et le solide. L'ajustement de l'adhésion du liquide sur la paroi est réalisé en observant l'angle de mouillage d'une goutte de liquide déposée sur une surface plane. Finalement, l'atomisation de liquide par une roue en rotation est étudiée en utilisant une paroi circulaire en rotation traversant un film de liquide immobile sur une surface plane.

Cette étude arrive à la conclusion qu'une approche particulaire permet la génération d'un nuage de gouttes derrière une roue en rotation. Cependant, ce type d'approche devrait être utilisé en 3D afin de mieux reproduire l'ensemble des propriétés physiques d'un liquide.

TABLE DES MATIÈRES

1	Introduction	1
1.1	Problématique	1
1.2	Objectifs de l'étude	3
1.2.1	Objectifs généraux	3
1.2.2	Apport de la recherche à la méthode PAF	4
2	État des connaissances	5
2.1	Méthodes de résolution eulérienne et lagrangienne	5
2.2	Suivi de particules	6
2.2.1	Méthode des éléments discrets (DEM)	6
2.2.2	Forces et particules (PAF)	7
2.3	Algorithmes de calcul pour interaction particulaire	10
2.3.1	Maillage-Particule (PM)	10
2.3.2	Particule-Particule (PP)	11

2.3.3	Hiérarchie en arbre (TC)	12
2.4	Formation et interaction de gouttes de liquide	14
2.4.1	Interaction de gouttes de liquide	14
2.4.2	Interaction liquide-solide	16
3	Méthodologie de simulation numérique de la dynamique du fluide	18
3.1	Forme de la fonction potentielle d'interaction	19
3.1.1	Échelle moléculaire	20
3.1.2	Approximation mésoscopique	23
3.1.3	Distance critique d'interaction	24
3.2	Formation de gouttes	26
3.2.1	Constantes de la fonction potentielle initiale	27
3.2.2	Ajustement initial de la fonction potentielle	31
3.2.3	Modification de l'échelle de la simulation	38
3.3	Interaction de deux gouttes à partir de gouttes stabilisées	39
3.3.1	Détermination de l'exposant q	40
3.3.2	Analyse des types de collisions avec le potentiel p_{34}	43
3.3.3	Modèle particulière de la viscosité	46
3.4	Interaction liquide-solide	49

3.4.1	Méthode numérique de détermination de la fonction de paroi	50
3.4.2	Modification empirique de la fonction de paroi	51
3.4.3	Ajustement des paramètres de forces liquide-solide	52
3.5	Modification de l'échelle de simulation	55
3.6	Ajustement final de la fonction potentielle d'interaction	56
3.6.1	Vérification de la compressibilité du liquide	56
3.6.2	Détermination numérique de la viscosité	58
3.7	Atomisation de gouttelettes de liquide par une roue en rotation	62
3.7.1	Interaction d'un liquide particulaire et d'une paroi courbe statique .	63
3.7.2	Interaction d'une goutte avec une roue en rotation	65
4	Méthodologie de résolution du modèle numérique	68
4.1	Modèle mathématique à résoudre	68
4.1.1	Schéma d'intégration numérique	69
4.2	Structure du code de calcul	70
4.2.1	Structure monoprocesseur	70
4.2.2	Structure parallèle	72
4.2.3	Interaction de paroi	73
4.3	Environnement monoprocesseur	73

4.4 Environnement parallèle	74
4.4.1 Machines de calcul	75
4.4.2 Protocole MPI	77
5 Conclusion	79
Bibliographie	81
A Concept de distance critique d'interaction	83
A.1 Le concept de sphère d'interaction	83
B Figures de collisions de gouttes	86
C Développement du modèle théorique de couche limite	89

LISTE DES FIGURES

2.1	Distance d'interaction par rapport à la force interparticulaire	9
2.2	Structure hiérarchique d'un algorithme TC	13
2.3	Création de gouttes de liquide derrière une roue en rotation	14
2.4	Paramètre d'impact	15
2.5	Mode de collision entre deux gouttes d'eau en fonction du nombre de Weber (Orme [19])	16
2.6	Mesure de l'angle de mouillage d'une goutte de liquide sur une surface solide	17
3.1	Forme de la fonction potentielle de Lennard-Jones	21
3.2	Comparaison du potentiel de Lennard-Jones et de Coulomb	23
3.3	Définition des situations servant au calcul de l'erreur à la suite de l'utilisa- tion d'une distance critique d'interaction	25
3.4	Comparaison d'une collision pour $R_i = 11R_e$ et $R_i = \infty R_e$	26
3.5	Comparaison des approximations du potentiel mésoscopique	28
3.6	Distribution initiale de 589 particules	29
3.7	Volume occupé par une particule dans un système particulaire à l'équilibre	35

3.8	Densité locale en fonction de la distance par rapport au centre de la goutte	35
3.9	Évolution d'une collision près de $We = 19$ et $b/D = 0$	40
3.10	Collision utilisant une fonction potentielle $p = 3$ $q = 6$	41
3.11	Potentielle $p = 3$ $q = 4$	42
3.12	Étape caractéristique d'une collision de deux gouttes tridimensionnelles (coupe)	44
3.13	Effet de la viscosité lors d'une collision de 2 gouttes de liquide	46
3.14	Distance critique d'interaction visqueuse	47
3.15	Modèle de paroi particulaire et mathématique	49
3.16	Comparaison des fonctions de force particulaire et théorique	52
3.17	Résultats numériques d'angle de mouillage en fonction du facteur GH_{wp}	54
3.18	Variables de l'équation 3.24	59
3.19	Profil de vitesse de la couche limite à la paroi	60
3.20	Comparaison du rayon de la roue par rapport à la distance critique d'in- teraction liquide-solide	64
3.21	Résultats numériques d'interaction liquide et paroi courbe	64
3.22	Résultats expérimentaux d'interaction liquide et paroi courbe [11]	65
3.23	Résultats numérique d'atomisation derrière une roue en rotation	67
4.1	Calcul de la position et de la vitesse dans une méthode de type Leapfrog	70

4.2	Logique du MPI_ALLREDUCE	78
4.3	Logique du MPI_BCAST	78
B.1	Résultats expérimentaux [23] $We = 23$ $b/D = 0.05$ et numériques $We = 9$ $b/D = 0$ de collisions de gouttes.	86
B.2	Résultats expérimentaux [23] $We = 96$ $b/D = 0$ et numériques $We = 16$ $b/D = 0$ de collisions de gouttes.	87
B.3	Résultats expérimentaux [23] $We = 10$ $b/d = 0.55$ et numériques $We = 2$ $b/D = 0.55$, $We = 3$ $b/D = 0.55$ de collisions de gouttes.	88

NOMENCLATURE

a	Espacement local interparticulaire	$[m]$
\vec{a}	Vecteur accélération d'une particule	$[m/s^2]$
A	Tension d'adhésion	$[N/m]$
b	Distance entre l'axe de collision de deux gouttes	$[m]$
b/D	Paramètre d'impact entre deux gouttes	
d	Dimension physique de l'étude ($2 = 2D$ ou $3 = 3D$)	
D	Diamètre d'une goutte de liquide	$[m]$
e	Épaisseur du film de liquide	$[m]$
E_{total}	Énergie intermoléculaire et interparticulaire d'un volume de liquide	$[J]$
f	Rapport de diamètre lors de la modification de l'échelle d'une simulation	
f_x	Force radiale de la méthode PAF selon x	$[N]$
f_y	Force radiale de la méthode PAF selon y	$[N]$
F_{ij}	Force radiale entre deux molécules/particules de la méthode PAF	$[N]$
F_{wp}	Force d'interaction particule-paroi	$[N]$
g	Gravité	$[m/s^2]$
g_x	Composante parallèle au plan de la gravité	$[m/s^2]$
g_y	Composante tangentielle au plan de la gravité	$[m/s^2]$
G	Constante d'attraction de la méthode PAF en 2D	$[Jm^p]$
G_{wp}	Constante d'attraction liquide-solide	$[Nm^2]$
GH_{wp}	Facteur d'ajustement de la tension d'adhésion liquide-solide	
h	Épaisseur virtuelle d'une distribution particulaire	$[m]$
H	Constante de répulsion de la méthode PAF en 2D	$[Jm^q]$
H_{wp}	Constante de répulsion liquide-solide	$[Nm^3]$
k	Constante de Boltzman ($1.3806503 \times 10^{-23}$)	$[Nm/K]$
K	Module de compressibilité d'un liquide	$[N/m^2]$
m	Masse d'une particule	$[kg]$
N	Nombre de particule d'une simulation	
N_g	Nombre de noeuds d'un maillage dans un algorithme de type PM	

N_{meso}	Nombre de liens mésoscopiques compris dans un volume de liquide	
N_{mol}	Nombre de liens moléculaires compris dans un volume de liquide	
p	Exposant d'attraction de la fonction potentielle d'une méthode PAF	
P	Pression	[Pa]
P_i	Pression ressentie par une particule	[Pa]
q	Exposant de répulsion de la fonction potentielle d'une méthode PAF	
q_e	Charge électrique moyenne du H_2O	[C]
R_e	Rayon d'équilibre entre deux particules mésoscopiques	[m]
r_{ij}	Distance radiale entre deux particules i, j de la méthode PAF	[m]
r_{iw}	Distance entre une particule et une paroi solide	[m]
r_{mol}	Distance intermoléculaire à l'équilibre du liquide à l'étude	[m]
r_s	Rayon d'une goutte de liquide	[m]
R_i	Distance critique d'interaction liquide-liquide	[m]
R_{iw}	Distance critique d'interaction liquide-solide	[m]
R_t	Espacement initiale entre les particules lors du calcul énergétique	[m]
t	Temps	[s]
u	Composante parallèle au plan de la vitesse	[m/s]
U	Vitesse d'impact lors d'une collision de goutte	[m/s]
v	Composante tangentielle au plan de la vitesse	[m/s]
\vec{v}	Vecteur vitesse d'une particule	[m/s]
V	Volume	[m ³]
We	Nombre de Weber	
\vec{x}	Vecteur position d'une particule	[m]
α	Rapport de la distance critique d'interaction et du rayon d'équilibre	
γ	Tension de surface	[N/m]
ε	Énergie d'attraction maximale entre deux molécules élémentaires	[J]
ε_0	Constante diélectrique du vide	[C ² /Nm ²]
θ	Angle de mouillage	[rad]
κ	Facteur diélectrique de l'eau	
μ	Coefficient visqueux d'un liquide	[Ns/m ²]

μ_{num}	Coefficient visqueux numérique d'un liquide particulaire	$[Ns]$
$\phi(r_{ij})$	Fonction potentielle entre 2 molécules/particules i et j	$[J]$
ρ	Densité	$[kg/m^3]$
σ	Diamètre rigide équivalent d'une molécule élémentaire	$[m]$
τ	Contrainte visqueuse	$[Pa]$

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

1.1 Problématique

Pour des questions de sécurité routière et de performances, le domaine de l'automobile commence à s'intéresser au nuage de gouttes présent à l'arrière des véhicules lors de conditions pluvieuses. Ce nuage réduit la visibilité des conducteurs et dégrade les performances aérodynamiques des véhicules.

Historiquement, l'étude des phénomènes de formation et d'interaction de gouttes de liquide était basée principalement sur des méthodes expérimentales ou analytiques. De nos jours, les simulations numériques prennent de plus en plus d'importance dans la recherche et le développement en mécanique des fluides. En effet, la puissance de calcul des ordinateurs modernes permet de résoudre des problèmes de plus en plus complexes.

La création de gouttes de liquide peut être observée par différents mécanismes de formation. L'un de ces mécanismes consiste à soumettre le liquide à une force de cisaillement externe. Par exemple, les pneus d'une automobile circulant par temps de pluie exercent une force de cisaillement sur le liquide présent sur la chaussée. C'est ce mécanisme de formation qui engendre le nuage de gouttes de liquide à l'arrière du véhicule.

La résolution classique des équations de continuité, de quantité de mouvement et d'énergie permet de représenter un écoulement de fluide diphasique ou non. Cependant, dans le cas des écoulements diphasiques, la résolution directe de ces équations ne procure pas

d'informations précises sur l'arrangement spatial des deux fluides l'un par rapport à l'autre. Il est possible de connaître la fraction de liquide dans le gaz à un point donné du domaine d'étude, mais la forme que prend le liquide dans le gaz, par exemple, reste inconnue. L'étude de la formation et de l'interaction de gouttes de liquide requiert la connaissance de l'arrangement spatial du liquide dans son milieu. C'est pourquoi la résolution de ces équations doit être effectuée avec une méthode permettant d'obtenir ces informations.

La présente recherche étudie la possibilité d'utiliser une approche particulière pour créer un modèle numérique capable de représenter la formation de gouttes derrière une roue d'automobile en rotation. Cette méthode est connue sous le nom de "Particule and Force method" et est désignée dans le reste du mémoire sous l'acronyme PAF.

Normalement, les modèles numériques utilisant une approche particulière sont utilisés dans le cadre d'études portant sur le comportement thermodynamique des liquides. Puisque la formation de goutte est un phénomène principalement dynamique, la définition de l'approche particulière doit être modifiée afin d'étudier les phénomènes physiques issus des liaisons chimiques intermoléculaires.

1.2 Objectifs de l'étude

1.2.1 Objectifs généraux

L'objectif général de cette étude est d'établir le potentiel d'une approche particulière pour l'étude de la génération du sillage de gouttes derrière une roue évoluant sur une surface mouillée.

Afin d'arriver à cet objectif, différentes simulations sont réalisées pour comprendre adéquatement le comportement mésoscopique d'un liquide modélisé par un agrégat de particules. Le premier objectif intermédiaire de l'étude est le développement d'un cadre logiciel permettant de faciliter les simulations numériques. Le second objectif intermédiaire est l'étude des propriétés physiques d'un liquide formé d'un ensemble de particules. Le troisième objectif intermédiaire est l'étude de l'interaction de deux gouttes de liquide ensemble. Finalement, le dernier objectif intermédiaire est l'étude de l'interaction d'une goutte de liquide avec une surface plane solide. Ces étapes permettent de mieux comprendre les caractéristiques de l'approche particulière qui est utilisée pour représenter un milieu continu liquide.

Le potentiel d'application de ce type de simulation numérique dépend de la compréhension des différents aspects numériques de la méthode. En effet, le grand nombre de particules utilisées dans ce type d'approche requiert l'optimisation des paramètres de calcul afin d'obtenir des simulations réalisables dans un temps de calcul raisonnable. Le pas en temps de la simulation, le volume de calcul, la stabilité et le temps de calcul des simulations constituent certains des aspects qui sont traités lors de l'étude.

1.2.2 Apport de la recherche à la méthode PAF

Puisque les ressources de calculs nécessaires à ce type de méthode sont disponibles depuis peu de temps, ce type de méthode est très peu développé. Cette étude se propose d'étudier certaines modifications à la méthode PAF classique telle que proposée par Greenspan [9]. Ces modifications sont la définition d'une surface solide par une fonction mathématique ainsi que l'introduction d'un terme visqueux dans le calcul des forces interparticulaires. Les sections suivantes présentent sommairement ces deux modifications tandis que leur description détaillée est fournie au chapitre 3.

Définition d'une surface solide

Jusqu'à présent, la représentation d'un solide dans une méthode de type PAF est réalisée à l'aide de particules dont les positions sont imposées dans l'espace et le temps. L'arrangement particulaire est uniforme et représente la forme du solide désiré. Dans la présente étude, les limites de la surface solide sont définies à l'aide d'une fonction mathématique qui tient compte de sa géométrie. Cette méthode permet de diminuer le temps de calcul étant donné qu'une seule évaluation de la force est réalisée entre chaque particule mobile et le solide pour déterminer l'interaction résultante. Dans la méthode classique, les forces provenant de toutes les particules décrivant la paroi solide doivent être évaluées et accumulées pour chaque particule composant la paroi solide.

Introduction de la viscosité

La méthode PAF classique n'inclut pas de terme de viscosité lors des calculs de forces interparticulaires. La présente étude se propose d'inclure un terme de viscosité dans le calcul des forces afin de représenter plus fidèlement la dynamique du liquide. La viscosité est indispensable pour prendre en compte certaines caractéristiques d'un écoulement telles que le frottement à la paroi ou la création de vortex due aux contraintes de cisaillement par exemple.

CHAPITRE 2

ÉTAT DES CONNAISSANCES

2.1 Méthodes de résolution eulérienne et lagrangienne

La description et l'étude des phénomènes relevant de la mécanique des fluides s'effectue principalement dans un des deux grands cadres conceptuels que constituent l'approche eulérienne et l'approche lagrangienne.

L'approche eulérienne définit les propriétés du fluide à un endroit fixé du domaine étudié. Des variantes de cette approche traitent des problèmes où peuvent coexister plusieurs fluides à la fois. Sous sa forme élémentaire, ce type d'approche ne fournit pas d'information sur la forme des discontinuités entre deux fluides; il permet de connaître uniquement la fraction d'un fluide par rapport à un autre. En passant à un niveau de complexité supérieur, il est possible de prendre en compte la géométrie de l'interface entre deux fluides en formulant des problèmes dits "à frontière libre".

L'approche lagrangienne traite le domaine étudié en suivant la trajectoire d'un ensemble de composantes possédant des propriétés physiques individuelles. Le milieu continu est complètement défini lorsqu'on considère l'apport de chaque composante dans la simulation. Ce type de méthode de résolution permet de connaître la forme des agrégats d'un milieu discontinu puisque chaque composante est définie indépendamment des autres. Ce type d'approche est couplé à une méthode d'évaluation des forces interparticulaires dans cette étude afin de modéliser le liquide par un ensemble de particules.

2.2 Suivi de particules

Les méthodes numériques basées sur l'approche lagrangienne de résolution de l'équation du mouvement permettent de construire des simulations où l'évolution d'un grand nombre de particules est suivie dans le temps. Ces méthodes se regroupent principalement en deux types :

Le premier type étudie le mouvement de particules dont la forme est bien définie. Les contacts interparticulaires régissent l'évolution du système. La collision de deux ou de plusieurs boules de billard est un exemple de ce type de simulation. La section 2.2.1 décrit cette approche en détail.

Dans le second type de méthode, les particules sont considérées comme des masses ponctuelles qui n'ont pas de frontières prédéterminées. L'évolution des particules est fonction de forces d'attraction et de répulsion interparticulaires. Le mouvement d'électrons autour d'un proton peut représenter un exemple de ce type de simulation. La section 2.2.2 présente un des modèles de ce type de simulation.

2.2.1 Méthode des éléments discrets (DEM)

La DEM est une méthode où le milieu à l'étude n'est pas considéré comme un continuum mais est discrétisé en plusieurs particules rigides ou déformables qui interagissent les unes avec les autres, Mustoe [17]. Pour une simulation 2D, chaque particule possède deux degrés de liberté en translation et un degré de liberté en rotation. Les interactions entre les particules se produisent lorsque la distance entre la frontière des deux particules est nulle ou est inférieure à zéro. Cette technique est répandue dans la modélisation granulométrique pour prédire l'évolution d'écoulements particuliers dans les séparateurs de grains ou dans les silos par exemple, Cleary et al. [4]. Le calcul des forces interparticulaires est déterminé à l'aide d'une équation de force qui est fonction de la raideur et de l'amortissement interne des particules. Le modèle de contact interparticulaire prend en compte aussi

bien le transfert de quantité de mouvement que le transfert de moment cinétique lors de contacts interparticulaires. La constante de raideur des particules détermine la force de répulsion interparticulaire, tandis que la constante d'amortissement est proportionnelle à l'énergie dissipée lors des collisions. Cette méthode permet de vérifier les lois de conservation de masse, d'énergie, de quantité de mouvement et de moment cinétique du système de particules. Les étapes de calculs d'une méthode DEM sont les suivantes :

1. Vérifier les contacts interparticulaires ;
2. Calculer la force appliquée sur chaque particule selon les contacts ;
3. Calculer l'accélération, la vitesse et la nouvelle position des N particules ;
4. Passer au pas de temps suivant.

La résolution de l'équation du mouvement des particules peut être effectuée en utilisant des méthodes numériques semblables ou identiques aux méthodes qui sont présentées à la section 2.3.

2.2.2 Forces et particules (PAF)

La méthode PAF est la méthode de base utilisée dans cette étude afin d'effectuer le suivi de particules de liquide. Cette méthode simule le comportement de fluides en discrétisant le milieu continu en un ensemble de particules en interaction selon Johnson [14]. Lorsque les particules sont à faible distance les unes des autres, une fonction de force interparticulaire engendre des interactions radiales ou transversales entre les particules. Ces forces d'interaction font évoluer le système. Les particules sont modélisées comme des masses ponctuelles ne possédant aucun moment d'inertie. Greenspan [9] [10] a utilisé ce type de méthode pour modéliser la dynamique de gouttes d'eau en interaction avec différents milieux liquides ou solides. Il a également utilisé cette méthode pour étudier la propagation de fissures dans des solides soumis à des efforts externes. La partie radiale de la fonction de force liant deux particules est caractérisée par une composante d'attraction et une

composante de répulsion, déterminées en appliquant à l'échelle mésoscopique des potentiels équivalents à ceux de Lennard-Jones et de Coulomb présents à l'échelle moléculaire. L'équation 2.1 présente un exemple de fonction de force interparticulaire utilisé dans la littérature.

$$F_{ij} = - \left(\frac{G}{r_{ij}^3} \right) + \left(\frac{H}{r_{ij}^5} \right) \quad (2.1)$$

G	Constante d'attraction de la méthode PAF en 2D	$[Nm^3]$
H	Constante de répulsion de la méthode PAF en 2D	$[Nm^5]$
F_{ij}	Force radiale entre deux molécules/particules de la méthode PAF	$[N]$
r_{ij}	Distance radiale entre deux particules i, j de la méthode PAF	$[m]$

Ce modèle de force est dérivé d'une fonction potentielle $\phi(r_{ij})$ qui considère l'énergie de liaison radiale entre les particules telle que définie par l'équation 2.2.

$$F(r_{ij}) = -\nabla\phi(r_{ij}) \quad (2.2)$$

La force radiale qui apparaît entre deux particules est additive pour l'ensemble des particules d'une simulation. Afin de déterminer la force appliquée sur une particule, l'influence des $N - 1$ autres particules de la simulation doit être considérée. Le temps de calcul d'une telle méthode peut être réduit en considérant uniquement les particules voisines lors du calcul des forces interparticulaires. En effet, lorsque deux particules sont éloignées l'une de l'autre, la force interparticulaire devient pratiquement nulle. Il est possible de négliger la contribution au potentiel de force de toutes les particules en dehors d'un certain domaine d'interaction prédéfini par une distance critique d'interaction. La section 3.1.3 présente en détail le raisonnement permettant de négliger certaines particules lors du calcul de la force interparticulaire. La figure 2.1 illustre le lien qui existe entre la fonction potentielle interparticulaire et la distance critique d'interaction considérée lors du calcul des forces interparticulaires.

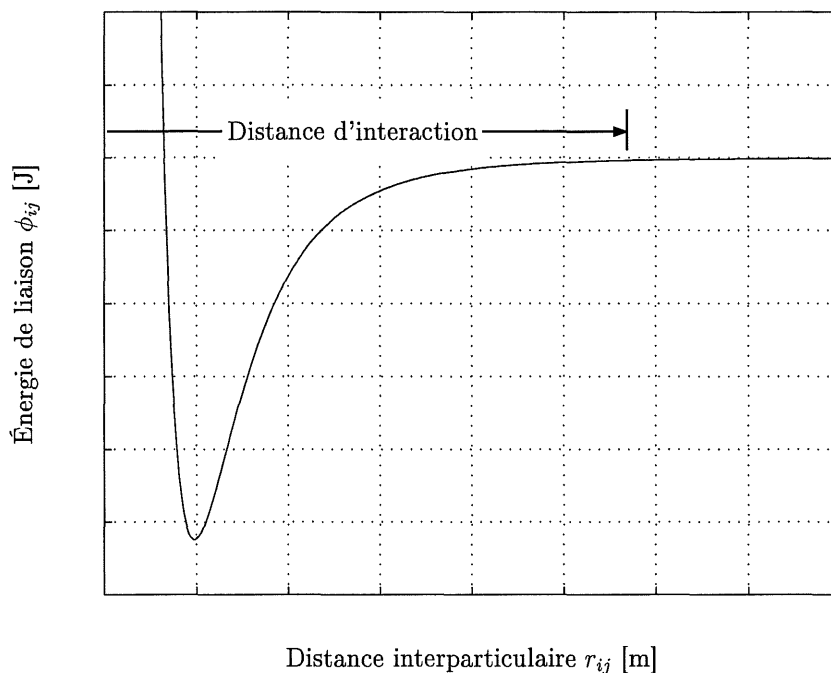


Figure 2.1 Distance d'interaction par rapport à la force interparticulaire

La méthode PAF n'utilise pas de maillage prédéfini pour suivre la position des particules durant la simulation. Les particules contiennent toute l'information nécessaire au calcul des positions successives. La méthode PAF permet de vérifier les lois de conservation de masse, d'énergie et de quantité de mouvement du système de particules. Les étapes de calcul sont les suivantes :

1. Vérifier la présence de particules dans le domaine d'interaction de chaque particule ;
2. Calculer la force appliquée sur chaque particule en fonction des distances interparticulaires ;
3. Calculer l'accélération, la vitesse et la nouvelle position des N particules ;
4. Passer au pas de temps suivant.

La résolution de l'équation du mouvement des particules peut être effectuée en utilisant des méthodes numériques semblables ou identiques aux méthodes qui sont présentées à la section 2.3.

Cette méthode est utilisée dans cette étude pour suivre la dynamique du liquide. Le comportement du liquide est gouverné par des liaisons moléculaires qui peuvent être approximées par une fonction de force de type PAF.

2.3 Algorithmes de calcul pour interaction particulaire

Le calcul des forces interparticulaires peut se réaliser à l'aide de différents algorithmes. Les sections 2.3.1 à 2.3.3 présentent différentes méthodes d'évaluation des forces interparticulaires qui possèdent chacune leurs avantages et leurs inconvénients.

2.3.1 Maillage-Particule (PM)

Dans un algorithme de type PM, la force appliquée sur une particule est déterminée par interpolation d'un champ de force défini sur les noeuds d'un maillage régulier existant. Le champ de force est actualisé à chaque pas de temps. Il est déterminé en calculant un potentiel par une équation de Poisson dont le second membre est la somme des influences de chaque particule. Par l'utilisation de méthodes spectrales résolues par transformées de Fourier rapide (FFT), le coût de calcul d'un tel algorithme est proportionnel à $N + N_g \log N_g$ opérations (où N_g est le nombre de noeuds du maillage). Ce type d'algorithme est utilisé principalement dans la simulation de phénomènes astrophysiques tels que l'évolution de galaxies. Les étapes du calcul de la force sur chaque particule sont les suivantes :

1. Former le second membre en accumulant l'influence de chaque particule ;
2. Calculer le champ potentiel en résolvant une équation de Poisson sur le maillage ;
3. Dériver le potentiel pour obtenir le champ de force sur tous les noeuds du maillage ;

4. Interpoler la force appliquée sur chaque particule à partir du champ de force ;
5. Calculer l'accélération, la vitesse et la nouvelle position des N particules ;
6. Passer au pas de temps suivant et revenir en 1.

Le coût de calcul relativement faible d'un tel algorithme constitue son principal avantage selon Graps [8]. Cependant, ce type d'algorithme gère difficilement les cas où la distribution particulaire n'est pas uniforme puisque la précision obtenue lors du calcul des forces dépend du maillage choisi. Si le maillage est trop grossier dans une zone très dense, la fonction de force risque de ne pas représenter la réalité une fois qu'elle sera appliquée sur les N particules. Par ailleurs, ce type d'algorithme requiert la construction d'un maillage pour le calcul des forces d'interactions. Les différents types de méthodes issus de cette formulation découlent des travaux de Harlow [12].

2.3.2 Particule-Particule (PP)

Un algorithme de type PP est le plus simple à mettre en oeuvre pour calculer les forces interparticulaires d'un ensemble de plusieurs particules. Il évalue et accumule particule par particule la force appliquée sur la particule j par les $N - 1$ autres particules. Le coût de calcul d'un tel algorithme est de l'ordre de $N^2/2$ opérations. Cet algorithme est peu utilisé intégralement en pratique, étant donné son coût de calcul élevé. Voici la structure générale du calcul des forces interparticulaires pour un algorithme PP :

1. Calculer pour toutes les particules la force exercée par les $N - 1$ autres particules ;
2. Calculer l'accélération, la vitesse et la nouvelle position des N particules ;
3. Passer au pas de temps suivant.

Cet algorithme est très flexible et permet d'utiliser un pas de temps variable pour limiter les instabilités lorsque la distance entre deux particules devient faible. Cependant, le coût de calcul très élevé limite rapidement le nombre de particules pouvant être suivies durant

la simulation. Dans cette situation, ce type d'algorithme est relativement simple à paralléliser. La présente étude utilise cette méthode de résolution avec un calcul en parallèle de l'évaluation des forces interparticulaires. Son implémentation est discutée à la section 4.4.

2.3.3 Hiérarchie en arbre (TC)

Contrairement aux algorithmes PM, les méthodes TC (pour "Tree Code") n'utilisent pas de maillage prédéfini mais plutôt une décomposition spatiale de zones emboîtées partitionnant le domaine à la manière d'un arbre hiérarchique à plusieurs branches. L'espace est découpé de manière récursive en zones de tailles variables dans lesquelles se retrouvent 0, 1 ou plusieurs particules. Une zone vide, ou ne contenant qu'une seule particule, forme un noeud terminal de l'arbre. Une zone contenant plusieurs particules est découpée en quatre (en 2D) ou huit (en 3D) sous-zones. La décomposition est terminée lorsque chaque particule possède son propre noeud de l'arbre. Par la suite, l'arbre est retraversé des noeuds terminaux vers le noeud global afin de calculer l'influence de chaque noeud intermédiaire. À chacun des noeuds est associé un centre de masse qui sert à déterminer la force interparticulaire appliquée sur une particule d'un autre noeud de l'arbre. Cette décomposition est modifiée à chaque pas de temps en fonction de la position de chaque particule. Le coût de calcul d'un tel algorithme est proportionnel à $N \log N$ opérations. Cette méthode est efficace lorsque la dispersion des particules est hétérogène puisque l'algorithme est en mesure de répartir la charge de calcul selon la densité des particules dans le domaine. La plupart du temps, ce type d'algorithme est combiné à d'autres méthodes afin d'accélérer le calcul. Dubinski et al. [6] ont utilisé une méthode de type TC combinée à une méthode PM pour représenter le comportement de galaxies. La figure 2.2 illustre le principe de regroupement en branches de particules et la décomposition associés à un algorithme TC.

Les étapes du calcul de la force sur chaque particule sont les suivantes :

1. Construire l'arbre hiérarchique ;
2. Calculer le centre de masse de chaque noeud ;
3. Calculer les forces appliquées aux particules ;
4. Calculer l'accélération, la vitesse et la nouvelle position des N particules ;
5. Passer au pas de temps suivant.

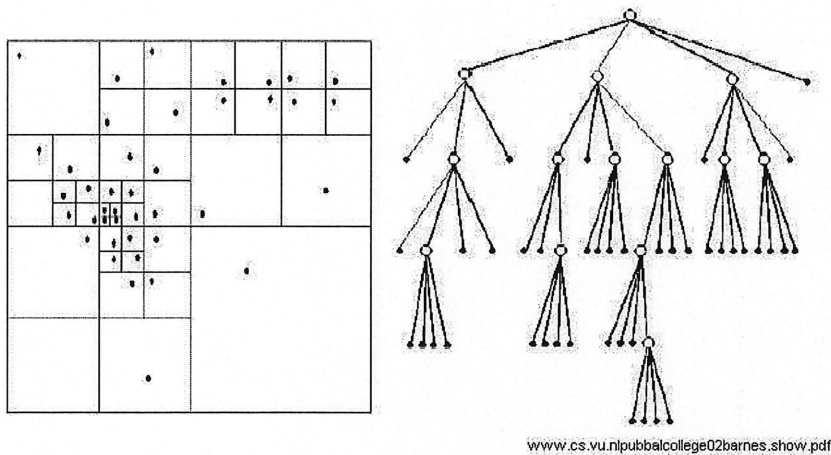


Figure 2.2 Structure hiérarchique d'un algorithme TC

Un algorithme TC a pour principal avantage un faible coût de calcul. Il ne requiert pas de maillage fixe et demeure optimal lorsque la distribution particulaire n'est pas uniforme. Ce type d'algorithme requiert néanmoins une plus grande capacité mémoire pour conserver l'information nécessaire à la résolution.

La nature relativement homogène des géométries liées aux écoulements de la présente étude ne justifie pas la mise en oeuvre de ce type d'algorithme. La réalisation de simulations plus complexes, en 3D par exemple, devrait conduire à évaluer l'intérêt de cette approche.

2.4 Formation et interaction de gouttes de liquide

On ne dispose que de peu de données concernant la formation de gouttes de liquide derrière une roue en rotation. CYR [5] a étudié expérimentalement le phénomène en soufflerie mais aucune relation ne permet de relier les différents paramètres de la roue à la forme et à la vitesse que prennent les gouttes en quittant la roue. Quelques images en soufflerie comparables à la figure 2.3 sont disponibles à titre de comparaison. Étant donné le sujet de l'étude, on s'appuiera essentiellement sur les travaux traitant de l'interaction de deux gouttes de liquide et du contact d'une goutte de liquide avec un milieu solide. Les travaux réalisés sur le sujet sont présentés sommairement aux sections 2.4.1 et 2.4.2.

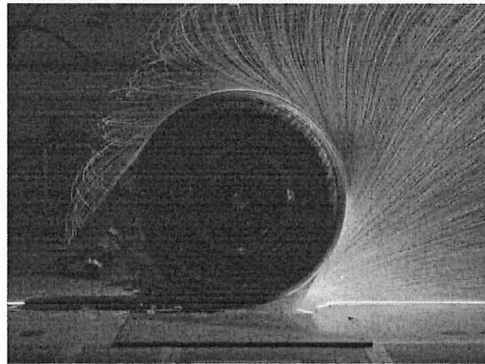


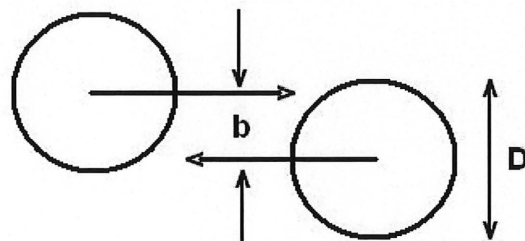
Figure 2.3 Création de gouttes de liquide derrière une roue en rotation

2.4.1 Interaction de gouttes de liquide

L'étude de l'évolution de la forme que prennent deux gouttes de liquide à la suite d'une collision est bien couverte dans la littérature. Typiquement, le nombre de Weber (défini par l'équation 2.3) et un paramètre d'impact, défini à la figure 2.4, permettent de classifier les différents modes de stabilisation résultant d'une collision. La figure 2.5 tirée de Orme [18] présente une cartographie du type de collision en fonction du paramètre d'impact (b/D) et du nombre de Weber pour deux gouttes de mêmes dimensions.

$$We = \frac{\rho U^2 D}{\gamma} \quad (2.3)$$

γ	Tension de surface	$[N/m]$
ρ	Densité	$[kg/m^3]$
U	Vitesse d'impact	$[m/s]$
D	Diamètre de la goutte	$[m]$



Paramètre d'impact = b/D

Figure 2.4 Paramètre d'impact

Il existe principalement trois types d'évolution possibles à la suite d'une collision face à face de deux gouttes d'eau de même dimension tel que proposé par Qian [19]. Premièrement, si le nombre de Weber est relativement faible et que le paramètre d'impact est faible, les deux gouttes vont se réunir pour former une seule entité. Deuxièmement, si le nombre de Weber est élevé et que le paramètre d'impact est faible, les deux gouttes vont se réunir puis se séparer de façon réflexive en deux ou plusieurs gouttes selon les conditions initiales. Troisièmement, si le nombre de Weber est relativement élevé et que le paramètre d'impact est élevé, les deux gouttes vont entrer en contact puis se séparer par étirement. Certaines études numériques basées sur les équations de Navier-Stokes [27] [24] ont reproduit avec succès ces trois types d'évolution en fonction du nombre de Weber et du paramètre d'impact.

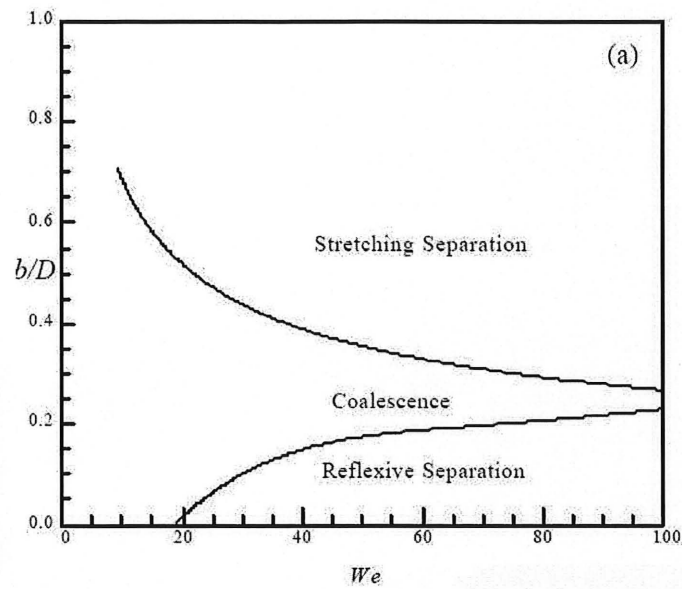


Figure 2.5 Mode de collision entre deux gouttes d'eau en fonction du nombre de Weber (Orme [19])

2.4.2 Interaction liquide-solide

La libération de gouttes d'une roue en rotation est directement liée à l'adhésion du liquide sur la paroi solide. L'adhésion d'un liquide à une surface peut être liée à l'angle de mouillage entre la goutte et la surface solide tel que décrit par l'équation 2.4 tirée de Adamson [1].

$$A = \gamma \cdot \cos(\theta) \quad (2.4)$$

A Tension d'adhésion [N/m]

θ Angle de mouillage [rad]

Lorsque la tension d'adhésion diminue, l'angle de mouillage augmente et le liquide se détache plus facilement du solide. La mesure de l'angle de contact est effectuée telle qu'illustrée à la figure 2.6. Adamson [1] propose que l'angle de mouillage d'une goutte d'eau au repos sur une surface de caoutchouc est d'environ 112° .

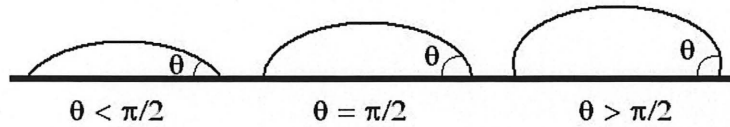


Figure 2.6 Mesure de l'angle de mouillage d'une goutte de liquide sur une surface solide

CHAPITRE 3

MÉTHODOLOGIE DE SIMULATION NUMÉRIQUE DE LA DYNAMIQUE DU FLUIDE

Les simulations numériques fluides utilisant une approche de type PAF font interagir plusieurs particules les unes avec les autres afin de recréer la dynamique d'un fluide. Au niveau moléculaire, les interactions sont régies par une fonction potentielle calculée à partir des propriétés physiques du fluide. Des modifications doivent être apportées à la fonction potentielle de niveau moléculaire afin d'adopter un modèle équivalent au niveau mésoscopique.

Dans un premier temps, la forme de la fonction potentielle est déterminée à l'échelle mésoscopique en se basant sur les propriétés du fluide à l'échelle moléculaire. Les paramètres du modèle sont ensuite ajustés en retrouvant l'énergie interne, la densité et la tension de surface d'une goutte de liquide au repos. Lorsque la goutte possède les propriétés physiques désirées, une seconde goutte semblable est insérée dans la simulation afin d'étudier la collision entre les deux gouttes de liquide. La dynamique de la collision permet de fixer la valeur de certains paramètres numériques du modèle.

Dans un second temps, la goutte d'eau est soumise à l'influence d'une surface solide afin de déterminer la fonction d'interaction liquide-solide. L'interaction liquide-solide est modélisée en remplaçant la surface solide par une équation mathématique de la même forme que la fonction de force interparticulaire. L'équation est ensuite ajustée en fonction de l'angle de mouillage entre la goutte et le solide afin de représenter l'adhésion sur un type de surface particulier.

Finalement, le coefficient numérique provoquant la viscosité est évalué en simulant un écoulement laminaire sur un plan incliné. Le profil de vitesse théorique de la couche limite est utilisé à titre de comparaison. Une fois que l'ensemble des coefficients de la méthode est validé, le modèle est utilisé pour étudier la génération d'un sillage de gouttes derrière une roue en rotation.

Les sections suivantes présentent en détail l'ensemble des étapes permettant d'obtenir un modèle numérique de type PAF qui représente les propriétés de l'eau, des surfaces solides et de l'interaction liquide-solide. Lors de ces calculs, certaines hypothèses de base sont utilisées :

1. La force totale sur une particule est la somme des forces appliquées par les autres particules ;
2. Les interactions entre deux particules sont indépendantes de toute les autres interactions ;
3. L'interaction radiale entre deux particules dérive d'un potentiel de force ;
4. L'interaction transversale entre deux particules n'est due qu'à la viscosité.

3.1 Forme de la fonction potentielle d'interaction

La fonction potentielle d'interaction radiale est obtenue en transposant au niveau mésoscopique les forces d'attraction et de répulsion moléculaires. Les interactions sont modélisées par une fonction potentielle qui correspond à l'énergie de liaison radiale entre deux molécules élémentaires. Typiquement, la fonction potentielle est composée d'un terme régissant les interactions à courte distance et d'un terme régissant les interactions à longue distance. Les sections 3.1.1 à 3.1.2 présentent les étapes qui sont réalisées afin de transformer la fonction potentielle de la molécule H_2O en fonction potentielle mésoscopique.

3.1.1 Échelle moléculaire

À l'échelle moléculaire, la fonction potentielle liée à la molécule H_2O est bien connue. Rahman et al. [20] ainsi que Thompson et al. [21] ont réussi à créer des modèles numériques dans lesquels les propriétés thermodynamiques sont fidèles à la réalité. Dans ces études, une fonction potentielle de type Lennard-Jones est typiquement utilisée pour représenter les interactions moléculaires à courte distance entre les atomes d'oxygène. Cette fonction potentielle est habituellement couplée à une fonction potentielle de Coulomb qui régit l'attraction intermoléculaire à grande distance engendrée par le nuage d'électrons des atomes d'hydrogène tel que présenté par Mahoney et al. [16]. Kolafa et al. [15] proposent que la combinaison de ces deux fonctions potentielles soit utilisée pour représenter le comportement thermodynamique de molécules polaires telle que l'eau.

Potentiel de Lennard-Jones

Selon Hirschfelder et al. [13], la forme classique de la fonction potentielle de Lennard-Jones pour la molécule H_2O est définie comme suit :

$$\phi(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (3.1)$$

σ	Diamètre rigide équivalent d'une molécule	$2.65 \times 10^{-10} \text{ m}$
ϵ	Énergie d'attraction maximale	$[J]$
k	Constante de Boltzman	$1.3806503 \times 10^{-23} \text{ Nm/K}$
ϵ/k	380 K	

Ce potentiel est caractérisé par une importante force de répulsion agissant à courte distance représentée par le terme $\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12}$ et par une force d'attraction à grande distance représentée par le terme $\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6$. La figure 3.1 illustre la forme de la fonction potentielle de Lennard-Jones.

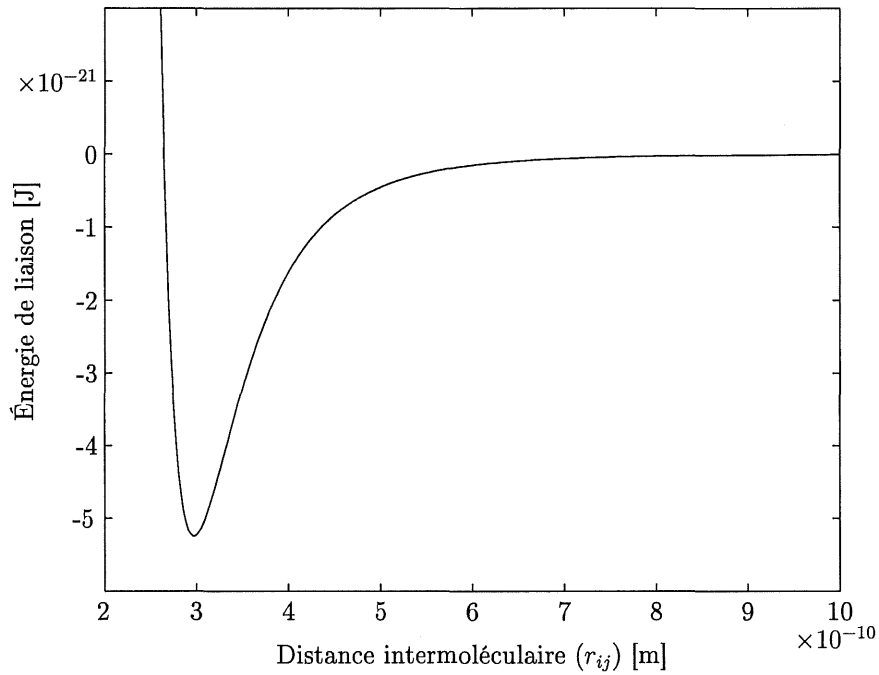


Figure 3.1 Forme de la fonction potentielle de Lennard-Jones

Potentiel de Coulomb

Mahoney et al. [16] ainsi que les références [25], [26] présentent la forme classique de la fonction potentielle de Coulomb pour la molécule H_2O comme suit :

$$\phi(r_{ij}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e^2}{r_{ij}} \quad (3.2)$$

ϵ_0	Constante diélectrique du vide	$\kappa * 8.85 \times 10^{-12} C^2/(Nm^2)$
κ	Facteur diélectrique de l'eau	80
e	Charge électrique de l'électron	$1.602 \times 10^{-19} C$
q_e	Charge électrique moyenne du H_2O	$0.417 * e$

La fonction potentielle de Coulomb est caractérisée uniquement par une force d'attraction qui diminue progressivement en fonction de la distance entre deux molécules.

Combinaison de la fonction potentielle de Lennard-Jones et de Coulomb

La polarité des molécules de H_2O est négligée sur les particules créées à l'échelle mésoscopique puisque ces particules sont composées d'un très grand nombre de molécules élémentaires, comme il est expliqué à la section 3.1.2. Il est donc justifié de faire l'hypothèse que la polarité moyenne de la particule mésoscopique est nulle. Cette hypothèse simplifie la création du potentiel combiné, car l'angle entre les atomes d'hydrogène n'est pas pris en compte. Les fonctions potentielles de Lennard-Jones et de Coulomb se présentent sous la forme suivante une fois qu'elles sont combinées :

$$\phi(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e^2}{r_{ij}} \quad (3.3)$$

La combinaison des fonctions potentielles de Lennard-Jones et de Coulomb est nommée fonction potentielle de Stockmayer. La figure 3.2 représente l'énergie de liaison en fonction de la distance entre deux molécules élémentaires H_2O telle que définie par les équations 3.1, 3.2 et 3.3.

Cette figure permet de mettre en évidence que l'intensité de la fonction potentielle de Lennard-Jones s'estompe rapidement par rapport à la fonction potentielle de Coulomb. La combinaison des deux fonctions potentielles est caractérisée par une grande répulsion à courte distance et par une attraction qui agit à moyenne et à grande distances. Il est donc important de préserver ce type de comportement lors du passage au niveau mésoscopique afin de conserver la dynamique du liquide.

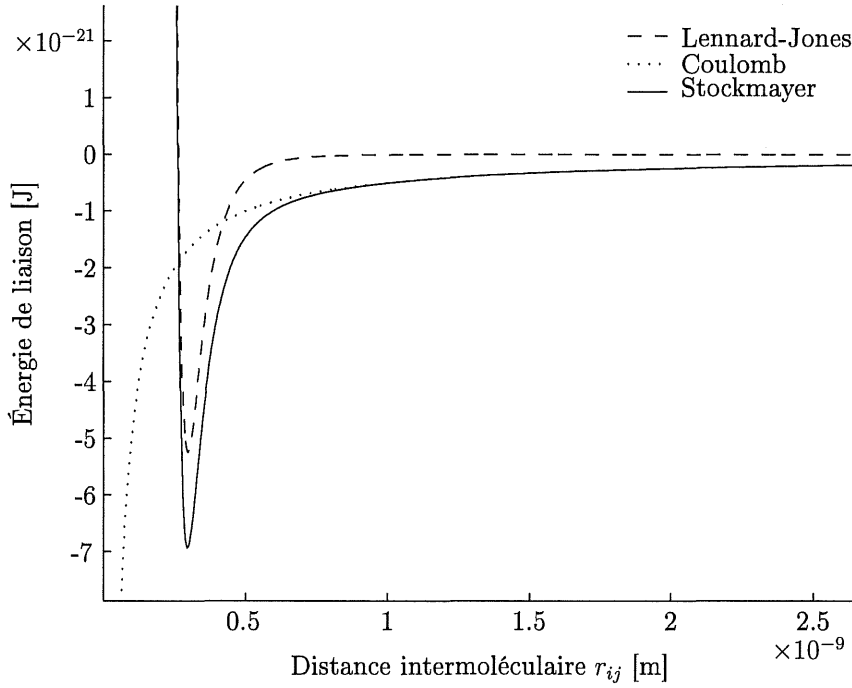


Figure 3.2 Comparaison du potentiel de Lennard-Jones et de Coulomb

3.1.2 Approximation mésoscopique

La fonction potentielle mésoscopique est calculée en modifiant la fonction potentielle moléculaire définie à la section 3.1.1. Dans la nouvelle formulation, les termes attractifs de Coulomb et de Lennard-Jones sont combinés en un seul terme afin de simplifier les calculs numériques, et ainsi de diminuer le temps de résolution de la simulation. La forme de l'équation mésoscopique est donc similaire à l'équation classique de Lennard-Jones (3.1). Telle que proposée par Greenspan [9], la forme de la fonction potentielle mésoscopique est la suivante :

$$\phi(r_{ij}) = \frac{H}{r_{ij}^q} - \frac{G}{r_{ij}^p} \quad (3.4)$$

p Exposant d'attraction de la fonction potentielle d'une méthode PAF

3.1.3 Distance critique d'interaction

Telle que définie à la section 2.2.2, l'interaction de deux particules séparées par une distance supérieure à une distance critique est négligée dans le calcul des forces interparticulaires. La définition de la distance critique d'interaction est illustrée à la figure 2.1 par rapport à une fonction potentielle de Lennard-Jones.

Avant de continuer, la notion de rayon d'équilibre (R_e) doit être introduite afin de faciliter la compréhension du lecteur. Le rayon d'équilibre correspond à la moitié de la distance d'équilibre entre deux particules au repos. La distance d'équilibre correspond à la distance à laquelle il faut placer deux particules isolées de toute autre interaction que celle créée mutuellement pour qu'elles restent au repos (accélération nulle) après avoir été libérées. Les équations 3.5 et 3.6 donnent un exemple du calcul du rayon d'équilibre pour la fonction de force hypothétique 3.5.

$$F(r_{ij}) = \frac{4}{r_{ij}^4} - \frac{2}{r_{ij}^3} \quad (3.5)$$

À l'équilibre, l'accélération et donc la force $F(2R_e)$ est nulle, donc :

$$\frac{4}{(2R_e)^4} - \frac{2}{(2R_e)^3} = 0 \implies R_e = 1 \quad (3.6)$$

Le choix de la distance critique d'interaction est effectuée en calculant l'erreur maximale atteignable sur la force d'interaction d'une particule i exposée à deux situations bien précises. La première situation correspond à l'interaction avec un demi-espace rempli de matière. La seconde situation correspond à l'interaction avec un volume de matière équivalant à une demi-sphère de rayon égal à la distance critique d'interaction. La figure 3.3 illustre les deux situations.

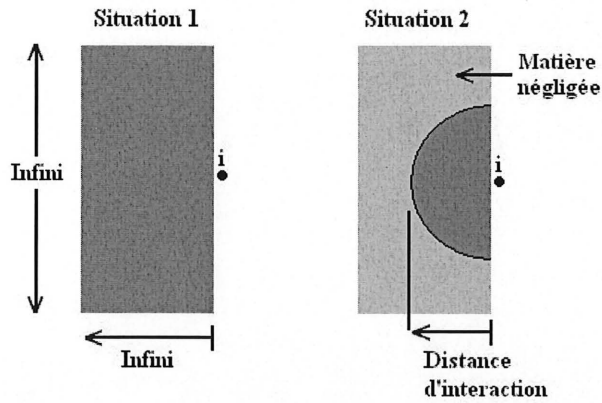


Figure 3.3 Définition des situations servant au calcul de l'erreur à la suite de l'utilisation d'une distance critique d'interaction

L'erreur est basée sur le rapport entre la différence de la force engendrée par la demi-sphère et par le demi-espace. Le calcul est réalisé à l'aide de l'équation 3.7. Cette équation est valide pour tout $p > 2$. Son développement est détaillé à l'annexe A.

$$Erreur = \frac{\Delta F}{F} = \frac{1}{\alpha^{p-2} - 1} \quad (3.7)$$

α R_i/R_e

R_i Distance critique d'interaction

Il est convenu qu'une erreur éventuelle de moins de 10% sur l'évaluation de la force d'interaction est acceptable lors de la présente étude. L'utilisation d'une fonction potentielle ayant comme exposant $p = 3$ et $q = 4$ engendre une distance critique d'interaction de $11R_e$ selon l'équation 3.7. La figure 3.4 présente la comparaison de l'évolution de la collision de deux gouttes de liquide dans le cas où la distance critique d'interaction R_i vaut $11R_e$ et dans le cas où elle est infinie. Dans les deux simulations les propriétés physiques et la vitesse de collision sont identiques. Il est possible de remarquer des différences quantitatives (en D et E par exemple), mais dans l'ensemble le résultat des deux simulations est très semblable, ce qui justifie l'utilisation du concept de distance critique d'interaction.

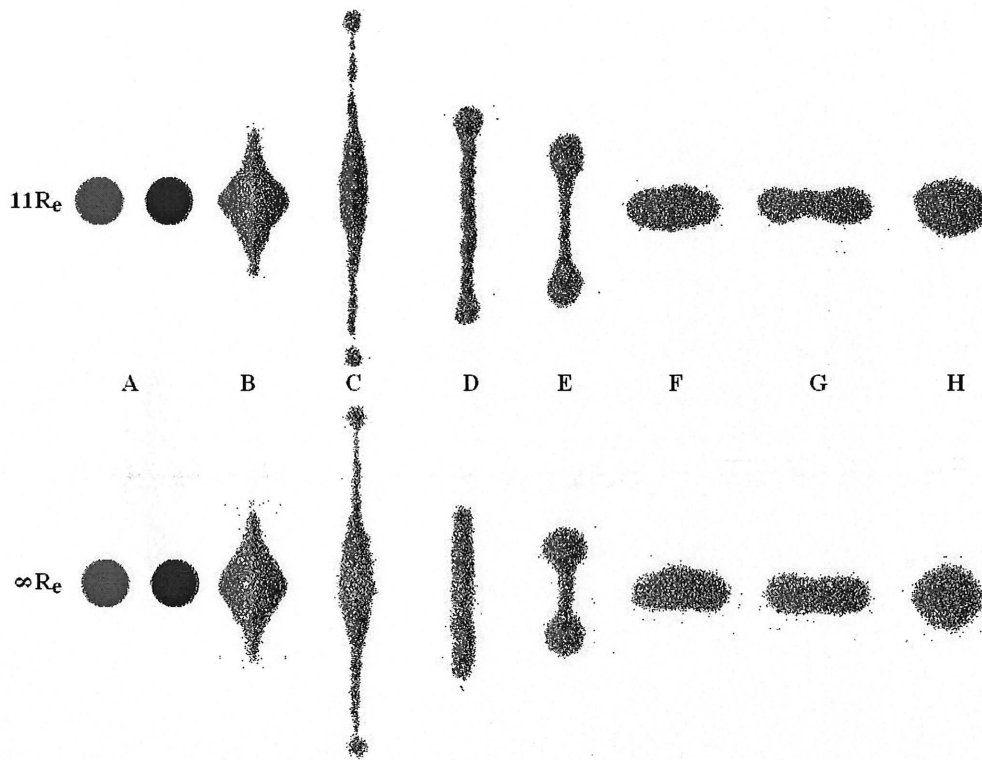


Figure 3.4 Comparaison d'une collision pour $R_i = 11R_e$ et $R_i = \infty R_e$

3.2 Formation de gouttes

La dynamique des simulations PAF est directement reliée à la fonction potentielle interparticulaire utilisée lors des calculs puisque la dynamique et les propriétés physiques du liquide en découlent. Cette section présente la méthodologie qui permet de déterminer les coefficients mésoscopiques de la fonction potentielle pour de l'eau modélisée par un ensemble de particules en interaction selon l'équation 3.4.

Dans la présente étude, cette équation est utilisée dans le cadre de simulations en 2D. Le liquide particulaire s'écoule entre deux plans virtuels qui sont séparés par une distance égale à $2R_e$. Les plans n'ont aucune influence physique sur la dynamique du système, ils ne servent qu'à contenir le fluide sans lui appliquer de contraintes. Toutes les forces n'ont que deux composantes (f_x, f_y) . Les particules composant le liquide sont composées d'agrè-

gats de molécules élémentaires dont la position est représentée par une masse ponctuelle évoluant dans le plan $z = 0$. La particule ne possède aucune dimension, toutes les forces qui sont en jeu sont appliquées sur les masses ponctuelles selon x et y . Lorsque le texte fait référence à une goutte, il s'agit d'un ensemble de particules qui sont disposées en $z = 0$ en forme de cercle tel qu'illustré à la figure 3.6.

3.2.1 Constantes de la fonction potentielle initiale

Les quatre constantes de l'équation 3.4 sont déterminées en trois étapes distinctes. La première étape consiste à déterminer les exposants p et q qui permettent à la fonction potentielle mésoscopique d'adopter une forme semblable au potentiel combiné de la figure 3.2. La seconde étape consiste à déterminer les constantes G et H afin que la goutte possède la densité et la tension de surface de l'eau. La dernière étape consiste à effectuer un ajustement final de l'ensemble des constantes afin de représenter le comportement dynamique de l'eau lorsque le modèle est soumis à certaines situations classiques de la mécanique des fluides.

Choix des exposants p et q

Les exposants p et q sont déterminés séparément. L'exposant p est déterminé à l'échelle moléculaire afin que l'évolution de l'attraction en fonction de la distance interparticulaire soit similaire à la variation observée dans la fonction potentielle de Stockmayer. L'exposant q est déterminé dans la section 3.3 par une méthode faisant intervenir la tension de surface et la dynamique d'une collision entre deux gouttes. Les résultats de la section 3.3 montrent que la valeur de l'exposant q doit être de 4.

La figure 3.5 représente la forme du potentiel d'interaction de trois couples d'exposants p et q par rapport au potentiel combiné de l'équation 3.3. La figure 3.5 montre que le potentiel 2-4 présente un potentiel d'attraction beaucoup trop important à grande distance interparticulaire par rapport au potentiel combiné. L'utilisation de ce potentiel engendre

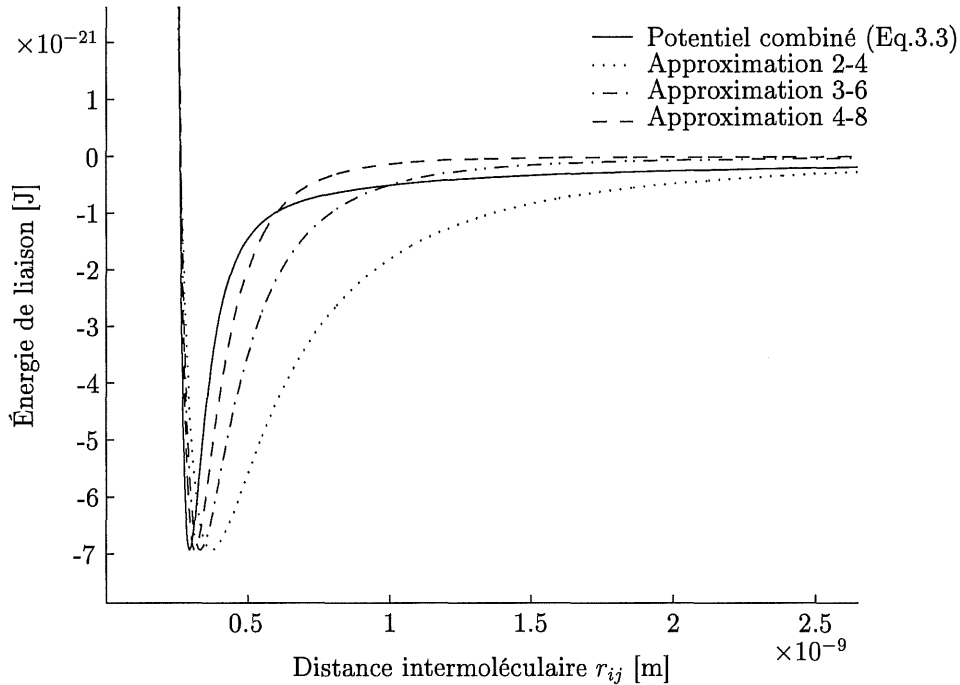


Figure 3.5 Comparaison des approximations du potentiel mésoscopique

la création d'un liquide beaucoup trop ferme en comparaison à l'eau. Le potentiel d'attraction 4-8 s'estompe rapidement. Ce potentiel est caractérisé par un liquide dont les liaisons interparticulaires se brisent facilement. Son comportement dynamique peut être considéré comme un liquide moins rigide que l'eau, un alcool par exemple. Étant donné que dans l'ensemble le potentiel 3-6 présente un comportement similaire au potentiel combiné, l'exposant p est fixé à 3 et l'exposant q à 6. Il faut cependant mentionner que l'exposant q est modifié dans la section 3.3 dans le but d'obtenir un modèle dont le comportement dynamique et les propriétés physiques sont plus proches du liquide étudié, l'eau.

Choix des constantes initiales G et H

Les constantes G et H de la fonction potentielle interparticulaire initiale sont déterminées en employant une méthodologie énergétique similaire à celle proposée par Greenspan [9]. Voici les étapes de cette méthodologie :

Premièrement, une distribution initiale en forme de goutte cylindrique est créée. Cette dernière est composée d'un nombre arbitraire de particules fixées par l'utilisateur. Cette distribution représente une goutte d'eau à l'équilibre en l'absence de gravité. Les étapes conduisant à la distribution initiale sont les suivantes :

1. Fixer le diamètre D de la goutte cylindrique à simuler ;
2. Fixer le nombre N_{meso} de particules mésoscopiques dans la goutte ;
3. Distribuer selon un pavage de triangles équilatéraux les particules à l'intérieur du diamètre de la goutte afin d'obtenir un espacement constant R_t entre chaque particule. L'espacement R_t correspond également à l'épaisseur virtuelle de la goutte lors du calcul de la densité présenté à la section 3.2.2 ;
4. Calculer la masse m de chaque particule pour satisfaire la densité globale de la goutte selon l'équation $m = (\rho D R_t) / N_{meso}$, ρ étant la masse volumique du liquide étudié.

La figure 3.6 représente un exemple de distribution initiale d'une goutte composée de 589 particules.

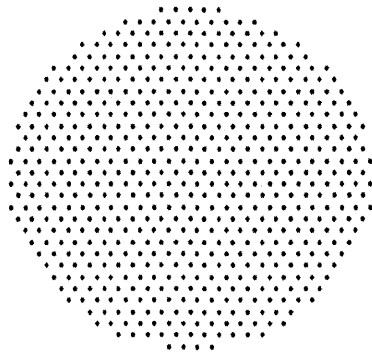


Figure 3.6 Distribution initiale de 589 particules

Lors de la seconde étape, l'énergie potentielle présente au niveau moléculaire doit être calculée pour un volume équivalent à la distribution initiale à l'aide de l'équation 3.3. Cette étape permet de connaître la quantité d'énergie potentielle E_{total} qui doit être redistribuée dans les liens interparticulaires de la distribution initiale. L'énergie interne est obtenue en multipliant le nombre de liens intermoléculaires N_{mol} contenus dans le volume par la valeur de l'énergie contenue dans un lien tel que défini par l'équation 3.8.

$$E_{total} = N_{mol} \times 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{mol}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{mol}} \right)^6 \right] + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r_{mol}} \quad (3.8)$$

r_{mol} Distance intermoléculaire à l'équilibre du liquide à l'étude $[m]$

Puisque la distribution initiale est considérée à l'équilibre et que les exposants p et q sont connus, il est possible de créer un système de deux équations à deux inconnues afin de déterminer une première approximation des constantes G et H . La première équation (3.9) est obtenue en égalant l'énergie totale déterminée à l'équation 3.8 avec la fonction potentielle mésoscopique définie à l'équation 3.4. Cette égalité permet de redistribuer l'énergie des liens moléculaires entre les N_{meso} liens interparticulaires de la distribution initiale mésoscopique.

$$E_{total} = N_{meso} \times \left(\frac{H}{R_t^q} - \frac{G}{R_t^p} \right) \quad (3.9)$$

La seconde équation (3.11) est obtenue en transformant la fonction potentielle en fonction de force à l'aide de l'équation 2.2 et en supposant que les particules de la distribution sont à l'équilibre.

$$-\frac{d\phi}{dr}(r_{ij}) = F(r_{ij}) = \frac{qH}{r_{ij}^{q+1}} - \frac{pG}{r_{ij}^{p+1}} \quad (3.10)$$

Densité	ρ	998 kg/m^3
Tension de surface	γ	0.073 N/m^2
Viscosité	μ	$1 \times 10^{-3} \text{ N s/m}^2$
Compressibilité	K	$2.19 \times 10^9 \text{ N/m}^2$

TABLEAU 3.1 Propriétés de l'eau à 20°C

Puisque la distribution est à l'équilibre $F(R_t) = 0$.

$$\frac{qH}{R_t^{q+1}} - \frac{pG}{R_t^{p+1}} = 0 \quad (3.11)$$

Les exposants p et q prennent les valeurs 3 et 6 dans ces mêmes équations lors de cette étape de l'étude.

La solution du système d'équation composé des équations 3.9 et 3.11 permet de déterminer la valeur initiale des constantes G et H . Ces constantes servent de paramètres initiaux à la première simulation numérique qui est réalisée dans la section 3.2.2.

3.2.2 Ajustement initial de la fonction potentielle

Les constantes de la fonction potentielle mésoscopique déterminées à la section 3.2.1 sous l'hypothèse que cette distribution est à l'équilibre sont ajustées afin de satisfaire les propriétés physiques macroscopiques de l'eau. Les propriétés que l'étude cherche à reproduire dans les simulations sont la densité, la tension de surface, la viscosité et l'incompressibilité. Dans un premier temps, une goutte au repos est utilisée pour calculer la densité et la tension de surface. L'étude de la viscosité et de l'incompressibilité est réalisée ultérieurement dans la section 3.6 puisque la définition de l'interaction liquide-solide est requise pour ces propriétés. Le tableau 3.1 résume les propriétés physiques de l'eau selon White [22] qui sont utilisées dans le cadre de cette étude.

Il faut souligner que les constantes G et H issues de la section 3.2.1 ne sont pas directement utilisables dans une simulation PAF pour simuler la dynamique du liquide. La première approximation sert uniquement de point de départ lors de l’ajustement. Pour le moment, les exposants p et q sont utilisés directement sans modification. Les étapes conduisant à la création d’une simulation PAF représentant un liquide formé d’un amas de particules possédant la densité et la tension de surface d’une goutte d’eau sont les suivantes :

1. Stabiliser la distribution initiale avec les constantes G et H initiales ;
2. Ajuster les constantes G et H afin d’obtenir le bon diamètre de la goutte ;
3. Ajuster la densité de la goutte en modifiant la masse des particules ;
4. Modifier les constantes G et H pour ajuster la tension de surface de la goutte ;
5. Revenir en 2 jusqu’à ce que le procédé converge.

Les sections suivantes présentent ces étapes en détail.

Méthode de stabilisation des particules dans une goutte

Le but de cette étape est de stabiliser la distribution initiale en utilisant comme constantes les valeurs G et H provenant de la section 3.2.1. Lors de la première simulation, le système de particules n’est pas en équilibre et la distribution initiale risque de subir de grandes déformations ou même de devenir instable. En effet, lorsque les particules se rapprochent rapidement les unes des autres, la force de répulsion augmente rapidement et peut engendrer des instabilités sur la position des particules. Ces instabilités peuvent apparaître sous forme de fortes oscillations du système ou encore par l’éjection de particules en dehors du domaine à l’étude. L’ajustement de certains paramètres de la simulation permet de réduire le temps de stabilisation d’un système de particules.

Étant donné que l’on cherche à obtenir une goutte d’un diamètre équivalent à celui de la distribution initiale, il est recommandé de modifier les constantes G et H qui régissent l’attraction et la répulsion entre les particules afin de limiter le temps de stabilisation du système. Si la distribution prend trop d’expansion il faut diminuer H ou augmenter G . Si la distribution se contracte rapidement sur elle-même il faut diminuer G ou augmenter H .

Le but est de conserver inchangée la distribution initiale le plus possible à tout moment durant la stabilisation.

L'évolution de l'énergie cinétique du système de particules est utilisée afin d'évaluer la stabilité du système. Le déséquilibre des particules au début de la simulation procure une grande énergie cinétique au système. Cette énergie diminue durant la stabilisation et atteint un minimum lorsque les particules sont en équilibre les unes avec les autres. Les paragraphes suivants présentent certaines méthodes permettant d'accélérer la stabilisation.

Le pas en temps : La position des particules est sensible au pas de temps choisi puisque la force (et l'accélération par $\vec{F} = m \vec{a}$) varie rapidement à faible distance interparticulaire. Le choix d'un pas de temps assez petit pour limiter le déplacement des particules entre chaque évaluation de la force est crucial. Plus le pas de temps est faible, plus le comportement du système est représenté de façon réaliste puisque la simulation dispose de plusieurs pas en temps pour suivre les grandes variations de la force interparticulaire. Il faut donc déterminer un pas de temps suffisamment petit pour représenter la variation rapide de la force lorsque la distance interparticulaire est inférieure à la distance d'équilibre. Cependant, diminuer le pas en temps de manière excessive augmente inutilement le temps de simulation.

Méthode de la position moyenne : Lorsque le système présente de fortes oscillations, la méthode de la position moyenne est utilisée pour accélérer la stabilisation. Cette méthode consiste à effectuer une moyenne de la position des particules sur un laps de temps prédéterminé. Cette position moyenne est utilisée comme condition initiale d'une nouvelle simulation. L'opération est répétée jusqu'à ce que le système de particules ne subisse plus d'oscillations.

Amortissement artificiel : L'introduction d'un amortissement artificiel sur la vitesse représente une autre possibilité pour accélérer la stabilisation. Cet amortissement réduit d'un facteur prédéterminé la vitesse des particules à chaque pas en temps. Cette méthode permet d'utiliser un pas de temps plus important lors de la stabilisation. Cependant, cet amortissement ne doit pas être utilisé lors des calculs de la dynamique du système puisqu'il biaiserait les résultats obtenus.

Ajustement de G et H pour satisfaire la densité de l'eau

La densité d'un liquide particulière est reliée à la distance d'équilibre interparticulaire. En isolant le rayon d'équilibre R_e d'une équation semblable à l'équation 3.11, il est possible de constater qu'elle est fonction du rapport de H sur G pour des exposants p et q donnés. Cette section présente une méthode en trois étapes afin de modifier G et H pour obtenir la densité voulue.

La première étape consiste à ajuster les constantes G et H afin d'obtenir une goutte qui possède le diamètre désiré. À cette étape, la valeur de la densité n'a pas vraiment d'importance. Le diamètre de la goutte peut être modifié en variant les constantes G et H puisque ces constantes régissent les forces d'attraction et de répulsion entre les particules. Si le diamètre de la goutte est trop grand, il faut augmenter la valeur de G afin d'engendrer une plus grande attraction interparticulaire et rapprocher les particules les unes des autres. Diminuer la valeur de H a le même effet. Si la goutte possède un diamètre trop petit, il faut diminuer la valeur de G ou augmenter la valeur de H . À l'issue de cette étape, la goutte possède le diamètre désiré pour les simulations futures.

La seconde étape consiste à calculer la densité locale des particules composant la goutte en effectuant les calculs suivants :

1. Calculer la moyenne de la distance des plus proches voisins de chaque particule. La variable a est utilisée pour définir cette moyenne ;
2. Calculer le volume occupé par chaque particule en utilisant la relation présentée à la figure 3.7 ;

3. Calculer la densité locale ρ en divisant la masse individuelle d'une particule par le volume défini par $\frac{a^2\sqrt{3}}{2}R_t$ selon le a et le R_t défini à la figure 3.7.

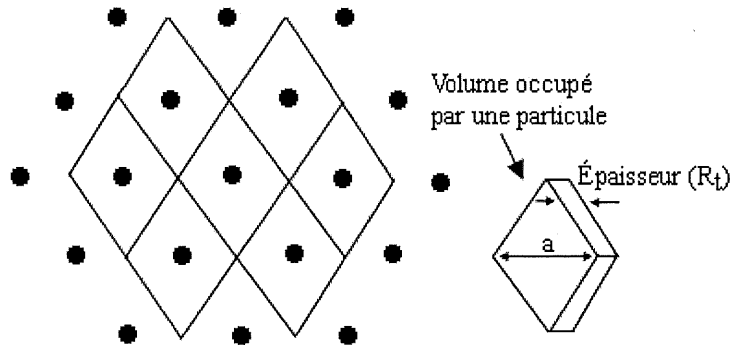


Figure 3.7 Volume occupé par une particule dans un système particulaire à l'équilibre

À la suite de cette étape, la densité locale de chaque particule est connue et elle peut être représentée sur un graphique dont un exemple apparaît à la figure 3.8. Ce graphique montre qu'au centre de la goutte la densité est maximale et elle demeure constante jusqu'à ce que les effets de bord présents à la surface de la goutte prennent plus d'importance.

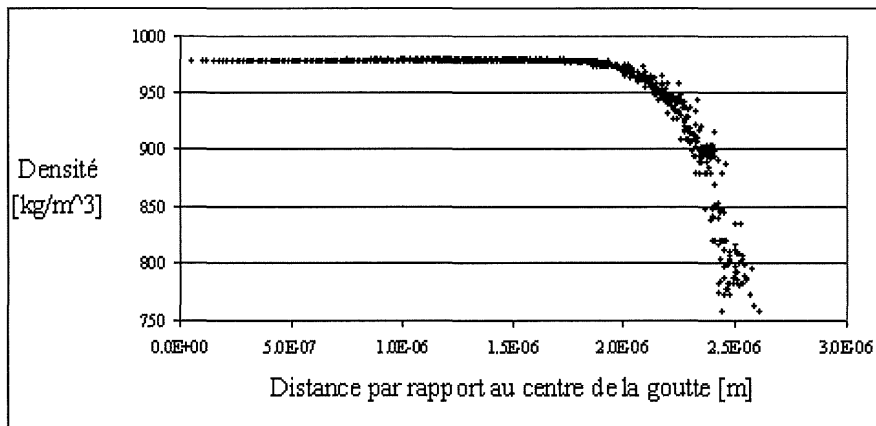


Figure 3.8 Densité locale en fonction de la distance par rapport au centre de la goutte

La dernière étape consiste à modifier la masse de toutes les particules afin que la densité des particules du centre de la goutte soit équivalente à la densité de l'eau. Ce calcul est effectué par une simple règle de trois. Il faut préciser que la goutte qui sert à ajuster G et

H doit contenir suffisamment de particules afin que l'équilibre des forces interparticulaires du centre ne soit pas influencé par le déséquilibre des forces près de la surface. La goutte doit être d'un diamètre d'au moins $2R_e$ afin que les particules du centre de la goutte ne soient pas influencées par les particules situées à la surface de la goutte.

Ajustement de G et H pour satisfaire la tension de surface de l'eau

La tension de surface d'une simulation particulière est reliée aux constantes G et H puisqu'elles régissent l'amplitude des forces d'attraction et de répulsion interparticulaires. La section précédente montre que la densité est reliée au rapport de G et H . Cette section présente la méthodologie permettant de fixer la valeur de G et H puisqu'une infinité de combinaisons peuvent donner le même rapport.

La tension de surface se définit comme étant la force surfacique requise de façon à briser les liens de la surface d'un liquide. Dans la présente étude, la tension de surface est déterminée en utilisant une relation qui fait intervenir la différence de pression ressentie entre les particules au centre et à la surface d'une goutte de liquide. À cette fin, la relation classique 3.12 tirée de Allen et al. [2] est utilisée.

$$\Delta P = \frac{2\gamma}{r_s} \tag{3.12}$$

P	Pression	[Pa]
r_s	Rayon de la goutte	[m]

La pression en chaque point de la goutte est calculée en utilisant l'équation 3.13 qui est adaptée de Gould et al. [7]. Cette dernière permet de calculer la pression ressentie par une particule en utilisant les forces interparticulaires exercées par ses voisins et la distance qui la sépare de ces derniers.

$$P_i = \frac{1}{d} \sum_{j=1}^N \frac{r_{ij} F_{ij}}{V} \quad (3.13)$$

P_i	Pression ressentie par la particule i	$[Pa]$
V	Volume d'un cylindre de rayon r_{ij} et d'épaisseur de la distribution	$[m^3]$
d	Dimension de l'espace (2 dans cette étude)	

Voici la méthodologie à suivre afin d'ajuster la tension de surface d'une goutte de liquide formée par un ensemble de particules.

1. Calculer la pression ressentie par chaque particule de la goutte à l'aide de l'équation 3.13;
2. Calculer le rayon moyen de la goutte;
3. Calculer la tension de surface à l'aide de l'équation 3.12; si la tension de surface est trop faible, augmenter la valeur de G et H en conservant le même rapport H/G ;
4. Si la tension de surface est trop grande, diminuer la valeur de G et H en conservant le même rapport H/G .

À la suite de ces étapes, la densité et la tension de surface du liquide particulaire sont conformes aux propriétés physiques de l'eau présentées au tableau 3.1.

L'équation 3.14 présente la fonction potentielle obtenue à ce stade permettant de modéliser une goutte statique de $500 \mu m$ composée de 2048 particules possédant les propriétés physiques de l'eau pour une distance critique d'interaction $R_i = 11R_e$.

$$\phi(r_{ij}) = \left(\frac{2.2816 \times 10^{-42}}{r_{ij}^6} - \frac{1.2445 \times 10^{-27}}{r_{ij}^3} \right) \quad (3.14)$$

Cette relation est modifiée dans la section 3.3 afin de mieux reproduire le comportement dynamique de l'eau.

3.2.3 Modification de l'échelle de la simulation

Les sections 3.2.1 et 3.2.2 présentent une méthode permettant de créer une goutte de liquide d'un diamètre imposé composé d'un ensemble de N_{meso} particules. Par exemple, l'équation 3.14 présente une fonction potentielle permettant de former une goutte de $500\ \mu m$ à l'aide de 2048 particules. La création d'une goutte de $5\ \mu m$ formée du même nombre de particules est réalisée en calculant une nouvelle fonction potentielle. Cette section présente une méthode permettant de changer l'échelle d'une goutte particulière existante en utilisant sa fonction potentielle comme point de départ. Cette méthode évite à l'utilisateur de refaire les étapes de la section 3.2.1 pour déterminer la nouvelle fonction potentielle.

1. Calculer le rayon de la goutte existante ;
2. Calculer le rapport $f = r_{500\ \mu m} / r_{5\ \mu m}$;
3. Calculer le rayon d'équilibre de la goutte actuelle ;
4. Calculer le rayon d'équilibre de la nouvelle goutte $R_{e\ 5\ \mu m} = R_{e\ 500\ \mu m} / f$;
5. Déterminer un rapport H/G permettant de retrouver le nouveau rayon d'équilibre en utilisant l'équation 3.11 ;
6. Utiliser $2R_e$ comme nouvelle épaisseur de distribution ;
7. Calculer la nouvelle position des particules dans la goutte en utilisant une règle de trois qui fait intervenir la position des particules dans la goutte actuelle et le rapport f calculé précédemment.
8. Effectuer les étapes de la section 3.2.2 afin d'ajuster précisément les constantes G et H en fonction des propriétés de l'eau.

3.3 Interaction de deux gouttes à partir de gouttes stabilisées

À cette étape de l'étude, une fonction potentielle permettant de créer une goutte d'eau stable et immobile dans l'espace est disponible. Cependant, cette fonction ne garantit pas que le comportement dynamique du modèle soit en accord avec la réalité. En effet, n'importe quelle combinaison d'exposants p et q permet de retrouver les propriétés physiques statiques de l'eau en ajustant les constantes G et H . Les exposants p et q jouent un rôle important dans la dynamique du fluide puisqu'ils contrôlent le taux de variation de la force en fonction de la distance interparticulaire. L'exposant d'attraction p est déterminé à la section 3.2.1 en étudiant la variation de l'attraction en fonction de la distance interparticulaire. L'exposant de répulsion q est quant à lui déterminé en étudiant le comportement dynamique de gouttes possédant les propriétés physiques de l'eau.

L'étude de la dynamique du liquide est réalisée en comparant l'évolution de la collision de deux gouttes avec les données expérimentales disponibles sur le sujet. Cette dynamique est sélectionnée comme point de comparaison puisqu'elle est décomposable en plusieurs périodes qui sont faciles à analyser individuellement. Dans la présente étude, la dynamique de la collision recherchée doit être qualitativement comparable aux données expérimentales. Une comparaison quantitative deviendrait possible lors d'une étude tridimensionnelle pour les raisons énoncées à la section 3.3.2. La collision entre deux gouttes est réalisée en donnant une vitesse macroscopique identique à chacune des particules d'une même goutte. L'étude doit être effectuée avec des conditions d'impact variées, comme une collision face à face à vitesse constante, une collision en angle, etc.

Dans les simulations effectuées, l'équilibre interne des gouttes est volontairement brisé afin d'obtenir des gouttes non symétriques plus représentatives de la réalité. Dans une goutte symétrique, les particules sont distribuées uniformément en arrangement triangulaire. Le bris de l'équilibre interne est réalisé en déplaçant les particules de leur position d'équilibre avant la collision.

3.3.1 Détermination de l'exposant q

La détermination de l'exposant q est réalisée en analysant la collision face à face de deux gouttes de même dimension se déplaçant à des vitesses macroscopiques de même valeur et de directions opposées. Ce type de collision engendre la coalescence ou la séparation des deux gouttes dépendamment du nombre de Weber et du paramètre d'impact de la collision. La structure prise par les deux gouttes durant la collision est utilisée pour ajuster l'exposant q afin de retrouver le comportement dynamique recherché. La figure 2.5 montre la relation qui existe entre le nombre de Weber, le paramètre d'impact et le type de dynamique qui résulte de la collision.

L'ajustement de l'exposant q est réalisé en analysant des collisions dont la dynamique résulte en la coalescence des deux gouttes afin d'en limiter la complexité. Selon la figure 2.5, le nombre de Weber qui doit être utilisé doit être inférieur à 19 afin de créer une simulation où les deux gouttes se regroupent en une seule entité. La figure 3.9 de QIAN et al. [19] présente l'évolution d'une collision autour d'un Weber de 19 en trois périodes distinctes.

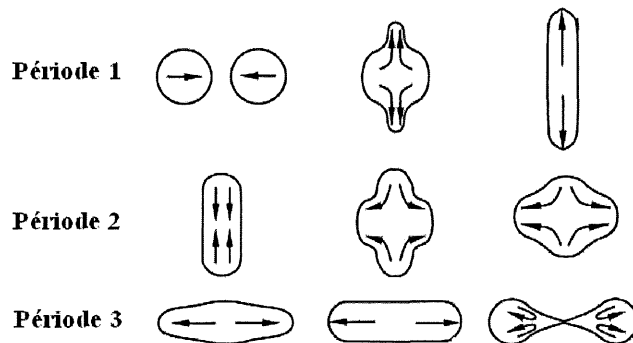


Figure 3.9 Évolution d'une collision près de $We = 19$ et $b/D = 0$

La première période représente le début de la collision. Les deux gouttes entrent en collision et la vitesse des particules devient perpendiculaire à la direction de la vitesse initiale, ce qui a pour effet d'étirer la goutte verticalement. La seconde période débute lorsque la

vitesse interne de la goutte devient nulle, change de direction et provoque une contraction de la goutte sur elle-même. La troisième période débute lorsque la vitesse interne de la goutte redevient parallèle à la vitesse initiale de collision. À la fin de la troisième période la forme de la goutte est caractérisée par un pincement au centre. En dessous d'un Weber de 19 la goutte se regroupe en une seule entité. Au dessus de Weber 19, la goutte se sépare au pincement pour créer deux gouttes distinctes. Ce type de dynamique est nommé séparation réflexive. Le choix de l'exposant q est réalisé en comparant la dynamique des simulations avec la dynamique de la figure 3.9 juste avant la séparation réflexive.

La figure 3.10 présente la collision de deux gouttes parfaitement symétriques en utilisant $p = 3$ $q = 6$ dans la fonction potentielle d'interaction. Cette collision présente un paramètre d'impact nul et un nombre de Weber de 9.

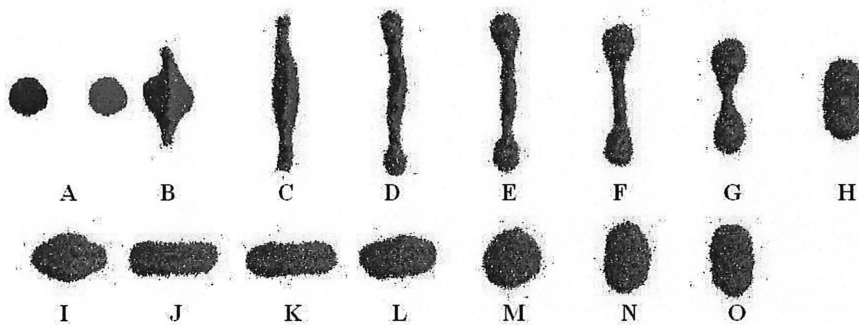


Figure 3.10 Collision utilisant une fonction potentielle $p = 3$ $q = 6$

La période 1 s'étend de A à D. Les deux gouttes entrent en collision, la vitesse change de direction et tend à étirer verticalement la goutte. La période 2 est représentée de E à H. La dynamique de cette période est comparable à la dynamique présentée à la figure 3.9. La période 3, visible de I à K, est caractérisée par une extension horizontale insuffisante de la goutte. En effet, les forces d'attraction interne sont trop importantes pour permettre au liquide de s'éloigner et de former un pincement au centre. La fonction potentielle $p = 3$ $q = 6$ doit être modifiée afin d'obtenir une fonction potentielle moins attractive, ou plus répulsive, tout en conservant la densité et la tension de surface de l'eau. Étant donné que l'exposant d'attraction p est déjà fixé et que les constantes G et

H s'ajustent en fonction de la forme de la fonction potentielle, il ne reste que l'exposant de répulsion q qui peut être modifié afin de jouer sur l'équilibre des forces et augmenter la force de répulsion. L'exposant q doit être diminué afin d'augmenter la constante H , tout en conservant l'équilibre des forces qui procure au liquide la densité et la tension de surface recherchées.

À la suite d'essais de collision avec les exposants $p = 3$ $q = 5$ et $p = 3$ $q = 4$, la fonction potentielle $p = 3$ $q = 4$ est retenue pour le reste de l'étude étant donné qu'elle engendre les résultats les plus représentatifs de la réalité. La figure 3.11 présente l'évolution de la collision de deux gouttes de liquide à l'aide de la fonction potentielle $p = 3$ $q = 4$ pour un paramètre d'impact nul et un Weber de 9.

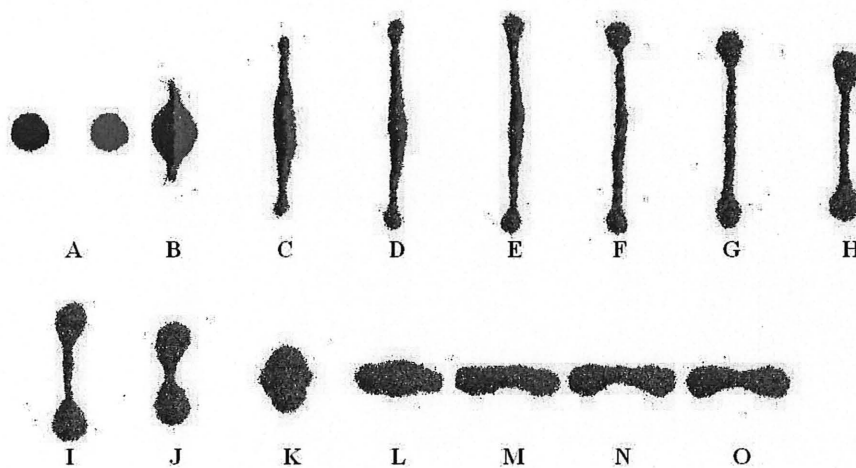


Figure 3.11 Potentielle $p = 3$ $q = 4$

La période 1 est représentée de A à E. Elle est caractérisée par un étirement plus important dû à la force de répulsion plus importante que dans le cas de la fonction potentielle $p = 3$ $q = 6$. Puisque la goutte est plus étendue, la force d'attraction doit procurer plus d'énergie au système de particules pour regrouper la goutte durant la période 2 qui s'étend de F à J. Puisque l'énergie de répulsion est plus importante et que la force d'attraction procure plus d'énergie dans la période 2, la période 3, qui se développe de K à O, présente un pincement au centre de la goutte. Cette caractéristique doit être présente lors d'une collision face à face de deux gouttes d'eau.

L'équation 3.15 présente la fonction potentielle utilisée pour la construction d'un liquide particulaire avec une distance critique d'interaction $R_i = 11R_e$. Cette définition de la fonction potentielle permet de créer une goutte de $500 \mu m$ avec 2048 particules possédant une masse individuelle de $8.9668 \times 10^{-13} kg$. La section 3.3.2 présente certains cas de collision de gouttes utilisant cette fonction potentielle en comparaison avec des données expérimentales de collisions de gouttes.

$$\phi(r_{ij}) = \frac{H}{r_{ij}^q} - \frac{G}{r_{ij}^p} \quad (3.15)$$

G	2.5424×10^{-27}	Constante d'attraction à l'échelle du micron	$[Jm^q]$
H	3.3285×10^{-32}	Constante de répulsion à l'échelle du micron	$[Jm^p]$
p	3	Exposant d'attraction de la fonction potentielle	
q	4	Exposant de répulsion de la fonction potentielle	

3.3.2 Analyse des types de collisions avec le potentiel p34

Tel que représenté par les figures 3.10 et 3.11, le nombre de Weber utilisé pour représenter le comportement dynamique de l'eau avant la séparation réflexive est inférieur à la valeur expérimentale. Cette différence peut s'expliquer par le caractère bidimensionnel (2D) des simulations. Cette simplification n'est pas sans conséquence puisque l'influence tridimensionnelle (3D) de la tension de surface est absente du modèle. La figure 3.12 représente la coupe d'une collision de goutte 3D rendue à la fin de la période 1. La contribution tridimensionnelle de la tension de surface procure au système de gouttes plus d'énergie surfacique, ce qui lui permet de résister à l'étirement et d'être ainsi en mesure de supporter des vitesses de collision (Weber) plus élevées pour un comportement dynamique similaire. Elle entraîne également une plus grande force d'attraction lors de la période 2, ce qui a pour conséquence de créer deux gouttes par réflexion à la fin de la période 3.

À la suite de cette analyse, il est évident qu'une simulation 3D serait plus appropriée pour simuler adéquatement le comportement dynamique de liquides par une approche particulière. La construction d'une simulation 3D est similaire à la construction d'une simulation 2D. La différence réside dans les définitions mathématiques du calcul de la densité et de la tension de surface qui doivent être modifiées pour prendre en compte la troisième dimension. La construction d'une simulation 3D requiert des ressources de calcul très importantes qui ne sont pas disponibles au moment de la réalisation de ces travaux. Par conséquent, le modèle numérique 2D est utilisé dans le reste de cette étude. Ce modèle est valide uniquement pour simuler qualitativement le comportement dynamique d'un liquide soumis à des efforts externes, les résultats obtenus n'étant pas directement utilisables pour une comparaison quantitative.

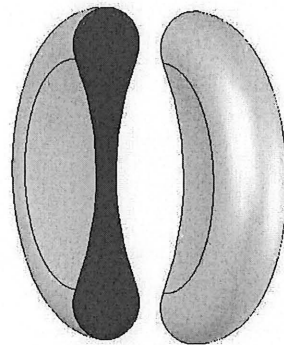


Figure 3.12 Étape caractéristique d'une collision de deux gouttes tridimensionnelles (coupe)

Le modèle numérique créé est utilisé pour simuler trois types de collisions de gouttes afin d'en tester les limites. Chaque simulation couvre un aspect différent de la dynamique d'une collision de goutte. Les résultats visuels correspondant aux trois types de collisions sont disponibles à l'annexe B.

Séparation réflexive La séparation réflexive est observée lorsque deux gouttes entrent en collision face à face sous un paramètre d'impact nul. Le détail de la dynamique de ce type de collision se trouve à la section 3.3.1. Les images A à O de la figure B.1 sont identiques à la figure 3.11, tandis que les images P à X présentent la suite de la simulation.

Séparation irrégulière La séparation irrégulière apparaît lorsque le Weber dépasse la valeur critique conduisant au phénomène de séparation réflexive. La séparation se produit dans la même direction que la séparation réflexive, mais le nombre de gouttes issues de la collision est plus important. Les images 1 à 5 de la figure B.2 présentent les résultats expérimentaux de ce phénomène pour un Weber de 96. Le modèle numérique actuel ne permet pas de reproduire ce type de comportement. Lorsque le Weber devient plus grand que 9, un nombre important de gouttes est créé à la fin de la période 1. Plus le Weber est important, plus le nombre de gouttes formées est grand. Les images A à H de la figure B.2 présentent ce phénomène pour une simulation numérique dont le Weber est de 16.

Collision décentrée La collision décentrée est observée lorsque le paramètre d'impact est non nul. Le phénomène est caractérisé par une rotation des deux gouttes regroupées après l'impact. Selon le Weber et le paramètre d'impact, les gouttes se coalescent ou se séparent selon une dynamique similaire à la séparation réflexive. Les images 1 à 7 de la figure B.3 présentent les résultats expérimentaux d'une collision dont le Weber est de 10 et dont le paramètre d'impact est de 0.55. Le modèle numérique actuel permet de reproduire ce type de comportement avant la séparation. Les images A à H et AA à OO présentent la dynamique de deux simulations numériques possédant le même paramètre d'impact mais sous un nombre de Weber différent. Les deux simulations représentent adéquatement la rotation de la goutte après la collision et la coalescence en une seule goutte après un certain temps.

3.3.3 Modèle particulaire de la viscosité

Les simulations présentées jusqu'à maintenant ne prennent pas en compte la viscosité dans les équations du mouvement : le liquide est considéré comme étant un fluide parfait. L'ajout d'un terme visqueux entraîne une perte d'énergie cinétique entre deux particules en interaction, ce qui modifie la dynamique du fluide. La figure 3.13 présente deux collisions de gouttes effectuées avec les mêmes conditions initiales. La première collision est non visqueuse tandis que la seconde inclut un terme visqueux dans les équations du mouvement. Il est possible d'observer que l'étirement de la goutte est nettement inférieur à la fin de la deuxième et de la troisième période lors de la simulation visqueuse.

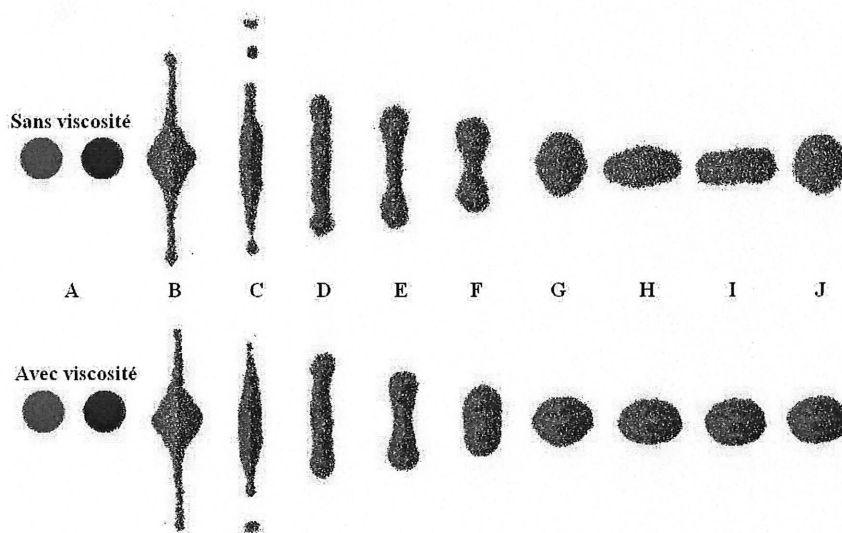


Figure 3.13 Effet de la viscosité lors d'une collision de 2 gouttes de liquide

Le modèle visqueux développé dans cette étude utilise deux paramètres : le premier concerne la distance d'interaction maximale de prise en compte de la viscosité ; le second paramètre correspond au coefficient de viscosité numérique qui contrôle le taux de dissipation d'énergie du système. Pour l'instant, les constantes sont définies approximativement afin de tenter de comprendre l'influence de chacune d'entre elles lors de la collision de deux gouttes. Le calcul exact des coefficients visqueux est réalisé à la section 3.6.2 suivant l'étude de l'interaction liquide-solide.

Distance critique d'interaction visqueuse

La notion de distance critique d'interaction visqueuse est similaire à la notion de distance critique interparticulaire présentée à la section 3.1.3. Elle a pour but d'éliminer l'interaction de particules trop éloignées d'une particule i lors du calcul de la perte d'énergie due au frottement des particules environnantes. La figure 3.14 présente une distance critique d'interaction visqueuse équivalente à $3R_e$.

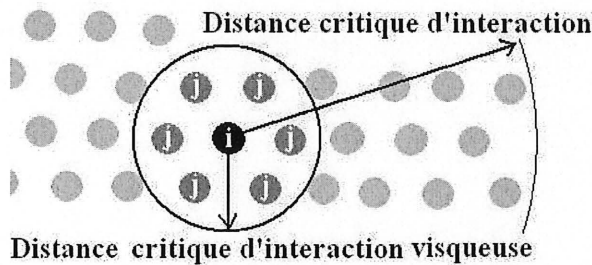


Figure 3.14 Distance critique d'interaction visqueuse

Dans le cadre des simulations de collision de gouttes de liquide, la distance critique d'interaction visqueuse est typiquement fixée entre $2R_e$ et $3R_e$ pour être en mesure de retrouver un comportement visqueux se rapprochant de la dynamique du fluide observée expérimentalement.

Constante numérique de viscosité

La constante numérique de viscosité utilisée dans les équations du mouvement joue le rôle de la constante μ des équations de Navier-Stokes. Par définition, la viscosité d'un fluide est un indicateur de la contrainte de cisaillement qui apparaît entre deux éléments de fluide adjacents lorsque leur vitesse est différente. L'équation 3.16 définit la contrainte visqueuse qui apparaît entre deux éléments de fluide qui se déplacent à une vitesse transverse du/dy l'un de l'autre.

$$\tau = \mu \frac{du}{dy} \quad (3.16)$$

τ Contrainte visqueuse

du/dy Dérivé transverse de la vitesse entre deux particules

Dans cette étude, la composante visqueuse est incluse dans les équations du mouvement selon une formulation découlant de l'équation 3.16. Le calcul est réalisé dans un repère mobile qui s'adapte à la position d'un couple de particule dans l'espace. Les étapes suivantes sont réalisées afin de calculer la force visqueuse sur un couple de particules :

1. Calculer la vitesse relative entre 2 particules ;
2. Calculer la distance entre ces 2 particules ;
3. Calculer la composante de la vitesse perpendiculaire à la droite reliant les deux particules ;
4. Approximer la dérivée du/dy ;
5. Calculer la force de cisaillement en appliquant la constante numérique de viscosité similairement à la constante μ des équations de Navier-Stokes ;
6. Transformer et appliquer la force visqueuse aux deux particules selon le repère de la simulation.

La constante de viscosité qui est utilisée dans les calculs n'est pas directement la constante μ qui se retrouve dans la littérature. Cette constante doit également inclure la surface d'application de la contrainte pour le calcul de la force. Il s'agit d'une constante qui tente de représenter la viscosité de l'eau lorsque cette dernière est utilisée avec une distance critique d'interaction visqueuse donnée.

3.4 Interaction liquide-solide

Dans les simulation de type PAF, la modélisation d'une paroi solide est normalement réalisée en introduisant un grand nombre de particules immobiles dans la simulation [9]. L'interaction entre le liquide et le solide est modélisée en évaluant la force engendrée par chaque particule du solide sur chaque particule du liquide. Ce type d'évaluation de la force liquide-solide est très coûteux numériquement puisque l'introduction des particules solides augmente significativement le nombre de calculs effectués sur chaque particule de liquide. La présente étude introduit une méthode d'évaluation de la force liquide-solide plus efficace en terme de nombre de calculs à effectuer. La méthode consiste à remplacer les N particules qui composent le solide par une description mathématique de la paroi solide et de la force qu'exerce cette paroi sur chaque particule en fonction de la position relative de la paroi et de la particule. Cette méthode réduit significativement le nombre de calculs lors de l'interaction liquide-solide puisqu'une seule opération est nécessaire afin de déterminer l'interaction d'une particule de liquide avec la surface solide. La figure 3.15 présente schématiquement cette méthode.

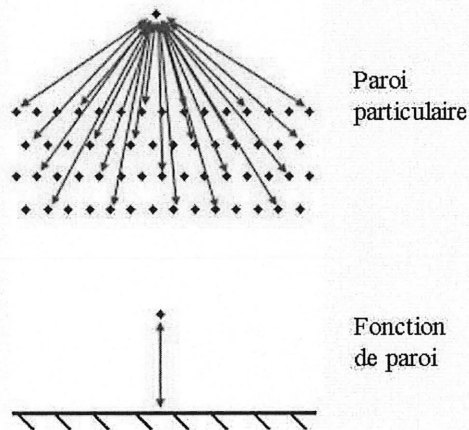


Figure 3.15 Modèle de paroi particulaire et mathématique

Dans un premier temps, la fonction de paroi est déterminée par une méthode numérique/empirique à partir d'un solide composé d'un grand nombre de particules. Dans un second temps, la fonction de paroi est modifiée empiriquement afin de limiter le coût de calcul numérique qui lui est associé. Finalement, les constantes de la fonction de paroi sont ajustées afin de représenter l'adhésion d'une surface précise.

3.4.1 Méthode numérique de détermination de la fonction de paroi

La première étape de détermination de la fonction de force d'interaction liquide-solide utilise une approche numérique faisant intervenir une paroi composée de 40000 particules immobiles. Les particules sont disposées uniformément sur le plan $z = 0$ à une distance de $2R_e$ les unes des autres. Le calcul de la fonction de force est réalisée en trois étapes. Premièrement, une particule de liquide est déplacée selon un parcours normal à la paroi particulaire. La force d'attraction et de répulsion est calculée à chaque position. Ensuite, une courbe de tendance est déduite à partir de ces valeurs pour la variation de la force d'attraction et de répulsion entre la paroi et la particule de liquide. Finalement, en faisant l'hypothèse que les forces radiales entre la particule et la paroi se développent selon les mêmes relations que les forces radiales entre les particules, les courbes de tendance sont combinées en une seule équation qui représente la fonction de force d'interaction liquide-paroi. Ce type de calcul conduit à une équation du type suivant :

$$F_{wp}(r_{iw}) = -\frac{3.0103 \times 10^{-18}}{r_{iw}^{2.1647}} + \frac{2.0411 \times 10^{-23}}{r_{iw}^{3.1886}} \quad (3.17)$$

F_{wp}	Force d'interaction particule-paroi	[N]
r_{iw}	Distance entre une particule et une paroi solide	[m]

Cette équation permet de calculer la force normale que produit une paroi de 40000 particules sur une particule de liquide se trouvant à une distance r_{iw} de la paroi. Puisque les exposants associés aux r_{iw} ne sont pas entiers, le calcul numérique d'une telle fonction de force est très coûteux numériquement lors des simulations. La section suivante présente une méthode permettant de modifier la fonction de force 3.17 afin de limiter le coût de calcul qui lui est associé, tout en conservant une interaction similaire entre le liquide et la paroi solide.

3.4.2 Modification empirique de la fonction de paroi

La fonction de force liquide-solide basée sur une approche empirique est développée afin de réduire le coût de calcul associé à l'équation 3.17. Dans la méthode empirique, les exposants d'attraction et de répulsion sont arrondis à l'entier le plus près et les constantes G_{wp} et H_{wp} sont ajustées afin de retrouver approximativement la variation de la force en fonction de la distance r_{iw} qui est obtenue à la section 3.4.1. La forme de l'équation utilisée ainsi que les constantes qui lui sont associées sont définies par l'équation 3.18.

$$F_{wp} = -\frac{G_{wp}}{r_{iw}^2} + \frac{H_{wp}}{r_{iw}^3} \quad (3.18)$$

G_{wp}	Constante d'attraction liquide-solide	$2.3335 \times 10^{-17} \text{ Nm}^2$
H_{wp}	Constante de répulsion liquide-solide	$1.7288 \times 10^{-22} \text{ Nm}^3$

La figure 3.16 présente une comparaison de la variation de la force entre une particule et fluide et les différentes fonctions de paroi par rapport à la distance r_{iw} .

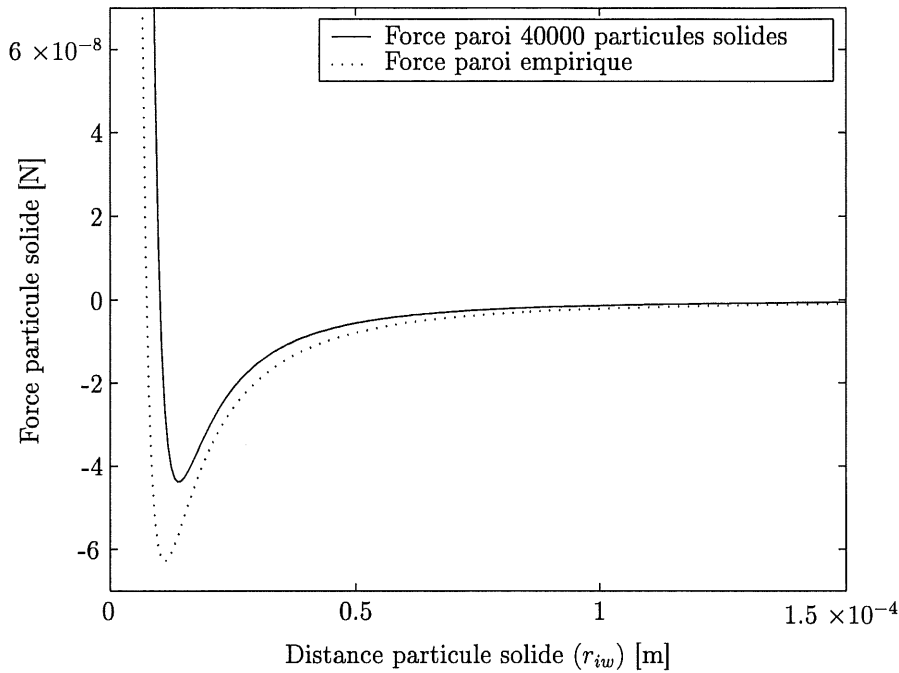


Figure 3.16 Comparaison des fonctions de force particulaire et théorique

3.4.3 Ajustement des paramètres de forces liquide-solide

La fonction de force de l'équation 3.18 correspond aux constantes d'attraction et de répulsion de l'eau. Cette fonction représente donc l'interaction qui apparaît entre de l'eau et de la glace. Dans les simulations, lorsqu'une goutte d'eau liquide entre en contact avec une surface de glace, définie par l'équation 3.18, elle tend à s'étendre le plus possible de manière à mouiller le plus de surface possible. La fonction potentielle liquide-solide doit être ajustée afin de représenter correctement l'adhésion de l'eau sur une surface de caoutchouc. Dans un premier temps, la fonction potentielle est modifiée en utilisant l'angle de mouillage entre le liquide et la paroi solide comme paramètre de validation. Dans un deuxième temps, la distance critique d'interaction liquide-solide est introduite de façon similaire à la distance critique d'interaction interparticulaire (section 3.1.3) afin de limiter le nombre de calculs entre le liquide et la paroi solide.

Angle de mouillage

Dans la section 2.4.2, l'angle de mouillage θ qui apparaît entre une goutte de liquide et une paroi solide est ciblé comme un bon indicateur de l'intensité de l'adhésion du liquide à la paroi tel que présenté par Adamson et al. [1]. Puisque l'angle de mouillage est facilement quantifiable visuellement, ce dernier est sélectionné comme critère à remplir afin de simuler l'adhésion d'un type de surface en particulier. Selon Adamson et al. [1], l'angle de mouillage qui apparaît entre une goutte d'eau et une surface de caoutchouc doit être de 112° lorsque sa mesure correspond à la figure 2.6. L'obtention de l'angle de mouillage désiré est réalisé en ajustant les constantes d'attraction et de répulsion liquide-solide G_{wp} et H_{wp} à l'aide d'un facteur multiplicatif GH_{wp} tel que défini à l'équation 3.19 :

$$F_{wp} = \left(-\frac{G_{wp}}{r_{iw}^2} + \frac{H_{wp}}{r_{iw}^3} \right) GH_{wp} \quad (3.19)$$

GH_{wp} Facteur d'ajustement de la tension d'adhésion liquide-solide

Afin de déterminer la valeur du facteur multiplicatif GH_{wp} qui permet d'obtenir un angle de mouillage de 112° , plusieurs simulations sont réalisées en variant GH_{wp} . À la suite des différentes simulations numériques, la valeur du facteur multiplicatif GH_{wp} est fixée à 0.17 afin d'obtenir un angle de mouillage de 112° entre une goutte d'eau composée de 2048 particules et une paroi solide définie selon l'équation 3.19. La figure 3.17 présente le résultat de différentes simulations utilisant des conditions initiales identiques mais un facteur GH_{wp} différent.

Distance critique d'interaction liquide-solide

Afin de limiter les calculs entre les particules de liquide et la paroi solide, une distance critique d'interaction liquide-paroi doit être fixée. Cette distance se définit exactement comme la distance critique d'interaction interparticulaire R_i décrite à la section 3.1.3. Seules les particules à l'intérieur d'un certain rayon d'interaction sont incluses dans le calcul entre le

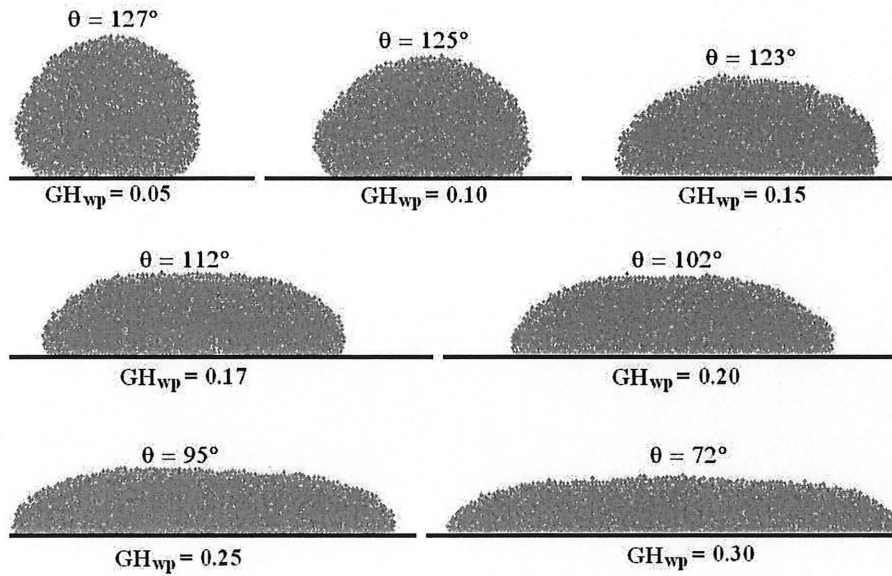


Figure 3.17 Résultats numériques d'angle de mouillage en fonction du facteur GH_{wp}

liquide et le solide. La distance est définie en considérant que la force induite par la paroi à la distance critique d'interaction liquide-solide est identique à la force interparticulaire à la distance critique d'interaction liquide-liquide de R_i . En utilisant l'équation 3.18 et en transformant la fonction potentielle 3.15 en fonction de force, il est possible d'isoler la distance critique d'interaction liquide-solide R_{iw} de l'équation 3.20. La résolution de cette équation en fonction de R_{iw} montre que la distance critique d'interaction liquide-paroi doit prendre la valeur $R_{iw} = 34R_e$.

$$\left(\frac{H_{wp}}{R_{iw}^3} - \frac{G_{wp}}{R_{iw}^2} \right) GH_{wp} = \frac{H}{11R_e^5} - \frac{G}{11R_e^4} \quad (3.20)$$

GH_{wp} 0.17 Facteur d'ajustement de la tension d'adhésion eau-caoutchouc

Afin de s'assurer que cette distance critique d'interaction liquide-solide R_{iw} ne modifie pas l'angle de mouillage de la goutte, et donc les propriétés d'adhésion à la paroi, de nouvelles simulations sont réalisées. Ces simulations sont identiques aux simulations ayant permis

de générer la figure 3.17 à l'exception que cette fois-ci les particules situées à une distance de la paroi supérieure à R_{iw} ne subissent plus l'influence de cette paroi. Les résultats de ces simulations montrent que la hauteur maximum des gouttes est légèrement plus grande que dans le cas d'une distance critique d'interaction infinie mais que l'angle de mouillage n'est pas influencé par sa valeur.

3.5 Modification de l'échelle de simulation

Une fois que la fonction potentielle d'interaction est validée avec les résultats expérimentaux au niveau du micron, une nouvelle fonction potentielle est déterminée à l'échelle du millimètre afin de simuler la formation d'un nuage de gouttes derrière un pneu d'automobile roulant sur une surface mouillée. L'utilisation de la fonction de force définie au niveau du micron serait utilisable au niveau du millimètre, mais le nombre de particules nécessaires au calcul serait trop important pour les ressources informatiques qui sont actuellement disponibles pour l'étude.

La méthodologie présentée à la section 3.2.3 est utilisée afin de déterminer la fonction potentielle à l'échelle du millimètre. La méthode est employée en utilisant une goutte d'eau de 5 *mm* de diamètre composée de 2048 particules comme nouvelle distribution particulaire. La fonction potentielle obtenue à la suite de la modification de l'échelle de simulation est définie par l'équation 3.21.

$$\phi(r_{ij}) = -\frac{G}{r_{ij}^3} + \frac{H}{r_{ij}^4} \quad (3.21)$$

G	Constante d'attraction de l'eau à l'échelle du <i>mm</i>	3.3417×10^{-22}	Jm^3
H	Constante de répulsion de l'eau à l'échelle du <i>mm</i>	4.4552×10^{-26}	Jm^4

En utilisant directement les équations présentées dans la section 3.4.2, la fonction de force liquide-solide à l'échelle du mm est calculée et se définit par l'équation 3.22

$$F_{wp}(r_{iw}) = -\frac{G_{wp}}{r_{iw}^2} + \frac{H_{wp}}{r_{iw}^3} \quad (3.22)$$

G_{wp}	Constante d'attraction liquide-solide de l'eau	3.0677×10^{-14}	Nm^2
H_{wp}	Constante de répulsion liquide-solide de l'eau	2.3144×10^{-18}	Nm^3

3.6 Ajustement final de la fonction potentielle d'interaction

Les résultats issus de l'étude de la dynamique du liquide et de l'interaction liquide-solide permettent de construire tous les types de simulations impliquant un liquide et une paroi solide linéaire. Puisque certaines propriétés physiques ne sont pas encore validées, de nouvelles simulations doivent être réalisées. Ces simulations servent à valider la compressibilité du liquide ainsi qu'à ajuster les coefficients visqueux numériques qui sont définis à la section 3.3.3. L'ajustement et la vérification des propriétés physiques du modèle sont effectués en comparant la dynamique des simulations aux résultats analytiques correspondants.

3.6.1 Vérification de la compressibilité du liquide

La compressibilité d'un liquide est caractérisée par un module de compressibilité K . Le module de compressibilité, particulier pour chaque liquide, est de 2.19 GPa pour de l'eau liquide à $20^\circ C$. L'équation 3.23 présente la définition du module de compressibilité tirée de White [22].

$$K = \rho \frac{\partial P}{\partial \rho} \quad (3.23)$$

Numériquement, l'évaluation du module de compressibilité est réalisée en simulant la compression hydrostatique d'un liquide dans un bassin composé d'un très grand nombre de particules de liquide. Dans ce type de situation, la pression associée à chaque particule varie en fonction de sa profondeur par rapport à la surface du bassin telle que définie par les équations hydrostatiques de la mécanique des fluides. Lorsque le bassin est au repos, il est possible de calculer la densité globale du bassin ainsi que la pression et la densité locale de chaque particule à l'aide des équations de la section 3.2.2. Ces informations permettent de déterminer le module de compressibilité du liquide particulaire à l'aide de l'équation 3.23.

À la suite des simulations numériques, il apparaît que la compressibilité du liquide formé est nettement supérieure à la compressibilité théorique de l'eau. En effet, le liquide particulaire formé à partir des équations 3.21 et 3.22 présente un module de compressibilité d'environ 0.02 GPa . Puisque la compressibilité du liquide est inversement proportionnelle au module de compressibilité, le modèle numérique reproduit un liquide approximativement 100 fois plus compressible que l'eau.

Dans le modèle actuel, la compressibilité, la tension de surface et le comportement dynamique du liquide sont reliés les uns aux autres. La section 3.3 met en évidence que la densité et la tension de surface du liquide sont indépendants des exposants p et q , mais que la dynamique du liquide est intimement liée à ces exposants. La compressibilité de l'eau est également fonction des exposants p et q , puisque ces derniers contrôlent le taux de variation de l'attraction et de la répulsion interparticulaire. Il s'avère donc difficile de satisfaire à la fois la dynamique et la compressibilité du liquide à l'aide du modèle existant. La compressibilité du liquide pourrait être contrôlée par une condition mathématique supplémentaire, mais le but de l'étude est de faire apparaître naturellement les propriétés du liquide par une fonction potentielle simple. Il faut rappeler que la tension de surface est ajustée en 2D et que l'utilisation d'un modèle 3D serait susceptible de modifier le comportement dynamique et la compressibilité du liquide pour le même couple d'exposants p et q .

3.6.2 Détermination numérique de la viscosité

La mesure de la viscosité d'un liquide est normalement réalisée à l'aide d'appareil mesurant la résistance au mouvement d'un fluide contraint à passer à travers les orifices d'un volume fermé. Avec le modèle numérique actuel, ce type de simulation est difficilement réalisable. En effet, des essais préliminaires démontrent que le mouvement de particules dans un volume fermé entraîne systématiquement l'instabilité des particules du système puisqu'elles sont incapables de se déplacer les unes par rapport aux autres. La présente étude propose une méthode alternative de détermination de la viscosité permettant d'ajuster les coefficients visqueux du modèle. Cette méthode consiste à reproduire la formation de la couche limite d'un film d'eau qui s'écoule sur un plan incliné. En ajustant correctement les paramètres visqueux, la couche limite qui se développe numériquement doit être similaire à la couche limite prédite par les équations de Navier-Stokes. Les sections suivantes présentent la méthodologie permettant de déterminer l'équation de la couche limite ainsi que les simulations qui sont réalisées pour ajuster les paramètres visqueux du modèle.

Modèle analytique de la couche limite

Le calcul théorique du profil de vitesse de la couche limite d'un film de liquide s'écoulant sur un plan incliné est déterminé à partir des équations de Navier-Stokes 2D avec les hypothèses suivantes :

1. Gradient de pression nul dans la couche limite ;
2. L'écoulement est en régime permanent ;
3. La composante tangentielle au plan de la vitesse est négligeable devant la composante parallèle au plan ;
4. Le profil de vitesse est complètement développé.

Le développement complet des équations, présenté à l'annexe C, permet de retrouver l'équation 3.24 qui définit la vitesse de la couche limite par rapport à la paroi. La figure 3.18 présente la définition des variables de l'équation 3.24.

$$u = \frac{\rho g_x}{\mu} \left(ey - \frac{y^2}{2} \right) \quad (3.24)$$

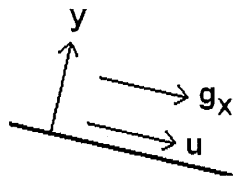


Figure 3.18 Variables de l'équation 3.24

u	Composante de la vitesse parallèle au plan d'écoulement	$[m/s]$
y	Distance normale au plan	$[m]$
ρ	Densité	$[kg/m^3]$
g_x	Composante de la gravité parallèle au plan	$[m/s^2]$
μ	Coefficient visqueux d'un liquide	$[Ns/m^2]$
e	Épaisseur du film de liquide	$[m]$

La figure 3.19 présente le profil de vitesse d'un film de liquide de 7.8 mm s'écoulant sur un plan incliné de 15°. L'ajustement des paramètres visqueux qui est réalisé à la section 3.6.2 est effectué afin de retrouver un profil de vitesse numérique comparable à cette figure.

Construction du modèle numérique

Les simulations effectuées pour représenter la formation d'une couche limite sur un plan incliné sont différentes des simulations liquide-solide présentées jusqu'à maintenant. Premièrement, l'écoulement du liquide sur un plan incliné est réalisé en faisant évoluer des particules de fluide le long d'une paroi solide plane. L'angle du plan incliné est représenté

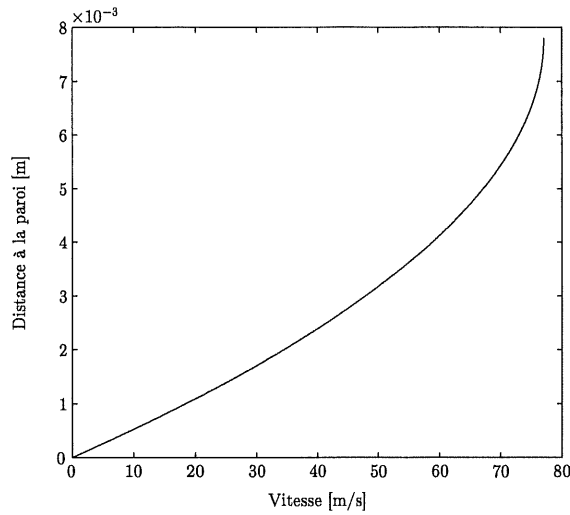


Figure 3.19 Profil de vitesse de la couche limite à la paroi

numériquement en appliquant aux particules une composante gravitationnelle selon x et y qui est variable en fonction de l'angle du plan. Deuxièmement, la représentation numérique d'un film de liquide infini (voir calcul analytique) est réalisé en appliquant une condition de périodicité sur un bloc de liquide d'épaisseur e . Dans le calcul des interactions, les particules à une extrémité du bloc de liquide sont en interaction avec les particules de l'autre extrémité. La périodicité est de largeur égale à deux fois la distance critique d'interaction pour éviter l'auto-interaction des particules. Finalement, puisque dans le modèle actuel la condition de non-glissement à la paroi n'apparaissait pas d'elle-même, cette dernière est imposée en positionnant le long de la paroi solide des particules immobiles à une distance de $2R_e$.

Une fois que le modèle d'écoulement de liquide sur un plan incliné est disponible, la distance critique d'interaction visqueuse et le coefficient numérique de viscosité μ_{num} sont ajustés à l'aide de différentes simulations.

À la suite des essais préliminaires, la distance critique d'interaction visqueuse est fixée à $3R_e$. Puisque par définition la viscosité est la mesure du taux de cisaillement entre deux éléments fluides, il est possible de faire l'hypothèse que son influence se limite aux plus

proches voisins d'une particule. Des essais préliminaires ont montré que l'utilisation d'une distance critique d'interaction visqueuse supérieure à $3R_e$ engendre des comportements anormaux du liquide tels que des discontinuités dans la vitesse entre deux particules de liquide adjacentes. L'utilisation d'une distance critique d'interaction visqueuse de $3R_e$ assure que la variation de la vitesse est graduelle entre les particules.

L'ajustement de μ_{num} est réalisé en utilisant trois types de conditions initiales sur la vitesse afin de tenter de reproduire le profil de vitesse théorique de la figure 3.19. Les paragraphes suivant présentent les trois types de conditions initiales ainsi que les résultats obtenus avec chacun d'entre eux.

Vitesse initiale nulle Dans ce type de simulation, les particules sont initialement au repos et le mouvement est initié naturellement par la composante de gravité parallèle au plan incliné. Ces simulations se caractérisent par une variation brusque de la dynamique de la simulation en fonction de μ_{num} . Lorsque μ_{num} est faible, les particules s'écoulent sur la paroi comme une seule entité. La paroi ne réussit pas à retenir les particules qui lui sont adjacentes afin de limiter leur vitesse et ainsi initier le profil de vitesse recherché. Lorsque μ_{num} est important, l'ensemble du liquide reste figé et aucun écoulement ne se produit. La force visqueuse entre la paroi et les particules ainsi qu'entre les particules elles-mêmes est trop importante pour initier le mouvement du film de liquide. Les résultats issus de ces simulations permettent de cerner approximativement μ_{num} .

Profil de vitesse théorique Dans ce type de simulation, la vitesse initiale des particules est déterminée à l'aide de l'équation 3.24 en fonction de leur distance par rapport à la paroi. Le coefficient μ_{num} est ajusté en tentant de maintenir le profil de vitesse constant dans le temps. L'utilisation du coefficient μ_{num} qui représente adéquatement l'eau permettrait de conserver le profil de vitesse initial dans le temps. L'utilisation d'un coefficient inadéquat engendre la modification du profil initial de vitesse. Malheureusement, la mise en oeuvre de cette technique ne donne pas des résultats satisfaisants. En effet, peu im-

porte le coefficient μ_{num} utilisé, la distribution particulaire devient instable. Même avec un coefficient visqueux nul, la distribution particulaire est incapable de demeurer stable. Une variation de vitesse importante entre les couches de particules du liquide est tout simplement incompatible avec le modèle utilisé.

Profil de vitesse uniforme Dans ce type de simulation, la vitesse initiale des particules de la simulation est non nul et elle est uniforme sur toute l'épaisseur e . De façon similaire aux simulations où la vitesse initiale des particules est nulle, l'influence du coefficient μ_{num} sur la dynamique du liquide est très importante. Une valeur faible de μ_{num} entraîne aucune variation de la vitesse initiale des particules tandis que l'utilisation d'une grande valeur de μ_{num} entraîne l'instabilité du système.

À la suite d'essais réalisés à l'aide des différentes conditions initiales, il apparaît évident que le profil de vitesse parabolique défini par la figure 3.19 est difficilement réalisable numériquement avec la méthode actuelle. Ce résultat implique que la viscosité du liquide qui est utilisé pour simuler la création d'un nuage de goutte derrière une roue en rotation ne correspond pas à la viscosité de l'eau. Par ailleurs, il est évident qu'avec la méthode actuelle il est impossible de simuler adéquatement l'interaction dynamique d'un liquide particulaire et d'une paroi.

3.7 Atomisation de gouttelettes de liquide par une roue en rotation

Cette étape étudie la possibilité de reproduire un nuage de gouttes de liquide derrière une roue en rotation à l'aide du modèle développé. Les résultats présentés jusqu'à maintenant mettent en évidence qu'il est présentement impossible d'obtenir un liquide particulaire 2D qui satisfait simultanément la densité, la tension de surface, la compressibilité, la viscosité et le comportement dynamique réel de l'eau. Les résultats des simulations d'atomisation de gouttelettes derrière une roue en rotation demeurent donc entièrement qualitatifs puisque le liquide particulaire possède uniquement la densité et la tension de surface de l'eau.

L'atomisation est réalisée en faisant interagir un film de liquide avec une paroi circulaire (appelée roue dans le texte) en rotation. Étant donné que le but premier de l'étude est d'appliquer éventuellement la méthode au cas d'un pneu d'automobile roulant sur une chaussée mouillée, les simulations tentent de représenter ce phénomène le plus fidèlement possible. La condition de non-glissement du pneu à la chaussée est réalisée en imposant une vitesse de rotation de la roue et une vitesse d'avance du film de liquide sur le sol qui sont compatibles cinématiquement. Le sol est modélisé par la fonction de paroi développée à la section 3.4 tandis que le modèle de la roue est présenté à la section 3.7.1. Les sections suivantes présentent les étapes permettant de reproduire l'atomisation de gouttelettes par une roue en rotation.

3.7.1 Interaction d'un liquide particulaire et d'une paroi courbe statique

La première étape à réaliser afin de comprendre l'interaction d'un liquide particulaire avec une roue en rotation est l'étude de l'interaction d'un liquide particulaire avec une roue statique. Les équations de la roue sont développées directement à partir de l'équation de la paroi plane présentée à la section 3.4. Le calcul des forces d'interaction entre une particule de fluide et la roue est réalisé afin que la force appliquée sur la particule soit toujours normale à la paroi. Cette méthode permet d'utiliser directement l'équation d'interaction 3.22 si le rayon de courbure de la roue est suffisamment important pour approximer la surface courbe par une surface linéaire. La figure 3.20 présente la comparaison de la distance critique d'interaction liquide-solide R_{iw} déterminée à la section 3.4.3 par rapport au rayon de la roue qui est utilisée durant l'étude. Cette figure permet de constater que la courbure de la paroi sur une longueur équivalente à la distance critique d'interaction liquide-solide n'est pas significative. Il est donc possible d'utiliser directement l'équation de la paroi plane pour représenter la paroi courbe.

De façon similaire aux simulations de la section 3.6.2, une couche de particule immobiles est positionnée le long de la circonférence de la roue afin de représenter la condition de non-glissement à la paroi et ainsi être en mesure de retrouver un comportement visqueux entre

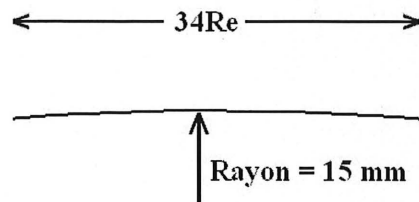


Figure 3.20 Comparaison du rayon de la roue par rapport à la distance critique d'interaction liquide-solide

la roue et le liquide. Le modèle d'interaction de paroi circulaire est vérifié en observant l'évolution d'une goutte de 5 mm qui entre en contact avec une roue de 30 mm de diamètre. La figure 3.21 présente cette évolution.

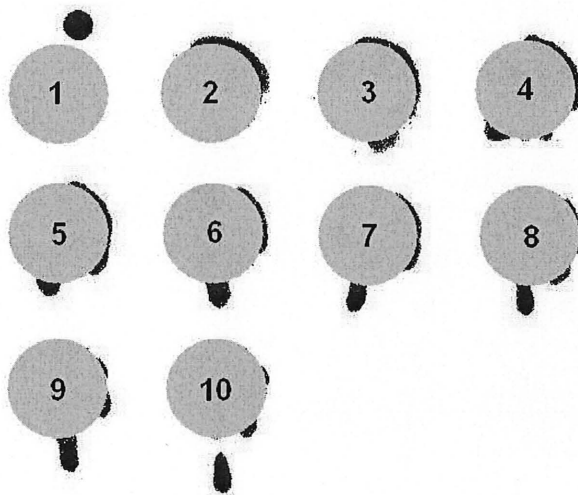


Figure 3.21 Résultats numériques d'interaction liquide et paroi courbe

Lors de la simulation, la goutte se dépose sur la roue, glisse sur la surface de la roue sous l'action de la gravité et finit par se détacher en bas de la roue. Puisque cette évolution correspond approximativement au comportement réel qui est présenté à la figure 3.22, ce modèle d'interaction est conservé pour étudier le phénomène d'atomisation.

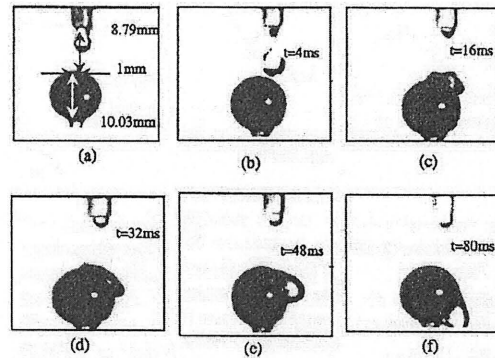


Figure 3.22 Résultats expérimentaux d'interaction liquide et paroi courbe [11]

3.7.2 Interaction d'une goutte avec une roue en rotation

La construction d'un modèle numérique représentant l'atomisation d'un film de liquide par une roue en rotation comporte trois éléments principaux : un film de liquide particulaire, une paroi plane représentant le sol et une paroi courbe représentant la roue en rotation. Les sections suivantes présentent les composantes du modèle numérique individuellement ainsi que le résultat qui est obtenu lorsqu'elles sont combinées afin de reproduire le phénomène d'atomisation.

Création d'un film de liquide stable sur une paroi plane

Un film de liquide stable sur une paroi solide est utilisé afin de recréer le liquide qui est en interaction avec la roue en rotation. Le nombre de particules du film de liquide est restreint afin de limiter la taille du calcul. Les particules sont initialement positionnées en arrangement uniforme au-dessus d'une paroi plane à une distance de $2R_e$ les unes des autres. Une première simulation est ensuite lancée afin de stabiliser les particules de la distribution uniforme sur la paroi. Ce film de liquide est utilisé directement lors des simulations d'atomisation pour simuler un film de liquide.

Rotation de la roue

La rotation de la roue est réalisée en déplaçant les particules fluides qui servent à imposer la condition de non-glissement à la paroi. À chaque pas en temps, ces particules sont déplacées sur la circonférence de la roue en fonction de la vitesse de rotation. Puisque les interactions entre les particules et la paroi sont définies normalement à la surface uniquement, la fonction de force de la paroi courbe n'est pas modifiée.

Atomisation

Les simulations d'atomisation sont réalisées dans la tranche de liquide présente au fond de la rainure de la roue, d'où l'espacement entre la roue et le film de liquide. La roue est en rotation autour de son centre et le film de liquide qui recouvre la paroi solide défile à vitesse constante sous la roue. La vitesse de rotation de la roue et la vitesse de défilement du film de liquide sont compatibles cinématiquement afin de reproduire la situation où la roue se déplace sur le film de liquide. Ce type de simulation est réalisé en utilisant différentes vitesses de rotation de la roue, différents facteurs d'ajustement de la tension d'adhésion GH_{wp} entre la roue et le liquide, ainsi que différents coefficients de viscosité afin de tenter de reproduire le phénomène d'atomisation derrière une roue en rotation.

Les résultats issus de ces simulations montrent que l'accord avec le phénomène observé n'est pas très bon. Jusqu'à maintenant, les simulations effectuées reproduisent un phénomène d'atomisation mais ce dernier est notablement différent du phénomène anticipé présenté à la figure 2.3. Les résultats expérimentaux montrent que les gouttes de liquide sont éjectées de la roue sur la totalité de sa circonférence, alors que dans les simulations réalisées, l'éjection de goutte s'observe uniquement à l'arrière de la roue tel qu'illustré à la figure 3.23.

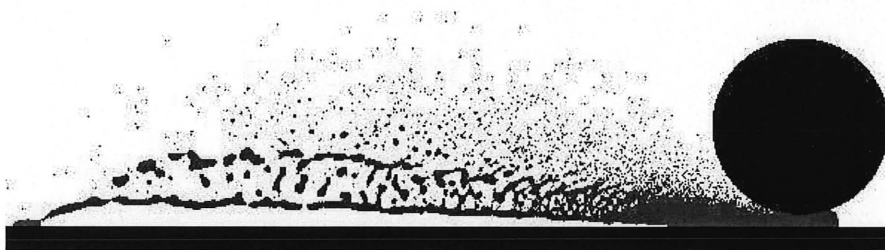


Figure 3.23 Résultats numérique d'atomisation derrière une roue en rotation

CHAPITRE 4

MÉTHODOLOGIE DE RÉOLUTION DU MODÈLE NUMÉRIQUE

Différents codes de calcul sont créés durant l'étude afin de réaliser les simulations. Les codes sont écrits en Fortran 90 avec une interface graphique OpenGL permettant d'afficher la dynamique de la simulation. Tout d'abord, un code fonctionnant en environnement monoprocesseur permet de réaliser des simulations simples impliquant un petit nombre de particules en interaction les unes avec les autres. Ensuite, ce code similaire est adapté en utilisant la librairie Message Passing Interface (MPI) afin d'être en mesure de distribuer la charge de calcul sur plusieurs ordinateurs reliés en parallèle. Lorsqu'une paroi solide est introduite dans les simulations, un nouveau code monoprocesseur est utilisé afin de valider l'interaction liquide-solide. Une fois que la formulation monoprocesseur d'interaction liquide-paroi est bien définie, elle est introduite dans un code parallèle similaire au code impliquant uniquement des interactions particulières. Les sections 4.2 à 4.4 présentent la structure de calcul utilisée ainsi que les environnements monoprocesseur et parallèle de l'étude.

4.1 Modèle mathématique à résoudre

Puisque la méthode PAF utilise une approche lagrangienne de définition du mouvement, l'équation qui régit le mouvement des particules est obtenue en effectuant la somme des forces sur chaque particule. Dans la présente étude, les forces appliquées sur les particules proviennent des interactions radiales, de la force de viscosité qui apparaît entre les

particules et de la présence d'une paroi solide.

Chaque particule interagit avec les particules voisines par le biais d'une fonction de force interparticulaire qui est composée de 2 termes. Chaque terme possède sa propre distance critique d'interaction qui limite le nombre de particules voisines considérées dans le calcul. Le premier terme correspond à l'interaction radiale qui apparaît entre deux particules en fonction de la distance r qui les sépare. Le second terme introduit une composante visqueuse qui est fonction de la composante transversale de la vitesse relative d'un couple de particules. Les équations 4.1 à 4.2 présentent les équations différentielles à résoudre pour faire évoluer la dynamique du système d'un pas en temps à l'autre.

$$\vec{F} = m \vec{a} \quad (4.1)$$

$$\vec{F}_{ij} = \left(\frac{H}{r_{ij}^5} - \frac{G}{r_{ij}^4} \right)_{1^{er} \text{ terme}} + \left(\mu_{num} \frac{d\vec{v}}{dx} \right)_{2^{e} \text{ terme}} \quad (4.2)$$

4.1.1 Schéma d'intégration numérique

Étant donné que la présente étude est orientée vers l'évaluation des méthodes particulières, le schéma d'intégration utilisé pour résoudre la dynamique du système de N particules n'a pas besoin d'être très complexe. La méthode multi-pas connue sous le nom de "Leapfrog" est sélectionnée comme schéma d'intégration numérique puisqu'elle présente un faible coût de calcul pour une erreur du second ordre sur les positions. Cette méthode fait usage de la vitesse des particules au temps milieu d'un intervalle dt . La séquence de calcul est la suivante :

Premier pas :

$$\vec{v}_{i,\frac{1}{2}} = \vec{v}_{i,0} + \frac{dt}{2} \cdot \vec{a}_{i,0} \quad (4.3)$$

Pas suivants :

$$\vec{v}_{i,k+\frac{1}{2}} = \vec{v}_{i,k-\frac{1}{2}} + dt \cdot \vec{a}_{i,k} \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (4.4)$$

$$\vec{x}_{i,k+1} = \vec{x}_{i,k} + dt \cdot \vec{v}_{i,k+\frac{1}{2}} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.5)$$

La figure 4.1 présente visuellement la méthode de calcul Leapfrog.

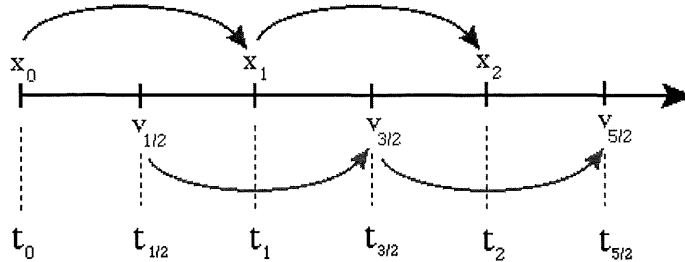


Figure 4.1 Calcul de la position et de la vitesse dans une méthode de type Leapfrog

4.2 Structure du code de calcul

La structure des codes de résolution monoprocesseur et parallèle est similaire. Tout d'abord, la lecture des conditions initiales est effectuée. Ensuite, l'accélération, la vitesse ainsi que la position des N particules sont calculées à tous les pas en temps. La position de toutes les particules est enregistrée périodiquement sur disque durant le calcul. En fin de calcul, les conditions finales des vitesses et des positions sont enregistrées dans un fichier de résultats. Les sections suivantes présentent le détail de la construction des programmes monoprocesseur et parallèle, ainsi que la modification permettant l'introduction de paroi solide dans le code.

4.2.1 Structure monoprocesseur

La structure de programmation monoprocesseur est la plus simple puisque l'ensemble des opérations est réalisé de façon séquentielle par le même processeur. Le programme lit en entrée un fichier de données initiales contenant le nombre, la position et la vitesse initiale des particules ainsi que les paramètres de simulation suivants :

Le nom du fichier de sortie ;
La masse individuelle des particules ;
Le pas en temps ;
Le nombre de pas en temps ;
Le champ de gravité ;
L'intervalle de mesure ;
La distance critique d'interaction ;
La distance critique d'interaction visqueuse ;
Les constantes G et H ;
Le paramètre de viscosité.

Le programme exécute les actions suivantes afin de déterminer la position des particules constituant le liquide durant la simulation :

1. Définition des variables de calcul ;
2. Lecture du fichier de données initiales ;
3. Allocation des tableaux et calcul de certains paramètres numériques en fonction des paramètres physiques ;
4. Calcul du premier pas en temps selon l'équation 4.3 ;
5. Boucle d'avancement pour tous les pas en temps. Cette boucle inclut le calcul de l'accélération, de la vitesse et de la position des particules à chaque pas en temps selon les équations 4.4 et 4.5. Durant cette boucle, la position et la vitesse des particules sont écrites sur disque périodiquement selon l'intervalle de mesure prédéterminé ;
6. Écriture du fichier de sortie de la position et de la vitesse finales des particules.

4.2.2 Structure parallèle

La structure de programmation parallèle est similaire à la structure monoprocesseur. La différence principale se situe au niveau de la répartition de la charge de calcul sur les différents processeurs. Le programme parallèle prend exactement les mêmes arguments d'entrée que le programme monoprocesseur. Le nombre de processeurs utilisés lors du calcul est défini dans la ligne de commande de lancement du code, cette commande étant spécifique à chaque machine de calcul. Le programme est construit afin d'être compatible avec toutes les machines utilisant un protocole MPI entre les processeurs.

Répartition de la charge de calcul

La répartition de la charge de calcul est réalisée différemment selon le type de calcul à effectuer. Cette distinction permet d'obtenir un temps de calcul optimal puisque l'ensemble des processeurs effectuent sensiblement le même nombre d'opérations dans toutes les étapes du calcul avant d'arriver à une barrière de synchronisation.

Le calcul de la vitesse des particules est réalisé selon l'équation 4.4. Pour déterminer la vitesse d'une particule i , le code doit connaître uniquement la vitesse de cette particule au pas en temps précédent ainsi que son accélération au pas en temps actuel. Il est donc possible de distribuer la charge de calcul en attribuant à chaque processeur un nombre égal de particules à traiter. Par exemple, si la simulation compte 24 particules qui doivent être réparties sur 4 processeurs, chaque processeur est responsable de déterminer la vitesse de 6 particules. Une fois le calcul de la vitesse terminé, chaque processeur transmet la partie du vecteur vitesse dont il est responsable aux autres processeurs. La même procédure est réalisée pour le calcul de la position à partir du vecteur vitesse.

La répartition de la charge de calcul lors de la détermination de l'accélération des N particules est différent. Il n'est pas possible de séparer entre les processeurs un nombre équivalant de particules à traiter. Le calcul de l'accélération d'une particule i est réalisé dans une double boucle imbriquée afin de considérer l'apport des $N - 1$ autres particules.

```
Pour i=1 à N
  Pour j=1 à i-1
    Calcul de l'accélération de j sur i
    Calcul de l'accélération de i sur j
  Fin Pour
Fin Pour
```

La répartition de la charge de calcul doit donc s'assurer d'attribuer à chaque processeur une portion d'interaction (i, j) comportant un nombre équivalent d'opérations.

4.2.3 Interaction de paroi

La répartition de la charge de calcul de l'accélération d'une particule à proximité d'une paroi est semblable à la répartition de la charge de calcul effectuée lors de la détermination de la vitesse et de la position des particules. Puisqu'une seule opération mathématique est nécessaire au calcul de l'influence d'une paroi, les particules peuvent être distribuées également entre les processeurs. Le calcul de l'accélération dans une simulation impliquant une paroi est divisé en deux boucles distinctes. La première boucle calcule l'accélération engendrée par les interactions interparticulaires et la seconde boucle calcule l'influence de la paroi sur les particules.

4.3 Environnement monoprocesseur

Les calculs réalisés en mode monoprocesseur sont principalement exécutés sur un ordinateur portable SONY modèle PCG-FRV25Q. Cette machine dispose d'un processeur Pentium 4 cadencé à 2.66 GHz relié à une mémoire de 448 Mo. Le code est programmé et compilé en langage Fortran 90 à l'aide de l'éditeur/compilateur Compaq Visual Fortran 6. Pour des fins de mise au point, les ordinateurs parallèles décrits à la section 4.4 peuvent également être utilisés en mode monoprocesseur.

Les simulations sont réalisées à l'aide de trois types de programmes différents. Le premier type de programme lit la donnée initiale du problème, effectue les calculs d'interactions particulières, affiche et sauvegarde en temps réel les résultats. L'utilisateur peut interagir avec le code pour arrêter la simulation si les résultats divergent. Ce code est utilisé pour comprendre la dynamique d'une simulation encore inexplorée. Le second type de programme ne comporte pas d'interface utilisateur. Il construit des fichiers de résultats volumineux à partir d'un fichier de conditions initiales fourni par l'utilisateur. Ce type de code est utilisé lorsque la dynamique du problème est bien cernée. Enfin, le troisième type de code affiche en OpenGL la dynamique particulière obtenue par le second type de programme.

4.4 Environnement parallèle

Lorsque les résultats obtenus sur l'ordinateur monoprocesseur sont stables et représentatifs de la réalité, les calculs sont lancés sur une machine parallèle. Ce type de machine utilise les capacités de plusieurs processeurs en même temps pour résoudre des problèmes plus exigeants en temps de calcul. Le type de programme utilisé sur ces machines construit des fichiers de résultats volumineux qui représentent la dynamique du système. La visualisation des résultats est réalisée sur la machine monoprocesseur décrite à la section 4.3.

La parallélisation des algorithmes nécessite une adaptation de la structure de programmation existante. En effet, la structure des codes parallèles doit minimiser le transfert d'informations entre les processeurs afin d'optimiser le temps de calcul. La structure de programmation parallèle doit être plus performante que la structure monoprocesseur, sans pour autant être optimale puisqu'il ne s'agit pas du but de cette étude. Les sections 4.4.1 et 4.4.2 présentent les ressources de calculs disponibles pour l'étude ainsi qu'une introduction au protocole MPI utilisé pour paralléliser le code.

4.4.1 Machines de calcul

Les machines parallèles peuvent être divisées en deux grandes familles, les machines à mémoire partagée et à mémoire distribuée présentant chacune des avantages et des inconvénients.

Les processeurs d'une machine à mémoire partagée utilisent un espace mémoire commun où tous les paramètres de la simulation sont stockés. L'information calculée par n'importe quel processeur est disponible en tout temps par les autres processeurs dans la mémoire partagée. Ce type d'architecture permet une structure de programmation relativement simple puisque chaque variable possède une adresse unique dans le système. Cependant, ce type de configuration présente un désavantage significatif pour les simulations réalisées dans cette étude. Les ordinateurs à mémoire partagée ne permettent pas l'accès de la mémoire à plus d'un processeur à la fois. Cette situation n'est pas favorable puisque le calcul de l'accélération des particules nécessite l'accès au vecteur des positions en tout temps par tous les processeurs. Restreindre l'accès à la mémoire se traduit par une perte d'efficacité des simulations.

Les ordinateurs d'une machine à mémoire distribuée possèdent chacun une mémoire individuelle. Cette disposition permet de réaliser des simulations nécessitant une mémoire très importante puisque l'introduction d'un nouveau processeur introduit du même coup une unité de mémoire supplémentaire. Ce type d'architecture requiert toutefois une structure de programmation plus complexe car les processeurs doivent se transmettre les paramètres de la simulation qu'ils modifient localement. Lorsqu'un processeur *A* veut obtenir de l'information sur les calculs réalisés par un processeur *B*, une ligne de code doit être introduite dans le programme afin que *B* transmette à *A* le message contenant l'information demandée.

Les programmes parallèles de cette étude sont exécutés sur les ordinateurs à mémoire distribués gérés par le Centre de Calcul Scientifique (CCS) de l'Université de Sherbrooke. Le protocole MPI est utilisé afin de décrire les échanges nécessaires entre les processeurs.

Différentes grappes d'ordinateurs utilisant le protocole MPI sont mises en oeuvre pour la réalisation de l'étude. Ces grappes peuvent également être utilisées en mode monoprocesseur afin de libérer la machine de développement décrite à la section 4.3. La première partie de l'étude est réalisée sur une grappe de 8 ordinateurs reliés par un lien Myrinet d'où provient leur nom "Myrinet". Voici les spécifications de la grappe d'ordinateur Myrinet :

MYRINET (GRAPPE D'ORDINATEURS)

8 processeurs Athlon 1.6 GHz reliés par un lien optique ;
4 Go Ram ;
256 Mo Cache/processeur ;
Vitesse : 572/processeur (Spec FP).

La grappe d'ordinateur Myrinet fut disponible uniquement lors de la première partie de l'étude puisque la grappe servait de plate-forme d'essai pour la mise en service de la grappe de calcul Mammouth. Malheureusement, la partie parallèle de Mammouth n'est pas en service durant l'étude. Les calculs sont donc réalisés sur la portion série de Mammouth. Cette portion de la grappe est dédiée aux calculs séquentiels et parallèles à faible taux de communication, l'interconnexion étant basée sur un lien Gigabit. Voici les spécifications techniques de Mammouth-Série :

MAMMOUTH-SÉRIE (GRAPPES D'ORDINATEURS)

Divisé en 6 sous-grappes
872 processeurs Intel Pentium 4, 3.2 GHz ;
1.7 TBytes de mémoire vive, 2GB/noeud ;
105 TBytes d'espace disque, Disque (/ltmp) : 120GB/noeud, 7200 RPM, SATA ;
Connexion Ethernet : Gbit.

Les simulations réalisées sur cette grappe d'ordinateur sont programmées sous le protocole MPI. Cependant, un nombre limité de processeurs est utilisé afin d'optimiser les ressources de calculs. L'utilisation d'un trop grand nombre de processeurs pour une même simulation entraîne une perte d'efficacité individuelle des processeurs. En effet, le temps de communication entre les processeurs devient supérieur au temps de calcul lorsque le ratio processeur/particules est supérieur à 1/1000. L'utilisation d'un réseau plus rapide, tel que le réseau Infiniband prévu pour la partie parallèle de Mammouth, permettrait de réaliser les simulations plus rapidement sur un plus grand nombre de processeurs.

4.4.2 Protocole MPI

La gestion des informations entre les processeurs de la grappe de calcul est réalisée par le protocole MPI. L'ensemble des codes sont compilés à l'aide du compilateur Fortran d'Intel Ifort, la partie MPI est compilée en utilisant le compilateur Fortran d'Intel Mpi-ifort.

Cette section présente une description sommaire des commandes MPI spécifiques à cette étude qui sont utilisées afin de gérer la communication entre les processeurs. D'autres commandes MPI sont appelées dans le code mais ces dernières sont courantes dans les codes MPI. Elles servent par exemple à initialiser la communication entre les processeurs ou à terminer l'exécution du code.

MPI_ALLREDUCE Lorsque cette commande est utilisée avec le paramètre `MPI_SUM`, elle permet d'effectuer la somme des valeurs d'une même variable présente sur tous les processeurs et de renvoyer le résultat à tous les processeurs. Dans la présente étude, cette commande est utilisée à chaque pas en temps afin de mettre en commun la portion de l'accélération calculée par chaque processeur avant de calculer la vitesse et la position des particules.

La figure 4.2 présente la logique derrière le MPI_ALLREDUCE.

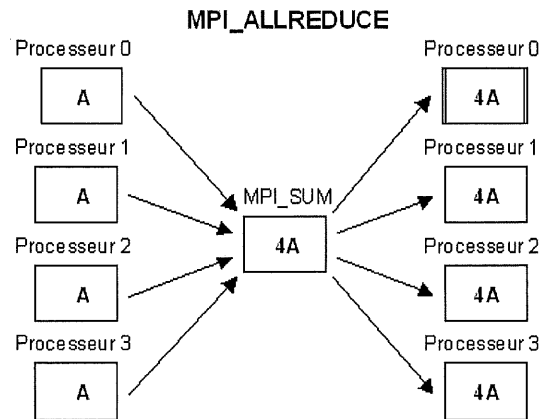


Figure 4.2 Logique du MPI_ALLREDUCE

MPI_BCAST Cette commande est utilisée afin de transférer une variable d'un processeur vers tous les autres processeurs. Dans la présente étude, cette commande est utilisée pour transférer les conditions initiales du processeur MASTER vers les autres processeurs. Elle est également utilisée pour transférer à chaque pas en temps la nouvelle position de chaque particule. La figure 4.2 présente la logique derrière le MPI_BCAST.

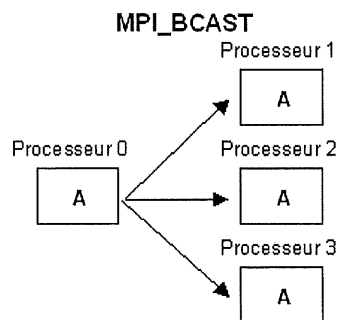


Figure 4.3 Logique du MPI_BCAST

CHAPITRE 5

CONCLUSION

Les résultats issus de cette étude montrent que le choix initial d'effectuer la modélisation en 2D pour représenter les interactions d'un fluide particulaire a apporté plus de difficultés que d'avantages. Un tel choix limite le nombre de propriétés physiques du liquide qui peuvent être satisfaites simultanément. Le passage à la modélisation 3D serait certainement plus approprié et pourrait permettre de résoudre les problèmes liés à l'incompatibilité observée entre la définition de la tension de surface, la compressibilité et la dynamique du liquide particulaire.

L'étude montre qu'il est possible de reproduire le comportement d'un liquide par une approche particulaire de type PAF en transposant les liens intermoléculaires du liquide à l'échelle mésoscopique. Le coût de calcul relié à une telle approche peut être réduit en introduisant une distance critique d'interaction R_i qui limite l'interaction d'une particule à ses plus proches voisins. La mise en oeuvre de cette approche a permis de représenter qualitativement certains modes de collision entre deux gouttes de liquide. Cependant, les modes de collisions entraînant des évolutions tridimensionnelles ne sont pas représentés adéquatement vu le caractère bidimensionnel de l'étude. Les travaux ont également conduit à la définition d'une fonction de paroi mathématique qui permet de représenter l'influence d'une paroi solide linéaire sur le liquide particulaire. De façon similaire à la distance critique d'interaction R_i , une distance critique d'interaction liquide-solide R_{iw} est introduite afin de réduire le coût de calcul de la méthode. Par la suite, il est démontré que la paroi mathématique linéaire peut être utilisée directement pour représenter une paroi circulaire si son rayon de courbure est suffisamment important par rapport à

la distance critique d'interaction R_{iw} . De plus, l'étude propose un modèle mathématique permettant d'inclure un terme visqueux dans les équations de la dynamique du liquide. Ce terme, comparable à la constante μ des équations de Navier-Stokes, permet d'introduire une perte d'énergie lors du mouvement relatif de deux particules. Ce terme est également utilisé afin de représenter la condition de non-glissement d'un liquide par rapport à un solide. Finalement, la combinaison de tous les éléments développés durant l'étude permet de réaliser une simulation représentant la génération d'un sillage de gouttes derrière une roue en rotation.

En conclusion, les simulations réalisées dans le cadre de l'étude montrent qu'une approche particulière de type PAF permet de représenter le comportement d'un liquide particulaire soumis à différents efforts externes. La collision de deux gouttes de liquide, l'interaction d'un liquide avec un solide et finalement la génération d'un sillage de gouttes derrière une roue en rotation sont modélisés afin de mettre en évidence le potentiel d'une telle approche. L'étude utilise un cadre logiciel permettant de réaliser les simulations numériques autant sur une machine de calcul monoprocesseur que sur une grappe de calcul parallèle utilisant le protocole MPI.

Recommandations

Réaliser l'étude en 3D afin d'être en mesure de bien saisir l'influence tridimensionnelle des liens interparticulaires sur la tension de surface et la compressibilité du liquide.

Étudier de façon plus fondamentale les propriétés physiques du liquide particulaire. Comprendre le lien qui existe entre la tension de surface, la compressibilité et le comportement dynamique du liquide. Cette étude pourrait se traduire par une remise en question de l'utilisation de la fonction potentielle présentée par Greenspan [9] employée dans la présente étude.

Exécuter les simulations sur une machine de calcul parallèle disposant d'un réseau de communication à grande vitesse afin de limiter le temps de calcul.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] ADAMSON, A., GAST, A. (1997) *Physical Chemistry of Surfaces*, EU, John Wiley & Sons, inc., 784 p.
- [2] ALLEN, M., TILDESLEY, D. (1987) *Computer Simulation of Liquids*, Oxford, Oxford science publication, 385 p.
- [3] BARNES, J. *Treecode Guide*, www.ifa.hawaii.edu/barnes/treecode/treeguide.html
- [4] CLEARY, P., SAWLEY, M. (Décembre 1999) *Three-Dimensional Modelling of Industrial Granular Flows*, Second international conference on CFD in the mineral and process industries, CSIRO, Melbourne, Australia, p. 95-100.
- [5] CYR, S. (2003) *Communication personnelle*
- [6] DUBINSKI, J., KIM, J., PARK, C., HUMBLE, R. (2003) *GOTPM : A Parallel Hybrid Particle-Mesh Treecode*, Astro-ph/0304467 v1, 24 p.
- [7] GOULD, H., TOBOCHNIK, J. (1996) *An Introduction to Computer Simulation Methods*, EU, 2e édition, Addison-Wesley publishing company, 721 p.
- [8] GRAPS www.amara.com/papers/nbody.html
- [9] GREENSPAN, D. (1997) *Particle Modeling*, Boston, Birkhäuser, 274 p.
- [10] GREENSPAN, D., HEATH, L. (1991) *Supercomputer Simulation of the Modes of Colliding Microdrops of Water*, J. Phys. D : Appl. Phys. 24, p. 2121-2123.
- [11] GUNJAL, P.R., RANADE, V.V., CHAUDHARI, R.V. (2003) *Experimental and Computational Study of Liquid Drop Over Flat and Spherical Surfaces*, Catalysis today 79-80, p. 267-273
- [12] HARLOW, F.H. (1964) *The PIC Computing Method for Fluid Dynamics*, Methods in Computational Physics, Vol.3, p. 319.

- [13] HIRSCHFELDER, CURTIS, BIRD (1967) *Molecular Theory of Gases and Liquids*, EU, Wiley, 1249 p.
- [14] JONHSON, N. (2001) *The Legacy of Group T-3*, <http://www-tdo.lanl.gov/t3/history.shtml#early>
- [15] KOLAFKA, J., NEZBEDA, I., LISAL, M. (2001) *Effect of Short and Long Range Forces on the Properties of Fluids. III. Dipolar and Quadrupolar Fluids*, *Molecular Physics* Vol.99 No.20, p. 1751-1764.
- [16] MAHONEY, M., JORGENSEN, W. (2000) *A Five-Site Model for Liquid Water and the Reproduction of the Density Anomaly by Rigid, Nonpolarizable Potential Functions*, *Journal of Chemical Physics* Vol.112 No.20, p. 8910-8922.
- [17] MUSTOE, G.(2003) *The Discrete Element Method*, <http://egweb.mines.edu/dem/>
- [18] ORME, M. (1997) *Experiments on Droplet, Bounce, Coalescence and Disruption*, *Progress in Energy and Combustion Science* Vol. 23, p. 65-79.
- [19] QIAN, J., LAW, C.K. (1997) *Regimes of Coalescence and Separation in Droplet Collision*, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.331, p. 59-80.
- [20] RAHMAN, A., STILLINGER, F. (October 1971) *Molecular Dynamics Study of Liquid Water*, *TBE journal of chemical physics* vol. 55 no. 7, p. 3336-3359
- [21] THOMPSON, S.M., GUBBINS, K.E., WALTON, J.P.R.B., CHANTRY, R.A.R., ROWLINSON, J.S. (1984) *A Molecular Dynamics Study of Liquid Drops*, *Journal of Chemical Physics* Vol.81 p. 530-542.
- [22] WHITE, F. (1999) *Fluid Mecanics*, EU, 4e édition, WCB/McGraw-Hill, 826 p.
- [23] <http://www.acsu.buffalo.edu/~ashgriz/liquid.html>
- [24] <http://www.mie.utoronto.ca/labs/MUSSL/>
- [25] <http://polymer.bu.edu/Wasser/robert/work/node9.html>
- [26] <http://www.rwc.uc.edu/koehler/biophys/4a.html>
- [27] <http://www.uni-stuttgart.de/itlr/gallery/freesurf.en.html>

ANNEXE A

CONCEPT DE DISTANCE CRITIQUE D'INTERACTION

A.1 Le concept de sphère d'interaction

Nous voulons étudier les conditions qui permettraient de négliger l'influence des particules qui se situent à une distance supérieure à un rayon d'interaction fixé *a priori*.

Utilisons des potentiels de degré libre, qui nous fournissent la force radiale

$$\vec{F}_{ij} = v_i v_j \left(\frac{G}{r_{ij}^p} - \frac{H}{r_{ij}^q} \right) \vec{S}_p \quad (\text{A.1})$$

Nous définissons le rayon d'équilibre comme étant la distance qui annule cette force :

$$\frac{G}{R_e^p} - \frac{H}{R_e^q} = 0 \Rightarrow R_e = \left(\frac{H}{G} \right)^{1/(q-p)} \quad (\text{A.2})$$

Une autre distance d'intérêt est celle où la force d'attraction est maximale :

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{G}{r_{ij}^p} - \frac{H}{r_{ij}^q} \right) = 0 \Rightarrow R_m = \left(\frac{qH}{pG} \right)^{1/(q-p)} \quad (\text{A.3})$$

Prenant R_e comme unité, nous définirons $\alpha_m = R_m/R_e$, qui se calcule par

$$\alpha_m = \left(\frac{(q-1)H}{(p-1)G} \right)^{1/(q-p)} \quad (\text{A.4})$$

Soit alors $R_i = \alpha_i R_e$ le rayon d'interaction au-delà duquel on néglige la contribution de toute cause sur la particule i . On voudrait quantifier cette approximation en fonction du paramètre α_i . Plaçons-nous dans la situation la plus défavorable : la particule i est sur la frontière plane ($z = 0$) d'un demi-espace rempli de matière continue, à l'exception d'une demi-sphère de rayon R_e centrée en i . On suppose en effet que la composante répulsive du potentiel assure à la particule une sphère d'exclusivité de rayon R_e dans laquelle ne peut exister aucune autre matière qu'elle-même. Calculons la valeur exacte de la composante en z (la seule non-nulle) de la première partie de la force radiale (on fait ce calcul en coordonnées sphériques)

$$r = \rho \quad S_{p,z} = \frac{z}{\rho} = \frac{\rho \cos \phi}{\rho} = \cos \phi \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} R_{Att,z}^{exact} &= v_i G \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\phi=0}^{\phi=\pi/2} \int_{\rho=R_e}^{\infty} \frac{\cos \phi}{\rho^p} \rho^2 \sin \phi d\rho d\phi d\theta \\ &= v_i G 2\pi \frac{1}{2} \int_{R_e}^{\infty} \frac{1}{\rho^{p-2}} d\rho \\ &= v_i G \pi \frac{1}{p-3} \frac{1}{R_e^{p-3}} \end{aligned}$$

La partie que l'on néglige s'exprimera par

$$R_{Att,z}^{ext} = \pi v_i G \int_{\rho=R_i}^{\infty} \frac{1}{\rho^{p-2}} d\rho = \pi v_i G \frac{1}{p-3} \frac{1}{R_i^{p-3}} \quad (\text{A.6})$$

L'erreur relative effectuée en négligeant l'extérieur de la sphère d'interaction a pour expression

$$\delta R = \frac{R^{ext}}{R^{exact}} = \frac{1}{R_i^{p-3}} / \frac{1}{R_e^{p-3}} = \frac{1}{\alpha_i^{p-3}} \quad (\text{A.7})$$

Donc, pour que cette erreur décroisse lorsque α_i croît (et aussi pour que les intégrales formées dans ce calcul soient convergentes), il **faut** que $p > 3$. Prenons par exemple $p = 7$ (force attractive, Lennard-Jones) et $\alpha_i = 5$. Dans ce cas,

$$\delta R_a = \frac{\Delta R_a}{R_a} = \frac{1}{5^4} = \frac{1}{625} \approx 0.16\% \quad (\text{A.8})$$

Dans le cas de la composante répulsive, en prenant $q = 13$, l'approximation sera encore meilleure :

$$\delta R_r = \frac{\Delta R_r}{R_r} = \frac{1}{5^{10}} = \frac{1}{9\,765\,625} \approx 0.1 \cdot 10^{-4}\% \quad (\text{A.9})$$

On pourrait aussi travailler avec deux rayons d'interaction, l'un attractif et l'autre répulsif, qui assureraient un équilibre dans les erreurs relatives maximales.

ANNEXE B

FIGURES DE COLLISIONS DE GOUTTES

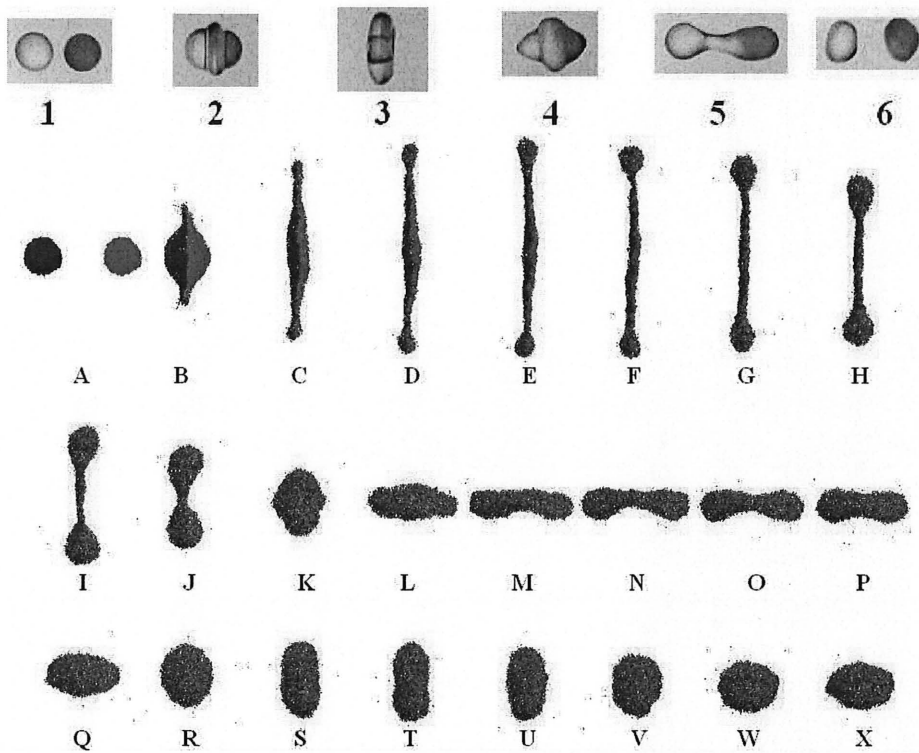


Figure B.1 Résultats expérimentaux [23] $We = 23$ $b/D = 0.05$ et numériques $We = 9$ $b/D = 0$ de collisions de gouttes.

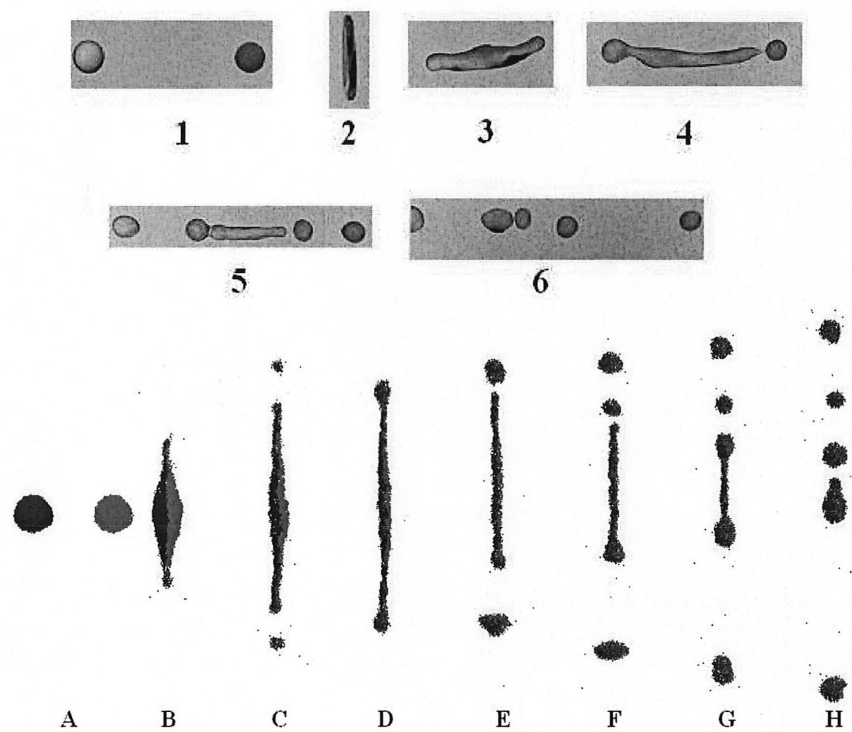


Figure B.2 Résultats expérimentaux [23] $We = 96$ $b/D = 0$ et numériques $We = 16$ $b/D = 0$ de collisions de gouttes.

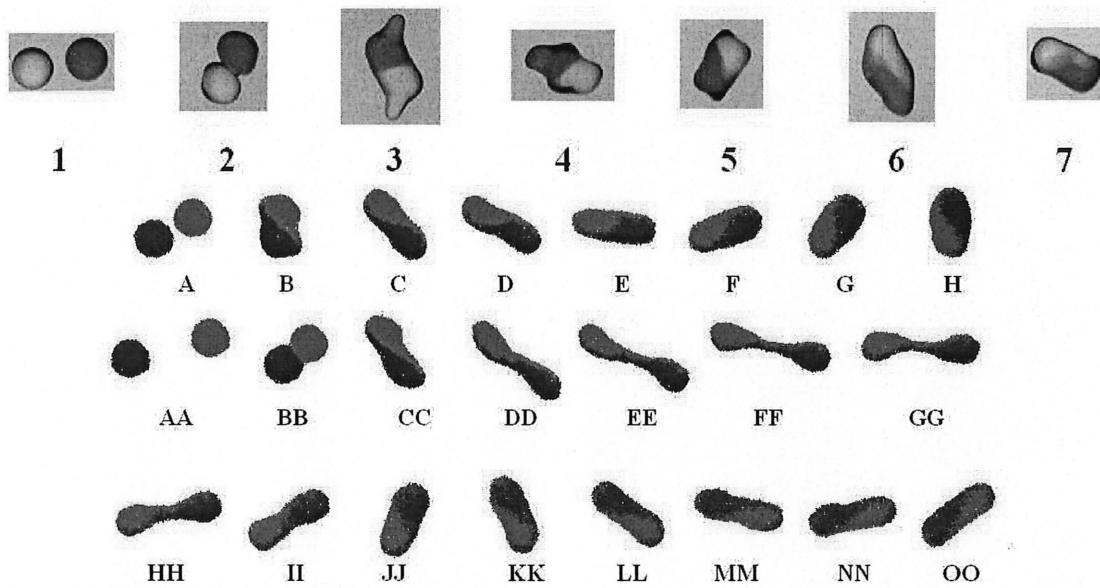


Figure B.3 Résultats expérimentaux [23] $We = 10$ $b/d = 0.55$ et numériques $We = 2$ $b/D = 0.55$, $We = 3$ $b/D = 0.55$ de collisions de gouttes.

ANNEXE C

DÉVELOPPEMENT DU MODÈLE THÉORIQUE DE COUCHE LIMITE

Continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} + \rho \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{C.1})$$

Bien que la section 3.6.1 démontre que la compressibilité du modèle est loin de celle de l'eau, la variation de la densité est négligée. L'équation de continuité devient :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{C.2})$$

Momentum :

$$\rho g_x - \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = \rho \frac{\partial u}{\partial t} \quad (\text{C.3})$$

$$\rho g_y - \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) = \rho \frac{\partial v}{\partial t} \quad (\text{C.4})$$

Hypothèses :

Puisqu'il n'y a pas de gradient de pression dans la couche limite

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial y} = 0 \quad (\text{C.5})$$

Puisque l'écoulement est en régime permanent

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial t} = 0 \quad (\text{C.6})$$

La composante tangentielle au plan de la vitesse est négligeable devant la composante parallèle au plan

$$v = 0 \quad (\text{C.7})$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = 0 \quad (\text{C.8})$$

Puisque le profil de vitesse est complètement développé et le film de liquide est infini sur la paroi

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (\text{C.9})$$

Les équations de momentum C.3 et C.4 se réduisent à

$$\rho g_x + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (\text{C.10})$$

Conditions limites :

Condition de non glissement à la paroi ($y = 0$)

$$u = 0 \quad (\text{C.11})$$

Condition de surface libre à la limite du film de liquide ($y = e$)

$$\mu \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \quad (\text{C.12})$$

L'équation 3.24 est déterminée en effectuant deux intégrations successives par rapport à y de l'équation C.10 et en appliquant les conditions limites C.11 et C.12. Cette équation relie la vitesse de l'écoulement parallèle au plan u à la distance à la paroi y pour une épaisseur de film constante e . La constante g_x représente la composante de la gravité parallèle au plan tandis que les constantes ρ et μ représentent respectivement la densité et la viscosité du liquide.

$$u = \frac{\rho g_x}{\mu} \left(ey - \frac{y^2}{2} \right) \quad (\text{C.13})$$